

## 2012年度 物理科学セミナー

### 講演題目：「結晶構造解析における HPC (High Performance Computing) の利用」

講師： 坂田 誠

(名古屋大学 名誉教授 高輝度光科学研究センター 客員主席研究員)

日時： 平成24年11月28日(水) 16時15分～17時45分(5限)

場所： A12棟 サイエンスホール

#### 【要旨】

近年、マキシマムエントロピー法(MEM)あるいは遺伝的アルゴリズム(GA)などの新しい構造解析手法が展開されているが、これらの手法は計算機の発達によって可能となったものである。もし、計算機的能力が現在の水準でなければ、このような近代的手法は全くと言って良いほど無力となってしまう。本講演では、このようなHPCの観点も含めて、MEMあるいはGAと言う極めて近代的な結晶構造解析を、具体例を交えて述べてみたい。

問い合わせ： 物理科学専攻 久保田 佳基 (内線：4050 email：kubotay@p.s.osakafu-u.ac.jp)