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	オルト
-----------------	-----

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 # x エラー

正しい指定

\$ 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。