

GAMESS 软件使用指南

2009 年 7 月

中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心

目录

_____软件使用指南.....	1
目录.....	2
1. 软件介绍.....	3
2. 软件的安装与测试.....	3
2.1 安装目录及安装信息.....	3
2.2 测试结果.....	3
3. 软件的运行使用方法.....	4

1. 软件介绍

GAMESS 是从头计算量子化学程序。可以从 RHF, ROHF, UHF, GVB 和 MCSCF 计算波函, 其中一些使用 CI 和 MP2 修正。自洽场的解析梯度用于自动几何优化, 过渡态寻找, 跟踪反应路径。能量 hessian 的计算允许预测振动频率。可以计算大量的分子特性, 从简单的偶极矩到含频率超级极化率。内部储存了大量基组和有效核势, 分子中可以包含到 Ra 的所有元素。几个图形程序用于显示最终结果。支持并行计算。

GAMESS (USA) 还有三个变体。PC-GAMESS 基于较早版本的 GAMESS (USA), 做了很多后期开发, 增加了很多 GAMESS (USA) 没有的功能, 适用于在 PC 机上运行, 需单独申请; CyGameSS 使用最新版本的 GAMESS (USA) 内核, 在 Windows 系统上编译, 并加入了加简单的输入文件编辑工具和计算控制界面; 另外还有专门为 ChemOffice 编译的计算模块 CSGAMESS, 用于在 Chem3D 的界面下执行从头计算。后两个可以在申请 GAMESS (USA) 后获得。

2. 软件的安装与测试

软件信息

- 平台: x86_64
- 版本: GAMESS January 12, 2009
- Licence 要求: 无

2.1 安装目录及安装信息

安装目录: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gameSS-2009.Jan.12/

数据目录: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gameSS-2009.Jan.12/tests/

2.2 测试结果

m(n,n): 表示在两个结点上各用 n 个 cpu, 共 m 个进程

测试 1:

CPU 数	wallclock	CPU 加速比
-------	-----------	---------

测试 2:

CPU 数	wallclock	CPU 加速比
-------	-----------	---------

3. 软件的运行使用方法

1. 进入用户目录，新建一个 Gamess 程序临时文件夹

```
mkdir ~/tmp
```

2. 进入数据目录，执行下面命令：

```
/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gamess-2009.Jan.12/rungms exam01.inp >& log
```

说明：exam01.inp 是数据文件样例。

4. 作业提交

串行作业

登录到 LB 结点之后，进入到数据所在目录，用 bsub 提交作业：

```
bsub -W MIN -n 1 -q QUEUE -e %J.err -o %J.out
```

```
"/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/Chem/gamess-2009.Jan.12/rungms INP > LOG "
```

MIN：为作业估计的运行时间（分钟）

QUEUE：目标队列

INP：数据文件，后缀名.inp

LOG：程序的标准输出文件

并行作业