



HPCクラスタ用WebポータルOpen OnDemandの紹介と HPCI共用ストレージの利用

中尾昌広（理化学研究所 計算科学研究センター）

背景

- HPCクラスタを用いるための前提知識は非常に多く、利用するまでの学習コストが大きい
 - シェルなどのコマンドラインインターフェースの学習
 - ジョブスケジューラの学習
 - SSH鍵ペアの生成と公開鍵の登録
- 計算ノード上でリモートデスクトップやJupyterLabなどのGUIアプリケーションを対話的に実行したい要望があるが、その手順は複雑
 - SSHトンネリングの設定
 - アプリケーションの実行コマンド



```
top
Processes: 596 total, 2 running, 594 sleeping, 2418 threads          10:05:40
Load Avg: 2.15, 1.81, 1.63  CPU usage: 4.39% user, 3.8% sys, 92.51% idle
SharedLibs: 643M resident, 120M data, 40M linkedit.
MemRegions: 96880 total, 4270M resident, 425M private, 2994M shared.
PhysMem: 14G used (1893M wired, 364M compressor), 992M unused.
VM: 223T vszie, 4283M framework vszie, 160759(0) swapins, 248728(0) swapouts.
Networks: packets: 10719029/12G in, 2457839/525M out.
Disks: 8336373/93G read, 2912845/60G written.

PID  COMMAND      %CPU TIME    #TH  #WQ  #PORT MEM   PURG  CMPRS  PGRP
177  WindowServer 31.0 03:44:15 26   10  4438+ 2247M 223M+ 79M   177
0    kernel_task  6.0  01:53:35 484/8 0    0   2002M+ 0B    0B    0
78311 top         5.3  00:00.43 1/1  0    28   5761K 0B    0B   78311
78313 screencaptur 4.1  00:00.33 4    3    71   7618K 752K  0B   1803
1794 iTerm2       3.7  22:59.68 6    3   422-  226M+ 13M-  83M  1794
```

多くの場合、新しいHPCクラスタを使う度に再学習が必要

Open OnDemand <https://openondemand.org>

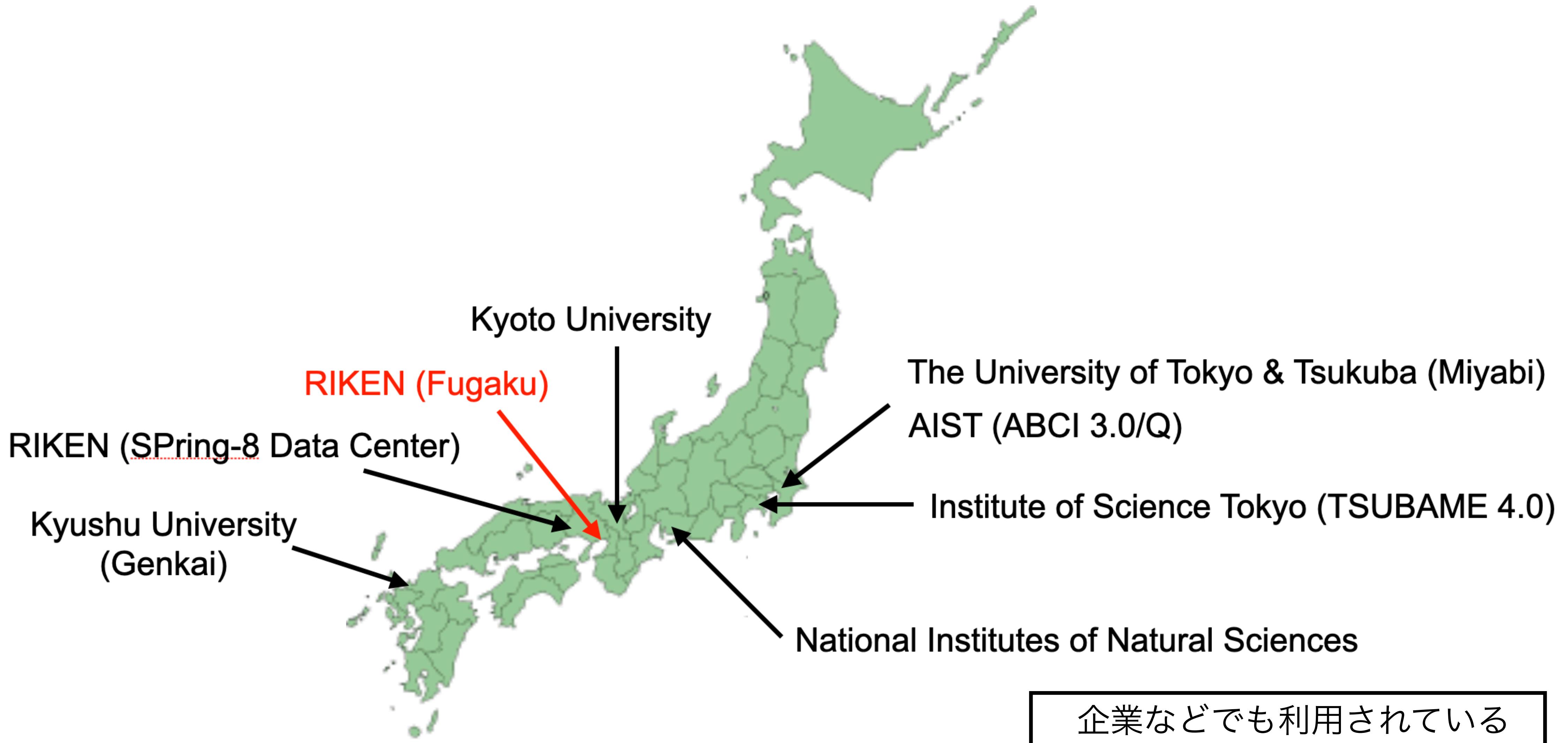
- HPCクラスタ用のWebポータルOpen OnDemandに着目
- オハイオ州立大学が中心となって開発しているOSS
- WebブラウザからHPCクラスタの操作が可能
 - 統一化されたユーザインターフェース
 - ファイルの送受信、ジョブ投入・監視、シェルアクセス
 - 計算ノード上でGUIアプリケーションを簡易に利用可能
 - アプリケーションプラットフォームとしての機能
- 2022年1月のHPC AsiaでOpen OnDemandの存在を知った。
2022年8月から「富岳」においてテスト運用(Fujitsu TCS用のコードを開発、本家に反映)。2023年5月から本番運用。
2025年9月からデフォルトのログイン方法になった。

The screenshot shows the Fugaku OnDemand web interface. At the top, there's a navigation bar with links for Fugaku OnDemand, Batch Jobs, Interactive Apps, Passenger Apps, My Sessions, Develop, Help, and Log Out. A message "Welcome to the supercomputer Fugaku" is displayed above the RIKEN and RCCS logos. Below this, a "Message of the day" section lists operational status for July 24, 2023, including a large-scale job execution period and resource groups. A "Pending jobs" section shows counts for different job types. The "Fugaku Schedule" section displays a calendar for July 2023 with specific job events highlighted. The "Accounting" section provides disk and resource usage statistics for various volumes. The "Recently Used Apps" section shows icons for Desktop, OpenFOAM, SCALE, and Jupyter. The "Passenger Apps" section includes Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, and HPCI Storage.

Open OnDemandは世界中の2,100以上の組織で利用



Open OnDemandは世界中の2,100以上の組織で利用



日本のOpen OnDemandコミュニティサイト

<https://openondemandjp.github.io/>

Open OnDemand JP

目的 GitHub 講習会 関連研究

目的

本サイトは、[Open OnDemand](#)の日本での普及を目的としたコミュニティサイトです。Slackで情報交換を行っていますので、ご興味のある方は、ぜひご参加ください。

 Slackに参加する

現在の参加者数は24名。
アカデミックと企業の割合は半々くらい。

GitHub

設定ファイル

- [スーパーコンピュータ「富岳」](#)
- [R-CCSクラウド](#)

Passenger Application

- [Open Composer](#) : ジョブスクリプトを簡単に生成・投入・管理
- [HPCI Shared Storage](#) : HPCI共用ストレージにアクセス
- [GakuNin RDM](#) : GakuNin RDM（研究データ管理基盤）にアクセス

← 本日の話題

Open OnDemandワークショップを
2023年10月と2025年1月に開催した。
次回は2026年中の予定

ダッシュボードの変更 (1/2)

- カスタマイズが可能

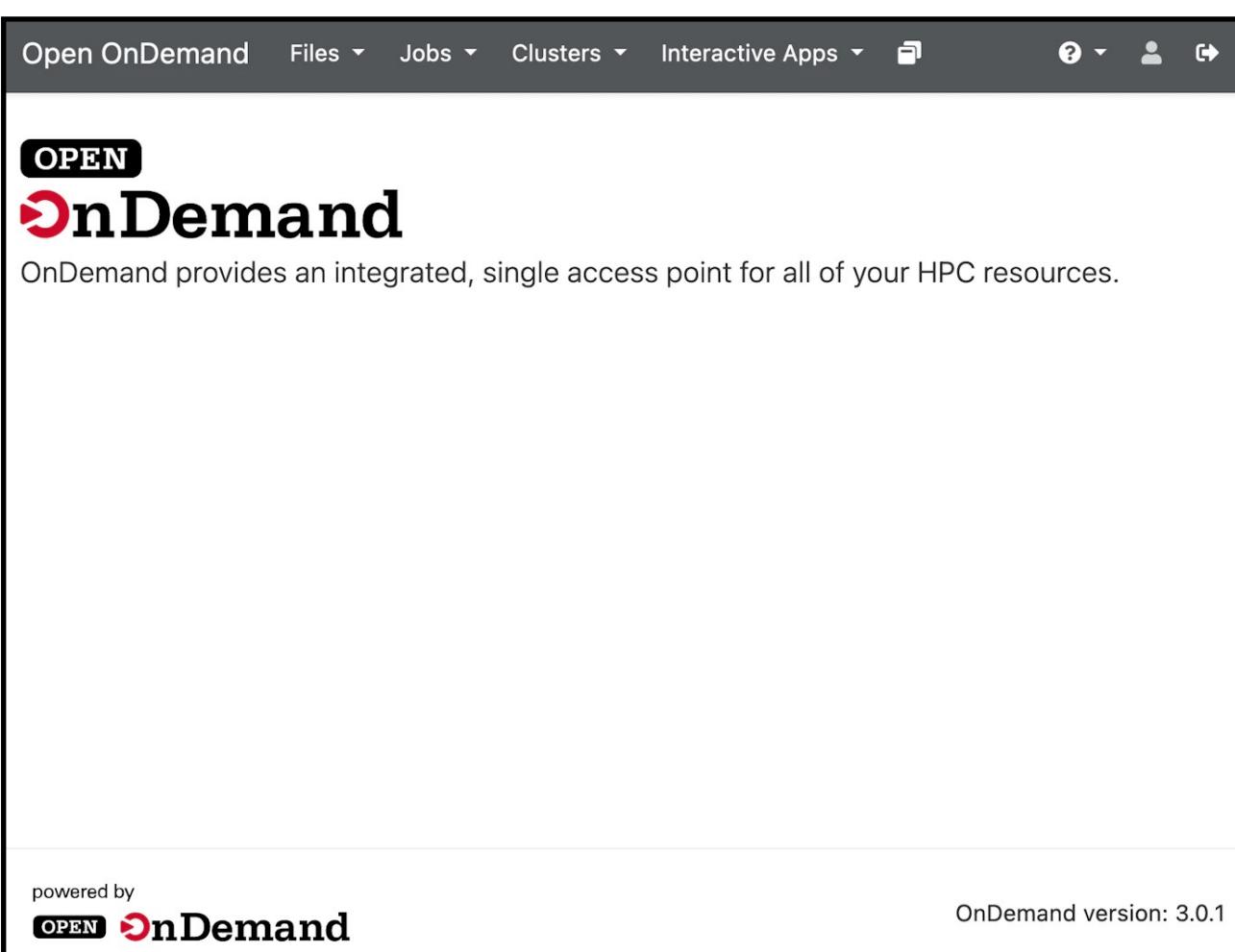
(i) 既存のテンプレートを用いる

- ロゴの追加、アプリを種類ごとに表示

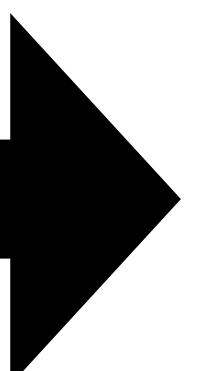
(ii) テンプレートをeRubyで記述する

- ジョブを投入する際にユーザが欲しい情報を表示

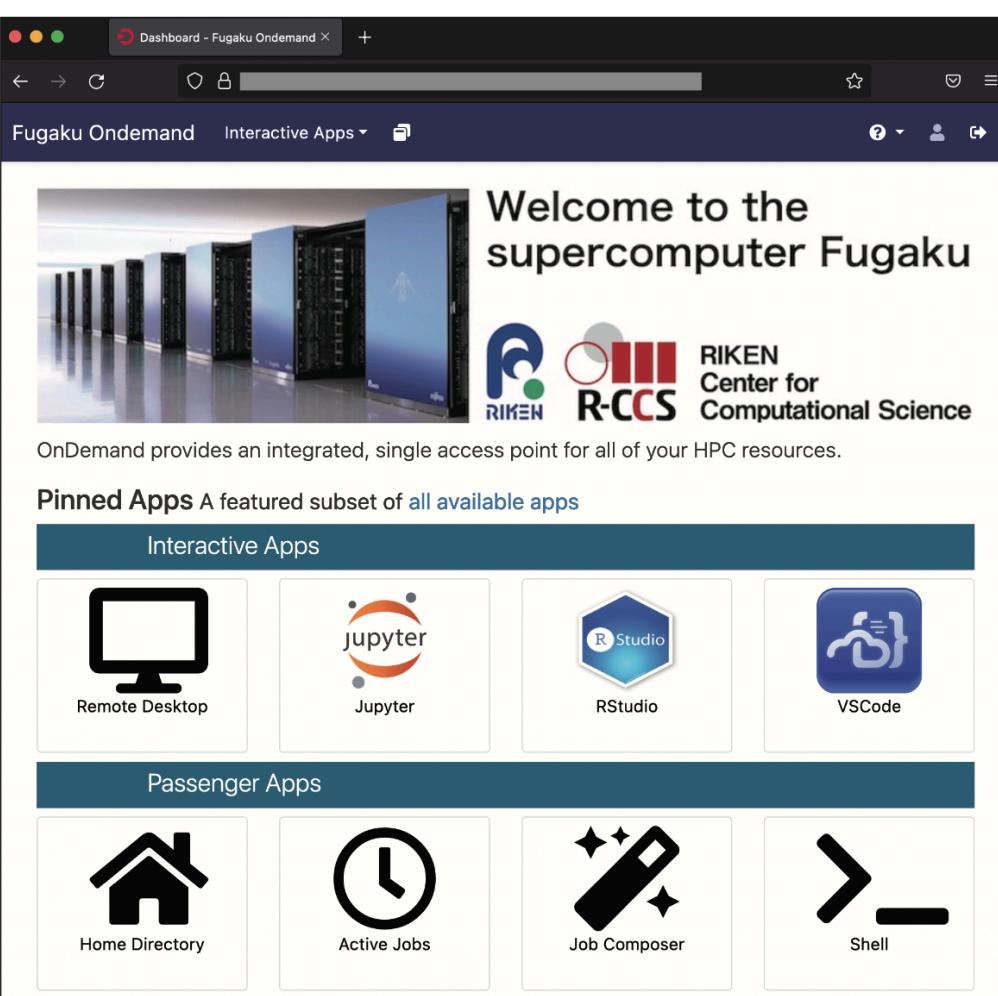
デフォルト



(i)



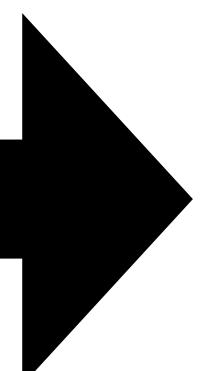
テスト運用時



現在

The screenshot displays a highly customized dashboard for the supercomputer Fugaku. It features a 'Welcome to the supercomputer Fugaku' header with server images and logos. Below are several sections: 'Information' (showing operational details for July 24, 2023), 'Pending jobs' (listing prepost-jobs for various nodes), 'Accounting' (disk usage and resource utilization table), and 'Recently Used Apps' (Desktop, OpenFOAM, SCALE, Jupyter). A 'Fugaku Schedule' section shows a monthly calendar with job execution highlights. The dashboard is presented in a light blue and white color scheme.

(ii)



ダッシュボードの変更 (2/2)

- A. 外部リンク（富岳マニュアルなど）
- B. 障害情報やオペレーション情報など
- C. 各キューの待ちジョブ数（Grafanaを利用）
- D. 運用力レンダー（Googleカレンダーを利用）
- E. ユーザのディスクとバジェットの利用率
- F. 最近使った計算ノードで動作するアプリ（最大4個）
 - 他のアプリはナビゲーションバーから選択可能
- G. Open OnDemandサーバで動作するPassenger Application
 - ファイル操作・ジョブ監視・HPCI Shared Storageなど

The screenshot shows the Fugaku OnDemand dashboard with the following sections:

- Welcome to the supercomputer Fugaku**: Features a server rack image, RIKEN and RCCS logos, and links to OnDemand Manual, Fugaku Portal, Schedule, Status, and Support.
- Message of the day**: A blue bar with a message about system maintenance.
- Information**: Displays operational logs for July 24, 2023, July 21, 2023, and July 19, 2023.
- Pending jobs**: A grid showing pending job counts across different queues: fugaku-small (17867), fugaku-large (915), prepost-gpu1 (12), prepost-gpu2 (0), prepost-mem1 (22), prepost-mem2 (3), and prepost-on-demand (0).
- Accounting**: A table showing disk usage and resource utilization for groups like rccs-aot, f-op, ra030002, and /home.
- Recently Used Apps**: Icons for Desktop, OpenFOAM, SCALE, and Jupyter.
- Passenger Apps**: Icons for Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, HPCI Storage, Job Composer, and Fugaku Shell Access.

対話アプリケーションとバッチジョブ

● Interactive Application

Category	Application
Development	Remote Desktop, JupyterLab, MATLAB, VSCode, Terminal
Profiler	NVIDIA Visual Profiler, NVIDIA Nsight Compute, NVIDIA Nsight Systems, Vampir
Viewer	AVS/Express, C-Tools, GaussView, Gnuplot, GrADS, ImageJ, MOLDEN, OpenMX viewer, OVITO, Paraview, PyMOL, SALMON view, Smokeview, VESTA, VMD, VisIt, XCrySDen
Workflow	WHEEL

● Batch Jobs (Open Composerから投入)

Category	Application
Climate	SCALE
Computer Aided Engineering	FDS, FFVHC-ACR, FrontFlow (blue/X), FrontISTR, OpenFOAM (Foundation/OpenCFD)
Condensed Matter Physics	ALAMODE, AkaiKKR, HΦ, mVMC, OpenMX, PHASE/0, Quantum Espresso, SALMON
Molecular Dynamics	GENESIS, GROMACS, LAMMPS, MODYLAS, PIMD
Quantum Chemistry	ABINIT-MP, Gaussian, NTChem, SMASH
Quantum Simulation	braket
Experimental Data Processing	KIERTÄÄ

アプリケーションの種類

- Passenger Application : Open OnDemandがインストールされたWebサーバで動作するユーティリティ（ファイルのアップロードなど）
- Interactive Application : 計算ノード上で動作するリモートデスクトップやJupyterLabなどの対話型GUIアプリケーション

これらのアプリケーションは、他のOpen OnDemandサイトと共有可能な場合がある

アイコンをクリックして
アプリケーションを起動する

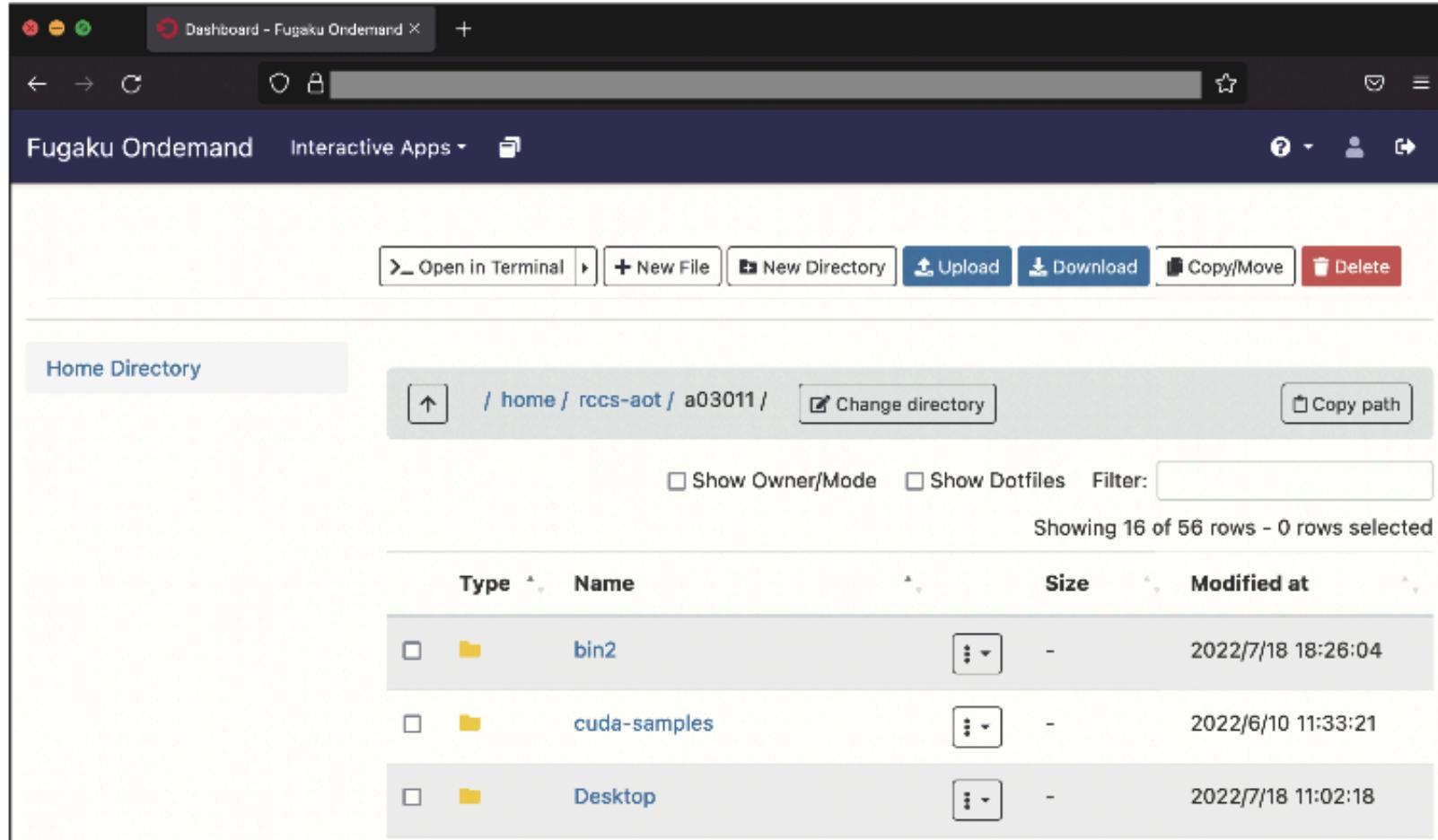
The screenshot shows the Fugaku OnDemand web interface. At the top, there's a navigation bar with links like 'Fugaku OnDemand', 'Batch Jobs', 'Interactive Apps', 'Passenger Apps', 'My Sessions', 'Develop', 'Help', 'Logged in as a03011', and 'Log Out'. Below the navigation is a banner featuring a server rack and the text 'Welcome to the supercomputer Fugaku' along with the RIKEN and R-CCS logos.

On the left, there's a sidebar titled 'Link' with links to 'OnDemand Manual', 'Fugaku Portal', 'Fugaku Schedule', 'Fugaku Status', and 'Fugaku Support', each with a small USA/JP icon.

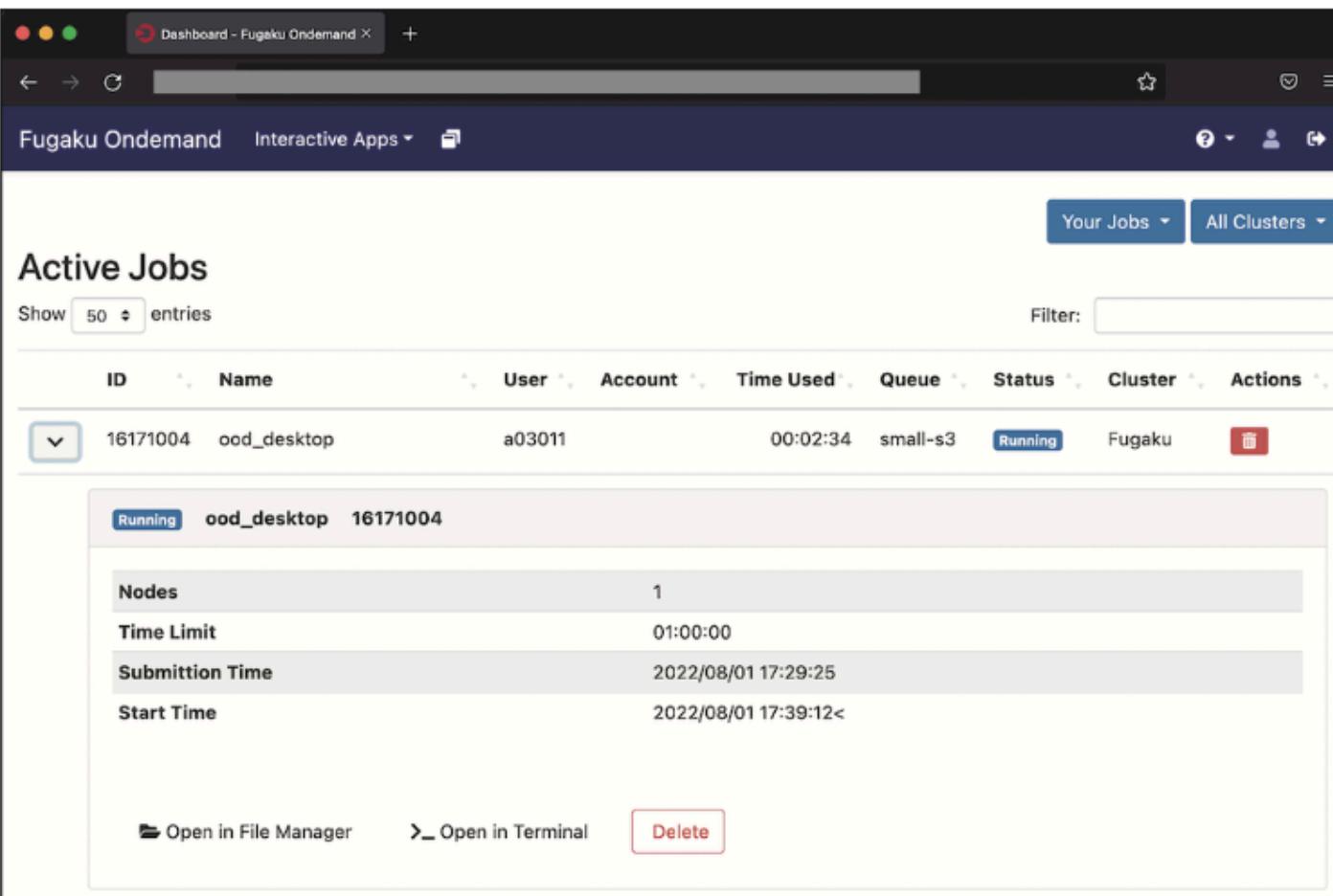
The main content area has several sections:

- Message of the day:** A blue header with the date 'Jul 24, 2023' and a message about a large-scale job execution period.
- Information:** A table showing operational status for July 24, 2023, including 'Operation' and 'Resource groups during the large scale job execution period'.
- Pending jobs:** A grid showing pending jobs across different categories: fugaku-small (17867), fugaku-large (915), prepost-gpu1 (12), prepost-gpu2 (0), prepost-mem1 (22), prepost-mem2 (3), and prepost-on-demand (0).
- Fugaku Schedule:** A calendar for July 2023 showing scheduled events. It highlights 'Medium-scale job' (July 25, 26, 27, 28, 29) and 'Large scale job execution' (July 24, 25, 26, 27, 28, 29).
- Accounting:** A table showing disk usage and resource utilization for various groups and volumes. For example, rccs-aot has 5,120 GB usage, f-op has 614,400 GB usage, and ra030002 has 5,120 GB usage.
- Recently Used Apps:** Icons for Desktop, OpenFOAM, SCALE, and Jupyter.
- Passenger Apps:** Icons for Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, HPCI Storage, Job Composer, and Fugaku Shell Access.

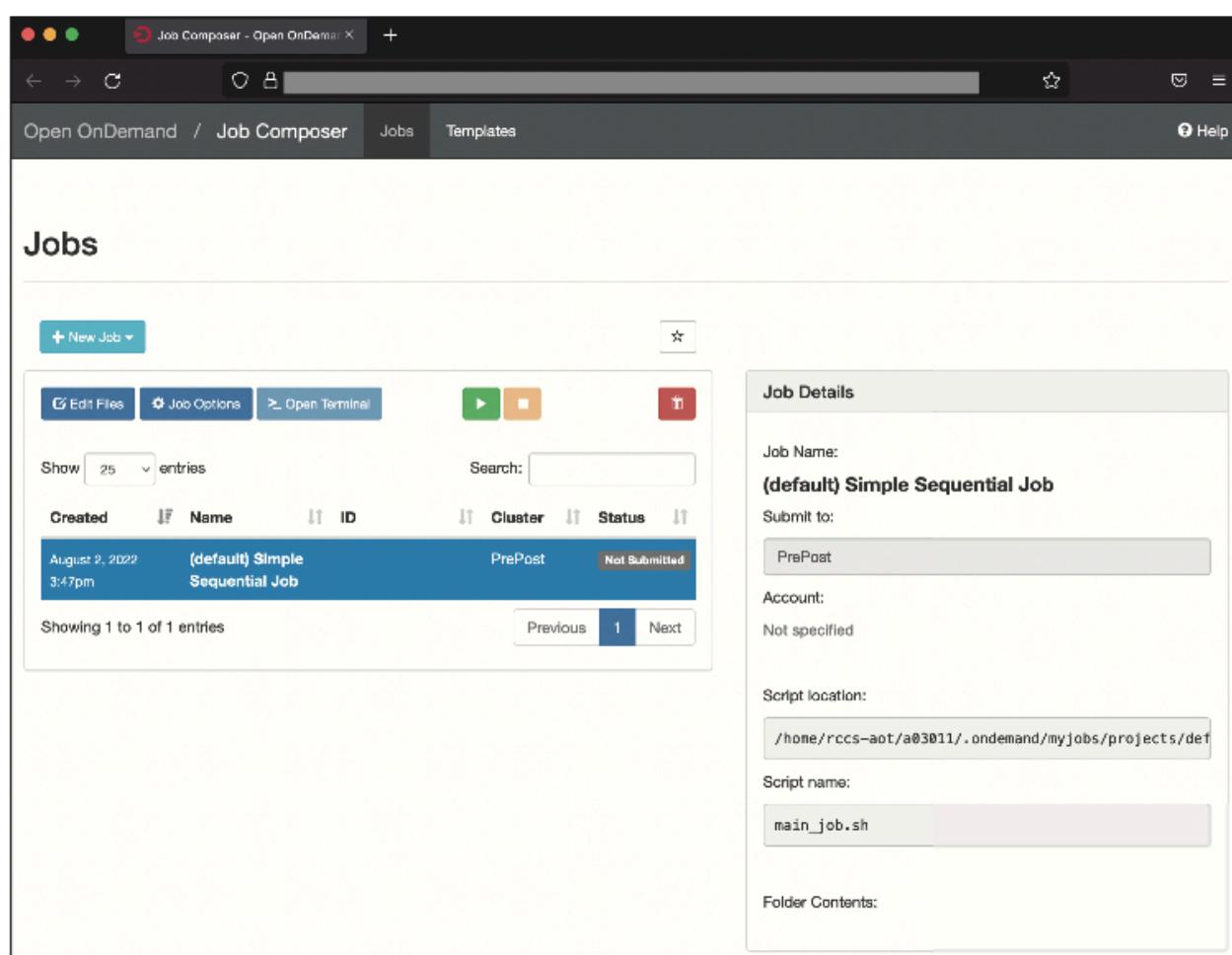
デフォルトのPassenger Apps



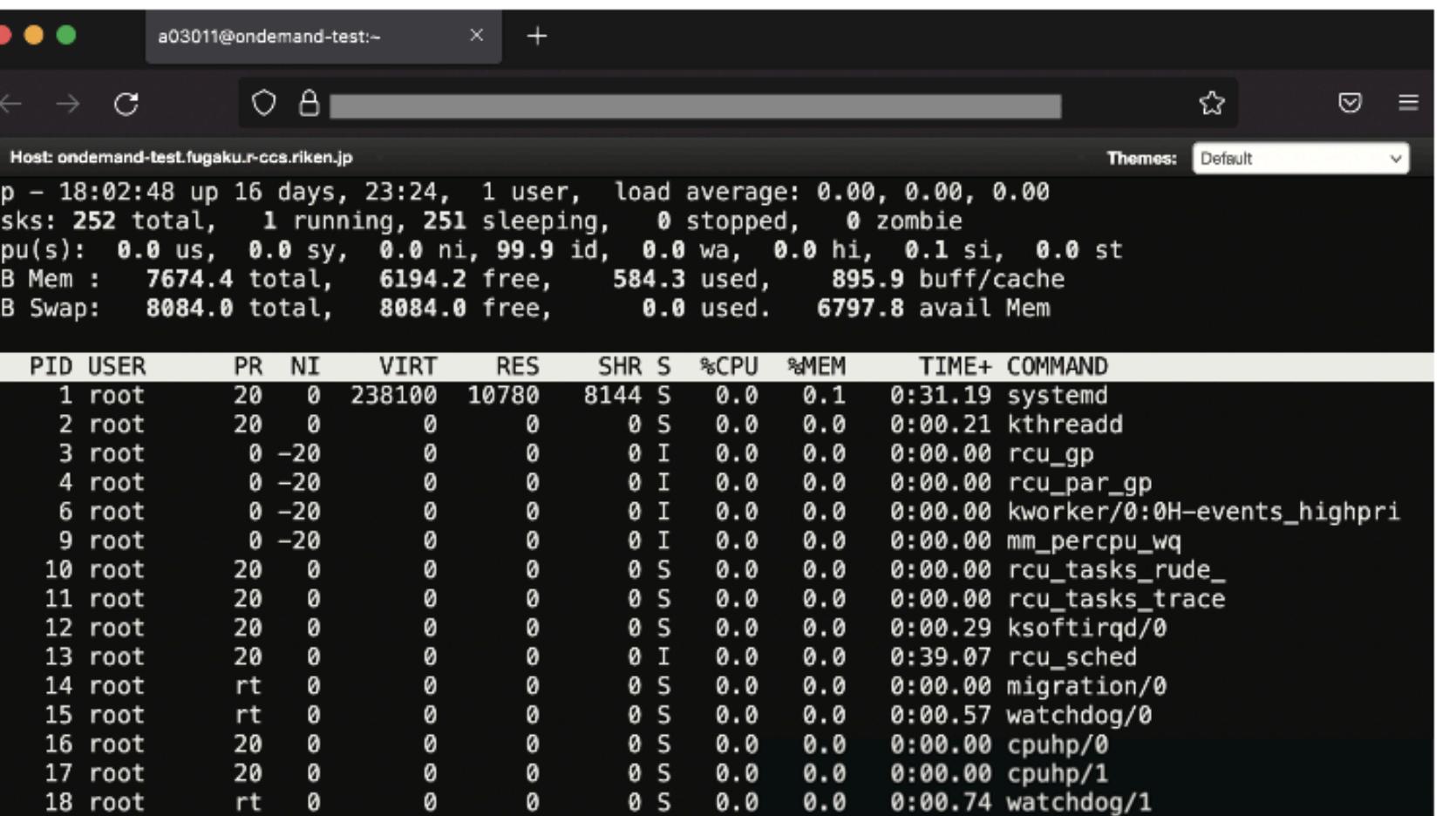
Home Directory



Active Jobs



Job Composer



Shell

- Home Directory : ファイルのアップロード・ダウンロード・編集が可能。rcloneと組合せることでAmazon S3などの外部ストレージとの連携も可能。
- Active Jobs : ジョブの監視
- Job Composer : バッチジョブの投入（使いづらいので無効化して、代わりのアプリであるOpen Composerを開発した）
- Shell : Webターミナル

開発したPassenger Apps (1/2)

富岳専用アプリ

Disk info

Disk usage for each user by group.

rccs-aot (Updated at 2025/08/13 13:53:29 (JST))

User	Volume	Path	Capacity [GiB]				Inode			
			Limit	Usage	Avail.	Ratio	Limit	Usage	Avail.	Ratio
a03002	/vol0400	/data/rccs-aot, /share/rccs-aot	5,120	5	3,989	0.09%	1,500,000	42	447,586	0.0%
a03003	/vol0400	/data/rccs-aot, /share/rccs-aot	5,120	456	3,989	3.9%	1,500,000	10,430	447,586	0.69%
a03011	/vol0001	/2ndfs/rccs-aot	5,120	44	3,989	0.85%	1,500,000	1,882	447,586	0.12%

グループ内の各ユーザのディスク利用率の表示

Budget info (Updated at 2025/08/13 04:42:51 (JST))

Budget usage for each user by group.

rccs-aot

User	Budget [NH]				
	Limit	Usage	Available	Ratio	Change Limit (For only a theme manager)
a03011	227,360	73	0	0.03%	227360 ⏚ submit
a03012	227,360	27	0	0.01%	227360 ⏚ submit
a03032	227,360	10	0	0.0%	227360 ⏚ submit

グループ内の各ユーザのバジェット利用率の表示

Inactive Disk Info

This application visualizes disk usage activity over time. Filter by period, count, size, or user to identify inactive or large datasets.

Select Dataset:

rccs-aot

Inactive Period:

6 - 12 months

48 months+

Filter by Group:

(ALL)

Count:

100k - 1M

100M+

Filter by User:

(ALL)

Size (TiB):

0.01 - 0.1

100+

Reset Parameters

MEMO:

- If you want to find files that haven't been accessed for more than N days, use "find /path/to/dir -type f -mtime +N" in Terminal.
- The information is updated approximately once a month.

Date (UTC)	Path	Group	User	Inactive Period	Count	Size (TiB)
2025-07-30 16:42:21	/vol0400/data/rccs-aot /vol0400/share/rccs-aot	rccs-aot	a03019	12 - 18 months	865,953	0.48

グループ内の最近利用されていないファイルがある
ディスク情報の表示

開発したPassenger Apps (2/2)

これらは他のOpen OnDemandでも動作する

Step 1. Generate Refresh Token

Please generate a refresh token at <https://elpis.hpci.nii.ac.jp>. If you are unsure how to do this, please refer to Sections 2.1 and 2.2 of the HPCI Shared Storage User Manual ([EN](#) | [JA](#)).

Step 2. Mount HPCI Shared Storage

Enter your HPCI ID and the passphrase generated in step 1.

HPCI ID

Passphrase

Mount

GakuNin RDMも可能

HPCI共用ストレージにマウントするアプリ
https://github.com/RIKEN-RCCS/HPCI_Shared_Storage

バッチジョブを投入・管理するツールOpen Composer
<https://github.com/RIKEN-RCCS/OpenComposer>

Home Application ▾ History Home Directory Shell Access Open OnDemand

GENESIS
GENESIS (GEneralized-Ensemble Simulation System) is a program package for molecular dynamics simulation and modeling of various biomolecular systems.

Script Location*
 Select Path

Script Name*
 Job Name

Hide script content

Resource group*
 See [Resource group configuration](#) for details.

Nodes (1 - 384)*
 Procs (1 - 18,432)*
 Threads (1 - 48)*

"Nodes x 48 >= Procs x Threads" must hold.

Maximum hours (0 - 72)*
 Maximum minutes (0 - 59)*

Group*

Show advanced option

GENESIS version*

Executable file*
 atdyn spdyn

Input file*
 Select Path

Script Content

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM --mpi "proc=1"
#PJM -L "elapse=1:00:00"
#PJM -g rccs-aot
#PJM -L "freq=2200,eco_state=2"
#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004
set -e
export OMP_NUM_THREADS=1

# Load modules
. /vol0004/apps/oss/spack/share/spack/setup-env.sh
spack load genesis@2.1.5/lxoes5d

# Execute GENESIS
cd /data/rccs-aot
mpixexec spdyn ./a03011
```

Submit

HPCI共用ストレージにマウントするためのアプリ

Step 1. Generate Refresh Token

Please generate a refresh token at <https://elpis.hpci.nii.ac.jp>. If you are unsure how to do this, please refer to Sections 2.1 and 2.2 of the HPCI Shared Storage User Manual ([EN](#) | [JA](#)).

Step 2. Mount HPCI Shared Storage

Enter your HPCI ID and the passphrase generated in step 1.

HPCI ID

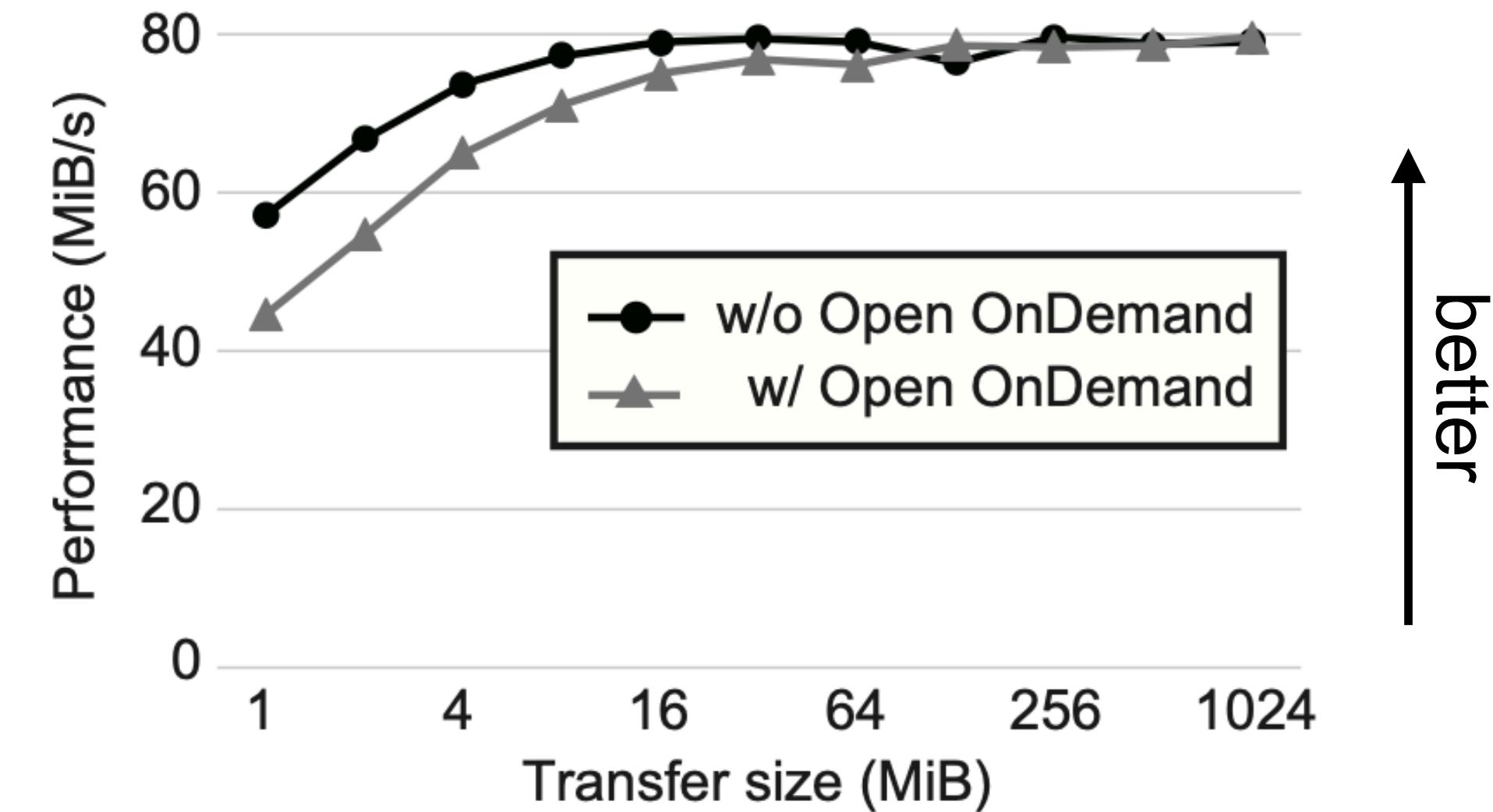
Passphrase

Mount

1. <https://elpis.hpci.nii.ac.jp>でリフレッシュトークンを作成
2. HPCI IDとPassphraseを入力
3. Mountボタンをクリック
プログラム内部でmount.hpciコマンドが実行される
4. HPCI共用ストレージを利用する
5. Umountボタンをクリック
プログラム内部でumount.hpciコマンドが実行される

評価

- Open OnDemandのオーバヘッドを調べるために、Open OnDemandを用いる場合と用いない場合におけるデータ転送速度を比較
- Open OnDemandサーバからHPCI共用ストレージにデータ転送
- Open OnDemandサーバとHPCI共用ストレージは同じ理研の建物内
- Open OnDemandサーバのCPUはXeon Gold 6338 x2
メモリは256GB、ネットワークは100Gbps
- 結果
 - Open OnDemandを用いない方が最大28%早いが、データサイズが大きくなるにつれ性能差は小さくなる
 - 64MiB以上では性能差はなくなるため、実用上は問題ないと考えられる



まとめと今後の予定

- まとめ
 - HPCクラスタが持つ計算資源を簡易に利用可能にするOpen OnDemandの紹介とカスタマイズ
 - Passenger ApplicationであるHPCI共用ストレージ用のアプリケーションの開発
 - ・ Home Directoryと組み合わせることで、GUIでファイル操作が可能
 - ・ HPCI共用ストレージについて転送速度を比較し、Open OnDemandのオーバヘッドは十分に小さいことがわかった
- 今後の予定
 - gfpcopyによる並列コピーの実装
 - ローカルからリモートにアップロードするときにファイルを圧縮する機能の実装
 - AIチャットによるヘルプサービス機能の実装