

[Web 版大規模科学計算システムニュースより]

大規模科学計算システムニュースに掲載された記事の一部を転載しています。 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/tayori/>

Gaussian16 のバージョンアップについて (No. 282)

非経験的分子軌道計算プログラム「Gaussian16」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。また、Gaussian09 も引き続きご利用いただけます。

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

バージョン名	:	Gaussian16 C. 01
バージョンアップ日	:	2019 年 8 月 28 日 (水)
サービスホスト	:	front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
実行コマンド	:	subg16
	:	subg09 (Gaussian09 E. 01 用コマンド)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンターWeb サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

<https://gaussian.com/relnotes/>

HULINKS Gaussian16 製品情報

<https://www.hulinks.co.jp/software/chem/gaussian>

センターWeb サイト

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/gaussian.html>

(共同利用支援係)

科学技術計算言語 MATLAB のバージョンアップについて (No. 282)

科学技術計算言語「MATLAB」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。

MATLAB は、アルゴリズム開発、データの可視化、数値計算を行うための高レベルなテクニカルコンピューティング言語と対話型環境です。MATLAB を利用することにより、C、C++、Fortran といった伝統的なプログラミング言語よりも短時間で科学技術計算の問題を解決することが可能です。

バージョン名 : MATLAB R2019a
バージョンアップ日 : 2019年8月28日 (水)
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
起動コマンド : matlab (GUI版)
: matlab -nosplash -nodesktop -nodisplay (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンターWeb サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

https://www.mathworks.co.jp/products/new_products/latest_features.html

センターWeb サイト

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/matlab.html>

(共同利用支援係)

数式処理プログラム Mathematica のバージョンアップについて (No. 282)

数式処理プログラム「Mathematica」のバージョンアップを行いましたのでお知らせいたします。

Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。Mathematica の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという 3 つに大別でき、この 3 つが一体となって使いやすいインターフェイスを提供しています。

バージョン名 : Mathematica 12.0
バージョンアップ日 : 2019年8月28日 (水)
サービスホスト : front.cc.tohoku.ac.jp (並列コンピュータ)
起動コマンド : mathematica (GUI版)
: math (テキスト版)

新機能の概要、機能の詳細、実行方法については開発元 Web サイト、およびセンターWeb サイトをご覧ください。

開発元 Web サイト

<https://www.wolfram.com/mathematica/new-in-12/>

センターWeb サイト

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/mathematica.html>

(共同利用支援係)