{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Gamess

Exemplo:

```
APP=gamess
CASE=caso
HOSTS=4
```

Essa submissão espera o arquivo de entrada "caso.inp". O arquivo .stdout (saída padrão) será atualizado a cada 15 minutos. O arquivo .dat a cada 3 horas.
Parâmetros:
- CASE - Nome do caso. Define o nome de arquivos de entrada, log e saida. **Padrão:** (nome do arquivo de parâmetros, sem a extensão)
- HOSTS - Número de hosts (processos) para a execução. **Padrão:** 1

Reiniciando a simulação

Segue uma sugestão enviada pelo Augusto de como reiniciar a simulação.

Observe que para restart para cálculos de otimização de estrutura, para cálculos vibracionais, por exemplo, mais informações teriam de ser coletadas do arquivo .dat.

1) Obter a última estrutura otimizada:

```
datagam -G case.stdout
```

(um arquivo denominado LAST será escrito com as ultimas coordenadas obtidas na otimização)

2) Obter os últimos grupos de $VEC:

```
datagam -i VEC -1 case.dat
```

(um arquivo VEC.last será criado)

3) Copiar o arquivo case.inp para um case_restart.inp;

4) Substituir a estrutura do arquivo case_restart.inp pela estrutura presente no arquivo LAST;

5) Inserir no fim do arquivo case_restart.inp o arquivo VEC.last

6) Colocar/modificar a linha de comando $GUESS ficando assim

```
(configuração mínima):
    $GUESS GUESS=MOREAD $END
```

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}