

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

# 最新バージョンを使用
$ osub --latest input.inp
$ osub -l input.inp # 短縮形

# 特定バージョンを指定
$ osub -v 5.0.4 -np 4 input.inp
$ osub --version 6.1.1 -np 8 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

# 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

オプション	説明	デフォルト
-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	ローカルス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

```
# デフォルトバージョン (6.1.0) を使用
$ osub input.inp

# 最新バージョン (6.1.1) を使用
$ osub --latest input.inp

# 特定バージョンを明示指定
$ 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。

