

---

## Novas versións de aplicacións instaladas

- Actualizado (17.11.2005)

Instaláronse novas versións dos seguintes paquetes de software:

Máquina  
Paquete  
Versión  
Directorio instalación

HPC320  
Gamess  
Jul 2003  
/opt/cesga/gamess.jul2003

HPC320  
Molden  
4.0  
/opt/cesga/molden4.0

SUPERDOME  
Dalton  
1.2.1  
/opt/cesga/dalton

A versión 4.0 do molden permite a lectura dos ficheiros de saída de Gaussian 03, paquete que tamén está instalado no HPC320. Estas novas versións pasarán a ser as versións por defecto na próxima parada de mantemento que se realice en cada un dos sistemas. Se ten algún problema ou suxerencia con estas novas versións, non dubide en porse en contacto con nós a través de teléfono ou de mensaxería ao enderezo .

Ademais, instalouse o software Gromacs versión 3.2.1 (<http://www.gromacs.org>) nas máquinas SD, SC y SVG. Este paquete de Dinámica Molecular permite a execución tanto en modo secuencial como paralelo (utilizando mpi). A documentación do programa pódese atopar en:  
<http://www.gromacs.org/documentation/index.php>