

まえがき

筑波大学計算科学研究センター（以下、センター）は、2021年に設立30年目に入り、次世代の計算科学と高性能コンピューティングの研究開発に向かってより一層の努力を続けることを改めて確認し、過去30年に渡って進めてきたコ・デザインコンセプトに基づく高性能計算システムとその応用に関する研究を本年も継続しました。

本センターは、1992年度に設置された計算物理学研究センターを前身とし、2004年4月に改組・拡充されて設立されました。2010年には、文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」に認定され、「学際共同利用プログラム」によって、外部の研究者に計算機資源を提供し幅広く計算科学研究を支援する全国共同利用施設としての役割を果たしています。また、「研究集会開催支援」、「研究者招聘支援」、「共同研究旅費支援」、「短期雇用支援」など、共同研究における研究者や学生の交流を図るための支援も行っています。

2018年度から開始したセンター独自のマンスリーサバティカル制度（センターの教員・研究員を数週間～数ヶ月単位で海外派遣）を広く活用し、本学が提供する一般のサバティカル制度より柔軟で利用しやすい形での海外派遣を通じて、海外主要研究拠点との共同研究をより密に行う環境を整備してきました。また、そのカウンタープログラムとして、海外拠点の研究者を同じように短期間～中期間柔軟に招聘する中期招聘制度も継続し、海外の主要研究拠点との双方向の研究交流を通じ、世界レベルの国際共同研究とそれに基づく成果を上げるべく努力してきました。2022年度はこれまで約3年間に渡り世界中に大きな活動制約を与えてきたCOVID-19の影響も徐々に収まり、国際会議等も対面を含むハイブリッド形式に移行し始めました。本センターではCOVID-19当初の2020年から全ての教員にZoomライセンスを与え、インターネットを最大限に生かした研究及び交流の継続を図って来ましたが、2022年度中頃からは海外渡航・海外からの研究者の招聘も復活し始めました。

センターでは、科学諸分野と計算機科学分野の協働・融合を軸とした「学際計算科学」を推進し、超高速計算機システム技術の開発を行うと共に、科学の諸領域における超高速シミュレーションおよび大規模データ解析や情報技術の革新的な応用方法の研究を行う、コ・デザインと呼ばれる研究手法を続けていますが、このコンセプトは現在の超高性能・超大規模コンピュータ開発の礎となっています。2019年度からは第10世代のセンター独自コンセプトによるコ・デザインに基づくスーパーコンピュータであるCygnus (PACS-X)の運用を開始し、GPUとFPGAを組み合わせて相補的に利用することを世界で初めて実用化した画期的な多重複合型演算加速システムを実現、運用開始しました。また、2022年度からは最新鋭のGPU及びCPU、そして革新的記憶システムである永続性メモリ（Persistent Memory）を全面的に採用したビッグメモリ・スーパーコンピュータPegasus (PACS-XI)を導入し、データサイエンスとAI処理を中心に、HPC技術とAI技術の融合を目指す新しい計算科学の展開を開始しました。

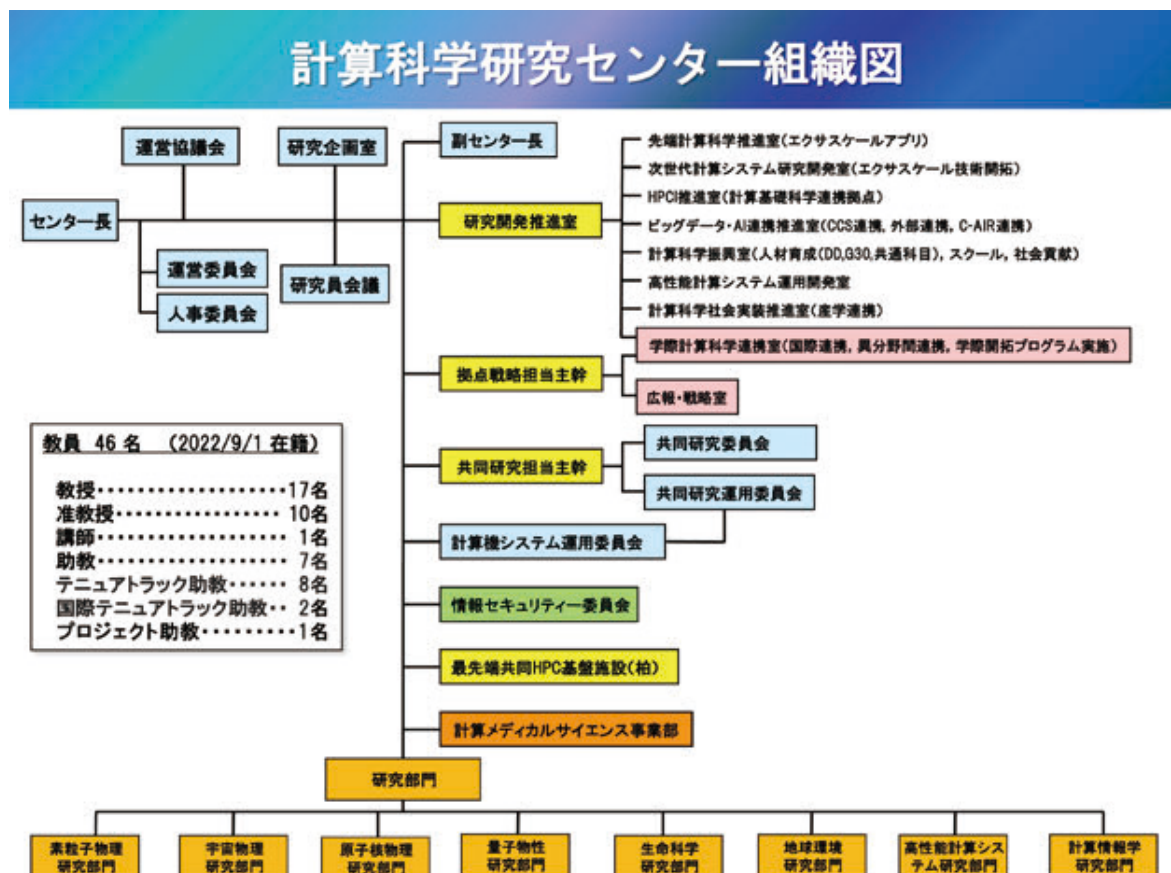
センターには、素粒子物理、宇宙物理、原子核物理、量子物性、生命科学、地球環境、高性能計算機システム、計算情報学の8つの研究部門があり、常勤教員43名、兼務教員1名、非常勤教員3名が従事している他、常勤研究員21名、非常勤研究員3名が在籍しています。また、国際連携として、英国エジンバラ大学、米国ローレンスバークレー国立研究所を始めとする海外15機関とMOUを締結するとともに、多数の海外研究機関と国際共同研究連携を行っています。この他に異分野間連携として、「計算基礎科学連携拠点」、「宇宙生命計算科学連携拠点」を行っています。また、「計算メディカルサイエンス推進事業部」では、計算生体分子医科学、睡眠ビッグデータ解析・自動診断、3D Surgical Vision、計算光バイオイメージングによる医学分野との連携を継続し、医理工連携のコンセプトの元、共同研究と人材交流を加速しています。さらに、2022年度からは産学連携研究体制を大きく推進する母体として計算科学社会実装推進室を新設し、センターにおける企業との共同研究をサポートしつつ、さらにその枠を広げるための共同研究の進め方のノウハウや、企業への技術展開を推進する体制を構築しています。

大きな国際交流イベントとしては、エジンバラ大学とローレンスバークレー国立研究所とそれぞれ行っている毎年定例の国際ワークショップも開催しました。2021年度まではCOVID-19の影響によりZoomによるリモート会議でしたが、2022年度12月には3年ぶりにエジンバラ大学を訪問し、一部はリモートでしたが基本的に対面による合同ワークショップを開催し、国際共同研究推進への新たなステップとしました。なお、ローレンスバークレー国立研究所に関しても2023年度からは対面会議に移行しました。さらに、やはりCOVID-19の影響で中断していた韓国KISTIとの日韓HPCウィンタースクールも2023年2月に再開し、本センターにて対面形式で実施しました。ただし、まだ韓国から学生に訪問してもらうのはまだ早いとの双方の判断から、韓国側の学生はZoomによるリモート参加、日本側は講師及び学生が現地参加というハイブリッド形式で行いましたが、これに続くCCSとKISTIの合同ワークショップは対面で行うことができました。以上のように、今後はCOVID-19を乗り越え、より一層の海外との連携交流活動が復活する見込みです。

本小冊子は、2022年度の計算科学研究センターの活動内容をまとめたものです。ご高覧いただければ幸甚に存じます。

2023年7月吉日
計算科学研究センター長
朴 泰祐

1 センター組織と構成員



組織人員・教員一覧リスト

センター長	朴 泰祐
副センター長	矢花 一浩
運営協議会	委員長 田浦 健次郎 (東京大学)
運営委員会	委員長 朴 泰祐
人事委員会	委員長 朴 泰祐
研究企画室	委員長 朴 泰祐
研究員会議	議長 朴 泰祐
研究開発推進室	
・ 先端計算科学推進室	室長 矢花 一浩
・ 次世代計算システム研究開発室	室長 朴 泰祐
・ HPCI 推進室	室長 藏増 嘉伸
・ ビッグデータ・AI 連携推進室	室長 天笠 俊之

・ 学際計算科学連携室	室長 稲垣 祐司
・ 計算科学振興室	室長 高橋 大介
・ 高性能計算システム運用開発室	室長 建部 修見
・ 社会実装推進室	室長 大谷 実
拠点戦略担当主幹	重田 育照
共同研究担当主幹	中務 孝
・ 共同研究委員会	委員長 中務 孝
・ 共同研究運用委員会	委員長 中務 孝
計算機システム運用委員会	委員長 建部 修見
情報セキュリティ委員会	委員長 朴 泰祐
最先端共同 HPC 基盤施設	施設長 田浦 健次郎（東京大学） 副施設長 朴 泰祐

研究部門（共同研究員は学内のみ記載）

素粒子物理研究部門

教授	藏増 嘉伸（部門主任）
准教授	石塚 成人、谷口 裕介、吉江 友照
助教	大野 浩史
研究員	浮田 尚哉、新谷 栄悟、吉村 友佑
学内共同研究員	金谷 和至（教授）、山崎 剛（准教授）

宇宙物理研究部門

教授	梅村 雅之、大須賀 健（部門主任）
准教授	森 正夫、矢島 秀伸、吉川 耕司
助教	Wagner, Alexander、福島 肇
研究員	高水 裕一、安部 牧人、朝比奈 雄太、桐原 崇亘 小川 拓未、諸隈 佳菜、菊田 智史、阿佐美 進也
客員准教授	中里 直人（会津大学）

原子核物理研究部門

教授	中務 孝（部門主任）、矢花 一浩
准教授	清水 則孝
助教	日野原 伸生
研究員	温 凱、角田 佑介、鷲山 広平

量子物性研究部門

教授	矢花 一浩（部門主任）、大谷 実
准教授	小泉 裕康、仝 暁民
講師	前島 展也
助教	佐藤 駿丞、萩原 聡
研究員	黒田 文彰、Sri Kasi Matta（学振外国人特別研究員）
客員教授	小野 倫也（神戸大学）
学内共同研究員	日野 健一（教授）、岡田 晋（教授）

生命科学研究部門

生命機能情報分野

教授	重田 育照（部門主任）
准教授	原田 隆平
助教	庄司 光男、堀 優太、Kowit Hengphasatporn
研究員	三嶋 謙二、森田 陸離、宮川 晃一、下山 充紘、松井 昌冬、 宗井 陽平、Mrinal Kanti Si、藤木 涼
学内共同研究員	広川 貴次（教授）、吉野 龍之介（助教）

分子進化分野

教授	稲垣 祐司（分野リーダー）
助教	中山 卓郎
学内共同研究員	橋本 哲男（教授）

地球環境研究部門

教授	日下 博幸（部門主任）、田中 博
助教	松枝 未遠、Doan Quang Van
研究員	佐藤 拓人、今井 優真
学内共同研究員	植田 宏昭（教授）、中村 祐輔（特任助教）

高性能計算システム研究部門

教授	朴 泰祐（部門主任）、高橋 大介、建部 修見、額田 彰
助教	多田野 寛人、小林 諒平、藤田 典久
研究員	平賀 弘平
客員教授	塙 敏博（東京大学）

学内共同研究員 安永 守利（教授）、櫻井 鉄也（教授）、
山口 佳樹（准教授）、今倉 暁（准教授）

計算情報学研究部門

データ基盤分野

教授 天笠 俊之（分野リーダー）
准教授 塩川 浩昭
助教 堀江 和正、Bou Savong（橋本 武彦）
研究員 太田 玲央、宮本 隆典
学内共同研究員 北川 博之（教授）

計算メディア分野

教授 亀田 能成（部門主任）、北原 格
助教 穴戸 英彦
研究員 謝 淳

2 令和四年度の活動状況

2.1 計算科学研究センターの次のステップに向けて

本センターの活動として、2022 年度はこれまで続けてきた本センターの歩み、特に計算科学者と計算機科学者が協力し、高性能計算システムの開発とそれを有効利用する計算科学アプリケーションの開発を同時に行う**コ・デザイン**のコンセプトの下、両分野の研究協力をより一層推進すること、国際研究展開力の向上と世界トップレベルの研究機関への進化を目指した活動を継続して行いました。また、2020 年から顕在化した COVID-19 下においても、自らの研究力と他機関との共同研究体制に大きな影響が出ないよう、インターネット環境を最大限に利用した研究を継続してきましたが、幸い 2022 年度は学会活動等も徐々に復活し、一部の活動を対面で行うことができました。

筑波大学計算科学研究センターは、1992 年度に設置された**計算物理学研究センター**を前身とします。計算物理学研究センターは、岩崎洋一先生（後に初代センター長、筑波大学学長）が、1992 年に文部科学省の“学術の新しい展開のためのプログラム（通称新プロ）”に申請した“専用並列計算機による「場の物理」の研究”の採択を受けて設立されたものです。当初は物理学系からの 6 名の振り替えと、純増で認められた 4 名の教員からなる組織で、センター独自の建物はありませんでした。そして、物理学計算の超高速化を目指したスーパーコンピュータ「CP-PACS」の開発予算が認められ、計算機棟設置が決まりました。その 4 年後の 1996 年に、超並列計算機 CP-PACS が完成し、スーパーコンピュータ・トップ 500 の世界第 1 位に登録されました。大学が主導したプロジェクトで、世界最高速のスーパーコンピュータを開発したのは我が国初の快挙でした。CP-PACS の完成は、物理学研究者と計算機工学の専門家の協働が実を結んだものであり、今でこそ広く認知されるようになった**コ・デザイン**の先駆けでもありました。その後、2004 年（平成 16 年）の国立大学法人化の節目に改組し、部門を拡充して、素粒子宇宙研究部門、物質生命研究部門、地球生物環境研究部門、超高速計算機システム研究部門、計算情報学研究部門の 5 部門からなる**計算科学研究センター**が発足しました。

その後、2006 年度から国立大学法人運営費交付金特別研究経費の交付を受けて、高性能超並列クラスタ「PACS-CS」が開発されました。さらに 2007 年には、重力演算加速器を融合させた新たなアーキテクチャ HMCS を発展させ、特別推進研究に基づく融合型並列計算機「宇宙シミュレータ FIRST」が開発されました。2011 年には、特別研究経費の交付により、超並列演算加速器クラスタ「HA-PACS」が製作されました。

また、2008 年には、当センターと東京大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター間で、T2K（Tsukuba-Tokyo-Kyoto）オープンスーパーコンピュータアライアンスを結成し、それぞれの大学のスーパーコンピュータの共同仕様を策定し、筑波大学では T2K-Tsukuba を調達しました。これは筑波大学としては初めて超並列クラスタ型スーパーコンピ

ュータを導入すると同時に、筑波大学として初めて米国メーカーによるスーパーコンピュータの導入ということにもなりました。クラスタ型計算機はその後の HA-PACS を経てメニーコア型超並列クラスタ COMA の開発・導入へとつながりました。

この流れを受け、2013 年に計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターによる、我が国で初めてとなる 2 大学連携によるスーパーコンピュータの開発・運用を目的とした「最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC)」が設置されました。そして、2016 年には、JCAHPC において新たなメニーコア型のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を導入し、我が国最高性能を達成しました (Top500 ランキングでは当時世界第 6 位)。

この間、センター組織として、素粒子と宇宙、物質と生命が独立した部門となるとともに原子核部門も加わって 8 部門の体制となり、その後もセンターとしての研究力を着々と強め、2022 年 3 月末において 45 名の専任教員を置く大センターへと発展しました。そして、研究開発推進室が設置され、各分野の研究のみならず、計算機工学分野との協働や異分野間連携が広く展開されるようになりました。計算科学研究センターは、2010 年度からは、文部科学省共同利用・共同研究拠点「**先端学際計算科学共同研究拠点**」に認定されました。学内では、研究大学強化促進事業の下で、**先端的研究型重点研究センター**の一つとして位置付けられ、重点的な機能強化が行われると共に、2016 年度には予算執行や人事を独立して行う部局となりました。学術センターが独立した部局となるのは、筑波大学では初めてのことです。学内においてトップレベルの研究を行う格付けである「世界級研究拠点 (R1)」と位置付けられ、2020 年度からは世界トップレベル研究形成拠点にも認定されています。

さらに、2021 年度末には文部科学省における第 3 期中期目標・中期計画期間の終了に伴う評価の結果、最高レベルの S 評価を受けることができました。なお、理系組織としての全国共同利用・共同研究機関の第 3 期期間において S 評価を受けた組織は 3 つに留まり、本センターがそのうちの 1 となったことは、我々の研究力と組織運営能力について、文部科学省において高く評価されたものと受け止めています。

2022 年度からの新しい活動として、研究開発推進室の一つとして計算科学社会実装推進室を立ち上げました。本センターの出発点は素粒子・宇宙等を中心とする計算基礎科学であり、これらの研究活動は変わらず活発に行われていますが、今日では計算科学は社会生活にも大きな影響を与える重要な研究開発手法であり、実社会での問題に対する解決手法として重要な位置を占めつつあります。本センターでも産学連携体制を強化し、応用に近い研究分野を中心に企業との共同研究を活発に進めています。計算科学社会実装推進室は、これらの産学連携活動を取りまとめ、計算科学の社会実装の実例を積み上げ、社会に役立つ計算科学研究を先導するための体制作りを行っています。

最後に、センターがここまで発展できたのは、文部科学省の多大なご支援、大学執行部の強いサポート、他大学・研究機関の多くの研究者の協力と支援、科学者と計算機工学者の協

働ならびにセンター内の研究者の尽力の賜物であり、この場を借りて関係各位に心より御礼申し上げます。

2.2令和五年度の活動方針

文部科学省共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」として、計算機システムの開発・運用、並びにこれを用いた学際計算科学の研究を推進する。「最先端共同 HPC 基盤施設」においては、東京大学との協働によりスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を運用し、幅広い分野の学術研究に供し、計算科学の発展に資する。また、2019 年 4 月より運用を開始した第 10 世代の PACS システムである Cygnus (PACS-X)を活用し、コ・デザインのコンセプトに基づく理工連携研究を強力に推進する。さらに、「計算基礎科学連携拠点」「宇宙生命計算科学連携拠点」「計算メディカルサイエンス推進事業部」を中心に、異分野間連携を強化する。国際共同研究拠点化に向けた研究体制の構築も継続して進める。さらに、次世代の計算科学とデータ科学・AI を先導する新たな挑戦的プラットフォームとして、第 11 世代の PACS システムである Pegasus (PACS-XI)を開発し、試験運用を開始する。

2.3共同利用・共同研究拠点「先端学際計算科学共同研究拠点」の活動状況

■ 実施計画

本センターの所有する多重複合型演算加速クラスター Cygnus (PACS-X) (81 ノード, 2.5 PFLOPS) , 及び東京大学情報基盤センターが運用するメニーコア型汎用 CPU スーパーコンピュータ Wisteria-BDEC01/Odyssay の一部を借用し、これらを計算資源として、プロジェクト共同研究を公募し、「学際共同研究プログラム」を実施する。本プログラムは①大規模計算によって可能となる計算科学を推進する「重点課題推進プログラム」、②異分野連携・共同研究を支援する「学際開拓プログラム」からなり、学際計算科学の共同研究を推進する。公募する分野は、Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野である。共同研究プロジェクトの課題公募は年初めに受け付け、利用状況を勘案し年度後半に追加配分を検討する。

「学際共同利用プログラム」の実施においては、共同研究委員会と共同研究運用委員会を設置して審査を行う。共同研究委員会は、各分野について学外 2 名・学内 1 名からなり、応募課題についてピアレビューを行い、共同研究委員会は審査結果を受けて採否案を策定し、センター長がこれを決定する。共同利用・共同研究に関する情報発信は、本センターHP の他、各研究分野の研究者コミュニティもメーリングリストを活用して行う。

また、今後のセンターの国際研究拠点化を視野に入れつつ、大型化する学際共同利用申請の処理と円滑なプログラムの運用のため、申請・審査・採択通知・プロジェクト管理等を統合的に処理し電子化し、処理システム自体の英語化を継続する。

■ 実施状況

Particle Physics, Astrophysics, Nuclear Physics, Material Science, Chemistry, Life Science, Global Environment, Biology, Numerical Analysis, HPC System, Computational Informatics の 11 分野で、計 73 課題の研究プロジェクトを採択し共同研究を実施した。これらの学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究により、学術論文 239 件を発表した。各分野における学際共同利用プログラムのプロジェクト採択数を表 1 に、学際共同利用プログラムを含む共同利用・共同研究による成果発表論文数を表 2 に、参加状況を表 3 に示す。

表 1 各分野における学際共同利用プログラム・プロジェクト採択数

分野	採択件数
Particle Physics	13
Astrophysics	7
Nuclear Physics	9
Material Science	14
Chemistry	1
Life Science	10
Global environment	3
Biology	2
Numerical analysis	3
HPC systems	6
Computational informatics	5
合計	73

表 2 共同利用・共同研究拠点の成果として発表された論文の総数

区分	令和4年度		うち国際学術誌掲載論文数	
化学	25	(4)	25	(4)
材料科学	1	(0)	1	(0)
物理学	105	(16)	104	(16)
計算機&数学	41	(6)	41	(6)
工学	31	(13)	30	(13)
環境&地球科学	17	(8)	16	(7)
臨床医学	3	(1)	3	(1)
基礎生命科学	16	(1)	15	(1)
人文社会系	0	(0)	0	(0)
合計	239	(49)	235	(48)

※右側の () 内には、拠点に所属する者が特に重要な役割を果たしている論文数を示す

表 3 共同利用・共同研究課題の採択状況及び実施状況

年度	採択状況				実施状況								
	公募型				新規分			継続分			合計		
	応募件数	採択件数	採択率 (%)	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究	公募型実施件数	うち研究テーマ設定型	うち国際共同研究
R4	96	96	100	1	32	0	0	64	0	1	96	0	1

2.4 国際連携と異分野融合

国際連携として、英国エジンバラ大学（EPCC: Edinburgh Parallel Computing Center）との合同ワークショップを 2022 年 12 月に 3 年ぶりに同センターにおいて現地対面開催し、一部の研究者はネットワークを用いたハイブリッド形式で参加した。米国ローレンスバークレー国立研究所（LBNL: Lawrence Berkeley National Laboratory）との合同ワークショップは COVID-19 の影響により 2021 年度と同様にテレビ会議（Zoom）を用いて行った。なお、こちらの合同ワークショップも 2023 年度以降は対面開催を復活させる予定である。

さらに、これまで COVID-19 の影響により中断していた韓国 KISTI との Japan-Korea HPC Winter School 及び合同ワークショップを 3 年ぶりに再開し、2022 年 2 月に本センターにおいて対面での交流を復活させた。ただし、韓国の学生をスクールに招聘するのはまだ時期尚早という判断から、彼らについては Zoom によるオンライン参加とし、これに日本側学生及び KISTI の若手研究者らが本センターで現地参加した。2 日間のスクールに続き、半日の合同ワークショップを行い、双方の研究の紹介と関連分野についての議論を行った。

ナショナル・フラッグシップ・スーパーコンピュータ「富岳」を用いた研究については、2020 年度より開始された「富岳」成果創出加速プログラムにおける「シミュレーションで探る基礎科学：素粒子の基本法則から元素の生成まで」「宇宙の構造形成と進化から惑星表層環境変動までの統一的描画の構築」「省エネルギー次世代半導体デバイス開発のための量子論マルチシミュレーション」の 3 課題にそれぞれ共同研究機関として参加し、「富岳」を用いた最先端の計算科学研究を推進してきたが、2022 年度をもって第一期の成果創出加速プログラムが終了したのに伴い、これらの研究課題も終了した。なお、2023 年度からは第三期の同プログラムの課題として本センターの宇宙物理研究部門を中心とする新しい課題が採択され、開始する予定である。

さらに、医学分野との連携により、計算科学による医療技術の開拓を目的とした、「計算メディカルサイエンス推進事業部」において、医理工連携の共同研究を加速させた。

2.5 センターシンポジウム

センターでは毎年10月、「学際計算科学による知の発見・統合・創造シンポジウム」の名の下に、センターの活動と先進的計算科学及び高性能計算に関するシンポジウムを、学際共同利用中間発表会を兼ねて開催してきた。2018年度より同シンポジウムを国際化し、全てのプログラムを英語化し、国際的研究発信力を高める試みを行っているが、2020・2021年度の2年間はCOVID-19の影響によりプログラムを1日に短縮し、講演セッション及び学際共同利用プログラムの成果発表を中心とするポスター発表の全てをZoomによるオンラインセッションとしていた。

しかし、2022年度はCOVID-19の状況が改善され、多くの国際会議が対面とオンラインのハイブリッドに移行していることに鑑み、かつ本年度は計算物理学研究センターの発足から30周年という記念すべき年であることも考慮し、2日間に渡る対面を原則としたハイブリッド開催を実現した。結果として合計200人の参加者を集める実りあるシンポジウムとなり、初日のプログラム終了後には3年ぶりの懇親会も盛況の中で開催することができた。

今後、世界トップレベルの国際的研究拠点を目指す上で、様々なイベントやプログラムの英語化は重要なステップである。学際共同利用の申請システムの電子化・英語化と、センターシンポジウムの国際化は継続していく予定である。

2.6 今後のあり方

計算科学研究センターは、筑波大学の研究センター組織再編の下で、先端研究センター群の中の世界級研究拠点（R1）に位置付けられた。これにより、全学戦略枠の人員配置やプロジェクト予算の配分等を通じて重点的な機能強化が行われ、2016年度より本学の独立した部局の一つとなり、大学の研究力強化に貢献している。計算科学研究センターは、計算機科学分野と科学諸分野が融合・連携して「学際計算科学」を推進し、我が国の計算科学の発展に資する高性能計算機の開発・運用を行っている。筑波大学の理念は、国、機関、学内組織などの境界を超えた教育研究のトランスボーダー化の加速であり、計算科学研究センターの役割は、計算科学を通じた学際融合と国際化の加速である。学際計算科学は、計算機工学と科学諸分野の融合だけでなく、科学の異分野間融合の高い可能性をもつものであり、当センターでは「計算」を共通軸とした共同研究が多く行われている。センターが推進する「宇宙生命計算科学連携」および「計算基礎科学連携」は、分野の境界を越えたグローバルな研究展開を実践できる拠点であり、既に様々な異分野間共同研究が進んでいる。また、医理工学連携を目指す「計算メディカルサイエンス推進事業部」における共同研究は、医学分野との連携基盤を作るものであり、将来は産業界との連携へと発展していく。さらに、新たに発足した計算科学社会実装推進室を中心として、特に応用研究に近い研究分野の研究と企業における社会実装の連携を進め、本センターにおける産学連携研究活動にも力を入れていく。今後、

これらセンターのもつ学際性と人材育成によって、機能強化・特色化を加速し、国際的なハブ拠点へと発展させる。これらの活動全てについて、世界トップレベルの国際研究拠点に向けた発展を目指し、活性化と成果の創出を目指す。