
Instalada nova versión de GAMESS

- Actualizado (17.11.2005)

Está instalada en probas a nova versión 22 NOV 2004 (R1) de GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System)

Servidores:

- HP Superdome (sd.cesga.es)
- COMPAQ HPC320 (sc.cesga.es)
- SVG (svgd.cesga.es)

A aplicación está instalada nos tres sistemas en:

/opt/cesga/games.nov2004

Para utilizar esta aplicación é necesario utilizar o script

/opt/cesga/games.nov2004/rungms

coa seguinte sintaxe:

/opt/cesga/games.nov2004/rungms JOB 00 NCPUS >& JOB.log

onde:

JOB é o nome do arquivo 'JOB.inp' a ser executado, # NCPUS é o numero de procesadores a ser usados (que deberá coincidir cos solicitados cando se enviou á cola o traballo).

A primeira vez que se execute crearase o directorio scr no home do usuario onde se almacenarán os arquivos .dat .irc .simen e.simcor procedentes da execución.

Documentación e limitacións da versión pódense atopar na dirección <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>

Esta aplicación dispón dunha lista de discusión para usuarios por email. Detalles da suscripción en

<http://www.gl.ciw.edu/games>

No caso de que non se reporten problemas con esta nova versión, pasará a ser a versión de produción a partir do 1 de xullo de 2005.

MANUAIS

Os manuais desta versión pódense atopar nos arquivos *.DOC no directorio de instalación.

SOPORTE

En caso de problemas na utilización deste paquete de software, contacte con .