

GAMESS (US)

GAMESS (**G**eneral **A**tomical and **M**olecular **E**lectronic **S**tructure **S**ystem) je *ab initio* kvantno-kemijska aplikacija opće namjene te posjeduje za to uobičajene QM/MM metode poput HF, DFT, GVB, MCSCF i dr. Omogućuje i izračun pobuđenih stanja koristeći TD-DFT, CI i EOM procedure. Input datoteke mogu biti generirane pomoću programa **Avogadro**, a output datoteke vizualizirane **MacMolplt** programom.

Na računalnom klasteru Isabella, GAMESS je preveden korištenjem Intelovog Fortran kompajlera te koristi MVAPICH2 MPI knjižnice. GAMESS se pokreće putem prilagođene skripte **rungms.mpi**, koja koristi SGE varijable iz okoline korisnika. Također, spomenuta skripta ima ugrađen MPI pokretač tako da je prilikom pozivanja nužno definirati samo *input* datoteku. Osim toga, ova skripta definira varijable potrebne za uspješan **source** iduće u nizu skripte **gms-files.csh**, koja je nužna za uspješno pokretanje konačne izvršne GAMESS datoteke, odnosno **gamess.2022.2.x**.

Zbog načina kako je GAMESS osmišljen da funkcioniра u paralelnom načinu rada, nužno je da na svakom od više čvorova ima jednak i paran broj MPI-procesa. Kako sustav za upravljanje poslovima SGE ne posjeduje mogućnost definiranja broja čvorova i CPU-jezgri po čvoru, GAMESS je sigurno pokretati u ***mpisingle** paralelnoj okolini.

Moduli

Moduli koji dopremaju GAMESS u Vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul
2022.2	gamess/2022.2

Primjer korištenja

Ulazne tj. *input* podatke s primjerima možete preuzeti u [zip](#) datoteci.

Primjer serijskog izvođenja

run.sge

```
#$ -N gamess
#$ -cwd
#$ -pe *mpisingle 4

module load gamess/2022.2

rungms.mpi exam01.inp
```