

富士通のコンピューティング技術 への取り組み

2025.12.8

富士通株式会社

中島 耕太



64/256量子ビット超伝導量子コンピュータの開発

FUJITSU



理研・中村先生チームとの共同研究により、
理研RQC-富士通連携センターにおいて開発

64量子ビット実機

23年10月



256量子ビット実機

25年4月



産業技術総合研究所 G-QuAT 様 導入

25年3月

世界最大級1024量子ビット 超伝導量子コンピュータ開発

FUJITSU

26年12月



量子技術実証のテストベッドとして幅広く活用



Fujitsu Technology Park

量子棟

FUJITSU-MONAKAとの
ハイブリッド環境の提供

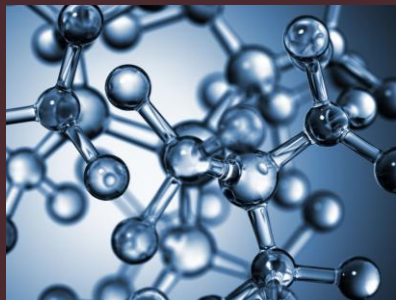


Quantum
Computing



HPC
Technology

世界最大規模の厳密解法

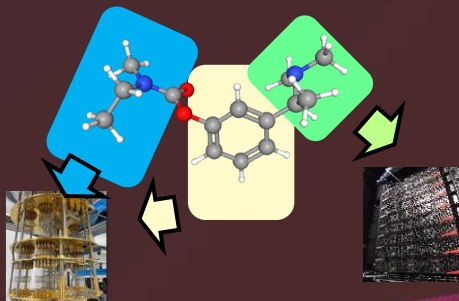


<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jctc.3c01190>

並列計算によるFull CIでの大規模計算

- ✓ 厳密な正しいエネルギー計算により正解を求める
- ✓ 量子化学領域で史上最大規模の厳密解法を演算
- ✓ ABCIを活用した大規模並列計算により実現

分子分割技術

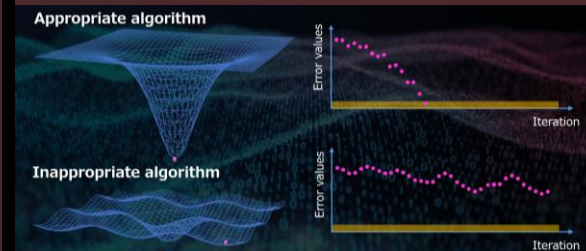


<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpca.5c06027>

量子とHPCアルゴリズムを自動併用

- ✓ 計算精度が高くなるよう分子を自動で分割
- ✓ 分割箇所の規模や性質に応じて、最適なアルゴリズムを決定
- ✓ 量子とHPCアルゴリズムで計算した部分エネルギーから全体を算出

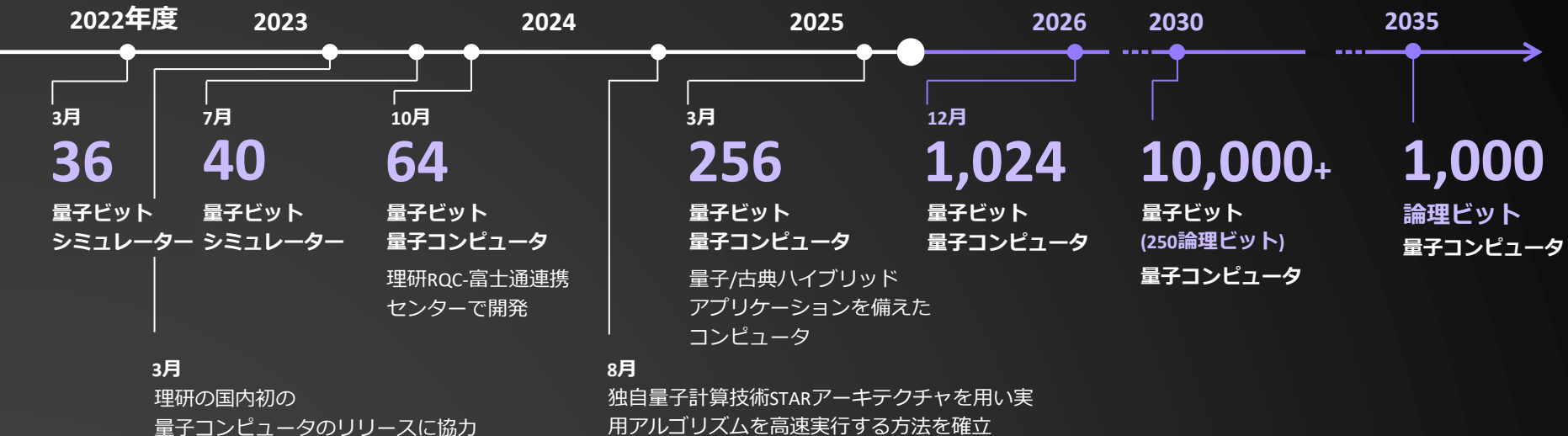
アルゴリズム自動選択技術



量子とHPCのアルゴリズムを自動選択

- ✓ 解への収束の様子を分析
- ✓ 収束の様子から精度や時間を予測し、最適なアルゴリズムへの切り替え
- ✓ 量子化学計算だけでなく、ロボットアーム制御にも応用

富士通量子コンピュータのロードマップ



2024年

64量子ビット機×
HPCハイブリッド
計算センター

2025年9月末

量子棟竣工



2026年12月

1,024量子ビット機
×HPC(FUJITSU-MONAKA)
ハイブリッド
計算センター

2031年

10,000+量子ビット機
×HPC
(MONAKA-X, GPUサーバ)
ハイブリッド計算センター

量子コンピューティングの現状とアプリケーション

- 量子コンピューティングのアプリケーション候補

- 量子化学計算
- 金融向けアプリケーション
- 量子機械学習

- いずれも量子コンピュータの成熟が必要 → 今はAI活用による加速が現実的

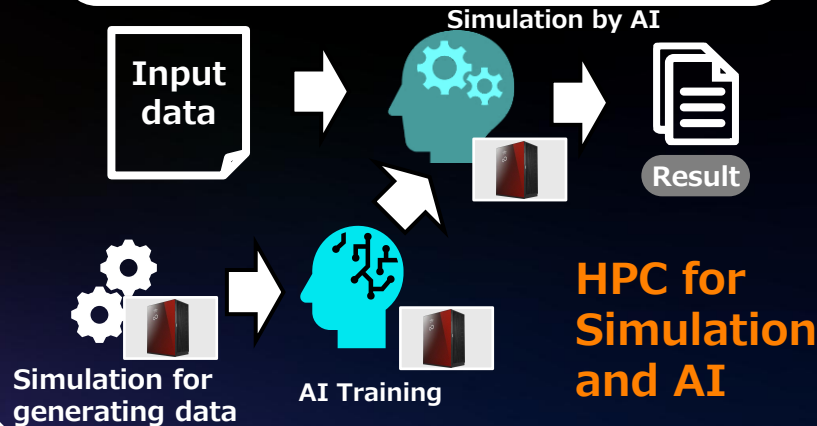
HPCとAIの融合による新しい計算パラダイム

- HPCにAIを組み込むことで劇的に計算を加速
- HPCシステムにおいてAIとのシームレスな連携機能を提供することは必須に

従来方式



AIを組み込んだシミュレーション



量子化学計算による材料設計

分子動力学:

対象材料の挙動を分析するためのシミュレーション

古典力場によるMD:

計算時間 ○

精度 ×

量子化学ポテンシャルによるMD:

計算時間 ×

精度 ✓

→ ニューラルネットワークによるポテンシャル計算で両立を実現



従来手法

ab initio MD (more than hundreds of years)

NNベースの
量子化学ポテンシャル計算

NNP-MD
(*8days)



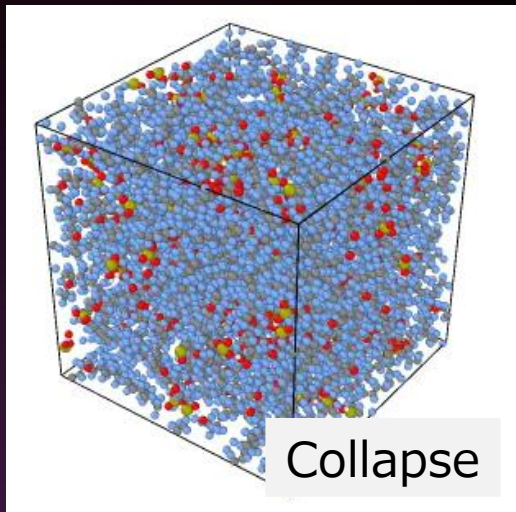
**x 100–10,000 faster
w/ High accuracy**

* Hydrated Nafion Example

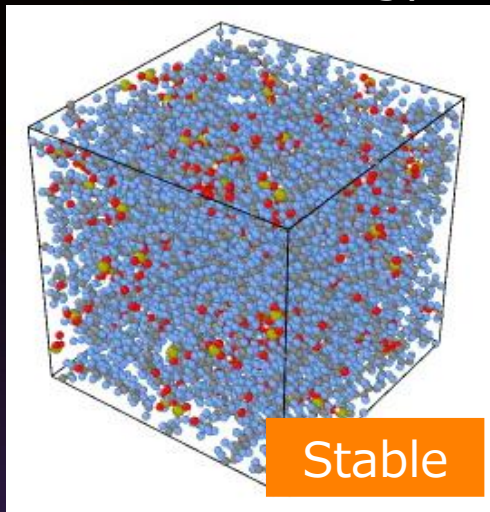
ナフィオンの事例

従来だと100年以上かかる、2万原子、30 ns (60M steps) を8日で計算

Conventional



Our technology



Achieved sufficient performance for practical use

10k-atoms: Large enough to design entire devices

10M-steps: Reproducible chemical reactions

1-week: Acceptable computation time for developers

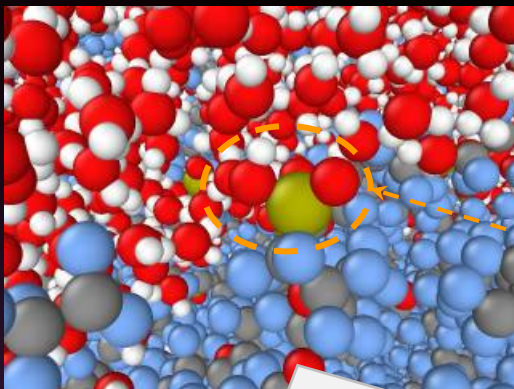
Note: Running 30 ns of MD takes 1.5 days

Hydrated Nafion (19,670 atoms)

古典MD vs ニューラルネットワークポテンシャルMD

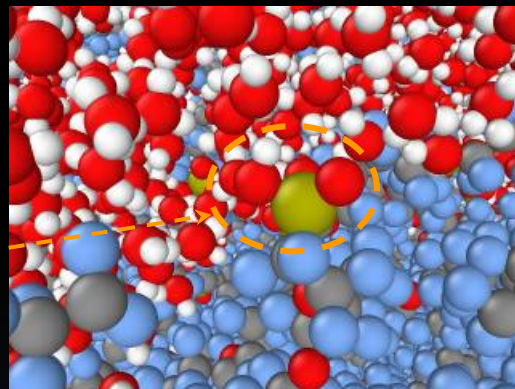
NNによる量子化学ポテンシャル計算により、化学反応を再現

Classical MD



Sulfone
group

古典MD: 化学反応は再現できない

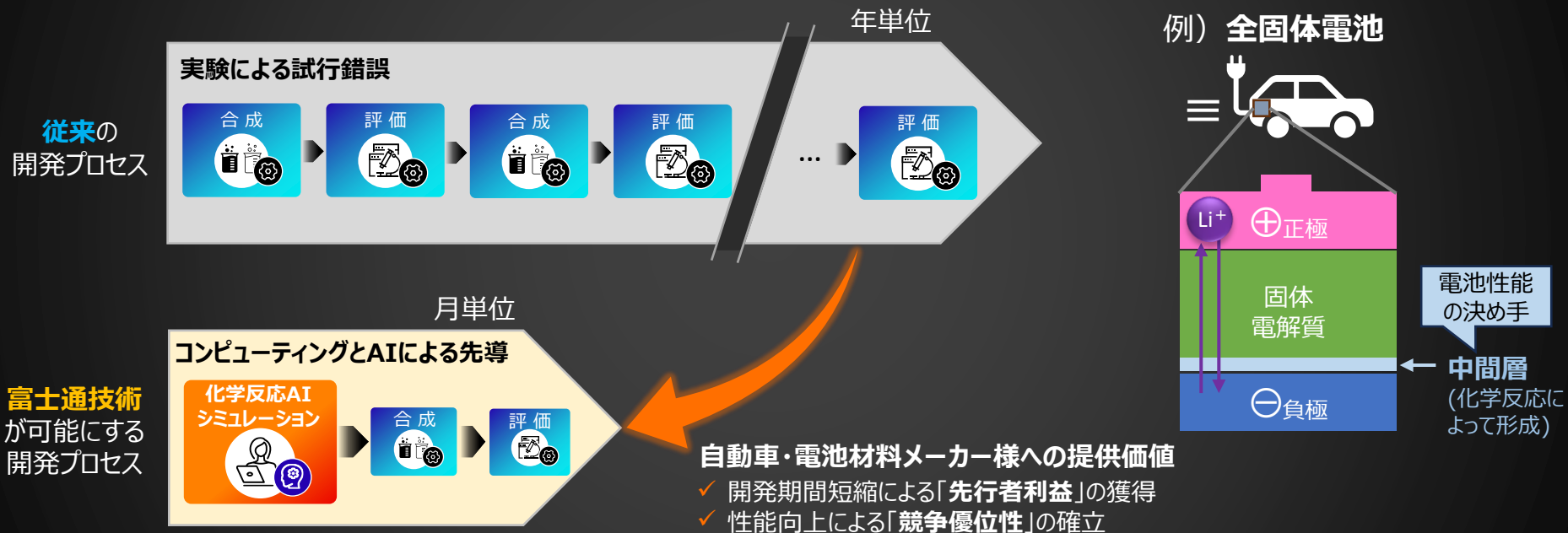


化学反応を再現

H: Hydrogen
C: Carbon
O: Oxygen
F: Fluorine
S: Sulfur

電気自動車向けバッテリー開発の課題

高性能バッテリーの市場投入スピードが、電気自動車開発競争の勝敗を分ける

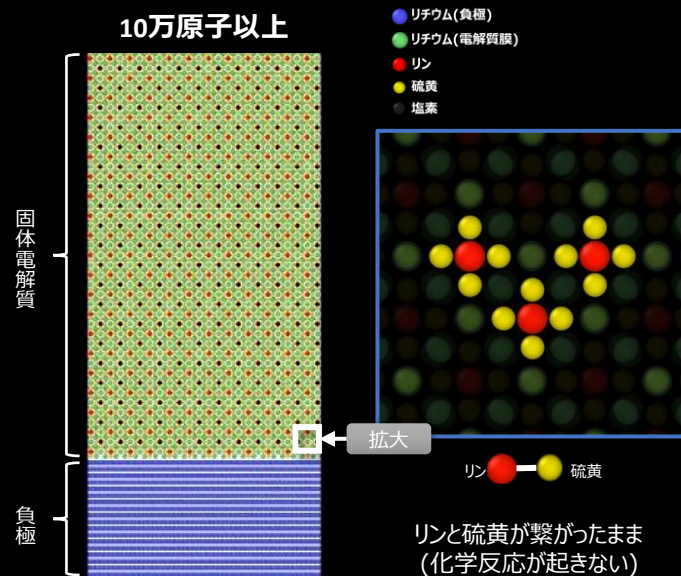


“10万原子超”規模における化学反応シミュレーション技術が不可欠

全固体電池内部の分子動力学シミュレーション



従来の分子動力学シミュレーション

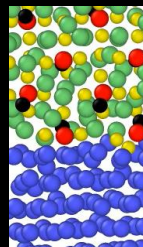


中間層が形成されない
⇒ 正しい分析不可

量子化学計算

10万原子超の
計算時間
1千億年以上
(見積)

数十～数百原子程度



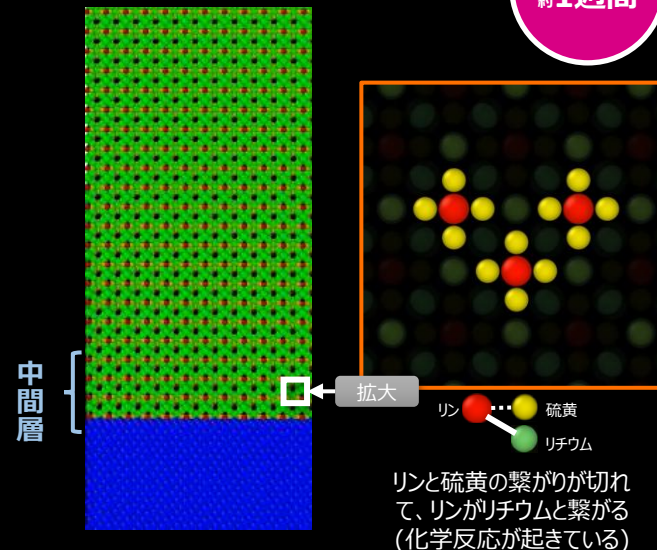
化学反応が起きている

中間層が不明瞭
⇒ 正しい分析不可

富士通技術

127,296 原子

計算時間
約1週間



中間層が形成される
⇒ 正しい分析・施策検証が可能

化学反応AIシミュレーション

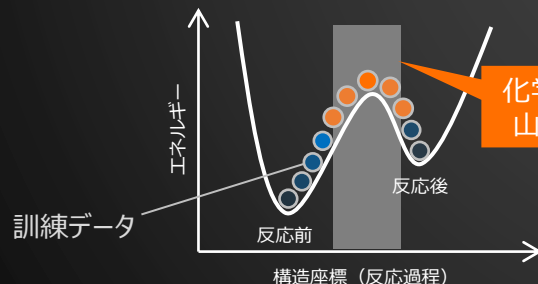
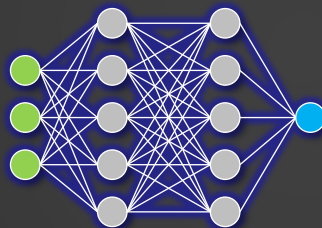
富岳で培ったHPC技術を基盤とし、自社での材料・デバイス開発の経験や量子化学計算の知見をAI技術に融合させることで実現

AIモデル生成

量子化学計算を用いた
大量のデータセット生成

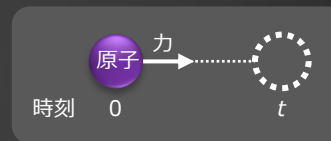


AI訓練



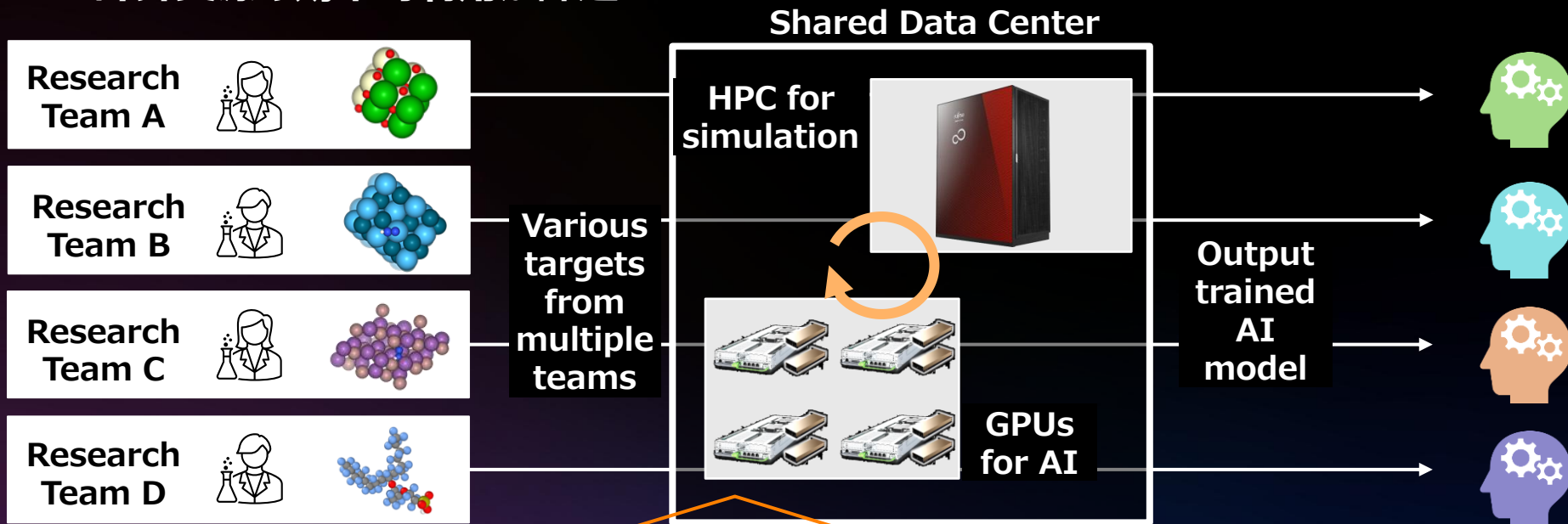
AIモデル予測

任意の原子配置における
原子に働く力を予測



実際にこの技術を使うにあたっての課題

- ✓ 複数のチームが計算資源を共有して、それぞれの研究を進める
- ✓ 計算資源の効率的利用が課題



Challenge: 重い学習処理がGPU資源を占有すると、他の研究が止まってしまう。この問題を解決したい。

AI学習・推論処理において、より効率的なGPUの利用を実現

GPU利用の課題

- GPUをジョブ単位で割り当てるため、GPUアイドル時間が大きくても、他のAIプログラムはジョブの終了を待たなければGPUを使えない
- GPUを仮想化して複数プログラムから共有する場合、GPUメモリはプログラム毎に分割されプログラム当たりの容量が小さくなる。

ACBの特長

- PytorchやTensorflowで動作するAI処理を効率化するためのGPUスケジューリング
- プログラム内処理単位でGPUの割り当てを制御
- GPUの稼働率を向上し、全体の処理時間を短縮
- 同じGPU資源で、より多くの処理が実行可能
- 仮想化技術によるGPUの共有とは異なり、GPU搭載メモリをプログラムが最大限利用可能

ACB技術

AI処理内容を分析、GPUを必要とする処理にGPUを動的割り当て

従来方式



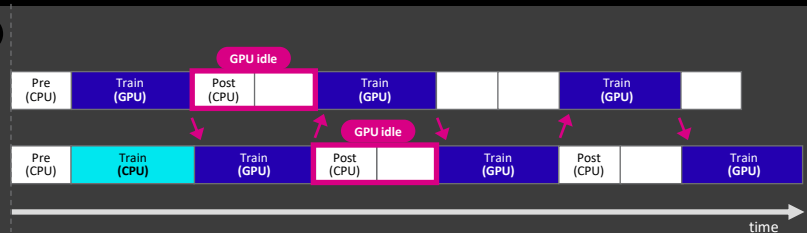
Program 0
Fixed
Program 1



ACB利用

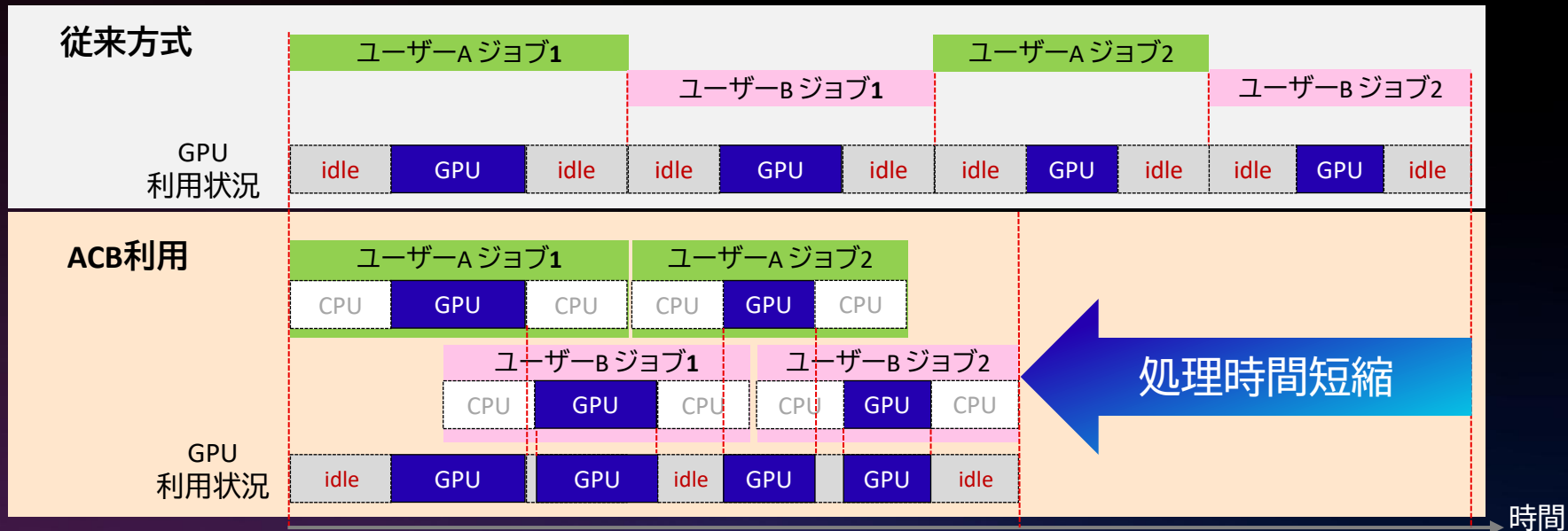


Program 0
Dynamic Allocation
Program 1



高効率なGPU利用で複数ジョブの同時実行時間を短縮

- 計算の中身を分析し、実際にGPUを利用する処理を検出
- GPUを利用する処理に着目し、GPUの動的割り当てを制御



ジョブ数に依存せずGPUの最大メモリ容量を利用可能

- 仮想化技術によるGPU共有と異なり、アプリ動作と連動してソフトでGPUを共有
- そのため、ジョブ数に依らずGPUの最大メモリを利用可能

従来方式:ハードレベルでのGPU共有

GPUメモリはジョブ数で分割
各ジョブは**小さいモデル**しか計算できない

GPUカード

GPUメモリ(H100:80GB)

ジョブA

ジョブB

ジョブC

GPU演算器

ジョブA/B/Cで共有

ACB利用:アプリ動作を見ながらGPUを共有

GPUメモリは各ジョブが占有
ジョブ数に関係なく**最大のモデル**を計算できる

GPUカード

GPUメモリ

ジョブA

GPU演算器

ジョブA

メモリ入替

GPUカード

GPUメモリ

ジョブB

GPU演算器

ジョブB

メモリ入替

GPUカード

GPUメモリ

ジョブC

GPU演算器

ジョブC

time

Thank you

