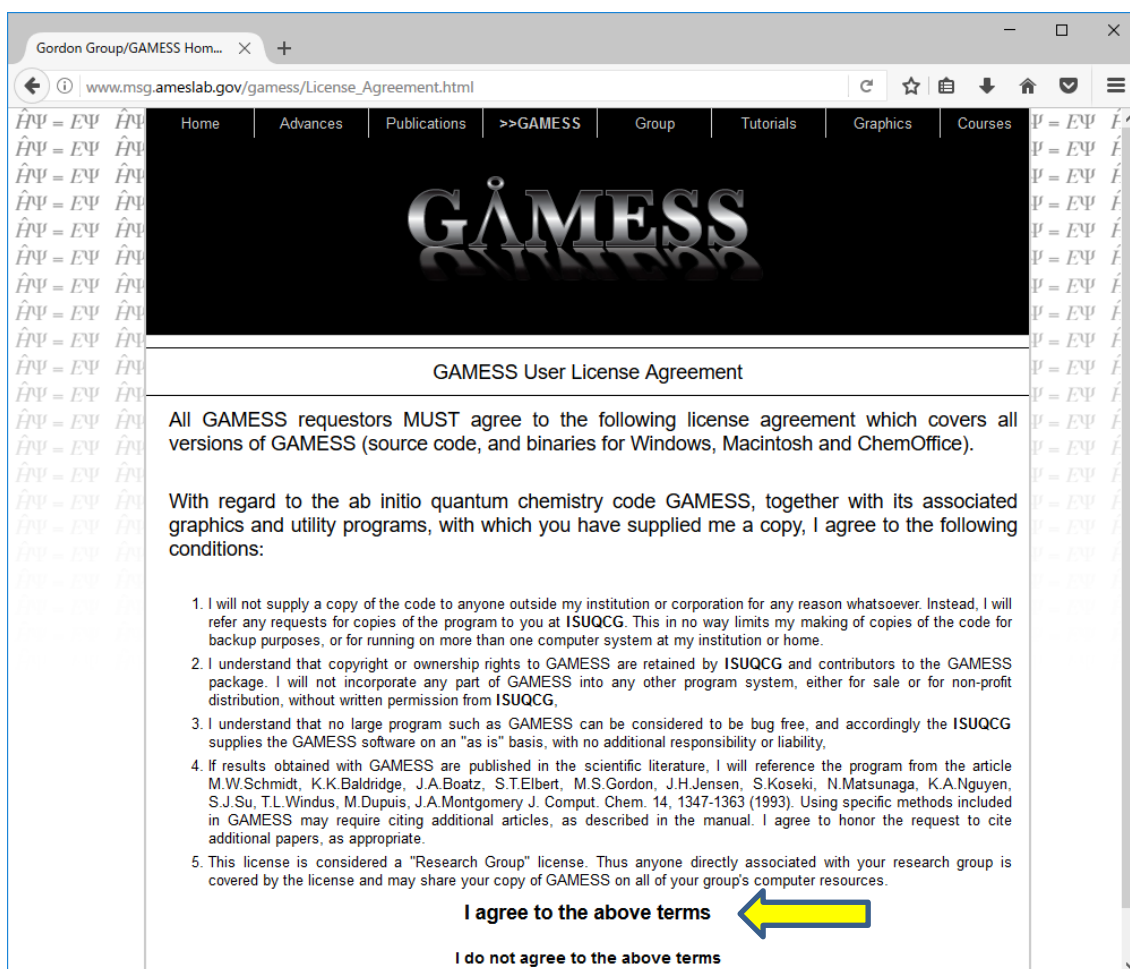


[\[64bit Windows の場合\]](#)

[\[32bit Windows の場合\]](#)

[64bit Windows の場合]

1. GAMESS のサイト内の[GAMESS User License Agreement]サイトにブラウザを用いてアクセスする。http://www.msg.ameslab.gov/games/License_Agreement.html



同意できる場合は、「I agree to the above terms」をクリックする。次の画面が表示される。

GAMESS Registration: Downlo... x +

www.msg.ameslab.gov/GAMESS/download/register/ 67%

GAMESS Registration System

Request Download

Fields in bold face type are required.

Email address:

Select desired programs below

Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Apple MacOS X
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Microsoft Windows
- GAMESS version Sep 6 2001 for MacOS 7-9
- GAMESS (VigyaanCD based on an obsolete version of GAMESS) version 1.0 beta for 32 bit x86 compatible PC
- GAMESS for ChemOffice version 6-9 (Does not include ChemOffice or work with more recent versions) version June 2003 for Microsoft Windows

Source Code Distributions

There is only one combined source code version of GAMESS, containing versions to compile on any of the machines listed below. You will be downloading only one tar file, so please check only the versions you will actually be using. Your choice(s) serve as a survey of the actual usage of different machine types, so please check all of the machines which you do actually intend to use.

Distributions well-tested on their platform:

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 32 bit (x86 compatible) under Linux
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 64 bit (x86_64 compatible) under Linux with gnu compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 64 bit IA64/x86_64 under Linux with Intel compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Apple MacOS X
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for AXP under Tru64/Linux (sold as Digital, Compaq, or HP)
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray XI under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray XT
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Fujitsu PrimePower under Solaris OE
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for HP PA-RISC or Intel under HP-UX
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM BlueGene
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM Power/PowerPC processors under AIX and Linux
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM SP under AIX
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Intel Xeon Phi
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Microsoft Windows HPC Server 2008 using PGI compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for NEC-SX series
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Sun Opteron or UltraSPARC under Solaris
- GAMESS-LIBCCHEM version August 18, 2016 R1 for NVIDIA GPUs

Distributions for older systems (extra effort may be needed to run)

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray T3E under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray vector machine under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for SGI MIPS under Irix

Request submission may take a few minutes. Please only click the Submit button once.

1) Email address を入力する

2) GAMESS versionfor Microsoft Windows にチェックを入れる
過去のバージョンを入手する場合もここにチェックを入れる

3) Submit Request をクリックする

GAMESS Registration System

User Registration Required

It seems that this is your first time downloading GAMESS software. Please fill in the following form so we have an idea of who's using GAMESS.

Fields in **bold face type** are required.

Email address:
Email address again:
First name:
Last name:
Organization:
Country:
Use for GAMESS:



Select desired programs below

Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- GAMESS version February 14, 2018 R1 for Microsoft Windows
- GAMESS version Sep 6 2001 for Mac OS 7-9
- GAMESS version September 30, 2016 R3 for Apple MacOS X
- GAMESS (VigyanCD based on an obsolete version of GAMESS) version 1.0 beta for 32 bit x86 compatible PC
- GAMESS for ChemOffice version 6-9 (Does not include ChemOffice or work with more recent versions) version June 2003 for Microsoft Windows

4) 初回は登録フォームが表示される。太字の欄をすべて入力し、再度 **Submit Request** をクリックする

5) 以下のような受付完了の画面が表示される

GAMESS Registration System

Request Accepted

Your download request has been accepted. E-mail has been sent to your address containing instructions for downloading the requested software. If these email(s) do not arrive in the next few days, contact games@si.msg.chem.iastate.edu. Note that the email will have a from address of games@si.msg.chem.iastate.edu and a reply to address of games@si.msg.chem.iastate.edu. If you do not receive the email reply within the next hour please check your spam folder or otherwise verify that the email reply has not been filtered by your email software.

2. 数日以内に先ほど入力したアドレスにメールが届く。メール本文中の指示に従い GAMESS をダウンロードする。

1) ダウンロードするためのパスワードをメモしてから、ダウンロードリンク先をクリックする。

You can download GAMESS for Windows binaries with your browser by going to:
<http://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/Windows64.html>
Instructions are provided on that web page for downloading and unpacking the GAMESS for Windows archive. The username is: source

You will need the password listed below:

Please note that the password will be changed regularly (usually weekly on Sunday). You should therefore arrange to complete the downloading of the source in a timely manner, before the password is changed. The password this week is:

aKEGiVMQ
next week it will be:

2) リンク先下部の **Older Version** から 2016 年版のダウンロード先に移動する。

ここでは例として 2016 年版の GAMESS の入手方法を示すが、最新版やその他のバージョンも Winmostar から使用可能である。

Chem3D

If you wish to use GAMESS with Chem3D on Microsoft Windows then please download and install the 2013 version available [here](#).

Older Versions

[2016]

3) インストーラを選択する。

64-Bit Windows

Notice: Native binaries for 32-bit Microsoft Windows Operating Systems are no longer supported. It can, however, be compiled from the source.

This version is the complete version of GAMESS (with Tinker, NEO, and VB2000) precompiled for use on 64-bit Windows. To download any of these Win below, enter the username (which is always **source**), and the current download password, from the e-mail you should have already received. Once down on the .msi file, and read the instructions.

The files are Microsoft Setup and Installation types (.msi). All post Windows-2000 installations should have an msixec to run it.

Release	Download (.msi)	Compiler	Optimization Flags	Math Library	Comments
2016 R1	gameSS-64-2016-pgi-linux-mkl.msi		stsse -Mipa=fast,safe	Intel MKL	all exam files pass
2016 R1	gameSS-64-2016-pgi-linux-pgi.msi	PGI v. 15.4	-fastsse -Mipa=fast,safe	PGI BLAS	all exam files pass
2016 R1	gameSS-64-2016-intel-linux-mkl.msi	Intel v. 16.4	-O2	Intel MKL	exam 43 fail

If you are unsure which .msi file to choose then please select the executable name in **BOLD**.

You should also download the directions file, [GAMESS-WINDOWS-README.pdf](#), which contains screen shots of how to install and execute GAMESS.

Recent versions of Chemdraw (in Chem Office) can prepare and then execute GAMESS input. In order to do so, please follow the installation direction file you need to copy the file C:\Users\Public\gameSS-64\runGms.gms to C:\Users\Public\gameSS-64\parameters.gms. The interface should then work, prc GAMESS by itself, according to the direction file named above.

特別な状況で無い限りは、太字のファイル (.msi) を選択する。

4) ユーザ名とパスワードの入力を要求されるので、以下のように入力してダウンロードする。

ユーザ名 : **source**

パスワード : (メールに記述されたもの)

3. インストーラの起動

1) エクスプローラなどを用いて.msi ファイルを保存したフォルダに移動する。

2) ダウンロードした.msi ファイルをダブルクリックすると、以下に示すようなセットアップウィザードが立ち上がる。



3) 指示に従ってウィザードを進んでインストールする。

注意！！途中でインストール先を聞いてくるが、GAMESSのインストール先には日本語やスペースが含まれてはいけない。

○ C:\Users\Public\gamess-64

× C:\Program Files\GAMESS ← スペースが含まれている

× C:\分子軌道法ソフト\GAMESS ← 日本語が含まれている

最後に、インストーラの指示に従って再起動する。

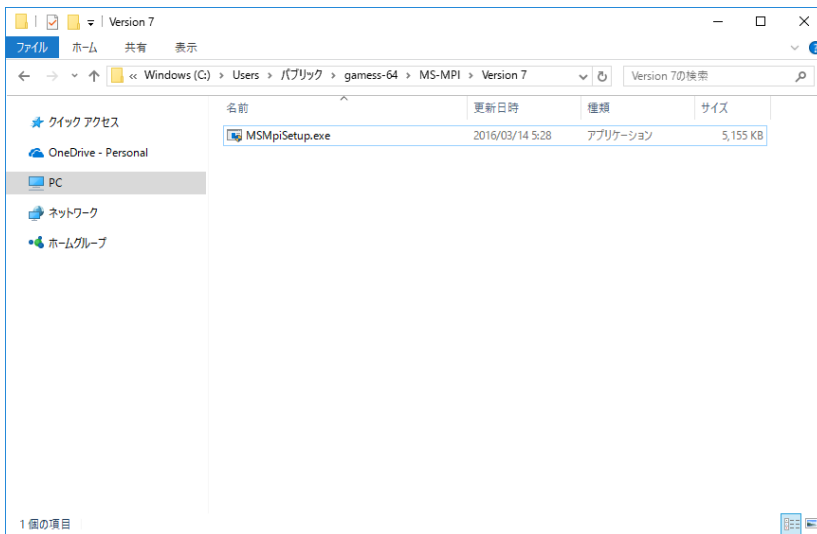
※詳しいインストール手順は <http://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/GAMESS-Windows-64-Bit-README-THEN-README-AGAIN.pdf>

を参照。

4. MPI 並列実行環境のインストール

1) インストール先フォルダに移動する。(例えば、C:\Users\Public\gamess-64)

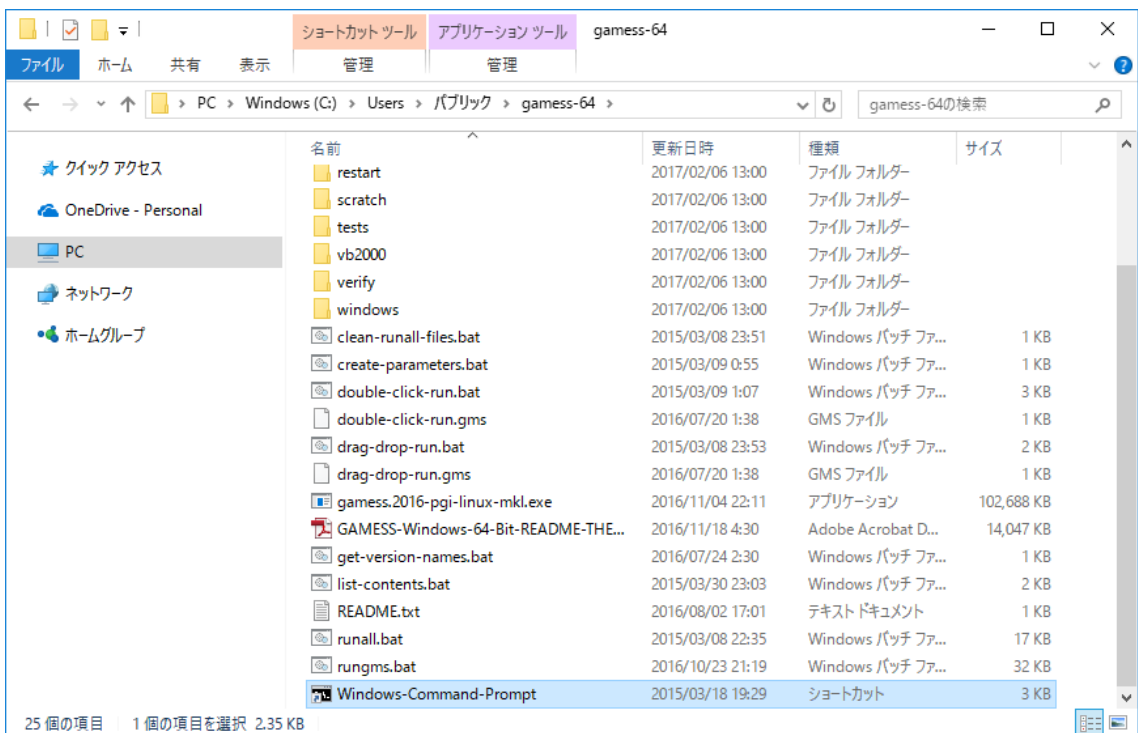
2) MS-MPI\Version 7 フォルダに移動する。



- 3) MSMpiSetup.exe をダブルクリックして、手順に従ってインストールする。
- 4) Windows を再起動する。

5. GAMESS の実行環境を構成する。

- 1) インストール先フォルダに移動する（例えば、C:\Users\Public\games-64）



- 2) Windows-Command-Prompt をダブルクリックする。下のようなウィンドウが立ち上がる。

```
Windows-Command-Prompt - C:\Users\Public\gamess-64\list-contents.bat
Script      Description
=====
clean-runall-files.bat  Removes exam log, scratch, and restart files.

create-parameters.bat  Creates rungms.gms parameter file needed by
                        the rungms.bat batch script.

double-click-run.bat   Run all *.inp files from the input folder and
                        store log files in output folder defined in
                        double-click-run.gms

drag-drop-run.bat      Script that accomodates drag-and-drop of *.inp
                        files. Uses [ncpus] and [version] defined in
                        drag-drop-run.gms

get-version-names.bat  List available GAMESS binaries and version names

runall.bat [version] [ncpus]
                Run exam files in either serial or parallel

rungms.bat [input] [version] [ncpus] [ppn]
                Run a GAMESS calculation

続行するには何かキーを押してください . . .
```

3) 何かキーを押す。

4) create-parameters.bat と入力して Enter を押す。これによって rungms.gms が作成される。何かキーを押す。

```
Windows-Command-Prompt
drag-drop-run.bat      Script that accomodates drag-and-drop of *.inp
                        files. Uses [ncpus] and [version] defined in
                        drag-drop-run.gms

get-version-names.bat  List available GAMESS binaries and version names

runall.bat [version] [ncpus]
                Run exam files in either serial or parallel

rungms.bat [input] [version] [ncpus] [ppn]
                Run a GAMESS calculation

続行するには何かキーを押してください . . .

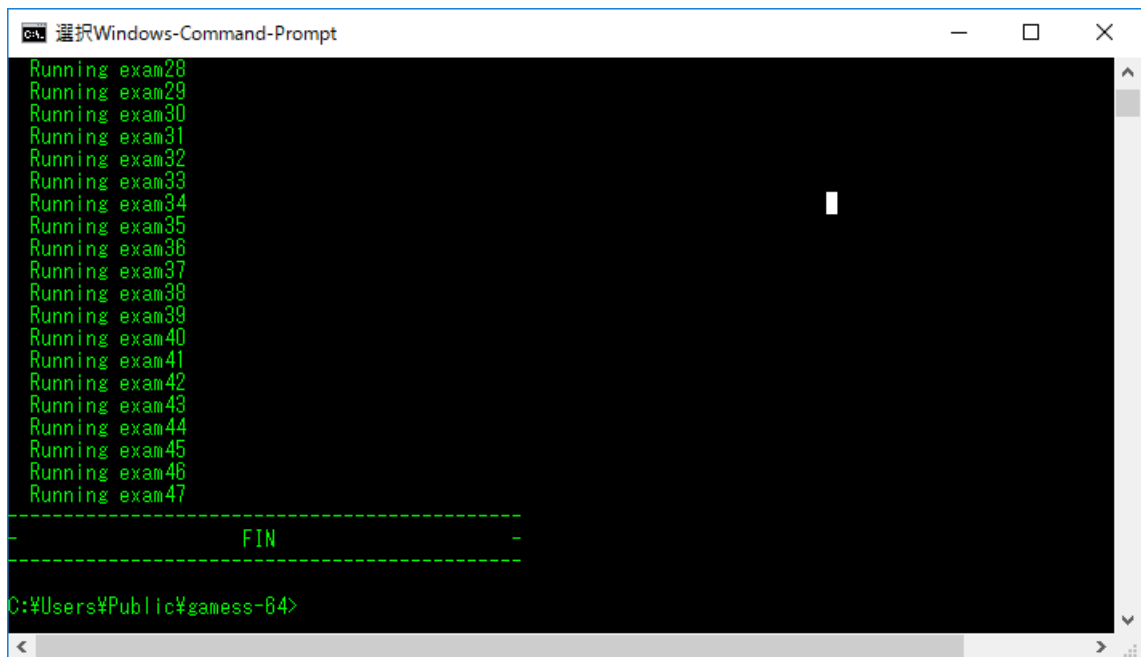
C:\Users\Public\gamess-64>create-parameters.bat
GAMESSDIR=C:\Users\Public\gamess-64
AUXDATADIR=C:\Users\Public\gamess-64\auxdata
RESTARTDIR=C:\Users\Public\gamess-64\restart
SCRATCHDIR=C:\Users\Public\gamess-64\scratch

Finished rungms.gms parameter file

続行するには何かキーを押してください . . .

C:\Users\Public\gamess-64>runall.bat
```

5) GAMESS が正しく実行できるかテストするため、runall.bat 2016-pgi-linux-mkl 1 と入力して Enter を押す。2016-pgi-linux-mkl の部分はインストールしたバージョンによって違うため、分からない場合は get-version-names.bat と入力して Enter を押し、表示される Version を調べる。下のようエラーなく表示されれば問題ない。



```
Running exam28
Running exam29
Running exam30
Running exam31
Running exam32
Running exam33
Running exam34
Running exam35
Running exam36
Running exam37
Running exam38
Running exam39
Running exam40
Running exam41
Running exam42
Running exam43
Running exam44
Running exam45
Running exam46
Running exam47
-----
                        FIN
-----
C:\Users\Public\gamess-64>
```

6) 並列実行のテストをするため、`runall.bat 2016-pgi-linux-mkl 2` と入力して **Enter** を押す。同様に正常終了を確認する。

6. Winmostar が GAMESS を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar の[ツール]→[環境設定]をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル[プログラムパス]タブを開き、[GAMESS(1)]の[...]ボタンをクリックする。GAMESS のインストールフォルダの下にある実行ファイル※を登録し[OK]をクリックする。

※実行ファイルは使用する GAMESS のバージョンによって異なる。

ex. C:\Users\Public\gamess-64\gamess.2016-pgi-linux-mkl.exe など

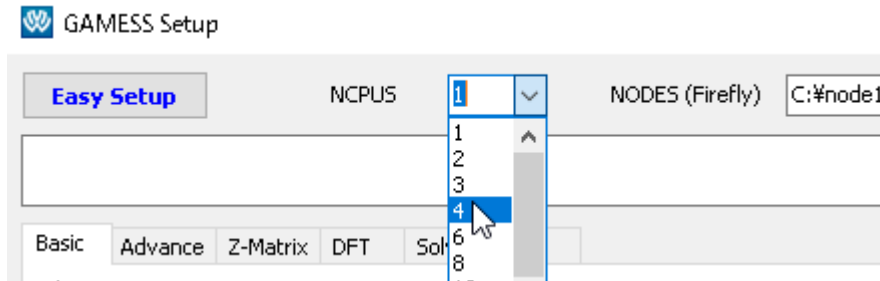
基本 編集 計算 表示 プログラムパス

Editor:	<input type="text" value="notepad"/>	...	GAMESS(1):	<input type="text" value="C:\Users\Public\games-64\games"/>	...
Jmol:	<input type="text" value="C:\jmol-11.5\jmol.bat"/>	...	GAMESS(2):	<input type="text" value="C:\ff820_windows\Firefly820.exe"/>	...
Mercury:	<input type="text" value="C:\Program Files\CCDC\Mercury 1."/>	...	Gaussian:	<input type="text" value="C:\g03w\g03.exe"/>	...
POV-Ray:	<input type="text" value="C:\Program Files\POV-Ray\v3.7\bi"/>	...	NWChem:	<input type="text" value="C:\nwchem\bin\nwchem.exe"/>	...
OpenSCAD:	<input type="text" value="C:\Program Files\OpenSCAD\open"/>	...	Cygwin:	<input type="text" value="C:\cygwin_wm"/>	...
VMD:	<input type="text" value="C:\Program Files (x86)\University c"/>	...	LAMMPS:	<input type="text" value="C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 2C"/>	...
MOPAC(1):	<input type="text" value="%BINDIR%\mop6w70.exe"/>	...	MPICH2:	<input type="text" value="C:\Program Files\MPICH2\bin\mpie"/>	...
MOPAC(2):	<input type="text" value="%BINDIR%\mop7w70.exe"/>	...	Quantum ESPRESSO:	<input type="text" value="C:\Program Files\Quantum ESPRES"/>	...
MOPAC(3):	<input type="text" value="%BINDIR%\mop9380.exe"/>	...	FDMNES:	<input type="text" value="C:\fdmnes\fdmnes_win64.exe"/>	...
MOSF:	<input type="text" value="%BINDIR%\mosf_jcpe.exe"/>	...	CONFLEX:	<input type="text" value="C:\CONFLEX\bin\flex7b3_win_x64"/>	...

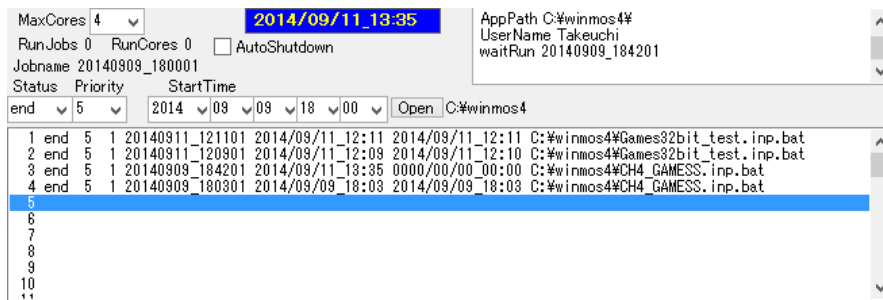
デフォルト値に戻す インポート エクスポート **OK** キャンセル 適用

7. CPU コア数の設定

1) Winmostar のメニューから、[QM]-[GAMESS]-[キーワード設定]を選択し、[NCPUS]の欄に計算に割り当てるコア数を設定してウインドウ下部の[OK]ボタンをクリックする。

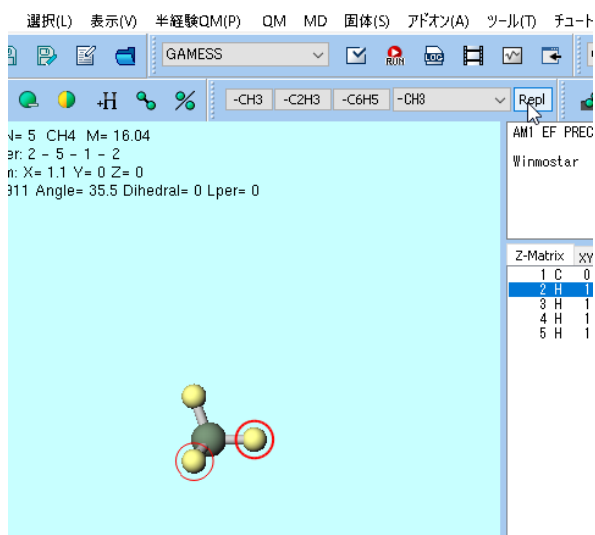


2) ローカルジョブでジョブマネージャを使用する場合（デフォルト）、Winmostar の [ツール]-[ジョブマネージャ]をクリックする。[MaxCores]に計算に割り当てるコア数を設定する

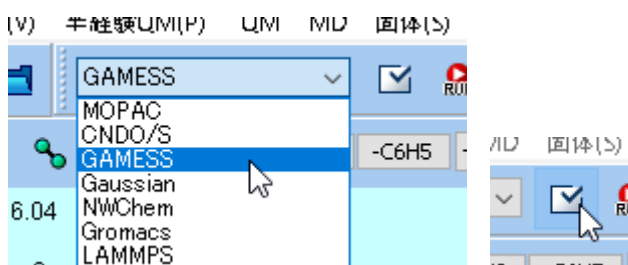


8. 簡易的な動作チェック

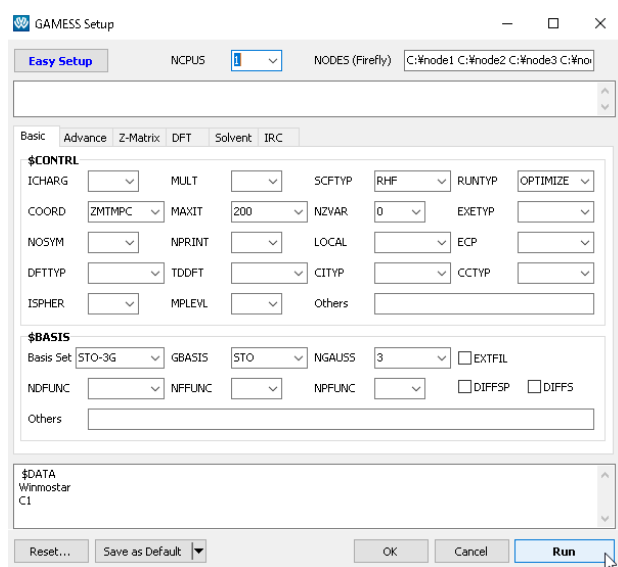
1) Winmostar のメインメニューの [ファイル]-[新規]をクリックし、メインウインドウ上部ツールバーの[Repl]ボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



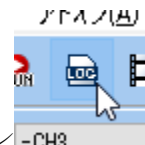
2) ツールバーの[ソルバを選択]プルダウンメニューで[GAMESS]を選択し、その横の[キーワード設定]ボタンをクリックする。



3) GAMESS Setup ウィンドウが開くので、右下の[Run]ボタンをクリックする。



4) 保存ダイアログが開き、適当な名前で保存すると黒いターミナルウィンドウが開き、GAMESSの計算が始まる。大量のメッセージが流れた後、最後に以下の様に”EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY”といったメッセージが表示されるのを確認する。ターミナルウィンドウ



ウが閉じた後に再度確認したい場合はツールバーの[ログを表示]ボタンを押してデフォルトで選ばれたファイルを開く。

(インストールした GAMESS の種類に応じて詳細なメッセージは若干変化する)

```
Winmostar/JM 20180524_025102 C:*winmos8\UserData#temp.inp.bat - □ ×
..... END OF PROPERTY EVALUATION .....
STEP CPU TIME = 0.00 TOTAL CPU TIME = 0.2 ( 0.0 MIN)
TOTAL WALL CLOCK TIME= 0.2 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%
$VIB
IVIB= 0 IATOM= 0 ICCOORD= 0 E= -39.7268636772
0.000000000E+00 0.000000000E+00-7.815234707E-06 0.000000000E+00 0.000000000E+00
6.628921970E-06-1.536769494E-06 0.000000000E+00 3.958403674E-07 7.680682677E-07
1.331329509E-06 3.952298037E-07 7.680486123E-07-1.331319693E-06 3.952425530E-07
-3.514397014E-10-5.265377405E-11 2.155835629E-06
.....END OF GEOMETRY SEARCH.....
STEP CPU TIME = 0.00 TOTAL CPU TIME = 0.2 ( 0.0 MIN)
TOTAL WALL CLOCK TIME= 0.2 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%
580000 WORDS OF DYNAMIC MEMORY USED
EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY Thu May 24 02:51:39 2018
DDI: 263624 bytes (0.3 MB / 0 MWords) used by master data server.

-----
CPU timing information for all processes
-----
0: 0.093750 + 0.093750 = 0.187500
1: 0.000000 + 0.015625 = 0.015625
-----
```

- ※ エミュレーターなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性があります。
- ※ GAMESS を実行した際に、「ddikick.x error: execvp failed in Kickoff_local」などとエラーが出る場合は、ファイヤウォールの設定で、GAMESS のインストールフォルダ以下の GAMESS の実行ファイル (gamess11.exe など) と ddikick に通信の許可を与えてください。
- ※ GAMESS2016 を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイヤウォールの例外設定に、GAMESS と MS-MSI のインストールフォルダを指定しなければならない場合があります。

[32bit Windows の場合]

1. GAMESS のサイト内の[GAMESS User License Agreement]サイトにブラウザを用いてアクセスする。http://www.msg.ameslab.gov/gamess/License_Agreement.html

Gordon Group/GAMESS Home... × +

www.msg.ameslab.gov/games/License_Agreement.html

Home | Advances | Publications | >>GAMESS | Group | Tutorials | Graphics | Courses

GAMESS

GAMESS User License Agreement

All GAMESS requestors MUST agree to the following license agreement which covers all versions of GAMESS (source code, and binaries for Windows, Macintosh and ChemOffice).

With regard to the ab initio quantum chemistry code GAMESS, together with its associated graphics and utility programs, with which you have supplied me a copy, I agree to the following conditions:

1. I will not supply a copy of the code to anyone outside my institution or corporation for any reason whatsoever. Instead, I will refer any requests for copies of the program to you at ISUQCG. This in no way limits my making of copies of the code for backup purposes, or for running on more than one computer system at my institution or home.
2. I understand that copyright or ownership rights to GAMESS are retained by ISUQCG and contributors to the GAMESS package. I will not incorporate any part of GAMESS into any other program system, either for sale or for non-profit distribution, without written permission from ISUQCG.
3. I understand that no large program such as GAMESS can be considered to be bug free, and accordingly the ISUQCG supplies the GAMESS software on an "as is" basis, with no additional responsibility or liability.
4. If results obtained with GAMESS are published in the scientific literature, I will reference the program from the article M.W.Schmidt, K.K.Baldrige, J.A.Boatz, S.T.Elbert, M.S.Gordon, J.H.Jensen, S.Koseki, N.Matsunaga, K.A.Nguyen, S.J.Su, T.L.Windus, M.Dupuis, J.A.Montgomery J. Comput. Chem. 14, 1347-1363 (1993). Using specific methods included in GAMESS may require citing additional articles, as described in the manual. I agree to honor the request to cite additional papers, as appropriate.
5. This license is considered a "Research Group" license. Thus anyone directly associated with your research group is covered by the license and may share your copy of GAMESS on all of your group's computer resources.

I agree to the above terms ←

I do not agree to the above terms

同意できる場合は、「I agree to the above terms」をクリックする。次の画面が表示される。

GAMESS Registration: Downlo... × +

www.msg.ameslab.gov/GAMESS/download/register/ 67%

GAMESS Registration System

Request Download

Fields in bold face type are required.

Email address:

Select desired programs below

Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Apple MacOS X
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Microsoft Windows
- GAMESS version Sep 6 2001 for MacOS 7-9
- GAMESS (VigyaanCD based on an obsolete version of GAMESS) version 1.0 beta for 32 bit x86 compatible PC
- GAMESS for ChemOffice version 6-9 (Does not include ChemOffice or work with more recent versions) version June 2003 for Microsoft Windows

Source Code Distributions

There is only one combined source code version of GAMESS, containing versions to compile on any of the machines listed below. You will be downloading only one tar file, so please check only the versions you will actually be using. Your choice(s) serve as a survey of the actual usage of different machine types, so please check all of the machines which you do actually intend to use.

Distributions well-tested on their platform:

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 32 bit (x86 compatible) under Linux
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 64 bit (x86_64 compatible) under Linux with gnu compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for 64 bit IA64/x86_64 under Linux with Intel compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Apple MacOS X
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for AXP under Tru64/Linux (sold as Digital, Compaq, or HP)
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray XI under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray XT
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Fujitsu PrimePower under Solaris OE
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for HP PA-RISC or Intel under HP-UX
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM BlueGene
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM Power/PowerPC processors under AIX and Linux
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for IBM SP under AIX
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Intel Xeon Phi
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Microsoft Windows HPC Server 2008 using PGI compilers
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for NEC-SX series
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Sun Opteron or UltraSPARC under Solaris
- GAMESS-LIBCCHEM version August 18, 2016 R1 for NVIDIA GPUs

Distributions for older systems (extra effort may be needed to run)

- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray T3E under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for Cray vector machine under Unicos
- GAMESS version August 18, 2016 R1 for SGI MIPS under Irix

Request submission may take a few minutes. Please only click the Submit button once.

1) Email address を入力する

2) GAMESS versionfor Microsoft Windows にチェックを入れる
過去のバージョンを入手する場合もここにチェックを入れる

3) Submit Request をクリックする

GAMESS Registration System

User Registration Required

It seems that this is your first time downloading GAMESS software. Please fill in the following form so we have an idea of who's using GAMESS.

Fields in **bold face type** are required.

Email address:
Email address again:
First name:
Last name:
Organization:
Country:
Use for GAMESS:

Select desired programs below

Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- GAMESS version February 14, 2018 R1 for Microsoft Windows
- GAMESS version Sep 6 2001 for Mac OS 7-9
- GAMESS version September 30, 2018 R3 for Apple MacOS X
- GAMESS (VigyaanCD based on an obsolete version of GAMESS) version 1.0 beta for 32 bit x86 compatible PC
- GAMESS for ChemOffice version 6-9 (Does not include ChemOffice or work with more recent versions) version June 2003 for Microsoft Windows

4) 初回は登録フォームが表示される。太字の欄をすべて入力し、再度 **Submit Request** をクリックする

5) 以下のような受付完了の画面が表示される

GAMESS Registration System

Request Accepted

Your download request has been accepted. E-mail has been sent to your address containing instructions for downloading the requested software. If these email(s) do not arrive in the next few days, contact games@si.msg.chem.iastate.edu. Note that the email will have a from address of games@si.msg.chem.iastate.edu and a reply to address of games@si.msg.chem.iastate.edu. If you do not receive the email reply within the next hour please check your spam folder or otherwise verify that the email reply has not been filtered by your email software.

2. 数日以内に先ほど入力したアドレスにメールが届く。メール本文中の指示に従い GAMESS をダウンロードする。

1) ダウンロードするためのパスワードをメモしてから、ダウンロードリンク先をクリックする。

You can download GAMESS for Windows binaries with your browser by going to:
<http://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/Windows64.html>
Instructions are provided on that web page for downloading and unpacking the GAMESS for Windows archive. The username is: source

You will need the password listed below:

Please note that the password will be changed regularly (usually weekly on Sunday). You should therefore arrange to complete the downloading of the source in a timely manner, before the password is changed. The password this week is:

aKEG1VMQ
next week it will be:

2) インストーラ(32bit Windows の binary)を選択する。

32-Bit Windows

If your PC is running an extremely old version of Windows, which is only a 32-bit version, we provide a very old 32-bit [binary](#).
Not everything mentioned in the manual will work, nor are bug fixes from the following years included. You will also need the [directions](#) for installation. Use this old binary unless their computer is incapable of 64-bit operation!

4) ユーザ名とパスワードの入力を要求されるので、以下のように入力してダウンロードする。

ユーザ名 : source

パスワード : (メールに記述されたもの)

3. インストーラを起動する。

1) エクスプローラなどを用いて.msi ファイルを保存したフォルダに移動する。

2) ダウンロードした.msi ファイルをダブルクリックすると、以下に示すセットアップウィザードが立ち上がる。



3) 指示に従ってウィザードを進んでインストールする。

注意！！途中でインストール先を聞いてくるが、GAMESSのインストール先には日本語やスペースが含まれてはいけません。

○ C:\game32

× C:\Program Files\GAMESS ← スペースが含まれている

× C:\分子軌道法ソフト\GAMESS ← 日本語が含まれている

最後に、インストーラの指示に従って再起動する。

※詳しいインストール手順は

<http://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/source/Windows/32bit/WinGAMESS-setup-guide-32.pdf>

を参照。

4. MPI 並列実行環境のインストール

1) <https://www.microsoft.com/ja-JP/download/details.aspx?id=5555> から「Microsoft Visual C++ 2010 再頒布可能パッケージ (x86)」(vc_redist_x86.exe)をダウンロードしてインストールする。

2) <https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=14737> から「HPC Pack 2008 R2 MS-MPI Redistributable Package with Service Pack 4」(mpi_x86.msi)をダウンロードしてインストールする。

3) PC を再起動する。

5. GAMESS の実行環境を構成する。

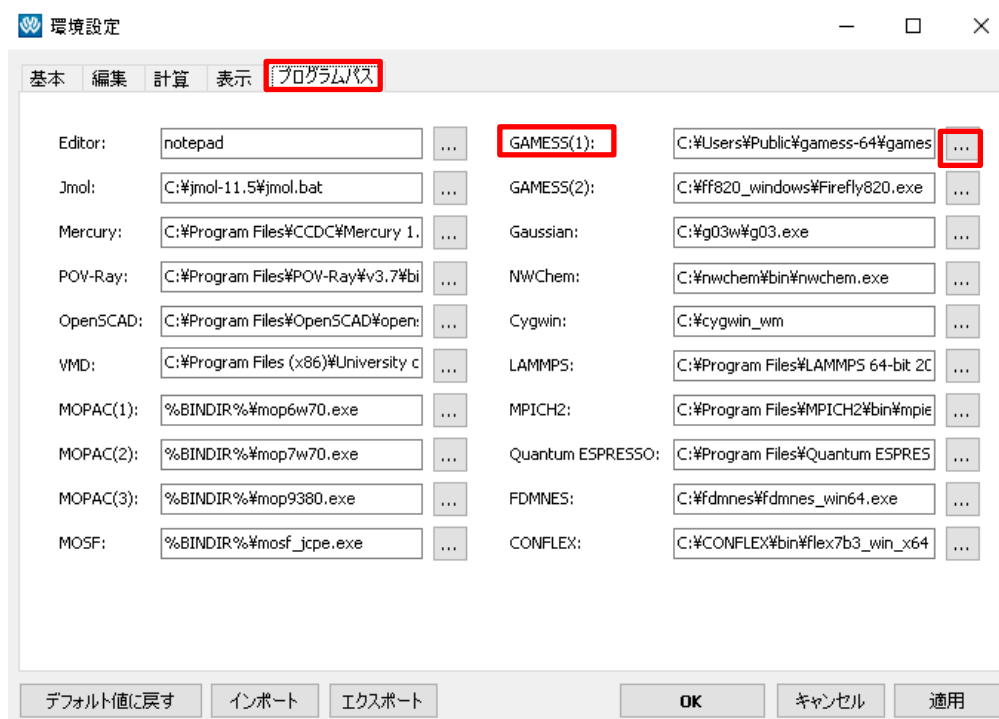
1) インストール先フォルダに移動する。(例えば、C:\¥ gamess.32)

2) parameters.gms をメモ帳などのエディタで開き、各種パラメータをインストールしたフォルダに合わせて編集する。

6. Winmostar が GAMESS を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar の[ツール]→[環境設定]をクリックして環境設定パネルを開く。環境設定パネル[プログラムパス]タブを開き、[GAMESS(1)]の[...]ボタンをクリックする。GAMESS のインストールフォルダの下にある実行ファイル※を登録し[OK]をクリックする。

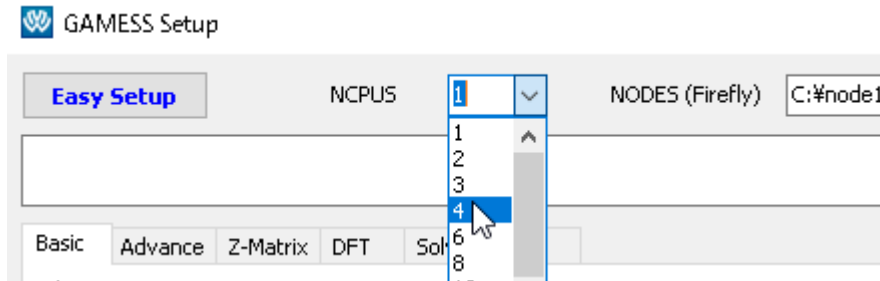
※実行ファイルは使用する GAMESS のバージョンによって異なる。

ex. C:\¥ gamess.32¥gamess.11-32.exe など

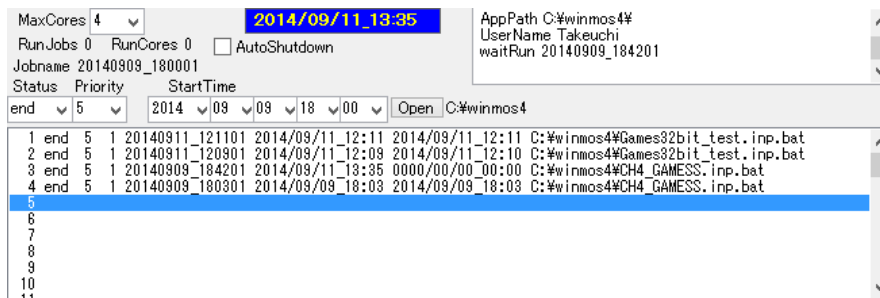


7. CPU コア数の設定

1) Winmostar のメニューから、[QM]-[GAMESS]-[キーワード設定]を選択し、[NCPUS]の欄に計算に割り当てるコア数を設定してウインドウ下部の[OK]ボタンをクリックする。

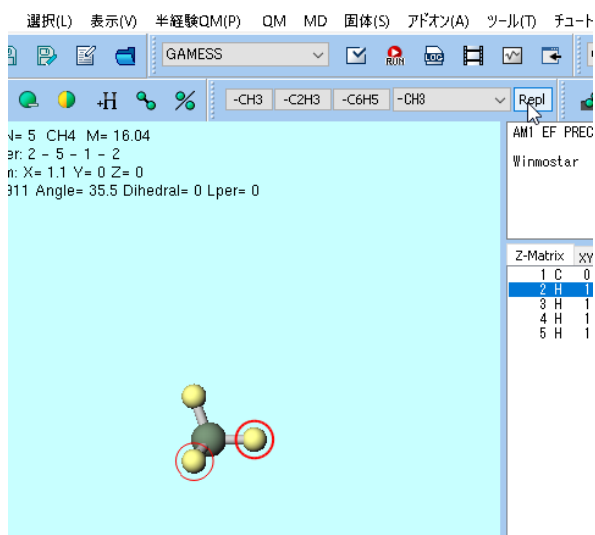


2) ローカルジョブでジョブマネージャを使用する場合（デフォルト）、Winmostar の [ツール]-[ジョブマネージャ]をクリックする。[MaxCores]に計算に割り当てるコア数を設定する

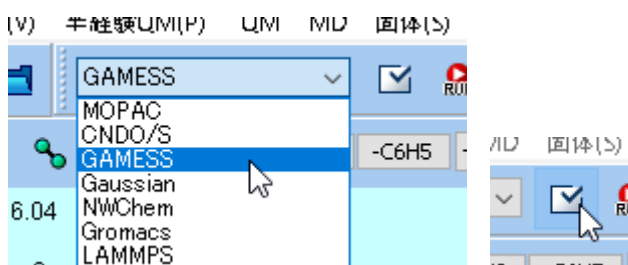


8. 簡易的な動作チェック

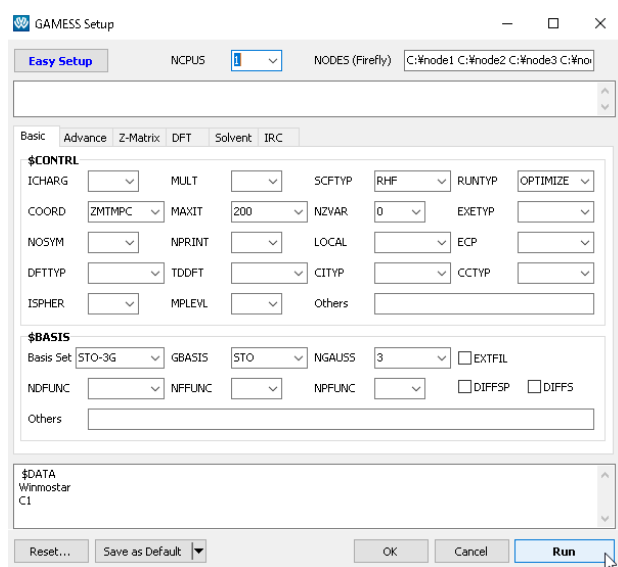
1) Winmostar のメインメニューの [ファイル]-[新規]をクリックし、メインウインドウ上部ツールバーの[Repl]ボタンをクリックすると、メタン分子が作成される。



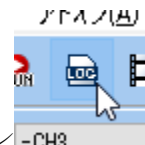
2) ツールバーの[ソルバを選択]プルダウンメニューで[GAMESS]を選択し、その横の[キーワード設定]ボタンをクリックする。



3) GAMESS Setup ウィンドウが開くので、右下の[Run]ボタンをクリックする。



4) 保存ダイアログが開き、適当な名前で保存すると黒いターミナルウィンドウが開き、GAMESSの計算が始まる。大量のメッセージが流れた後、最後に以下の様に”EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY”といったメッセージが表示されるのを確認する。ターミナルウィンド



ウが閉じた後に再度確認したい場合はツールバーの[ログを表示]ボタンを押ししてデフォルトで選ばれたファイルを開く。

(インストールした GAMESS の種類に応じて詳細なメッセージは若干変化する)

```
Winmostar/JM 20180524_025102 C:*winmos8\UserData#temp.inp.bat - □ ×
..... END OF PROPERTY EVALUATION .....
STEP CPU TIME = 0.00 TOTAL CPU TIME = 0.2 ( 0.0 MIN)
TOTAL WALL CLOCK TIME= 0.2 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%
$VIB
IVIB= 0 IATOM= 0 ICCOORD= 0 E= -39.7268636772
0.000000000E+00 0.000000000E+00-7.815234707E-06 0.000000000E+00 0.000000000E+00
6.628921970E-06-1.536769494E-06 0.000000000E+00 3.958403674E-07 7.680682677E-07
1.331329509E-06 3.952298037E-07 7.680486123E-07-1.331319693E-06 3.952425530E-07
-3.514397014E-10-5.265377405E-11 2.155835629E-06
.....END OF GEOMETRY SEARCH.....
STEP CPU TIME = 0.00 TOTAL CPU TIME = 0.2 ( 0.0 MIN)
TOTAL WALL CLOCK TIME= 0.2 SECONDS, CPU UTILIZATION IS 100.00%
580000 WORDS OF DYNAMIC MEMORY USED
EXECUTION OF GAMESS TERMINATED NORMALLY Thu May 24 02:51:39 2018
DDI: 263624 bytes (0.3 MB / 0 MWords) used by master data server.

-----
CPU timing information for all processes
-----
0: 0.093750 + 0.093750 = 0.187500
1: 0.000000 + 0.015625 = 0.015625
-----
```

- ※ エミュレーターなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性があります。
- ※ GAMESS を実行した際に、「ddikick.x error: execvp failed in Kickoff_local」などとエラーが出る場合は、ファイヤウォールの設定で、GAMESS のインストールフォルダ以下の GAMESS の実行ファイル (gamess11.exe など) と ddikick に通信の許可を与えてください。
- ※ GAMESS2016 を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイヤウォールの例外設定に、GAMESS と MS-MSI のインストールフォルダを指定しなければならない場合があります。