

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, 6.1.1 (デフォルト: 6.1.0)

- バージョン6.1.1が最新版です
- `--latest` または `-l` オプションで最新版を自動選択できます

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????????
$ osub -np 16 -m 1500 input.inp

# ??????????
$ osub --latest input.inp
$ osub -l input.inp # ???

# ??????????
$ osub -v 5.0.4 -np 4 input.inp
$ osub --version 6.1.1 -np 8 input.inp

# ????????? (4???×64?? = 256????)
$ osub -np 64 --nodes 4 input.inp

# ?????????1????????????(8????2400 MB/core)
$ osub -np 16 -mp 8 -m 2400 input.inp
```

```
# ??????largemem?
# -np ? 64 or 128
$ osub -np 64 -m 6000 -j largemem input.inp

# ?????????????????? (????????????????????)
$ osub -N input.inp

# ???????????? (????)
$ 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
-v, --version	ORCAバージョン	6.1.0
-l, --latest	最新バージョンを使用 (現在: 6.1.1)	False
--noedit	入力ファイル編集をスキップ	False
-N, --no-local-scratch	ローカルクラッチ使用を無効化	False
-ng, --nprocs-group	サブタスク並列数 (ORCA6.0以降のみ)	-

注意事項:

- --version と --latest を同時に指定した場合、--version の値が優先されます
- --nprocs-group はORCA 6.0以降でのみ有効です (5.x以前では無視されます)

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

バージョン管理

利用可能なバージョンの確認

```
$ osub
```

引数なしで実行すると、利用可能なバージョン一覧が表示されます：

```
Supported ORCA versions:
4.2.1 [ORCA4]
5.0.3 [ORCA5]
5.0.4 [ORCA5]
6.0.1 [ORCA6]
6.1.0 [ORCA6] (default)
6.1.1 [ORCA6] (latest)
```

バージョン指定の使い分け

```
# ?????????? (6.1.0) ???
$ osub input.inp

# ??????? (6.1.1) ???
$ osub --latest input.inp

# ?????????????
$ osub --version 5.0.4 input.inp
```

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する。

? ??????????????????

ピリオドを含む文字列（小数値を除く）

? ?????

- 相対パス → 絶対パスに自動変換 (<?????>.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

? ????????????

自動検出されないファイルを手動で指定する場合：

```
# ??????????????????????  
# ??????basis?coord??????????  
  
$ 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??????  
  
$ osub -np 100 input.inp # ? ???  
  
# ?????  
  
$ osub -np 64 input.inp # ? OK  
  
$ osub -np 128 input.inp # ? OK
```

? 2. ?????

```
# ?????????????1?????????????  
$ osub -np 16 -mp 8 -m 2400 input.inp  
  
# ???lagemem?????????  
$ osub -np 64 -j largemem input.inp
```

デバッグ情報の表示

```
# ??????????????????  
$ 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

- <???????>.ap: リソース設定が追加された入力ファイル

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。