

ORCA

Korištenje

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul
4.0.1.2	orca/4.0.1.2
4.1.2	orca/4.1.2
4.2.0	orca/4.2.0
5.0.0	orca/5.0.0
5.0.2	orca/5.0.2
5.0.3	orca/5.0.3
5.0.4	orca/5.0.4

Primjer korištenja:

run-orca-isabella.sge

```
#!/bin/sh
#$ -N orca-teran
#$ -q p28.q
#$ -pe *mpi 14
#$ -cwd

# load program environment
module load orca/4.0.1.2

# run the program
run-orca-isabella.sh job.inp
```



Važno

U %PAL sekciji ulazne datoteke `job.inp` kojom se kontrolira izvođenje paralelnih poslova, "`nproc xx`" parametar **mora odgovarati** zatraženom broju slotova/CPU jezgara.

Ako se primjerice zatražilo 14 slotova (`#$ -pe *mpi 14`), tada se isto mora navesti u ulaznoj datoteci:

```
%PAL
nproc 14
end
```

Za zahtjevnije simulacije poželjno je definirati %MaxCore sekciju ulazne datoteke i to tako da odgovara otprilike 75% zatražene memorije u poslu.

Ako se zatraži 20 GB radne memorije po jezgri (`#$ -l memory=20`), tada se isto može navesti umanjeno za otprilike 25% u ulaznoj datoteci:

```
%maxcore 15000
```

Napomena: vrijednost (`#$ -l memory=20`) navedena je u GB, a (`%maxcore 15000`) u MB.

Također, ulazna datoteka `job.inp` ne bi smjela sadržavati razmake (whitespace) u svom imenu.

Po završetku posla, datoteke *.gbw, *.xyz te *.trj koje je aplikacija generirala/koristila u izvršavanju posla će se spremiti u direktorij iz kojeg je posao pokrenut.

Verzija 4.2.0 sprema sve datoteke koje je aplikacija generirala/koristila kod izvršavanja posla u direktorij iz kojeg je posao pokrenut.

Instalacija

Aplikacija ORCA preuzeta je s <https://cec.mpg.de/orcadownload/index.php>.

Aplikacija se distribuira u izvršnom obliku te se u verziji 4.0.1.2 oslanja na OpenMPI 2.0.2, u verziji 4.1.2 i 4.2.0 na OpenMPI 3.1.3, a u verziji 5.0.0, 5.0.2 i 5.0.3 na OpenMPI 4.1.1.