



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 vsize, 4283M framework vsize, 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 portal. At the top, there's a navigation bar with links like 'Batch Jobs', 'Interactive Apps', 'Passenger Apps', and 'My Sessions'. The main header says 'Welcome to the supercomputer Fugaku' and includes the RIKEN and R-CCS logos. A 'Link' table provides quick access to various resources. Below this, the 'Message of the day' section contains an 'Information' table with operational status updates. The 'Pending jobs' section displays a grid of job status boxes for different resource groups. To the right, a 'Fugaku Schedule' calendar shows upcoming events. The 'Accounting' section features a detailed table of resource usage across different groups and volumes. At the bottom, there are two rows of application tiles: 'Recently Used Apps' (Desktop, OpenFOAM, SCALE, Jupyter) and 'Passenger Apps' (Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, HPCI Storage, Job Composer, Fugaku Shell Access).

Link	Flag
OnDemand Manual	US, JP
Fugaku Portal	US, JP
Fugaku Schedule	US, JP
Fugaku Status	US, JP
Fugaku Support	US, JP

Date	Operation	Details
Jul 24, 2023	Operation	July 2023 Large-scale job execution period
Jul 21, 2023	Operation	Resource groups during the large scale job execution period
Jul 19, 2023	Operation	Occurrence of inaccessibility and poor response at login nodes and jobs due to a file system maintenance(vol0005)

Resource Group	Count
fugaku-small	17867
fugaku-large	915
prepost-gpu1	12
prepost-gpu2	0
prepost-mem1	22
prepost-mem2	3
prepost-ondemand	0

Group	Volume	Disk (GiB)				Disk (inode)				Resource (NH)			
		Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate
rccs-aot	/vol0400	5,120	608	4,512	11%	1,500,000	265,259	1,234,741	17%	527,360	81,666	445,693	15%
f-op	/vol0403	614,400	160,260	454,140	26%	180,000,000	144,261,340	35,738,660	80%	-	-	-	-
ra030002	/vol0403	5,120	1	5,119	0%	1,500,000	2	1,499,998	0%	-	-	-	-
/home	/vol0400	20	5	15	25%	200,000	11,619	188,381	5%	-	-	-	-

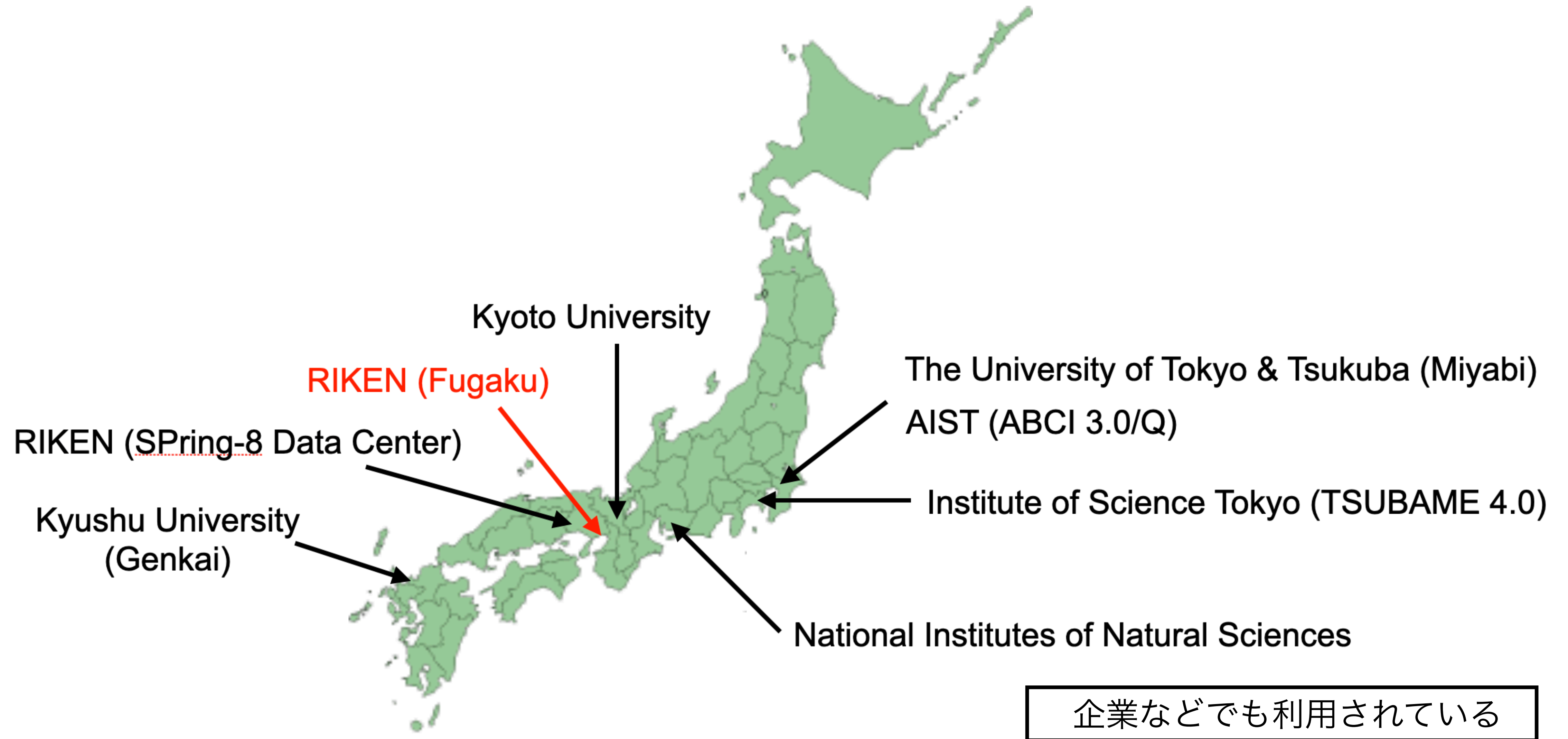
Desktop	OpenFOAM	SCALE	Jupyter
---------	----------	-------	---------

Active Jobs	Home Directory	Gakunin RDM	HPCI Storage
Job Composer	Fugaku Shell Access		

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

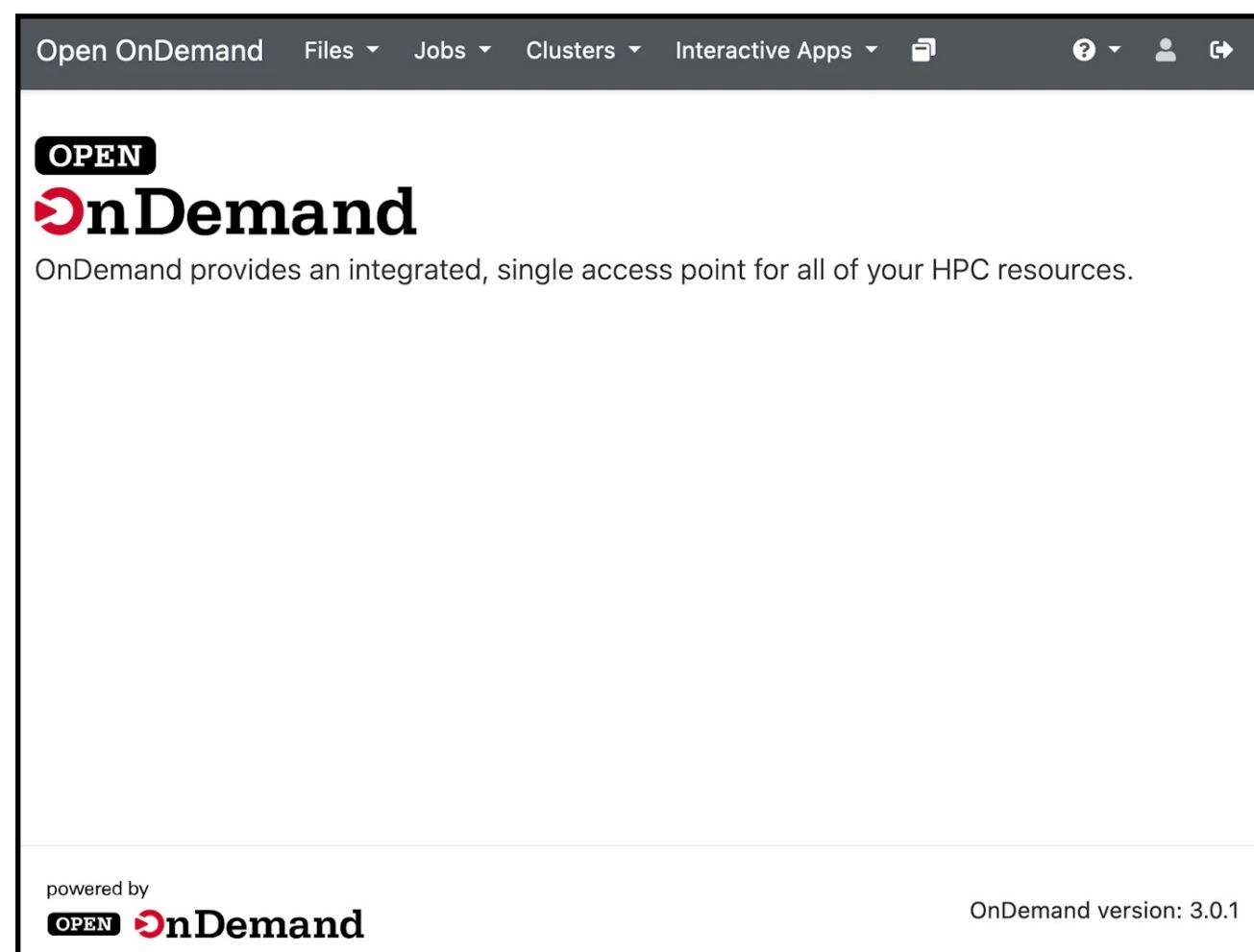
← 本日の話題

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

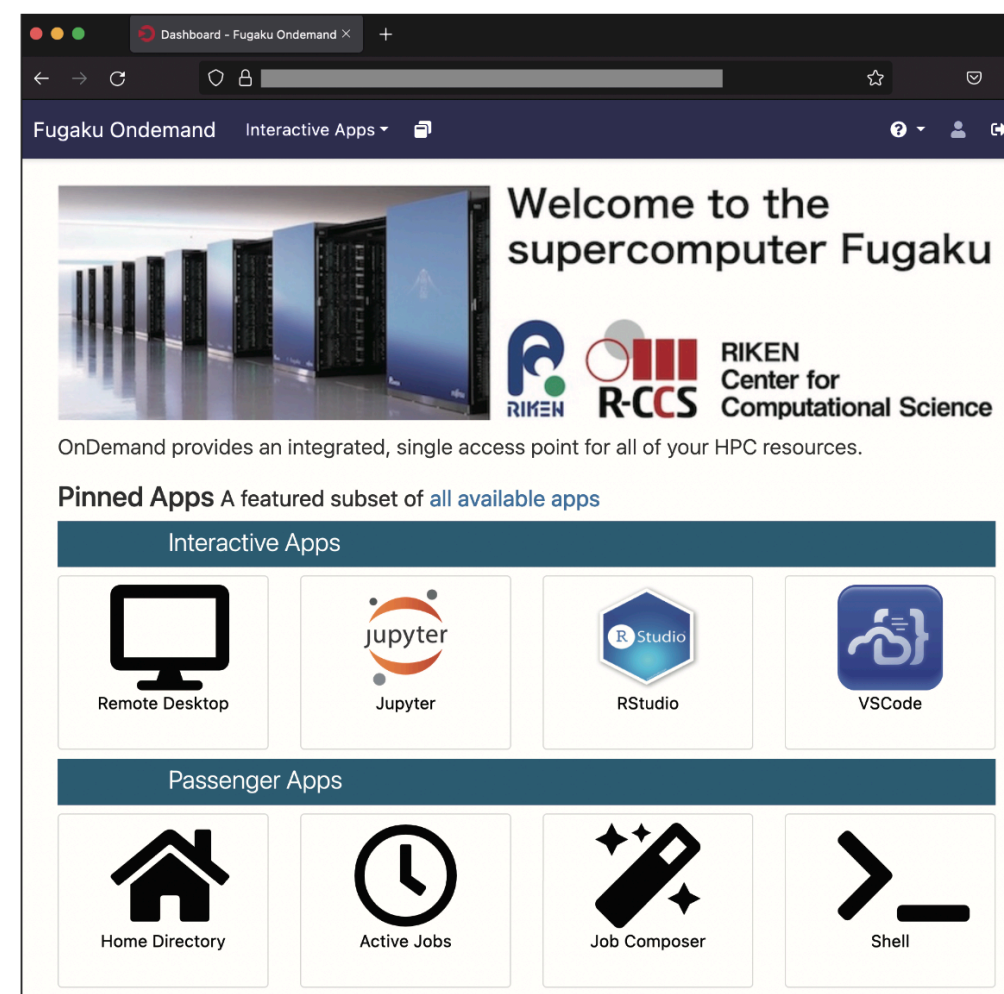
ダッシュボードの変更 (1/2)

- 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



テスト運用時



現在

Message of the day

Information

Jul 24, 2023	Operation	July 2023 Large-scale job execution period
Jul 21, 2023	Operation	Resource groups during the large scale job execution period
Jul 19, 2023	Operation	Occurrence of inaccessibility and poor response at login nodes and jobs due to a file system maintenance(vol0005)

Pending jobs

fugaku-small 17867	fugaku-large 915	prepost-gpu1 12	prepost-gpu2 0
prepost-mem1 22	prepost-mem2 3	prepost-ondemand 0	

Fugaku Schedule

Today: July 2023

Sun	Mon	Tue	Wed	Thu	Fri	Sat
25	26	27	28	29	30	Jul 1
2	3	4	5	6	7	8
9	10	11	12	13	14	15
16	17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28	29
30	31	Aug 1	2	3	4	5

Events shown in time zone: Japan Standard Time

Accounting (Updated at 2023/07/25 02:32:10 (JST))

Group	Volume	Disk (GiB)				Disk (inode)				Resource (NH)			
		Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate
rcs-aot	/vol0400	5,120	608	4,512	11%	1,500,000	265,259	1,234,741	17%	527,360	81,666	445,693	15%
f-op	/vol0403	614,400	160,260	454,140	26%	180,000,000	144,261,340	35,738,660	80%	-	-	-	-
ra030002	/vol0403	5,120	1	5,119	0%	1,500,000	2	1,499,998	0%	-	-	-	-
/home	/vol0400	20	5	15	25%	200,000	11,619	188,381	5%	-	-	-	-

Recently Used Apps

Desktop	OpenFOAM	SCALE	Jupyter
---------	----------	-------	---------

Passenger Apps

Active Jobs	Home Directory	Gakunin RDM	HPCL Storage
Job Composer	Fugaku Shell Access		

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. 運用カレンダー (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 displays the Fugaku OnDemand dashboard interface. At the top, a navigation bar includes links for 'Fugaku OnDemand', 'Batch Jobs', 'Interactive Apps', 'Passenger Apps', and 'My Sessions'. A 'Welcome to the supercomputer Fugaku' banner features the RIKEN and R-CCS logos. A 'Link' table provides quick access to manuals, portals, schedules, status, and support. The 'Message of the day' section contains operational updates. The 'Information' section shows a timeline of events. The 'Pending jobs' section uses a bar chart to display job counts for different resource groups. The 'Fugaku Schedule' section includes a calendar view of job execution periods. The 'Accounting' section provides a detailed table of disk and resource usage for various groups. The 'Recently Used Apps' section shows icons for Desktop, OpenFOAM, SCALE, and Jupyter. The 'Passenger Apps' section includes icons for Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, HPCI Storage, Job Composer, and Fugaku Shell Access.

Link	US	JP
OnDemand Manual		
Fugaku Portal		
Fugaku Schedule		
Fugaku Status		
Fugaku Support		

Group	Volume	Disk (GiB)				Disk (inode)				Resource (NH)			
		Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate	Limit	Usage	Avail.	Rate
rcs-aot	/vol0400	5,120	608	4,512	11%	1,500,000	265,259	1,234,741	17%	527,360	81,666	445,693	15%
f-op	/vol0403	614,400	160,260	454,140	26%	180,000,000	144,261,340	35,738,660	80%	-	-	-	-
ra030002	/vol0403	5,120	1	5,119	0%	1,500,000	2	1,499,998	0%	-	-	-	-
/home	/vol0400	20	5	15	25%	200,000	11,619	188,381	5%	-	-	-	-

Icon	Label
	Desktop
	OpenFOAM
	SCALE
	Jupyter

Icon	Label
	Active Jobs
	Home Directory
	Gakunin RDM
	HPCI Storage
	Job Composer
	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

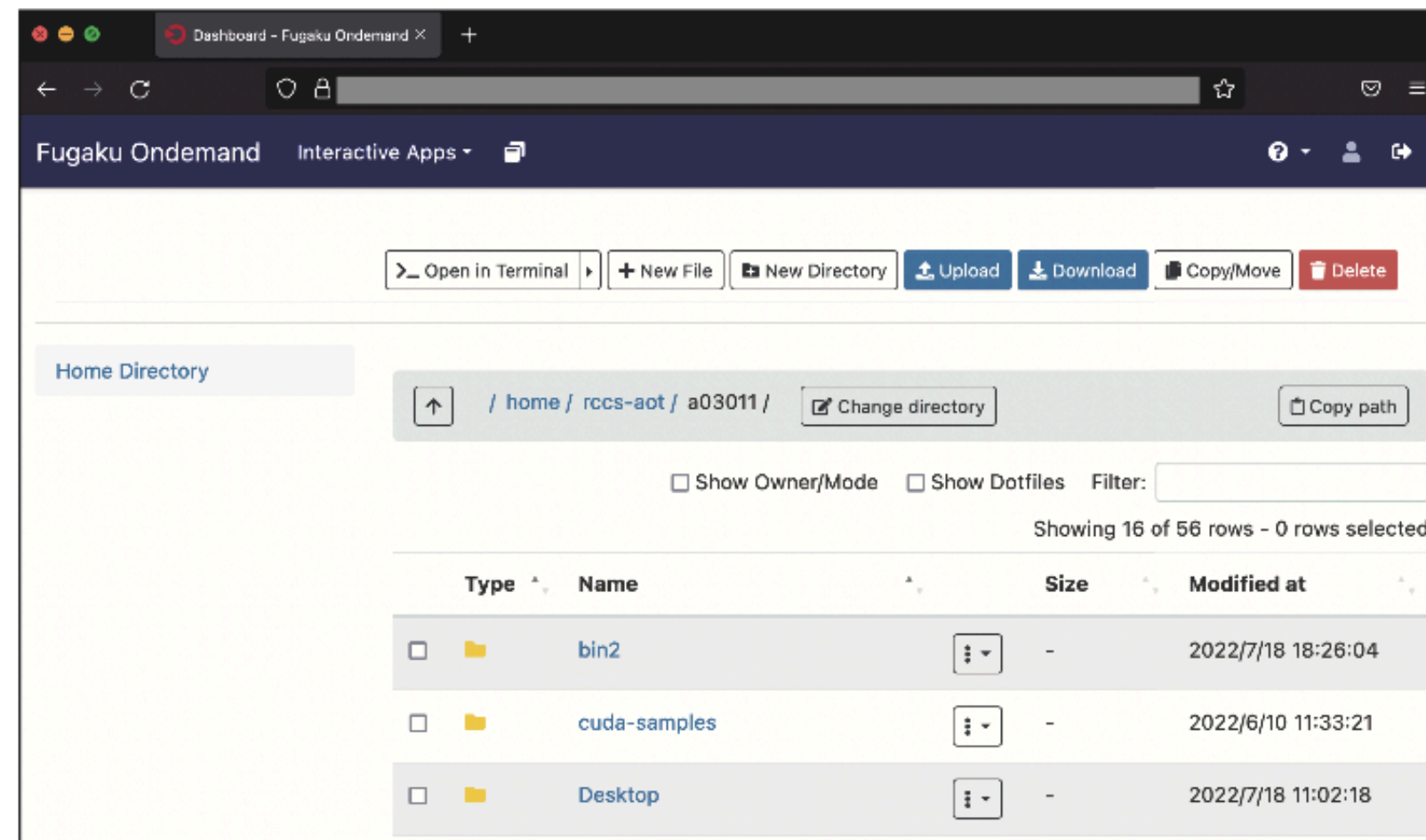
これらのアプリケーションは、他のOpen OnDemandサイトと共有可能な場合がある

アイコンをクリックして
アプリケーションを起動する

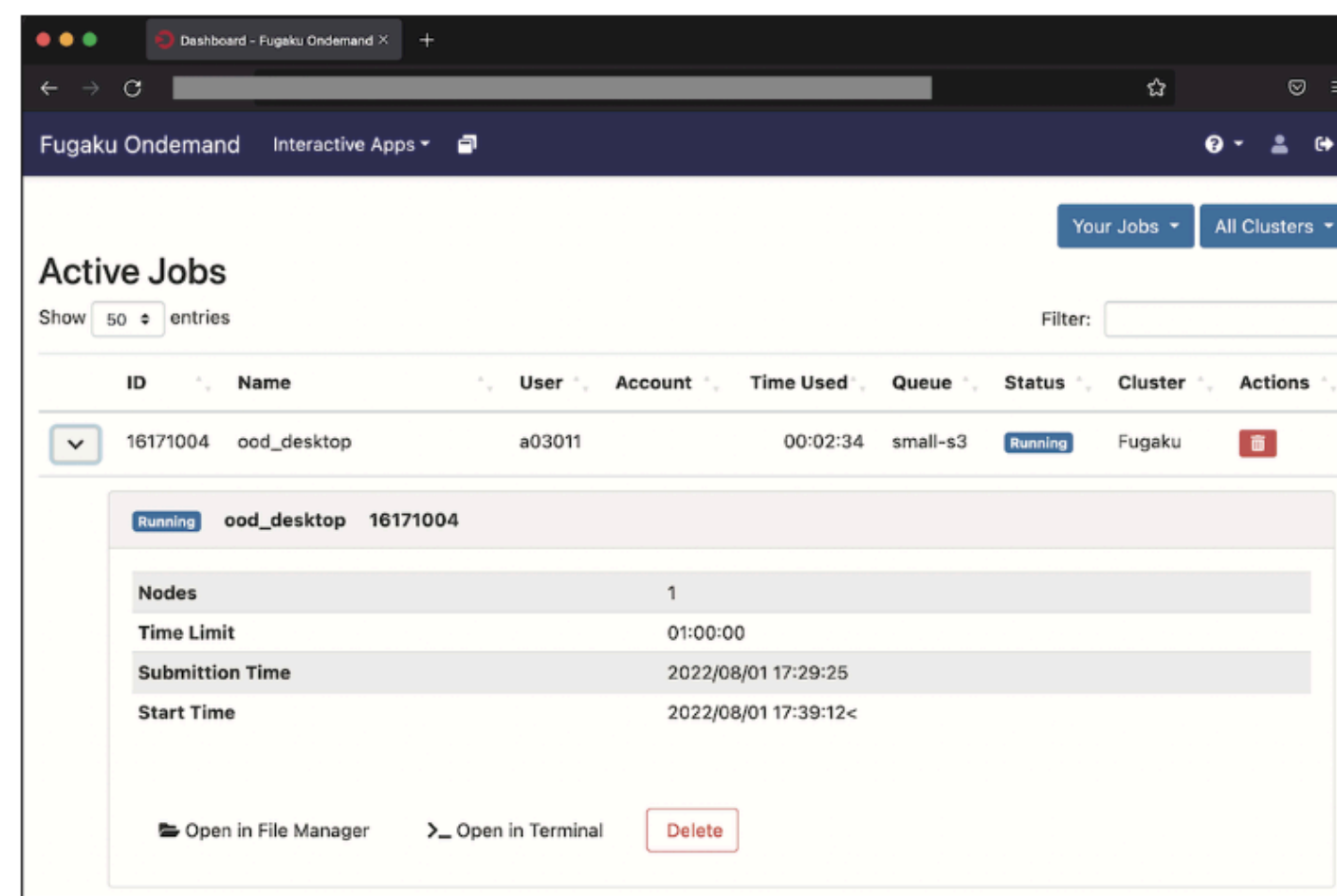
The screenshot displays the Fugaku OnDemand web interface. At the top, a navigation bar includes links for 'Fugaku OnDemand', 'Batch Jobs', 'Interactive Apps', 'Passenger Apps', 'My Sessions', and user information. The main content area is divided into several sections:

- Welcome to the supercomputer Fugaku**: A header section with the RIKEN R-CCS logo and a 'Link' table.
- Message of the day**: A section providing operational information and a calendar view for July 2023.
- Pending jobs**: A table showing the status of various job groups, including 'fugaku-small', 'fugaku-large', 'prepost-gpu1', 'prepost-gpu2', 'prepost-mem1', 'prepost-mem2', and 'prepost-ondemand'.
- Accounting**: A table showing resource usage (Disk, Inode, and Resource) for different groups and volumes.
- Recently Used Apps**: A section displaying icons for 'Desktop', 'OpenFOAM', 'SCALE', and 'Jupyter'.
- Passenger Apps**: A section displaying icons for 'Active Jobs', 'Home Directory', 'Gakunin RDM', 'HPCL Storage', 'Job Composer', and 'Fugaku Shell Access'.

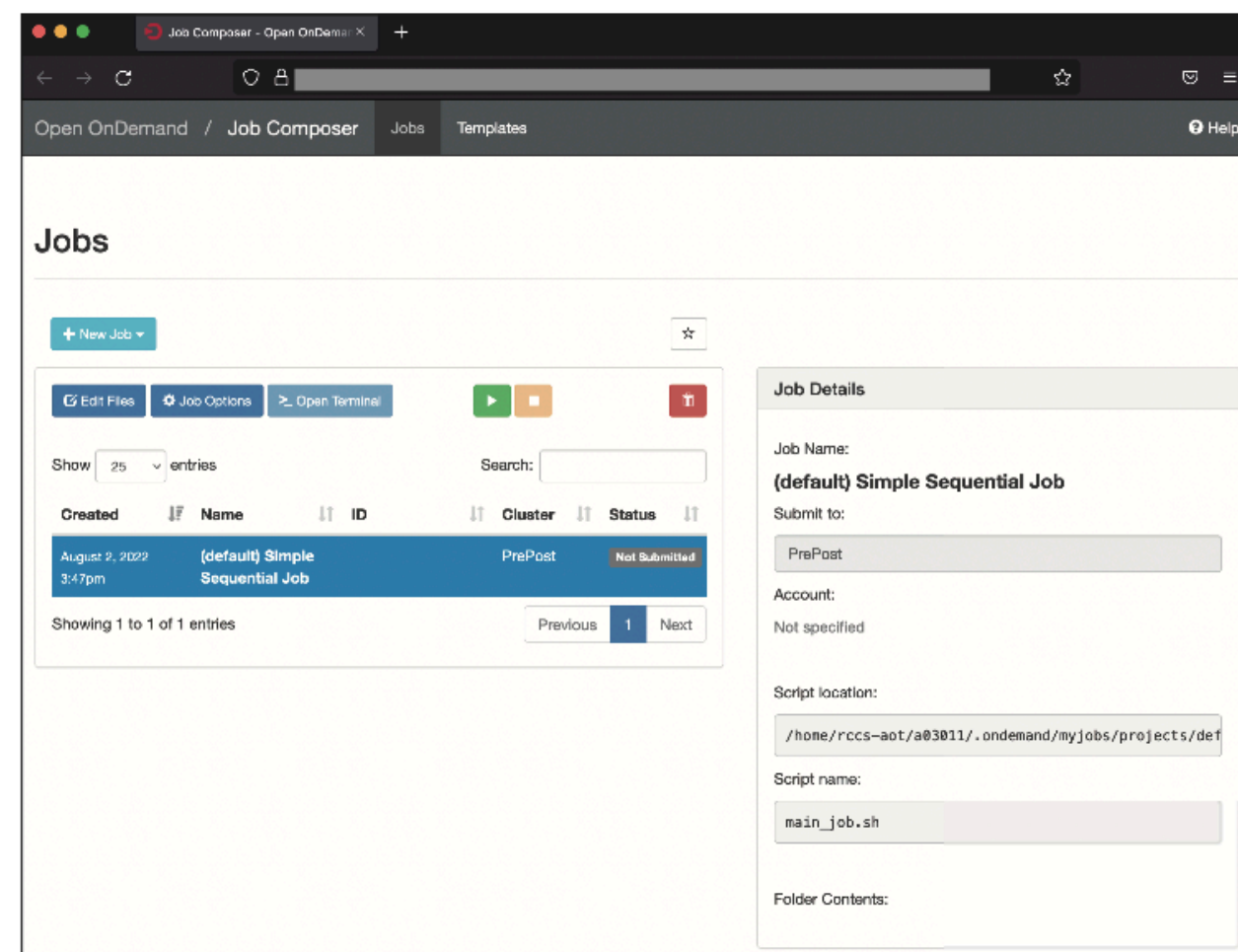
デフォルトのPassenger Apps



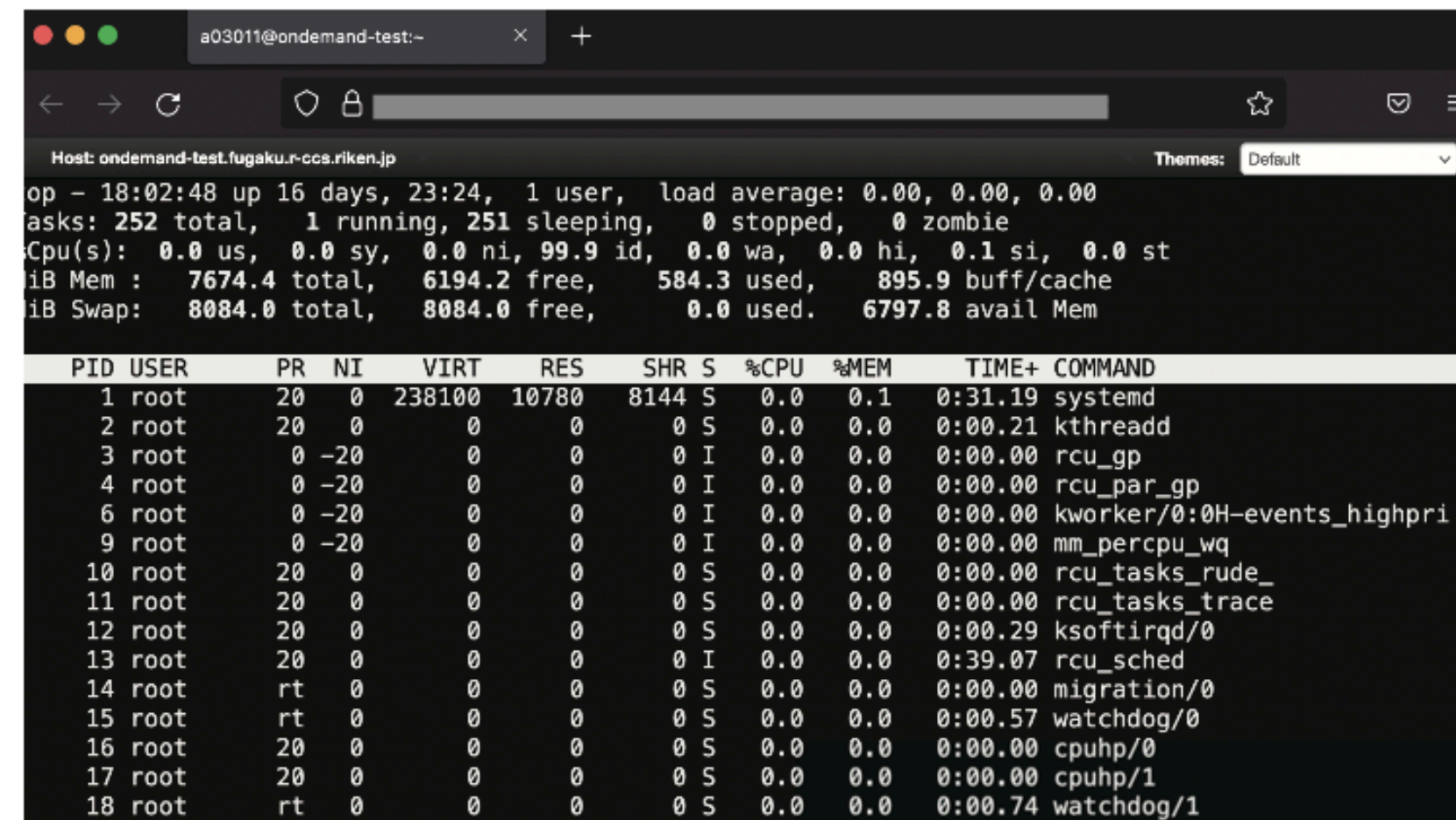
Home Directory



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と組み合わせることで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、代わりにのアプリである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	8.9%	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

Budget usage for each user by group.

rccs-aot

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

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+

Count:

100k - 1M

100M+

Filter by Group:

(ALL)

Size (TiB):

0.01 - 0.1

100+

Filter by User:

(ALL)

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>

The screenshot shows the Open OnDemand web interface for the GENESIS application. The top navigation bar includes 'Home', 'Application', and 'History'. The main header area displays 'GENESIS' and a brief description: 'GENESIS (GENeralized-Ensemble Simulation System) is a program package for molecular dynamics simulation and modeling of various biomolecular systems.' Below this, there are input fields for 'Script Location*' (set to '/data/rccs-aot/a03011'), 'Script Name*' (set to 'job.sh'), and 'Job Name'. A 'Select Path' button is next to the script location field. A 'Hide script content' checkbox is also present. The 'Resource group*' dropdown is set to 'small'. Below it, a link points to 'Resource group configuration'. The 'Nodes (1 - 384)*', 'Procs (1 - 18,432)*', and 'Threads (1 - 48)*' are all set to 1. A note states: '"Nodes x 48 >= Procs x Threads" must hold.' The 'Maximum hours (0 - 72)*' is set to 1, and 'Maximum minutes (0 - 59)*' is set to 0. The 'Group*' dropdown is set to 'rccs-aot'. There is a 'Show advanced option' checkbox. The 'GENESIS version*' dropdown is set to '2.1.5 (Mixed accuracy)'. The 'Executable file*' section has radio buttons for 'atdyn' and 'spdyn', with 'spdyn' selected. The 'Input file*' field is set to '/data/rccs-aot/a03011' with a 'Select Path' button. The 'Script Content' area shows a bash script for running GENESIS. At the bottom right, there is a 'Submit' button.

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*
/data/rccs-aot/a03011 Select Path

Script Name* Job Name
job.sh

☐ Hide script content

Resource group*
small

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

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

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

Maximum hours (0 - 72)* Maximum minutes (0 - 59)*
1 0

Group*
rccs-aot

☐ Show advanced option

GENESIS version*
2.1.5 (Mixed accuracy)

Executable file*
☐ atdyn ☒ spdyn

Input file*
/data/rccs-aot/a03011 Select Path

Script Content

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM --mpi "proc=1"
#PJM -L "elapsed=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
mpiexec 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

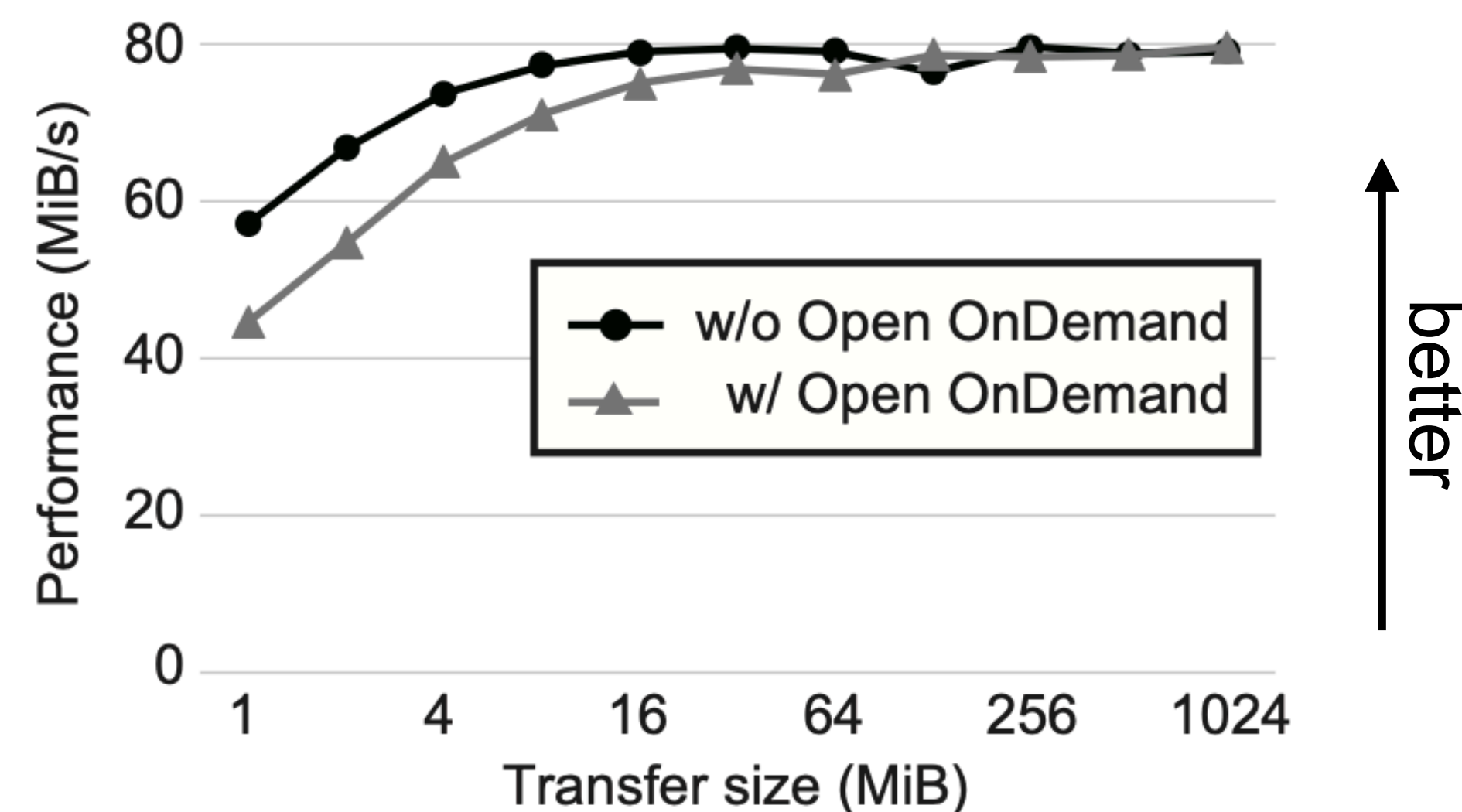
Passphrase

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、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%早いですが、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のオーバー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