

Title	サイバーメディアHPCジャーナル No.14 目次
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2024, 14
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/96511">https://hdl.handle.net/11094/96511</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

## 目次

特集：NVIDIA Modulusを利用したPINNsについて	1
AIとCAEを連携させるPINNsの実装「NVIDIA Modulus」のご紹介	2
柴田 良一 岐阜工業高等専門学校 建築学科	
大規模計算機システム利用者研究報告	9
クォークが重い領域のQCDにおける臨界点探索	10
金谷 和至 筑波大学 数理物質系 宇宙史研究センター	
マクロ系の摩擦則の包括的な解明	14
岩下 航 大阪大学 大学院基礎工学研究科	
AIを用いたタンパク質間複合体予測から、機能未知遺伝子の機能を推察する	19
河口 真一 大阪大学 大学院生命機能研究科	
第一原理計算に基づくフォノン非調和物性データベースの構築	23
大西 正人 <sup>1</sup> 、塩見 淳一郎 <sup>1,2</sup>	
東京大学 <sup>1</sup> 機械工学専攻、 <sup>2</sup> 工学系研究科総合研究機構	
Generation of ultrahigh magnetic fields and micro-scale particle accelerator	27
M. Murakami and D. Balusu	
Institute of Laser Engineering, Osaka University	
Machine learning study of single-atom platinum supported on graphene nanostructures (SAC Pt-G)	31
Beatriz Andrea C. Tan, Yuji Hamamoto, Yoshitada Morikawa	
Osaka University Graduate School of Engineering	
Development of Graph Neural Network Interatomic Potential to Investigate Diamond Oxidation and Graphitization	35
John Isaac G. Enriquez and Yoshitada Morikawa	
Osaka University Graduate School of Engineering	
原子吸着に伴うトポロジカル絶縁体表面に於けるスピン構造転移の研究	39
湯川 龍 東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター(SRIS)	
深層生成モデルを用いたヒト脳活動からの動的体験再構成	43
高木 優 大阪大学 大学院生命機能研究科	
Exploring the magnetic interaction in the photoexcited of	47
porphyrin-lanthanide 1:1 complexes with different capping ligands	
Anas Santria, <sup>1,2</sup> and Naoto Ishikawa <sup>1</sup>	
<sup>1</sup> Graduate School of Science, Osaka University	
<sup>2</sup> Research Center for Chemistry, National Research and Innovation Agency	
データ駆動型キャビテーションモデルと その学習データセットの構築に関する研究	53
岡林 希依 大阪大学 大学院工学研究科	
Inter-subunit coupling in PyrR pyrimidine synthase attenuator protein oligomers	57
Sandhya P. Tiwari Institute for Protein Research, Osaka University	

射影法を用いて保存則を発見するニューラル常微分方程式 松原 崇 大阪大学 大学院基礎工学研究科	59
深層学習を活用したガラスの構造緩和を決定する特徴量を抽出する技術の開発 金 鋼 大阪大学 大学院基礎工学研究科	63
酸化物系人工シナプス素子におけるドナー欠陥挙動の第一原理理論解析 藤平 哲也 大阪大学 大学院基礎工学研究科	66
ディープラーニング手法を用いた一細胞エンハンサー検出法の開発 村上 賢 大阪大学 蛋白質研究所	70
高分子のトポロジーに由来する特異な動的相関に関する理論・シミュレーション研究 後藤 頌太 大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域	74
BERTを用いたT細胞受容体の機能解明 安水 良明 大阪大学 大学院医学系研究科	79
超臨界翼におけるダブル遷音速ディップ発生メカニズムの解明：移動エントロピー法による流れ場の因果解析 三宅 冬馬 北海道大学 大学院工学院 機械宇宙工学専攻	80
データ駆動型高分子材料研究における統計的機械学習と分子シミュレーションの融合 南條 舜 総合研究大学院大学 複合科学研究科	85
Modeling Drug Release of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates using Machine Learning Metadynamics Rizka Nur Fadilla and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科	89
Theoretical Investigation of Hydrogen Desorption Process in Hydrogen Boride sheet for Catalytic Applications Kurt Irvin M. Rojas <sup>1</sup> , Yoshitada Morikawa <sup>1,2</sup> , and Ikutaro Hamada <sup>1</sup> <sup>1</sup> Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University <sup>2</sup> Research Center for Precision Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University	93
Modeling diffuse signatures of cosmic ray processes in galaxies: extra-galactic gamma-ray background radiation Ellis R. Owen 大阪大学 大学院理学研究科	98
粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション 杉村 奈都子 鹿児島工業高等専門学校 機械工学科	103
フラグメント分子軌道法による量子生命情報基盤の構築 ～タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析～ 福澤 薫 大阪大学 大学院薬学研究科	109
柔軟エアロシェルを有する大気突入機の流体構造連成解析 Fluid-structure interaction analysis for atmospheric-entry vehicle with inflatable aeroshell サンジョイ・クマー・サハ、高橋裕介 北海道大学 大学院工学研究院	113
The Investigation of Self Optimization of Active Sites by Reaction Intermediates during Non-Equilibrium States of CO <sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol Harry H. Halim, Yuki Yamada, M. Fadhlan Anshor, Pongpan Sitiputa, and Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科	120
動運動論的レーザー吸収で発生する高速電子特性の解析 高木 悠司 大阪大学 大学院理学研究科、レーザー科学研究所	124

センター報告	128
・2023年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	129
・SC23出展報告	148
・第29回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2023)報告および 第30回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)告知	155
・大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	157
・2024年度大規模計算機システム利用講習会	159
・2023年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	160
・2024年度「HPCI利用」の活動状況	168
・2024年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	169
・2023年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	170
・2024年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	171
・大規模計算機システムQ&A	173
 利用規程等	 175
・規程関係	176
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用規程	176
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム利用負担額一覧	178
大阪大学サイバーメディアセンター大規模計算機システム試用制度利用内規	179
・附表	180
大規模計算機システム  ホスト一覧	180
スーパーコンピュータSQUIDのジョブクラス一覧	180
2023年度大規模計算機システム稼働状況	182
 募    集	 183
・大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について	184
・大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）	185