

目 次

特集：2021 年度「若手・女性利用者推薦」採択課題 成果報告

| | |
|--|----|
| 2021 年度特集号発行にあたって | 1 |
| 下川辺隆史（東京大学情報基盤センター） | |
| Numerical simulation of pure solutal Marangoni convection in a shallow rectangular cavity | 4 |
| ZHANG JIANGAO（Graduate School of Engineering Science, Osaka University） | |
| 分子動力学計算で明らかにする金属結合タンパク質のダイナミクス | 10 |
| 森田陸離（筑波大学計算科学研究センター） | |
| PaCS-MD と異常検知を援用したタンパク質構造遷移経路の探索 | 17 |
| 原田隆平（筑波大学計算科学研究センター） | |
| 分子動力学シミュレーションで解明する維持メチル化酵素（DNMT1）の 活性化メカニズム | 22 |
| 保田拓範（筑波大学大学院理工情報生命学術院生物学学位プログラム） | |
| 降着円盤乱流における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の配分 | 27 |
| 川面洋平（東北大学学際科学フロンティア研究所） | |
| 階層型直交格子と再帰的なフィッティングによる回転翼の非定常空力予測 | 31 |
| 菅谷圭祐（東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻） | |
| ダイマー粒子を用いたガラスの Johari-Goldstein beta 緩和の理解 | 39 |
| 白石薫平（東京大学大学院総合文化研究科広域科学専攻） | |
| 公共データを活用した転写因子結合ダイナミクスの解析 | 45 |
| 植野和子（国立国際医療研究センター ゲノム医科学プロジェクト戸山プロジェクト） | |
| ディープラーニングによる高精度マルウェア分析 | 50 |
| 三橋力麻（東京大学大学院情報理工学系研究科システム情報学専攻） | |