

AI for Science 革新的研究推進事業 (ARiSE) 計算資源利用計画【記入例】

全体様式 2~3 頁+付票 (AI ワークロード票: 1 件あたり約 1/2 頁)
 Core form: 2-3 pages + repeatable AI workload cards (~half page each)

基本情報 / Basic Information

提案先	戦略ターゲット型 / 国際・融合型
戦略ターゲット名 (戦略ターゲット型) もしくは、研究分野 (国際・融合型)	
研究開発課題名	
研究開発代表者 氏名	
研究開発代表者 所属機関・部署・役職	
共同研究開発代表者 氏名	
共同研究開発代表者 所属機関・部署・役職	
研究期間	2026 年 10 月 ~ 2029 年 3 月 (2.5 年間)
研究概要	

1. 計算資源利用計画の概要 / Overview

申請区分 / Category	<input type="checkbox"/> 基盤研究 <input type="checkbox"/> 実証・開発 <input type="checkbox"/> その他	機微データ / Sensitive Data	<input type="checkbox"/> 無 / No <input type="checkbox"/> 有 / Yes
資源区分 / Resource Types	<input checked="" type="checkbox"/> GPU スーパーコンピュータ <input type="checkbox"/> CPU/HPC <input type="checkbox"/> クラウド <input type="checkbox"/> 外部 API		
利用が想定される計算機 / Expected computing resources	<input checked="" type="checkbox"/> AI4S マシン (理研) <input type="checkbox"/> 「富岳」その他の HPCI 共用スーパーコンピュータ <input type="checkbox"/> ABCI (産総研) <input type="checkbox"/> パブリッククラウドまたは AI サービス <input type="checkbox"/> ローカルモデル実行用の自身のマシン <input type="checkbox"/> その他		
最終成果物 / Expected Outputs	<p>この研究で得たワークフローを一般公開用のソフトウェアパッケージとしてまとめる。これを用いて MAPbI 細胞での使用に適した分子を探索し、その結果を公表する予定。/We will encapsulate the workflow into a publicly available software package. Will will apply it to search for molecules suitable for use with MAPbI cells and publish the result.</p>		
全体像 / Workflow in One Paragraph	<p>本研究の目的は、エージェント型 AI、サロゲートモデル、およびシミュレーションを統合したフレームワークを構築し、ペロブスカイト太陽電池に適した新規正孔輸送材料の探索を行うことである。</p> <p>エージェント型 AI は、サロゲートモデルの開発およびシミュレーションの実行を主導するとともに、その広範な知識を活用して新規候補分子の提案を行う役割を担う。</p> <p>具体的には、各 GPU に対して 1 つの AI エージェントを割り当て、各エージェントが新規分子の提案、サロゲートモデルによる計算、第一原理計算による検証、ならびにサロゲートモデルのファインチューニングを実行可能な体制を構築する。各エージェントは、入力されたバンド構造に基づき当該ワークフローを反復的に実行することで、エネルギー準位整合性に優れ、正孔移動度が高く、かつ高い安定性を有する分子の探索を行う。</p> <p>さらに、エージェント間で得られた知見およびデータを共有することで、各サロゲートモデルの精度向上を図るとともに、新規な探索空間の開拓を促進する。/We will run one AI agent per GPU that will be able to propose a new molecule, run a surrogate model calculation, run first-principles validation calculations, or fine-tune a surrogate model. Based on an input band structure, each agent will use this workflow to search with molecules with good energy level alignment, good hole mobility, and high stability. Agents will exchange findings and data to help refine their own surrogate model and to find new search space.</p>		

2. 要求資源サマリ / Requested Resource Summary

想定されるワークロード毎に、必要な計算資源量及び概算費用を記載した上で、ワークロード毎の付票を Appendix として添付する。各欄は概数で可。審査では「何をするために、どの資源を、どの程度、いくらで使うか」を比較する。 / For each anticipated workload, please describe the required computing resources and estimated costs, and attach a separate card for each workload.

Approximate values are acceptable; reviewers mainly compare purpose, scale, resource type, and cost.

区分 Category	主用途 Purpose	主資源 Primary Resource	総量 Total Volume	ピーク同時実行 Peak Concurrency	概算費用 Estimated Cost
学習/ Training	サロゲートモデルの学習/Surrogate model training.	GPU	AA GPU Hours	単一ノード (GPU 4 基) での初期学習と、単一 GPU (デー	AA × 300 円/GPU Hours

				タ並列) によるエージェントのファインチューニング/Initial training at single node scale (4 GPU). Agent fine tuning with Single GPU (data parallel)	
推論・エージェント/ Inference & Agents	分子生成および統合制御/Molecule generation and orchestration.	GPU	BB GPU Hours	単一 GPU (データ並列) /Single GPU (data parallel)	BB × 300 円/GPU Hours
シミュレーション・検証/ Simulation & Validation	分子特性の高精度計算/Accurate calculation of molecule properties	GPU	CC GPU Hours	単一 GPU (データ並列) /Single GPU (data parallel)	CC × 300 円/GPU Hours
ストレージ・API 等 /Storage, API, Other	サロゲートモデルの管理・保存 /Storage of surrogate models.	ストレージ /Storage	DD TB	各エージェントにつき1つのサロゲートモデル /One surrogate model per agent.	DD × 単価(cost)/TB

3. 実現可能性の根拠 / Basis of Feasibility

過去実績 / Prior Evidence	各種類の計算は、H100 GPU を 1 基搭載した Grace Hopper ノード上で実行済み。/We perform each type of calculation on a grace hopper node with a single H100 GPU.
外挿方法 / Extrapolation	シミュレーションおよび推論タスクは単一 GPU 上で動作し、メモリ帯域幅律速であると想定されるため、性能は 2.5 倍としてスケーリング評価を行う。/As simulation and inference tasks will run on a single GPU, and are expected to be memory bandwidth bound, we scale performance by 2.5.
主要前提 / Main Assumptions	本研究では、エージェントが計算タスクの配分を動的に決定する非決定論的なワークフローを提案しているが、性能およびコストの見積もりにおいては、固定的なワークフロー構成に基づいて評価を行う。/While we are proposing a highly nondeterministic workflow where the balance of compute tasks is chosen by the Agent, we estimate based on a fixed balance of workflow steps.
主なリスク / Main Risks	エージェント型 AI は本質的に非決定論的であり、そのため各エージェントがタスクから逸脱したり、失敗状態や無限ループに陥ることを防ぎつつ、計算資源を最適に活用する仕組みが求められる。/Agentic AI is nondeterministic. Ensuring that each agent remains on task - avoiding

	fail states or infinite loops - and making optimal use of computational resources.
縮退案 / Reduced-scope Plan	本プロジェクトは、当該ワークフローを計算機資源の広範囲にスケーリングすることを目的とする。ただし、想定コストを超過する場合には、大規模実行は行わず、ソフトウェア開発およびアルゴリズム改善に重点を置く方針とする。/This project aims to scale the workflow to large portions of the machine. If costs exceed expectations, we will not perform large scale runs and focus on software development.

4. プラットフォーム別内訳 / Platform-wise Breakdown

資源種別 Resource Type	システム/サービス System or Service	単位 Unit	総量 Total	概算費用 Estimated Cost
GPU系 / GPU systems	AI4S マシン /AI4Science Machine	GPU時間 / GPU-hours	AA + BB + CC GPU Hours	(AA + BB + CC) x 300 円/GPU Hour
CPU/HPC系 / CPU/HPC		ノード時間 / node-hours		
クラウド / Cloud		時間 or cost		
外部 API / External API		入力/出力 token		

5. 年間実施計画・体制 / Annual Plan and Team

年間計画 / Timeline	<p>2027年4月～8月：既存分子データセットを用いたサロゲートモデルの学習を実施する。併せて、シミュレーションおよびサロゲート推論のためのツール呼び出し機構を構築し、ファインチューニング用データセットの生成を行う。 Apr - Aug: surrogate model training on existing molecule dataset. Creation of tool calls for simulation and surrogate inference. Fine tuning dataset generation.</p> <p>2027年8月～9月：構築したツール呼び出し機構を用いて正孔輸送材料候補の生成・検証を行う。正孔輸送材料データセットを用いたサロゲートモデルのファインチューニングを実施し、エージェント主導のファインチューニングを行うためのツール呼び出し機構を開発する。 Aug - Sep: use and testing of tool calls to generate a set of hole materials. Fine tuning of surrogate model on hole material set. Creation of tool call for agent driven fine tuning.</p> <p>2027年10月～12月：複数エージェントによる並列実行可能な統合エージェントワークフローを開発する。エージェント性能向上のためのプロンプトエンジニアリングを実施し、大規模スケールでの動作検証を行う。 Oct - Dec: development of a combined agentic workflow to be run in parallel. Prompt engineering to improve agent performance. Testing on up to large scale.</p> <p>2028年1月～3月：MAPbI系材料に適した新規材料の探索へ本フレームワークを適用する。 Jan - Mar: application to search for materials fit for MAPbI.</p>
-----------------	--

最大同時実行 / Peak Concurrency	<p>通常の開発実行では、1~2 ノード規模（各 GPU にエージェントを割り当て）で運用する。スケーラビリティ検証については、最大 1,600 GPU 規模までの実行を対象として評価を行う。/Typical development runs will use 1 - 2 nodes with an agent assigned to each GPU. Scalability tests will be performed on up to 1600 GPUs.</p>
実施体制 / Team	<p>ポストドク AA：サロゲートモデルの初期開発およびエージェントフレームワークの設計・構築を担当する。 Postdoc AA - Initial surrogate model development. Development of agentic framework.</p> <p>学生 BB：正孔輸送材料データセットの生成およびサロゲートモデルのファインチューニング、ならびに各種テストの実施を担当する。 Student BB - generation of hole material dataset and fine tuning. Running tests.</p> <p>共同研究者 CC：シミュレーションワークフローのツールコールとしてのカプセル化および最適なパフォーマンスのための計算パラメータのテストを行う。 Collaborator CC - encapsulation of simulation workflow as a tool call. Testing of computational parameters for optimal performance.</p> <p>PI DD：プロジェクト全体の統括および進捗管理を行い、MAPbI 系材料探索の実行を主導する。 PI DD - project management, running of search for MAPbI materials.</p>
費用管理 / Cost Management	<p>運用開始後 1 か月を目安に、各処理ステップにおける計算コストの分析を行い、その結果に基づいて計算資源の予算計画の見直しを実施する。以降は、毎月、PI が計算資源およびデータ利用状況を確認する。さらに、大規模実行に伴う計算資源の枯渇を防ぐため、性能モデルを定期的に更新し、プロジェクトメンバー間で共有する。 After the first month of operations, we will analyze the computational costs associated with each step and revise the computer budget plan accordingly. Each month, the compute and data usage will be checked by the PI. A regularly updated performance model will be shared with project members to ensure large runs do not exhaust the computational resources.</p>

確認上の最重要点 / Key review points: ①科学目標の達成に対する必要性、②過去実績から見た実現可能性、③資源量と費用の妥当性、④代替案の有無。

付票：AI ワークロード票（必要数だけ複製） / Appendix: AI Workload Card (duplicate as needed)

各ワークロードごとに半ページで記載。学習、蒸留、推論、エージェント、シミュレーション、データ生成、評価のいずれにも使用可。
/ One half-page card per workload. Applicable to training, distillation, inference, agentic systems, simulation, data generation, or evaluation.

ワークロード票 #1 / Workload Card #1	
名称・種別 / Name & Type	名称： <input checked="" type="checkbox"/> 学習 <input type="checkbox"/> 蒸留 <input type="checkbox"/> 推論 <input type="checkbox"/> エージェント <input type="checkbox"/> シミュレーション <input type="checkbox"/> その他
科学目的 / Scientific Purpose	エネルギー準位、イオン化ポテンシャル（安定性評価指標）、および再編成エネルギー（移動度評価指標）を予測可能な初期サロゲートモデルの開発を行う。/Development of an initial surrogate model able to predict energy levels, ionization potentials (for stability), reorganization energy (for mobility).
モデル・データ / Model & Data	SOAP-BPNN および MACE といったアーキテクチャを比較検討する。初期学習には QM9 データセット（134,000 分子）を用いる。/We will compare SOAP-BPNN and MACE architectures. Initial training will be done on the QM9 dataset (134K molecules).
資源計画 / Resource Plan (同時実行・回数を含む /including Concurrency & Runs)	計算コスト見積もり (AA1) は、4 GPU × 1 エポックあたりの計算時間 × 10 種類の候補アーキテクチャ × 学習エポック数 (YY) として評価する。 各学習実行は単一ノード (GPU 4 基) を用いて実施する。また、最適なモデルアーキテクチャを特定するため、10 種類の候補アーキテクチャについて比較検証を行う。 AA1 = 4 GPU x XX time per epoch x 10 tested architectures x YY number of epochs We will use a single node (4 GPUs) for each training run. We will test 10 different candidate architectures to find the most accurate choice.
概算費用・根拠 / Cost & Basis	同規模の合成データセットを用いて H100 GPU 上で単一エポックの実測を行っており、その結果を基にスケーリング係数 ZZ を適用することで、1 エポックあたりの計算時間を XX 秒と見積もる。 We performed a single training epoch of a similarly sized synthetic dataset on an H100 GPU. Scaling by ZZ we expect a single epoch to take XX seconds.

ワークロード票 #2 / Workload Card #2	
名称・種別 / Name & Type	名称： <input type="checkbox"/> 学習 <input checked="" type="checkbox"/> 蒸留 <input type="checkbox"/> 推論 <input type="checkbox"/> エージェント <input type="checkbox"/> シミュレーション <input type="checkbox"/> その他
科学目的 / Scientific Purpose	初期サロゲートモデルは、汎用的な分子データセットを用いて学習を行う。その後、人手により構築した正孔輸送材料データセットを用いてファインチューニングを実施する。さらに、エージェントが性能低下を検知した場合には、エージェント主導のツール呼び出しとして追加的なファインチューニングを随時実行する。/The initial surrogate model will be trained on generic molecule sets. The model will first be finetuned on a human generated set of hole transport materials. Subsequent fine tuning calls will be performed as agentic tool calls when the agent detects degrading performance.

<p>モデル・データ / Model & Data</p>	<p>ファインチューニングは、学習段階で選定されたモデル（SOAP-BPNN または MACE）に対して実施する。初期段階では人手生成データセットを用い、その後はエージェントにより生成された分子データを用いて継続的にモデルを更新する。/We will fine tune the selected model from the training phase (SOAP-BPNN or MACE). The data will first be a human generated fine tuning set, and later Agent generated molecules.</p>
<p>資源計画 / Resource Plan (同時実行・回数を含む /including Concurrency & Runs)</p>	<p>以下のワークロード評価においては、1 エポック（全 QQ エポック中）を、エージェント主導の 1,000 ステップ（分子提案、ツール呼び出し、シミュレーション、ファインチューニング）から構成されるものと定義し、それぞれの処理は固定比率（A, B, C, D）で配分されるものとする。</p> <p>初期ファインチューニングは、合成データを用いた実験結果に基づき YY エポック実施する。</p> <p>初期ファインチューニング： $1 \text{ GPU} \times 1 \text{ エポックあたりの時間} \times 2 \text{ 候補アーキテクチャ} \times \text{YY エポック} = \text{A0 GPU 時間}$</p> <p>開発段階： $100 \text{ 実行} \times 8 \text{ GPU} \times \text{QQ エポック} \times (\text{ツール呼び出し時間 XX} + \text{分子提案時間 YY} + \text{コンテキスト削減時間 ZZ}) = \text{A1 GPU 時間}$</p> <p>中規模実行： $30 \text{ 実行} \times 32 \text{ GPU} \times \text{QQ エポック} \times (\text{XX} + \text{YY} + \text{ZZ}) = \text{A2 GPU 時間}$</p> <p>大規模実行： $4 \text{ 実行} \times 1600 \text{ GPU} \times \text{QQ エポック} \times (\text{XX} + \text{YY} + \text{ZZ}) = \text{A3 GPU 時間}$</p> <p>本番実行： $2 \text{ 実行} \times 32 \text{ GPU} \times \text{QQ エポック} \times (\text{XX} + \text{YY} + \text{ZZ}) = \text{A4 GPU 時間}$</p> <p>総計算時間は以下で評価する： $\text{AA1} = \text{A0} + \text{A1} + \text{A2} + \text{A3} + \text{A4}$</p> <p>ファインチューニングは各実行について単一 GPU（データ並列）で実施する。学習段階で選定された上位 2 種類のアーキテクチャに対して手動でのファインチューニングを行うとともに、AI エージェントはオンデマンドでファインチューニングを実行する（概ねシミュレーション 100 ステップごとに 1 回の頻度と見積もる）。</p> <p>For the following workload cards we define a single epoch (out of QQ) as including 1000 agent driven steps (proposal, tool call, simulation, fine tuning) with a fixed ratio (A, B, C, D) of each task within that epoch. Initial fine tuning will be done over YY epochs based on synthetic data experiment.</p> <p>Initial fine tuning: $1 \text{ GPU} \times \text{XX time per epoch} \times 2 \text{ candidate architectures} \times \text{YY number of epochs} = \text{A0 GPU hours.}$ Development: $100 \text{ runs} \times 8 \text{ GPUs} \times \text{QQ epochs} \times (\text{XX tool call time} + \text{YY molecule proposal time} + \text{ZZ context pruning time}) = \text{A1 GPU hours.}$ Medium Scale: $30 \text{ runs} \times 32 \text{ GPUs} \times \text{QQ epochs} \times (\text{XX tool call time} + \text{YY molecule proposal time} + \text{ZZ context pruning time}) = \text{A2 GPU hours.}$ Large Scale: $4 \text{ runs} \times 1600 \text{ GPUs} \times \text{QQ epochs} \times (\text{XX tool call time} + \text{YY molecule proposal time} + \text{ZZ context pruning time}) = \text{A3 GPU hours.}$ Production run: $2 \text{ runs} \times 32 \text{ GPUs} \times \text{QQ epochs} \times (\text{XX tool call time} + \text{YY molecule proposal time} + \text{ZZ context pruning time}) = \text{A4 GPU hours.}$</p>

	<p>Total time AA1 = A0 + A1 + A2 + A3 + A4</p> <p>We will use a single GPU for each fine tuning run (data parallel). We will do manual fine tuning on the top 2 architectures identified during training. AI agents will perform fine tuning tasks as on demand; we estimate once per 100 simulation steps.</p>
概算費用・根拠 / Cost & Basis	<p>同規模の合成モデルに対して 500 データ点を追加した条件で、H100 GPU 上で単一エポックのファインチューニングを実測している。高精度モデルの構築には YY エポックを要し、この結果に対してスケーリング係数 2.5 を適用することで、1 エポックあたりの計算時間を XX 秒と見積もる。/We performed a single fine-tuning epoch of a similarly sized synthetic model with an additional 500 data points on an H100 GPU. An accurate model required YY epochs. Scaling by 2.5 we expect a single epoch to take XX seconds.</p>

ワークロード票 #3 / Workload Card #3	
名称・種別 / Name & Type	<p>名称： <input type="checkbox"/>学習 <input type="checkbox"/>蒸留 <input type="checkbox"/>推論 <input checked="" type="checkbox"/>エージェント <input type="checkbox"/>シミュレーション <input type="checkbox"/>その他</p>
科学目的 / Scientific Purpose	<p>エージェント型 AI によるオーケストレーションにより、広大な候補分子の化学空間を自律的に探索することを可能とする。並列に動作する複数のエージェントは、新規分子の提案を行うとともに、サロゲートモデルまたは第一原理シミュレーションを用いた計算を実行する。/Agentic AI orchestration will allow for autonomous exploration of the vast chemical space of candidate molecules. Parallel agents will be able to propose new molecules and perform calculations using either a surrogate model or full simulation.</p>
モデル・データ / Model & Data	<p>DeepSeek-R1、Qwen3、Nemotron-3-Super に加え、研究期間中に登場する新規オープンソースモデルについても比較検討を行う。/We will compare DeepSeek-R1, qwen3, and Nemotron-3-Super as well as new open source models that emerge during the project.</p>
資源計画 / Resource Plan (同時実行・回数を含む /including Concurrency & Runs)	<p>計算コストは以下の通り見積もる：</p> <p>開発段階： 100 実行 × 8 GPU × QQ エポック × (ツール呼び出し時間 XX + 分子提案時間 YY + コンテキスト削減時間 ZZ) = B1 GPU 時間</p> <p>中規模実行： 30 実行 × 32 GPU × QQ エポック × (XX + YY + ZZ) = B2 GPU 時間</p> <p>大規模実行： 4 実行 × 1600 GPU × QQ エポック × (XX + YY + ZZ) = B3 GPU 時間</p> <p>本番実行： 2 実行 × 32 GPU × QQ エポック × (XX + YY + ZZ) = B4 GPU 時間</p> <p>総計算時間は以下で評価する： BB = B1 + B2 + B3 + B4</p> <p>各推論タスクは単一 GPU (データ並列) で実行する。</p> <p>Development: 100 runs x 8 GPUs x QQ epochs x (XX tool call time + YY molecule proposal time + ZZ context pruning time) = B1 GPU hours.</p>

	<p>Medium Scale: 30 runs x 32 GPUs x QQ epochs x (XX tool call time + YY molecule proposal time + ZZ context pruning time) = B2 GPU hours. Large Scale: 4 runs x 1600 GPUs x QQ epochs x (XX tool call time + YY molecule proposal time + ZZ context pruning time) = B3 GPU hours. Production run: 2 runs x 32 GPUs x QQ epochs x (XX tool call time + YY molecule proposal time + ZZ context pruning time) = B4 GPU hours. Total time BB = B1 + B2 + B3 + B4</p> <p>We will use a single GPU for each inference task (data parallel).</p>
<p>概算費用・根拠 / Cost & Basis</p>	<p>単一の H100 GPU 上で動作する ollama インスタンスを用い、gpt-oss (120B パラメータモデル) に対して、ツール呼び出し、分子提案、および調査結果のまとめの 3 種類のタスクについて推論時間の測定を行った。 その結果を基に、性能向上係数 2.5 を適用した場合、それぞれの処理時間は AA 秒、BB 秒、CC 秒と見積もられる。 Running an ollama instance on a single H100 GPU, we ran inference using gpt-oss (120b parameter version) on a representative prompt and history for three tasks: tool calling, molecule proposal, and finding synthesis. The times required scaled for 2.5x improved performance were AA, BB, and CC seconds, respectively.</p>

ワークロード票 #4 / Workload Card #3

<p>名称・種別 / Name & Type</p>	<p>名称: <input type="checkbox"/>学習 <input type="checkbox"/>蒸留 <input type="checkbox"/>推論 <input type="checkbox"/>エージェント <input type="checkbox"/>シミュレーション <input checked="" type="checkbox"/>その他</p>
<p>科学目的 / Scientific Purpose</p>	<p>エネルギー準位、イオン化ポテンシャル、および再編成エネルギーを算出するため、ハイブリッド汎関数レベルの密度汎関数理論 (DFT) 計算を実施する。 Density functional theory simulations at the hybrid-DFT level of theory will be performed to calculate energy levels, ionization potentials, and reorganization energy.</p>
<p>モデル・データ / Model & Data</p>	<p>計算には BigDFT コードを用い、学習データセットおよび AI エージェントによって提案された分子の双方に対して適用する。 We use the BigDFT code run on either the training dataset or molecules proposed by AI agents.</p>
<p>資源計画 / Resource Plan (同時実行・回数を含む / including Concurrency & Runs)</p>	<p>計算コストは以下の通り見積もる:</p> <p>開発段階: 100 実行 × 8 GPU × ZZ エポック × (シミュレーション時間 XX) = C1 GPU 時間 中規模実行: 30 実行 × 32 GPU × ZZ エポック × (XX) = C2 GPU 時間 大規模実行: 4 実行 × 1600 GPU × ZZ エポック × (XX) = C3 GPU 時間 本番実行: 2 実行 × 32 GPU × ZZ エポック × (XX) = C4 GPU 時間</p> <p>総計算時間は以下で評価する: CC = C1 + C2 + C3 + C4</p> <p>各シミュレーションは単一 GPU (データ並列) で実行する。</p>

	<p>Development: 100 runs x 8 GPUs x ZZ epochs x (XX simulation time) = C1 GPU hours. Medium Scale: 30 runs x 32 GPUs x ZZ epochs x (XX simulation time) = C2 GPU hours. Large Scale: 4 runs x 1600 GPUs x ZZ epochs x (XX simulation time) = C3 GPU hours. Production run: 2 runs x 32 GPUs x ZZ epochs x (XX simulation time) = C4 GPU hours. Total time CC = C1 + C2 + C3 + C4</p> <p>We will use a single GPU for each simulation run (data parallel).</p>
<p>概算費用・根拠 / Cost & Basis</p>	<p>単一 H100 GPU を用いて Spiro-OMeTAD のイオン化ポテンシャル計算を実施し、1 回のシミュレーションに要する時間を測定している。この結果に対してスケーリング係数 ZZ を適用することで、1 回のシミュレーション実行時間を XX 秒と見積もる。 We performed a single ionization potential calculation of Spiro-OMeTAD using a single H100 GPU. Scaling performance ZZ we expect a single simulation run to take XX seconds.</p>