ORCAジョブ(osub)

概要

osubは、量子化学計算ソフトウェア **ORCA** のジョブ投入を簡単にするコマンドです。
インプットファイルがあればジョブを投入することができます。

サポートするORCAバージョン

4.2.1, 5.0.3, 5.0.4, 6.0.1, 6.1.0(デフォルト)

基本的な使い方

最もシンプルな実行例

```
$ osub input.inp
```

これで以下の設定で計算が実行されます：

- ORCA 6.1.0
- 8 CPUコア
- 1200 MB/core メモリ
- 72時間の時間制限

よく使われるオプション指定例

```
# CPU数とメモリを指定
$ osub -np 16 -m 1500 input.inp

# マルチノード実行 (4ノード×64コア = 256コア並列)
$ osub -np 64 --nodes 4 input.inp

# リソースを多めに確保して1コアあたりのメモリ数を増やす(8コア並列、2400 MB/core)
$ osub -np 16 -mp 8 -m 2400 input.inp

# ORCAバージョンを指定
$ osub -v 5.0.4 -np 4 input.inp

# 大容量メモリ（largemem）
# -np は 64 or 128
$ osub -np 64 -m 6000 -j largemem input.inp

# 計算ノードのローカルスクラッチを使用しない (作業ディレクトリで計算の途中経過が見られる)
$ osub -N input.inp

# 複数ファイルを一度に投入 (逐次実行)
$ osub -np 8 *.inp
```

主要オプション

リソース指定

オプション	説明	デフォルト
-np, --ncpus	確保するCPU数	8
-m, --maxcore	メモリ/コア (MB)	1200
--nodes	ノード数	1
-mp, --mpiprocs	MPIプロセス数/ノード	ncpusと同じ
-t, --walltime	計算時間制限	72:00:00

ORCA設定

オプション	説明	デフォルト

オプション	説明	デフォルト
-v, --version	ORCAバージョン	6.1.0
--noedit	入力ファイル編集をスキップ	False
-N, --no-local-scratch	ローカルスクラッチ使用を無効化	False
-ng, --nprocs-group	サブタスク並列数（ORCA6のみ）	-

ジョブ制御

オプション	説明	デフォルト
-j, --jobtype	ジョブタイプ指定	自動判定
-g, --group	ユーザーグループ指定	プライマリグループ
-P, --prep-only	スクリプト生成のみ	False

その他

オプション	説明	デフォルト
-O, --overwrite	既存ファイル上書き	False
--mail	メール通知	False
--name	ジョブ名指定	-
--autoname	ファイル名からジョブ名自動生成	False

入力ファイルの処理

外部ファイル参照の自動処理

osub は入力ファイル内の外部ファイル参照を自動的に検出し、スクラッチディレクトリでの実行に対応するため、相対パスを絶対パスに変換します。

■ 自動検出の対象となる外部ファイル

ピリオドを含む文字列（小数値を除く）

■ 処理の動作

- 相対パス → 絶対パスに自動変換 (<元ファイル名>.ap に反映)
- 絶対パス → そのまま維持
- 存在しないファイル → ジョブ投入時に警告を表示

■ 明示的な外部ファイル指定

自動検出されないファイルを手動で指定する場合：

```
# ピリオドを含まないファイルを明示的に指定。
# インプットのbasis、coordが絶対パスに変換される

$ osub --external-files basis --external-files coord input.inp
```

トラブルシューティング

よくあるエラーと対処法

■ 1. ERROR: invalid ncpus value

```
 # 65-127コアは使用不可

$ osub -np 100 input.inp  # ✗ エラー

 # 正しい指定

$ osub -np 64 input.inp   # ✓ OK

$ osub -np 128 input.inp  # ✓ OK
```

■ 2. メモリ不足

```
# リソースを多めに確保して1コアあたりのメモリ数を増やす
 $ osub -np 16 -mp 8 -m 2400 input.inp

# またはlagememジョブタイプを使用
$ osub -np 64 -j largemem input.inp
```

デバッグ情報の表示

```
# スクリプト生成のみ（投入はしない）
$ osub -P -np 8 input.inp
```

実行直後に生成されるファイル (-N オプション無し)

ジョブスクリプト

- H-<PID>.sh: PBS用ジョブスクリプト

編集済み入力ファイル

- <元ファイル名>.ap: リソース設定が追加された入力ファイル

サポート・お問い合わせ

使用方法に関する質問や不具合報告は、システム管理者までお問い合わせください。