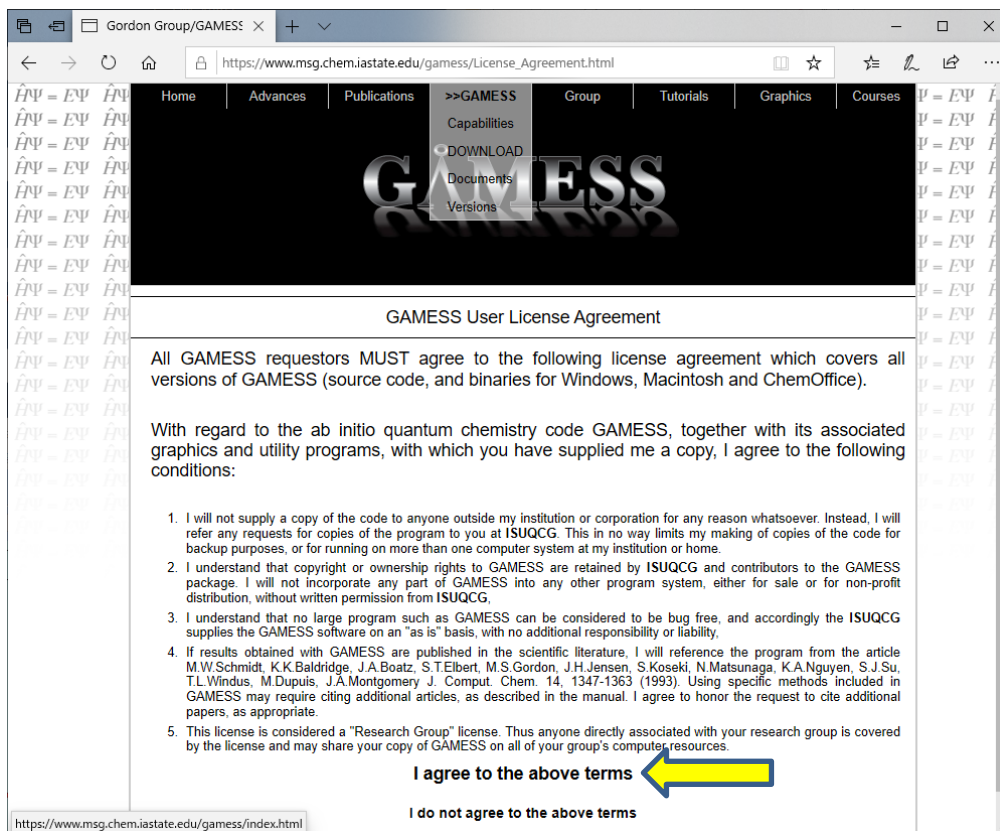


## Windows 版 GAMESS インストールマニュアル

2023 年 10 月 13 日

32bit 環境の場合は[こちら](#)に移動してください。以下に、現在標準的な 64bit 環境での手順を示します。

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。[https://www.msg.chem.iastate.edu/games/License\\_Agreement.html](https://www.msg.chem.iastate.edu/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。

- 1) Email address を入力する
- 2) GAMESS version .....for Microsoft Windows にチェックを入れる  
(2022 年 5 月現在では「GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows」)  
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

### Request Download

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

Email address:

1)

\*\*\* Apple iCloud mail server blocks emails from our domain. Please do not use an \*@cloud.com email.

\*\*\* Other mail server are also blocking emails from our domain. Please do not use an \*@mail.ru email.

\*\*\* If a week goes by without seeing a registration approval then please consider registering with a different email domain (gmail.com, hotmail.com, yahoo.com, etc.)

#### Select desired programs below

##### Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- ☐ GAMESS version September 30, 2019 R2 for Apple MacOS X
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows

2)

##### 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. 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 September 30, 2020 R2 for DoD HPCMP T1-22
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit ARM under Linux using armflang compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit ARM under Linux using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit ARM under Linux using NVIDIA HPC SDK
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit ARM under Linux using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using AMD compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using Intel OneAPI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using NVIDIA HPC SDK
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for 64 bit x86\_64 under Linux using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Apple MacOS X using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Apple MacOS X using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Apple MacOS X using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Apple MacOS X using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for HPE Cray
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for IBM Power processors under Linux
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows under Cygwin using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows under WSL using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows using Intel OneAPI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 2 for Microsoft Windows using unlisted compilers
- ☐ GAMESS+LIBCHEM version September 30, 2021 R2 Patch 2 for NVIDIA GPUs

3)

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

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。もしエラーが出て登録フォームが表示されない場合、他のブラウザで試してください。Microsoft Edge の場合は、Internet Explorer モードでアクセスし直してください。

## 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 June 30, 2019 R1 Patch 1 for Microsoft Windows
- ☐ GAMESS version Sep 6 2001 for MacOS 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

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](mailto:games@si.msg.chem.iastate.edu). Note that the email will have a from address of [games@si.msg.chem.iastate.edu](mailto:games@si.msg.chem.iastate.edu) and a reply to address of [games@si.msg.chem.iastate.edu](mailto: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 clicking to:

<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/Windows64.html>

Instructions are provided on that web page for downloading and using 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:

2)

next week it will be:

2) 表中のインストーラを選択する。

Welcome to GAMESS Microsoft Windows Operating Systems.

#### 64-Bit Windows

```

      .dp'      "bgd      db      7MMML      MMF' 7MM'"MM      .M'"bgd      .M'"bgd
      .M      ;MM      MMb      dPMM      MM      7      MI      Y      MI
      dM      ,M      MM      M      M      MM      d      MMb      MMb
      MM      `7MMF'  A      MM      M      M      SA      RMMMM      SHERa      ElMMq
      MM      MM      A      VM      M      VM      MM      MM      Y      MM      MM
      Mb      MM      A      VM      M      VM      MM      MM      M      Mb      dM      Mb      dM
      "      bmmmlGO      .YAN.      .KEES!L      JML.      .JMMML.      JMMmmmmMM      P"Ybmm"      P"Ybmm"

      GAMESS for Microsoft Windows
      http://www.nsg.ameslab.gov/games

```

This version is the complete version of GAMESS is precompiled for use on 64-bit Windows. To download any of these Windows binaries, just click on your choice below, enter the username (which is always **source**), and the current download password, from the e-mail you should have already received. Once downloaded, you just need to double click on the .msi file, and read the instructions.

**Pre-requisite software:** Download and install the Intel MPI library for Windows ([latest release](#))

Release	Download (.msi)	Compiler Used	Math Library	Comments
2021 R2 Patch 2	<a href="#">gamess-64-2021-R2-P2-intel.msi</a>	Intel 22.2	Intel MKL	Generic Optimized Binary

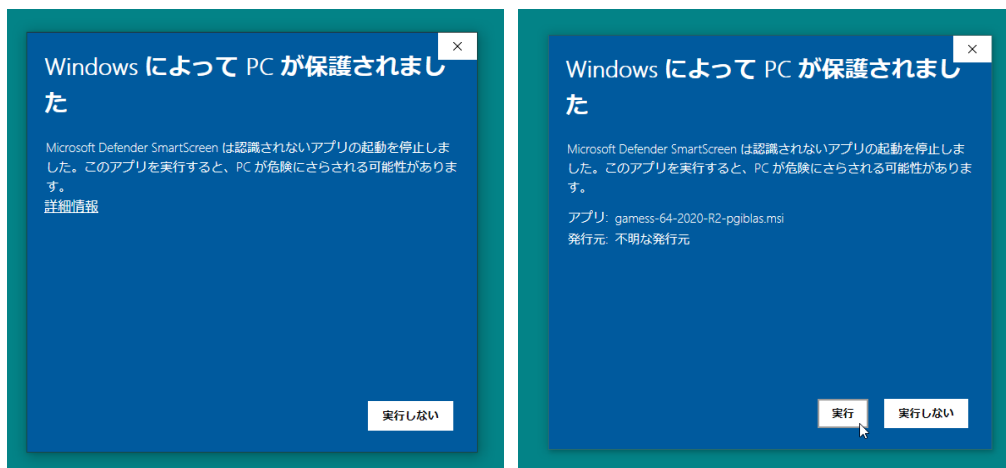
3) ユーザ名とパスワードの入力を要求されるので、以下のように入力してダウンロードする。

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。セキュリティ設定によっては下図の警告が出る。その場合は**詳細情報**をクリックし**実行**をクリックする。



- 3) 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。



- 4) 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

<https://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

**注意！！GAMESSの実行には、MPIのインストールが必須となるため、この操作は必ず行う必要がある。**

- 1) [Intel のページ](#) から「Intel MPI Library for Windows」（どちらか）をクリックしてインストーラをダウンロードする。Windows のユーザアカウント名に日本語が入っている場合、Online 版ではインストール途中でエラーが出て止まるため、Offline 版をダウンロードする。


##### Intel® MPI Library

Use this standards-based MPI implementation to deliver flexible, efficient, scalable cluster messaging architecture. This component is part of the Intel® oneAPI HPC Toolkit. [Sign up for updates.](#)

Intel® MPI Library (versions 2021.5.1 and 2021.5.2) have been updated to include functional and security updates. Users should update to the latest version.

##### 2021.5.2 Releases

Name (Click to initiate download)	Version	Size	Installer	Date
<a href="#">Intel® MPI Library for Linux*</a>	2021.5.1	16.55 MB	Online	Jan. 21, 2022
<a href="#">Intel MPI Library for Linux</a>	2021.5.1	108.8 MB	Offline	Jan. 21, 2022
<a href="#">Intel MPI Library for Windows*</a>	21.5.2	12 MB	Online	Mar. 03, 2022
<a href="#">Intel MPI Library for Windows</a>	21.5.2	46 MB	Offline	Mar. 03, 2022



- 2) ダウンロードしたインストーラを実行し、ウィザードの指示に従ってインストールする
- 3) Windows を再起動する**(必ず行う)**。

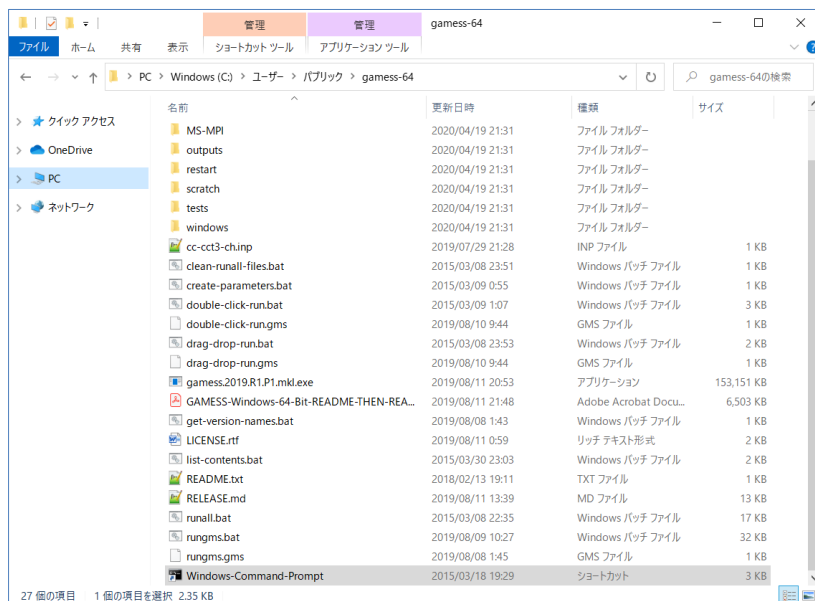
※詳しいインストール手順は

<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/GAMESS-Windows-64-Bit-README-THEN-README-AGAIN.pdf>

※GAMESS 2020.R2 以前を利用する場合は、Intel MPI ではなく MS-MPI をインストールする。  
その場合は、<https://www.microsoft.com/en-us/download/details.aspx?id=57467> から「Microsoft MPI v10.0」(msmpisetup.exe)をダウンロードしてインストールし、その後 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¥game-64)



2) Windows-Command-Prompt をダブルクリックする。次のウィンドウが立ち上がる。

```
Windows-Command-Prompt - C:\Users\¥Public¥game-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

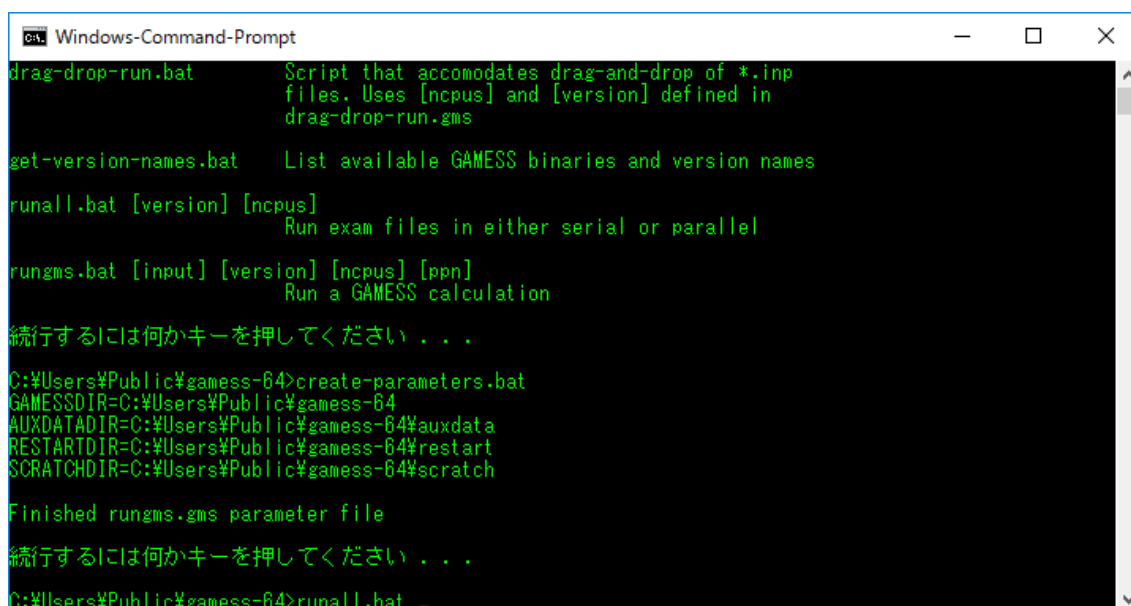
runall.bat [version] [ncpus]
                        Run exam files in either serial or parallel

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 . . .
```

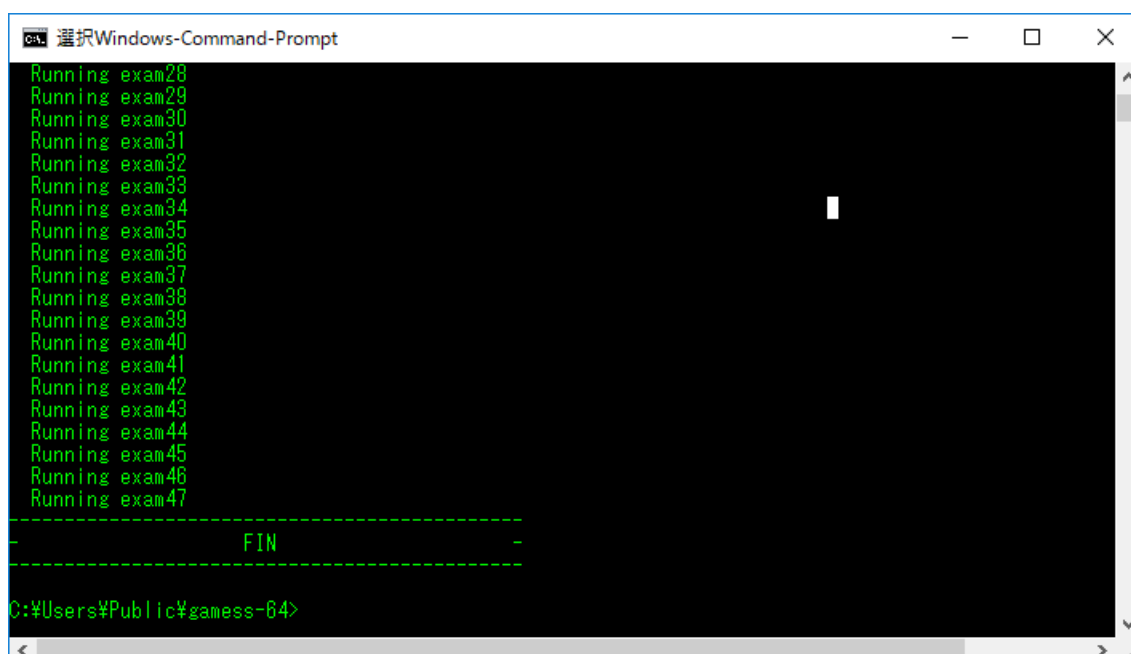
3) 何かキーを押す。

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 2021.R2.P2.intel.msucc 1」と入力して **Enter** を押す。「2021.R2.P2.intel.msucc」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。次のようにエラーなく表示されれば問題ない。



```
選択Windows-Command-Prompt
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 2021.R2.P2.intel.msucc 2」と入力して **Enter** を押す。同様に正常終了を確認する。入力の最後の 2 は並列数を意味する。この値を変更すると並列数を変えることはできるが、大きくし過ぎると並列数に比べて小さなテストジョブの並列可能数を超

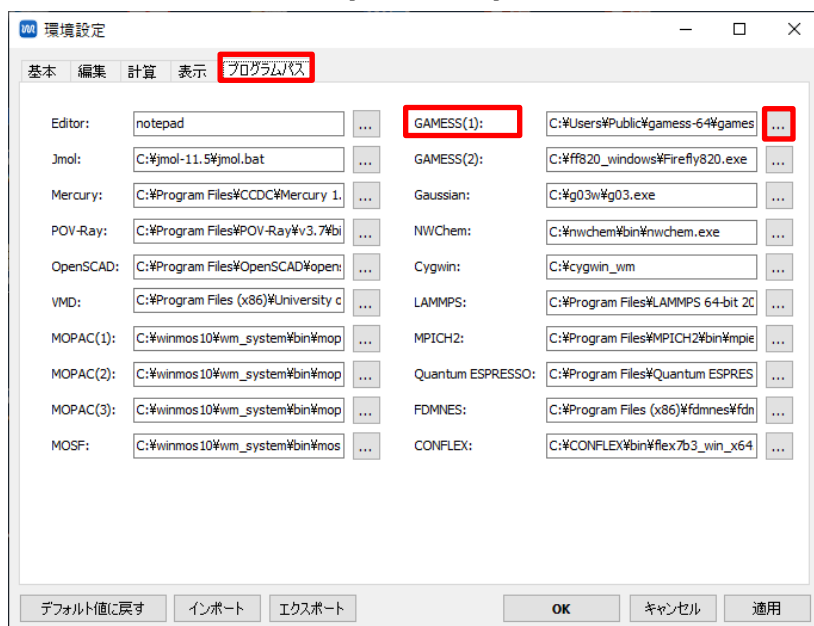


えるなどエラーが出ることもある。そのため、並列数 2 のままで実行して正常終了すれば、並列実行の動作確認としては十分である。

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ウィンドウを開く。そして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。

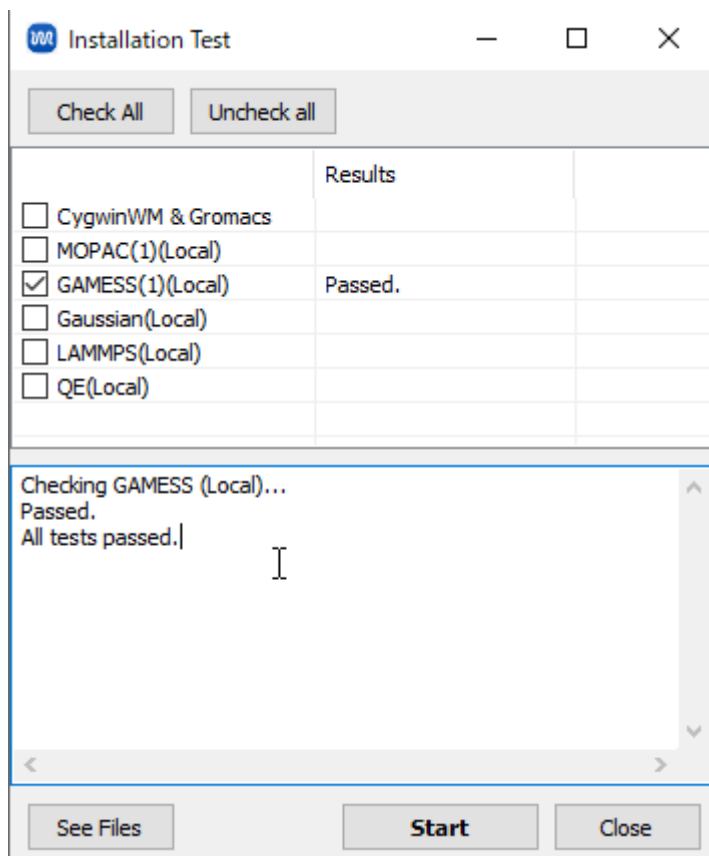
※実行ファイルは使用する GAMESS のバージョンによって異なる。

例えば C:\Users\Public\game-64\game-2021.R2.P2.intel.msucc.exe など



7. 簡易的な動作チェックを行う。

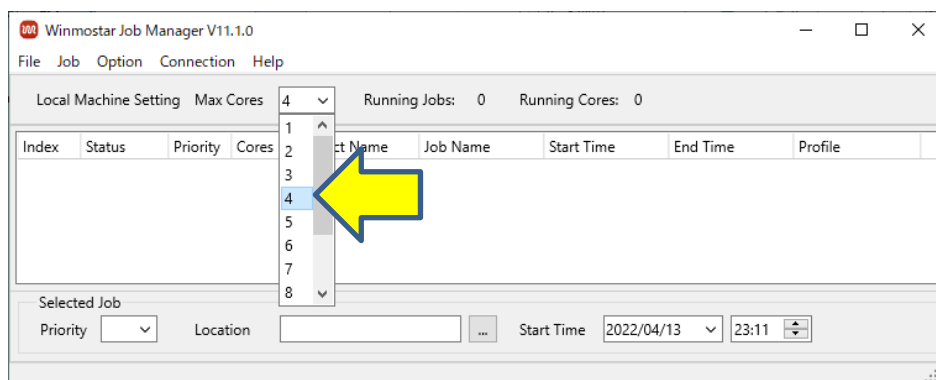
- 1) Winmostar のメインメニューのヘルプ | インストールテストをクリックする。
- 2) 「GAMESS(1)(Local)」にチェックを入れ **Start** をクリックする。Windows Defender などのセキュリティ警告が出た場合は**アクセスを許可**や**無視**をクリックする。
- 3) 20～30 秒程度待ち「All tests passed.」と表示されることを確認する。



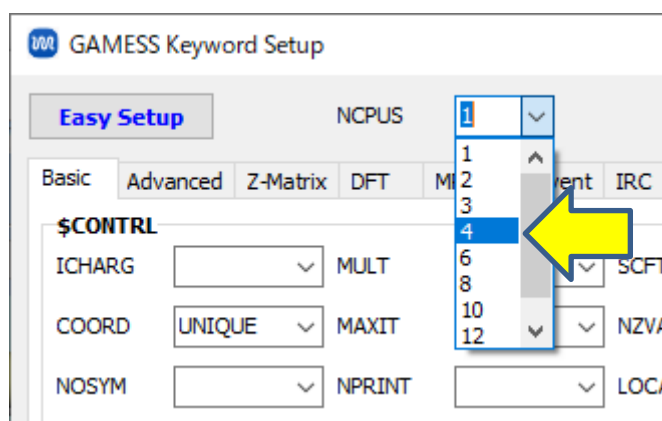
- ※ エミュレータなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性がある。
- ※ GAMESS を実行した際に、「ddikick.x error: execvp failed in Kickoff\_local」などとエラーが出る場合は、ファイヤウォールの設定で、GAMESS のインストールフォルダ以下の GAMESS の実行ファイル (gamess.2021.R2.P2.intel.msucc.exe など) と ddikick に通信の許可を与える。
- ※ GAMESS2020 を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイ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る。

## 8. CPU コア数の設定

1) Winmostar の ツール | ジョブマネージャをクリックする。**Max Cores** にこのコンピュータで計算に割り当てられる最大のコア数を設定する。例えば **Max Cores** が「4」なら、並列数 2 のジョブを最大で同時に 2 個まで実行することができる。各ジョブの並列数は次に設定する。



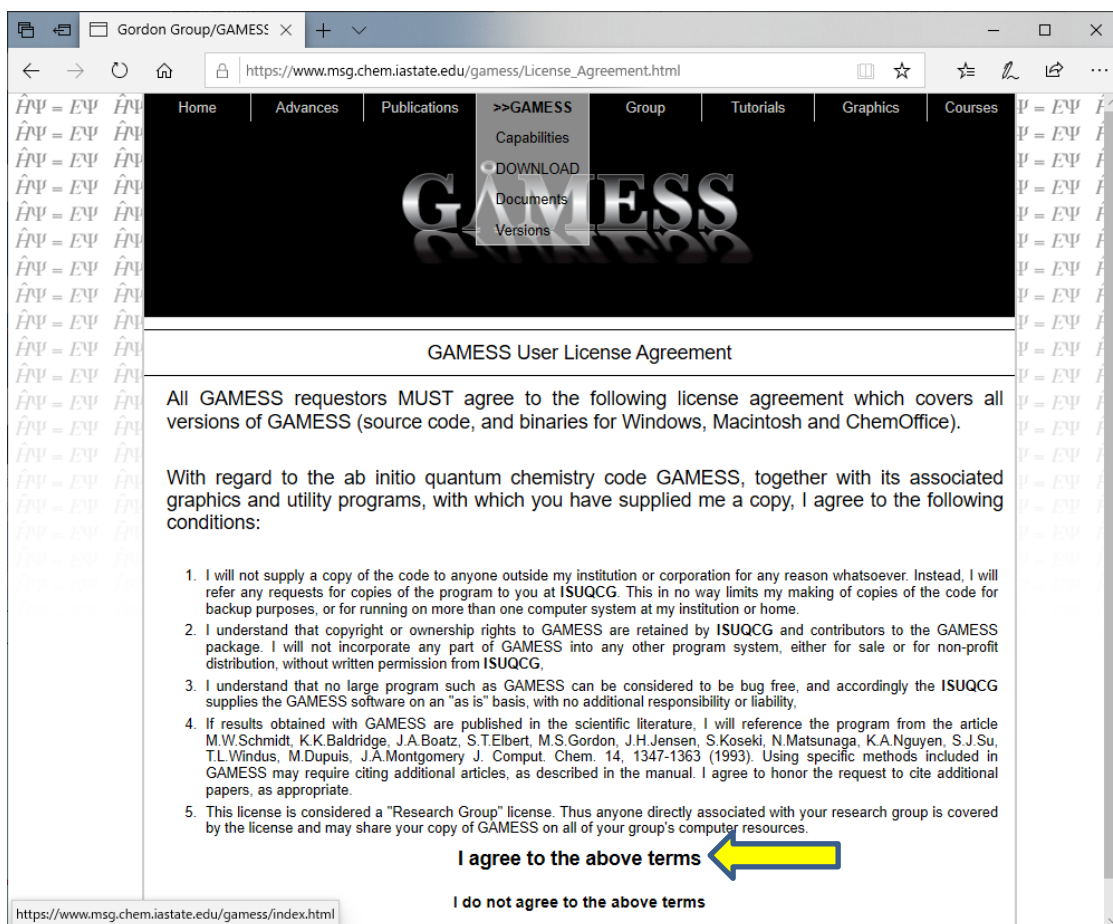
2) ファイル | 新規ファイルをクリックした後、**QM | GAMESS | キーワード設定**をクリックして **NCPUS** に個々のジョブの並列数(使用 CPU コア数)を設定する。



[32bit Windows の場合]

32bit Windows 版は 2010 年版ソースコードから作られているため、Winmostar の選択項目が一部対応していません。すべての機能を使いたい方は、64bit 版をインストールしてください。

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。 [https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/License\\_Agreement.html](https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/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。

- 1) Email address を入力する
- 2) GAMESS version .....for Microsoft Windows にチェックを入れる

### 3) Submit Request をクリックする

## GAMESS Registration System

### Request Download

Fields in bold face type are required.

Email address:

1)

\*\*\* Apple iCloud mail server blocks emails from our domain. Please do not use an \*@cloud.com email.

\*\*\* Other mail server are also blocking emails from our domain. Please do not use an \*@mail.ru email.

\*\*\* If a week goes by without seeing a registration approval then please consider registering with a different email domain (gmail.com, hotmail.com, yahoo.com) or check your SPAM box.

### Select desired programs below

#### Pre-compiled Binary Distributions

Distributions tested on their platform:

- ☐ GAMESS version September 30, 2019 R2 for Apple MacOS X
- ☐ GAMESS version September 30, 2020 R2 for Microsoft Windows

2)

#### 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 September 30, 2020 R2 for DoD HPCMP TI-22
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit ARM under Linux using armflang compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit ARM under Linux using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit ARM under Linux using NVIDIA HPC SDK
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit ARM under Linux using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using AMD compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using Intel OneAPI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using NVIDIA HPC SDK
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for 64 bit x86\_64 under Linux using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Apple MacOS X using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Apple MacOS X using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Apple MacOS X using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Apple MacOS X using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for HPE Cray
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for IBM Power processors under Linux
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows under Cygwin using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows under WSL using GNU compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows using Intel compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows using Intel OneAPI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows using PGI compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for Microsoft Windows using unlisted compilers
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for [Deprecated] 32 bit (x86 compatible) under Linux
- ☐ GAMESS version September 30, 2021 R2 Patch 1 for NVIDIA GPU

Submit Request

3)

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

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

## 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 MacOS 7-9
- ☐ GAMESS version September 30, 2018 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

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](mailto:games@si.msg.chem.iastate.edu) Note that the email will have a from address of [games@si.msg.chem.iastate.edu](mailto:games@si.msg.chem.iastate.edu) and a reply to address of [games@si.msg.chem.iastate.edu](mailto: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 clicking to:

<https://www.msg.chem.iastate.edu/GAMESS/download/Windows64.html>

Instructions are provided on that web page for downloading and using 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:

2)

next week it will be:

2) リンク先下部の Older Version から 2018 年版のダウンロード先に移動する。

### Chem3D


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

### Older Versions

[\[2019\]](#) [\[2018\]](#) 

3) 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](#)  as produced from the Oct 1, 2012 (R3) source code. Not everything mentioned in the manual will work, nor are bug fixes from the following years [needed](#). You will also need the [directions](#) for installing this old binary file. No one should 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ない。

○ C:¥gameess.32

× 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/en-us/download/details.aspx?id=57467> から「Microsoft MPI v10.0」(msmpisetup.exe)をダウンロードしてインストールする。

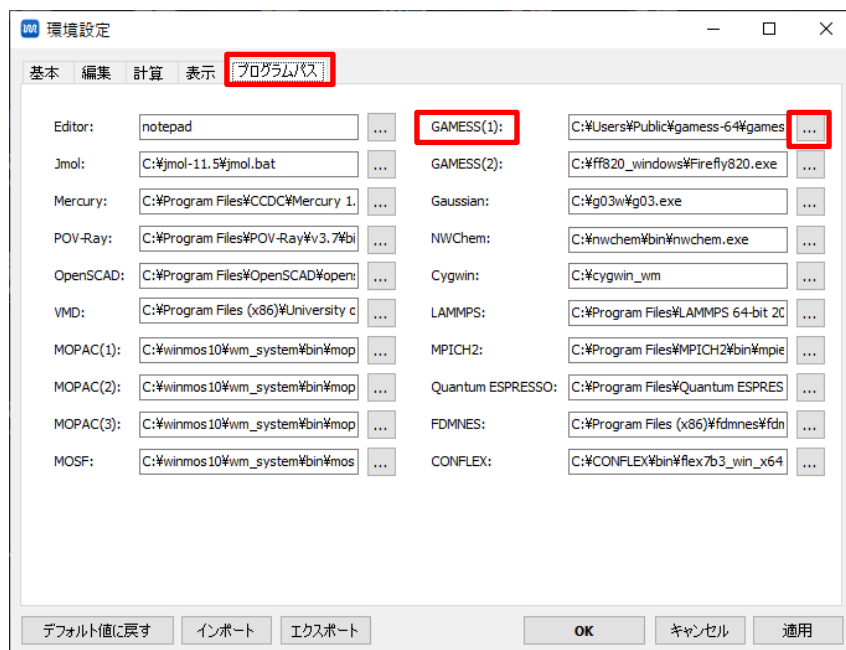
2) PC を再起動する。

#### 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:¥games.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。

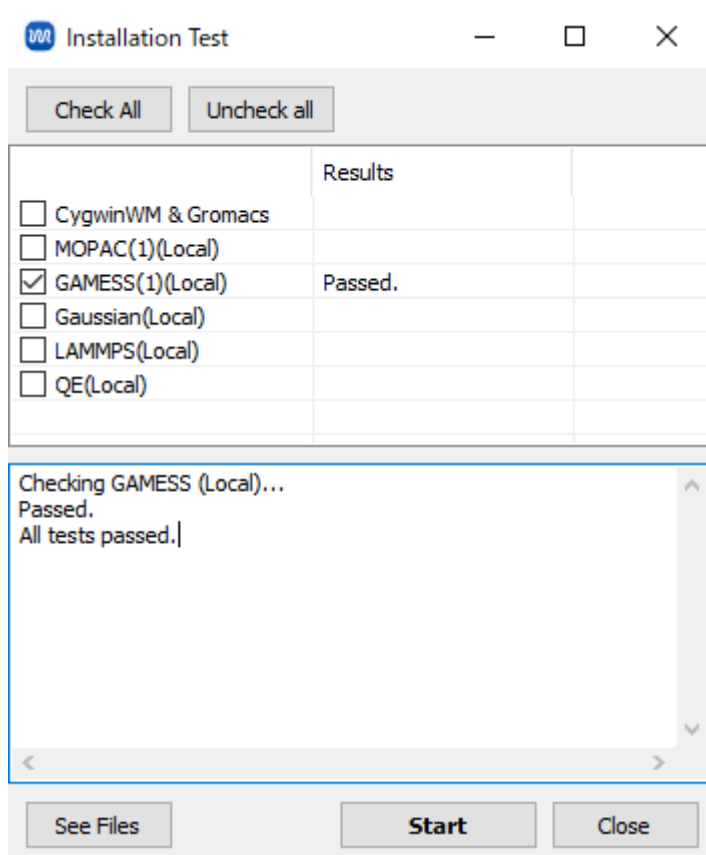
#### 6. Winmostar が GAMESS を呼び出せるようにパスを設定する。Winmostar のツール | 環境設定をクリックすると環境設定ウィンドウが開く。プログラムパスを開き、GAMESS(1)の[...]ボタンをクリックする。GAMESS のインストールフォルダの下にある実行ファイル※を登録し OK をクリックする。





7. 簡易的な動作チェックを行う。

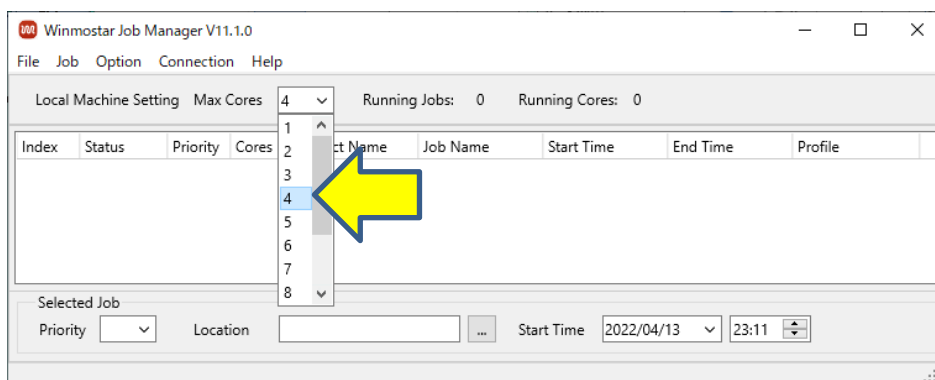
- 1) Winmostar のメインメニューのヘルプ | インストールテストをクリックする。
- 2) 「GAMESS(1)(Local)」にチェックを入れ **Start** をクリックする。Windows Defender などのセキュリティ警告が出た場合は**アクセスを許可**や**無視**をクリックする。
- 3) 20～30 秒程度待ち「All tests passed.」と表示されることを確認する。



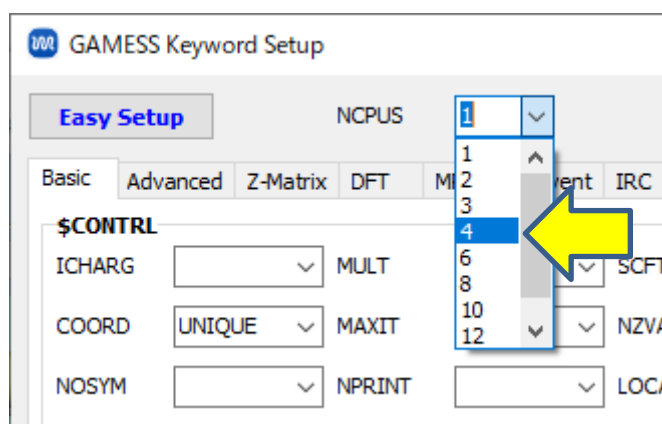
- ※ エミュレータなどを介して Mac 上で動作させる場合には不具合が出る可能性がある。
- ※ GAMESS を実行した際に、「ddikick.x error: execvp failed in Kickoff\_local」などとエラーが出る場合は、ファイヤウォールの設定で、GAMESS のインストールフォルダ以下の GAMESS の実行ファイル (gameess.2020.R2.pgiblas.exe など) と ddikick に通信の許可を与える。
- ※ GAMESS2020 を Windows 10 上に動作させる際に、Windows defender およびファイヤウォールの例外設定に、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る。

## 8. CPU コア数の設定

1) Winmostar の ツール | ジョブマネージャをクリックする。**Max Cores** にこのコンピュータで計算に割り当てられる最大のコア数を設定する。例えば **Max Cores** が「4」なら、並列数 2 のジョブを最大で同時に 2 個まで実行することができる。各ジョブの並列数は次に設定する。



2) ファイル | 新規ファイルをクリックした後、**QM | GAMESS | キーワード設定**をクリックして **NCPUS** に個々のジョブの並列数(使用 CPU コア数)を設定する。



以上