



スーパーコンピュータ「富岳」における Open OnDemand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
 - ジョブスケジューラ
 - 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>

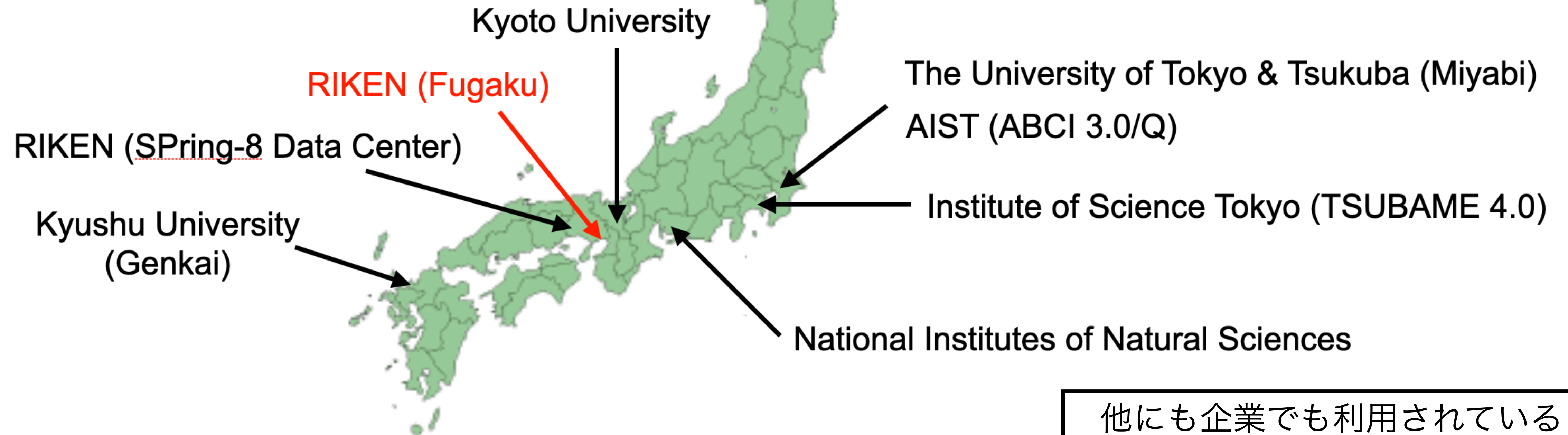
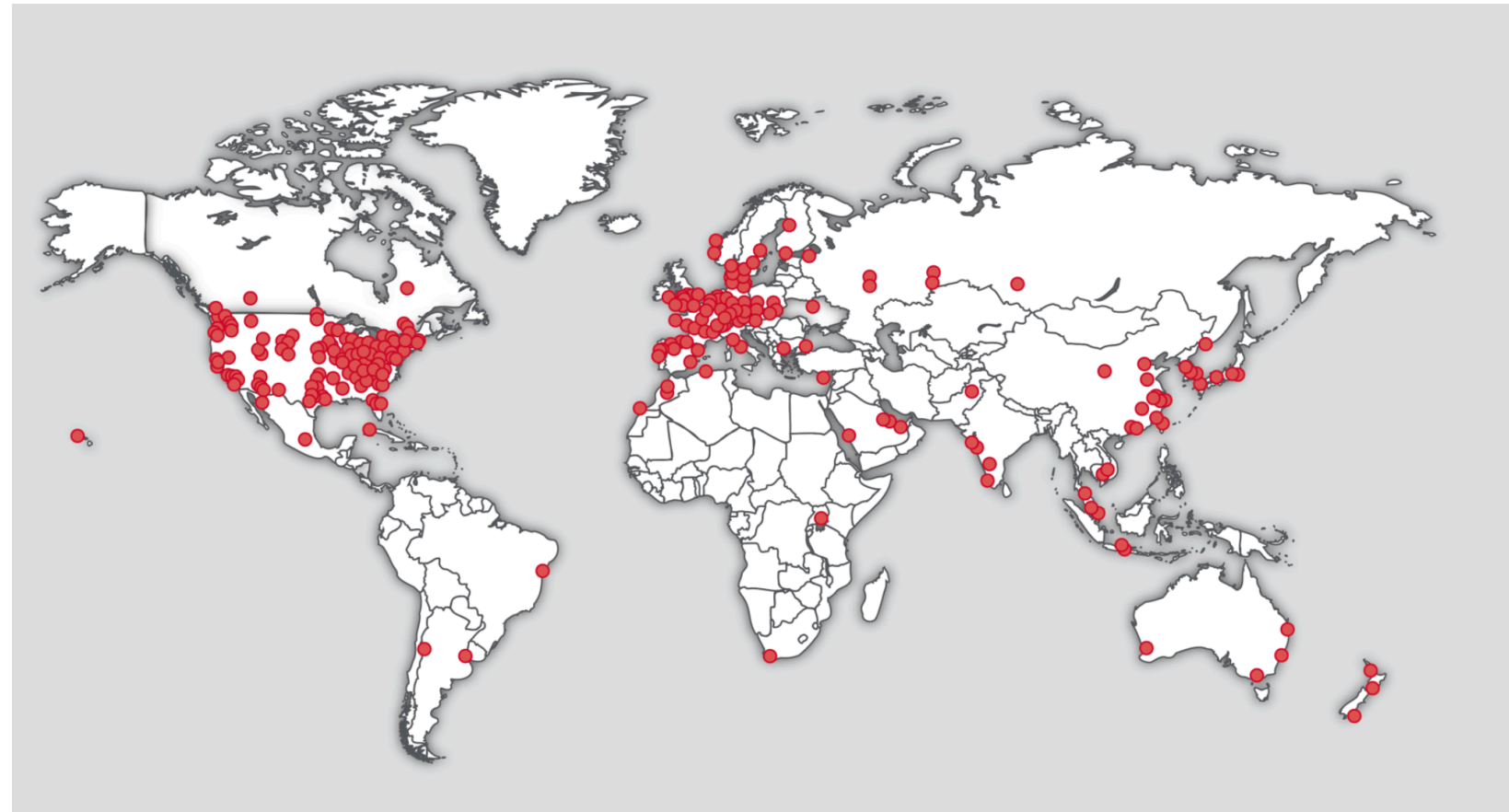
- HPCクラスタ用のWebポータルOpen OnDemandに着目
- オハイオ州立大学が中心となって開発しているOSS
- WebブラウザからHPCクラスタの操作が可能
 - 統一化されたユーザインタフェース
 - ファイルの送受信、ジョブ投入・監視、シェルアクセス
 - 計算ノード上でGUIアプリケーションを簡易に利用可能
 - アプリケーションプラットフォームとしての機能
- 2022年8月から「富岳」においてテスト運用（Fujitsu TCS用のコードを開発、本家に反映）、2023年5月から本番運用
 - 設定ファイルはGitHubで公開しています
 - https://github.com/RIKEN-RCCS/ondemand_fugaku

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 RCCS logos. A 'Link' table provides quick access to various resources. Below this, a 'Message of the day' section contains operational information and a 'Fugaku Schedule' calendar. A 'Pending jobs' section displays a grid of job status boxes for different resource groups. An 'Accounting' table provides detailed usage statistics for various groups. At the bottom, there are sections for 'Recently Used Apps' and 'Passenger Apps', each with icons for different applications like Desktop, OpenFOAM, SCALE, Jupyter, Active Jobs, Home Directory, Gakunin RDM, HPCI Storage, Job Composer, and Fugaku Shell Access.

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

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%	-	-	-	-

Open OnDemandは世界中の1600以上の組織で利用



他にも企業でも利用されている

日本のOpen OnDemandコミュニティサイト

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

Open OnDemand JP

目的 アプリケーション 発表



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に参加する

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

アプリケーション

Open OnDemand上で動作する便利なPassenger Applicationを紹介します。

Open Composer

ジョブスクリプトを簡単に生成・投入・管理

詳細を見る

HPCI共用ストレージ

HPCI共用ストレージにアクセス

(準備中)

GakuNin RDM

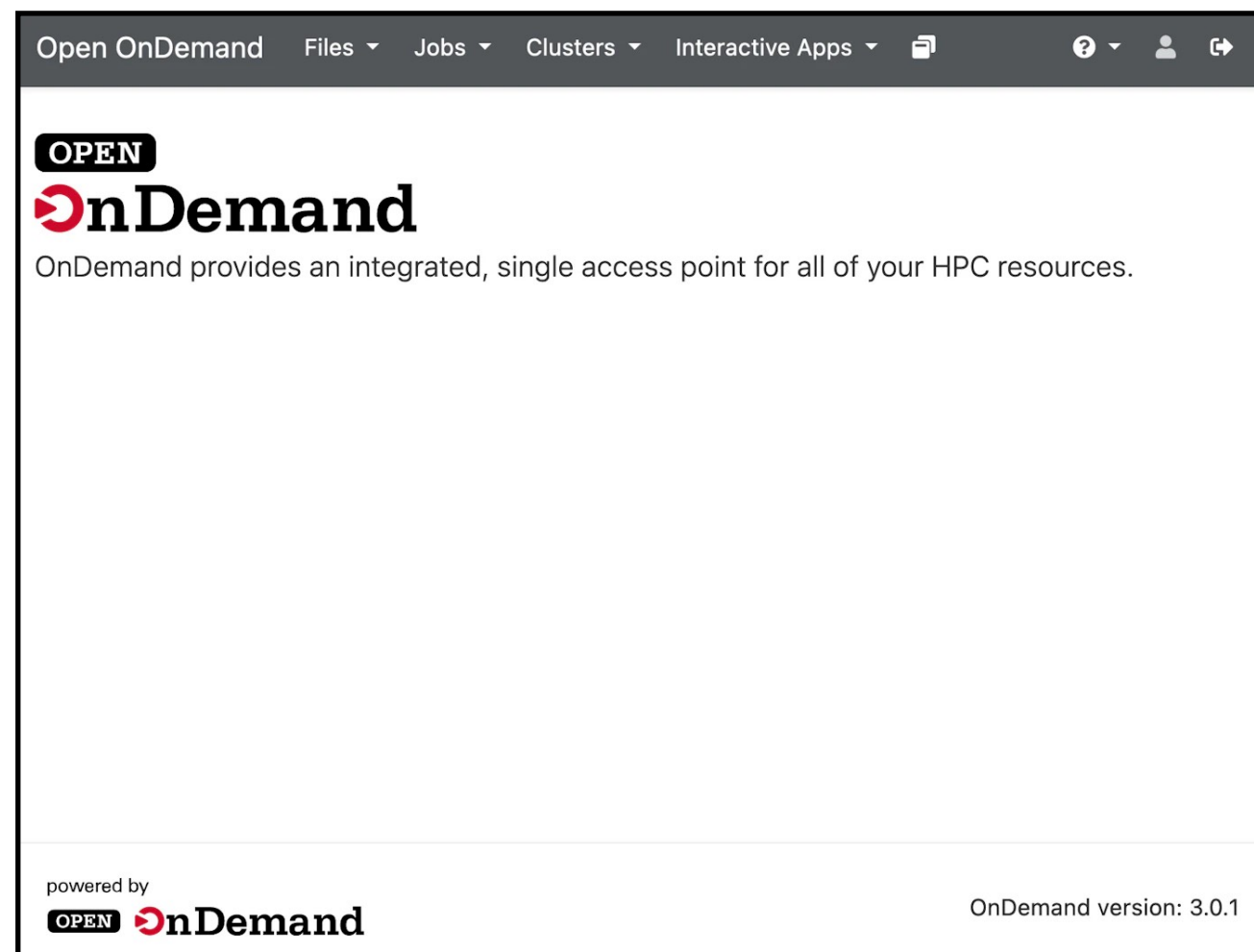
GakuNin RDM (研究データ管理基盤) にアクセス

(準備中)

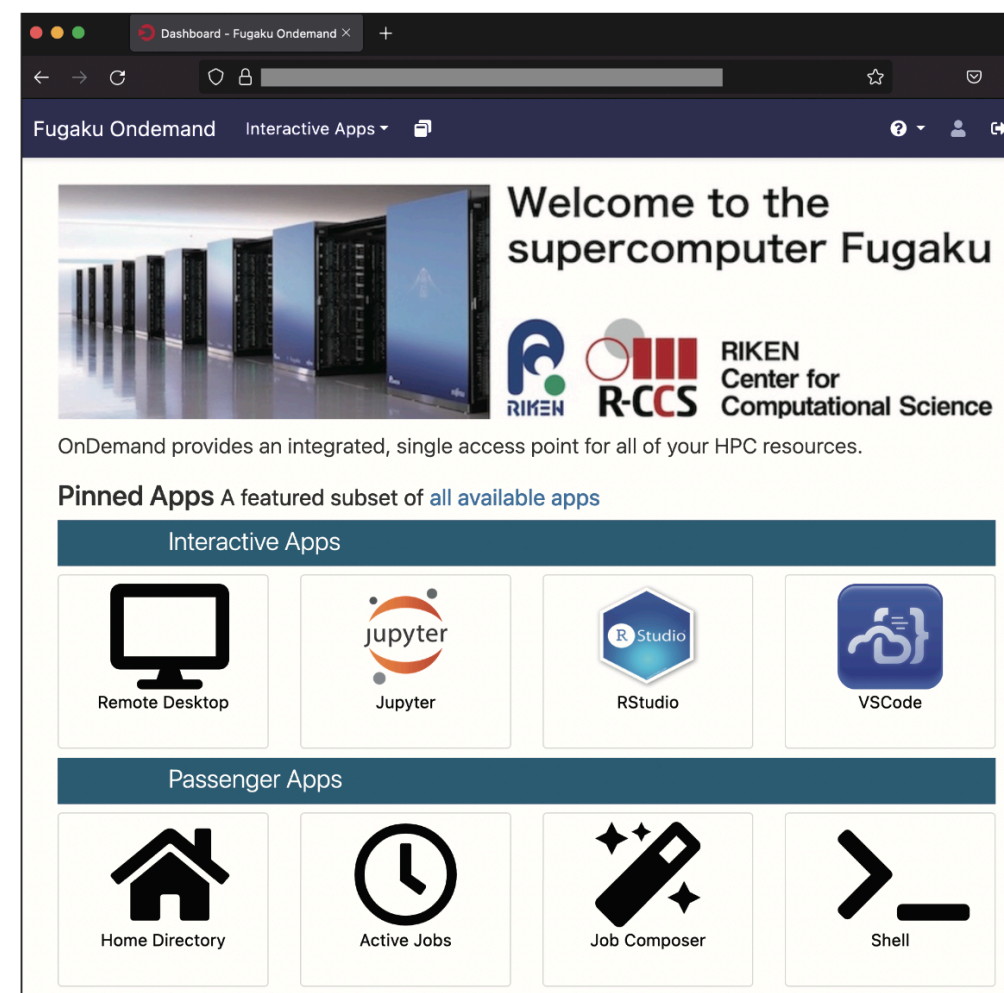
ダッシュボードの変更 (1/2)

- 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

Job Name	Count
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

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サーバで動作するユーティリティ
 - ファイルのアップロードやジョブ監視など

Fugaku OnDemandBatch JobsInteractive AppsPassenger AppsMy SessionsDevelopHelpLogged in as a03011Log Out



Welcome to the
supercomputer Fugaku

 RIKEN
Center for
Computational Science

Link	
OnDemand Manual	 
Fugaku Portal	 
Fugaku Schedule	 
Fugaku Status	 
Fugaku Support	 

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

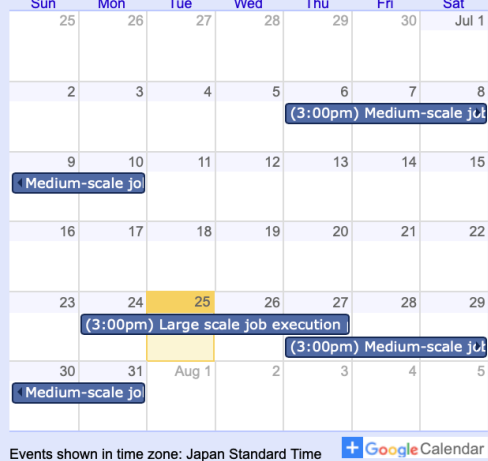
Operation

Occurrence of inaccessibility and poor response at login nodes and jobs due to a file system maintenance(vol0005)

Fugaku Schedule

Today

July 2023



Pending jobs

fugaku-small
17867

fugaku-large
915

prepost-gpu1
12

prepost-gpu2
0

prepost-mem1
22

prepost-mem2
3

prepost-ondemand
0

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

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
- Batch Jobs : 計算ノード上で動作する対話型でないアプリケーション

アイコンをクリックして
アプリケーションを起動する

Fugaku OnDemand Batch Jobs Interactive Apps Passenger Apps My Sessions Develop Help Logged in as a03011 Log Out

Welcome to the supercomputer Fugaku

RIKEN R-CCS Center for Computational Science

Link

OnDemand Manual	🇺🇸 🇯🇵
Fugaku Portal	🇺🇸 🇯🇵
Fugaku Schedule	🇺🇸 🇯🇵
Fugaku Status	🇺🇸 🇯🇵
Fugaku Support	🇺🇸 🇯🇵

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
				(3:00pm) Medium-scale job		
9	10	11	12	13	14	15
16	17	18	19	20	21	22
23	24	25	26	27	28	29
		(3:00pm) Large scale job execution		(3:00pm) Medium-scale job		
30	31	Aug 1	2	3	4	5

Events shown in time zone: Japan Standard Time Google Calendar

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%	-	-	-	-

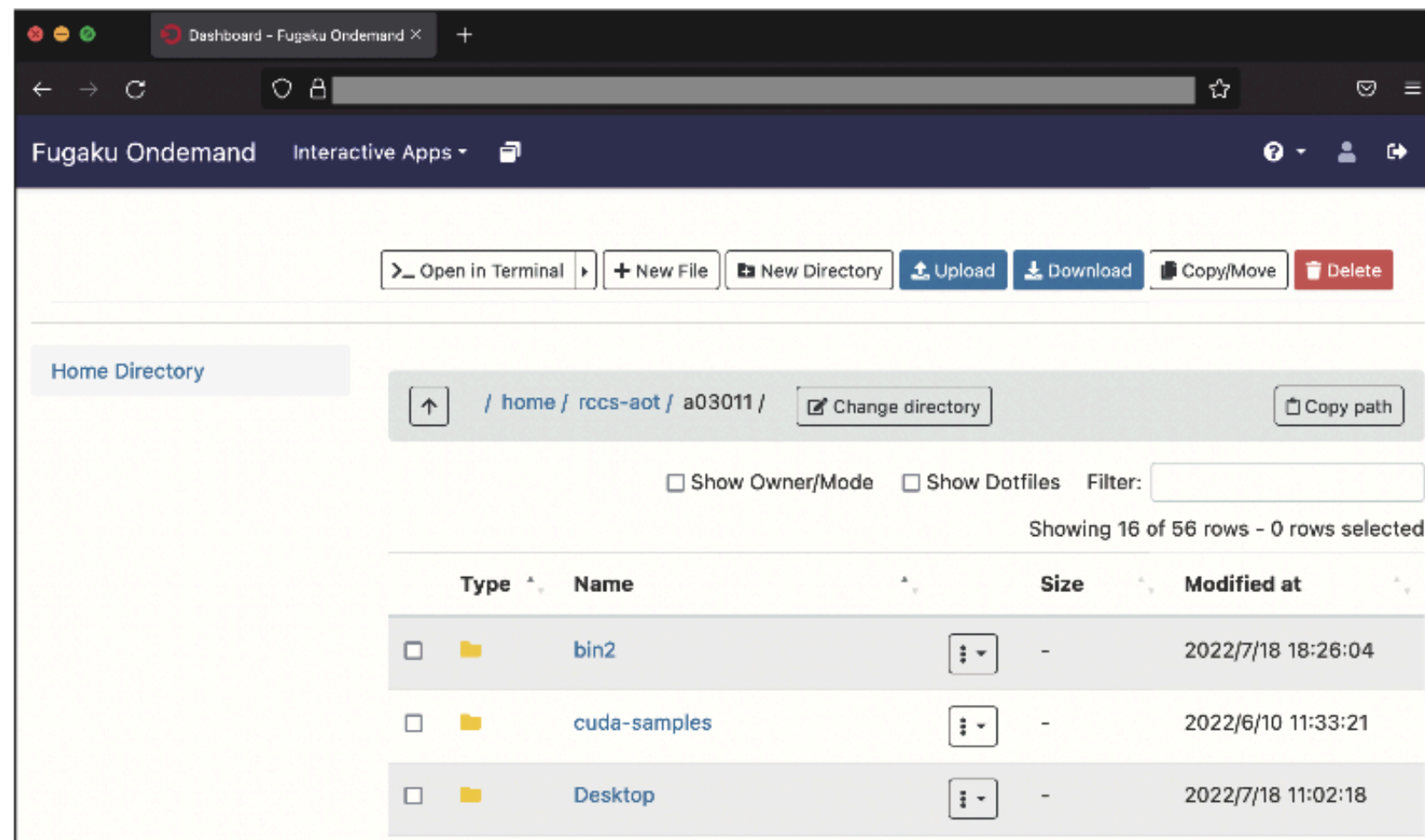
Recently Used Apps

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

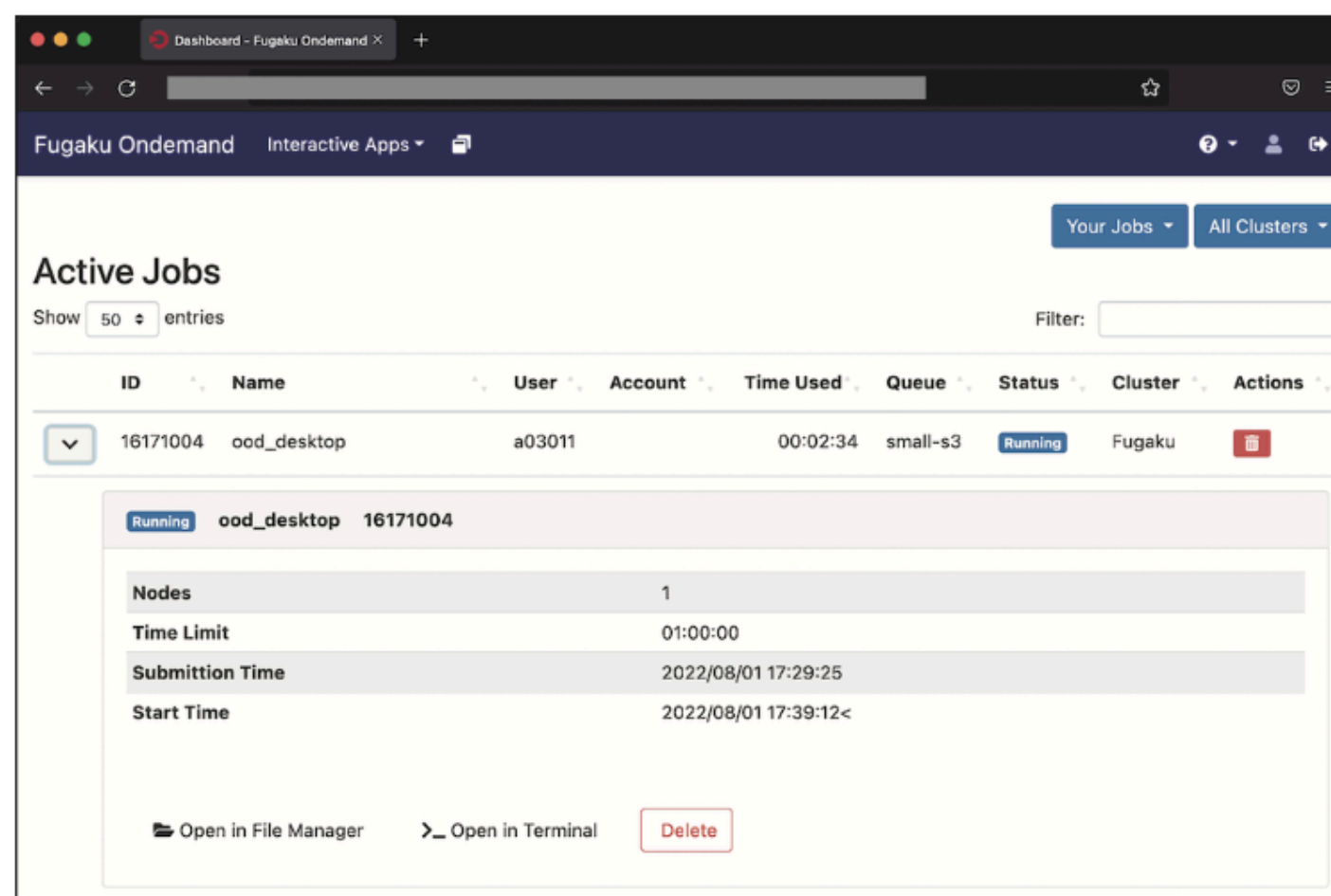
Passenger Apps

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

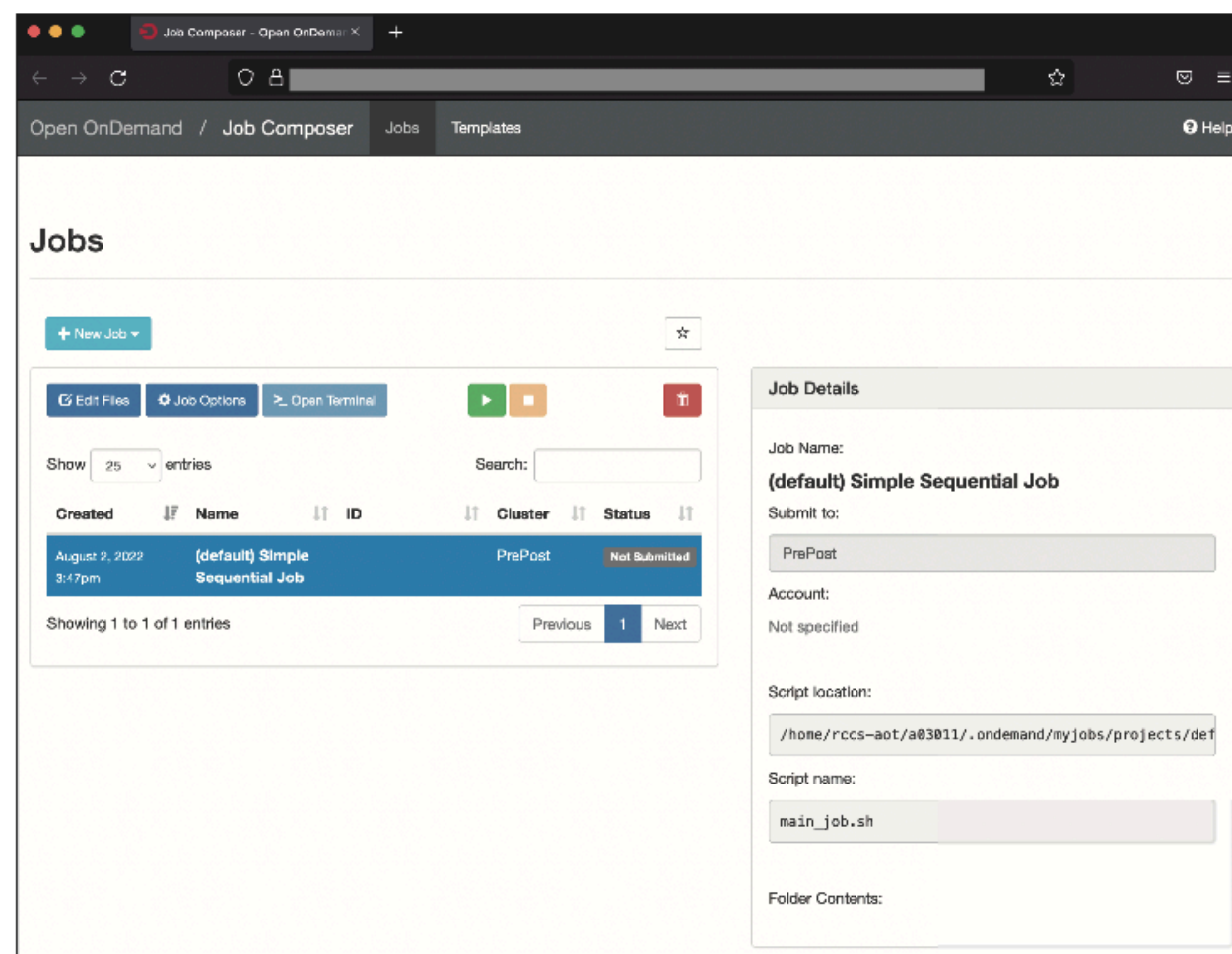
デフォルトのPassenger Apps



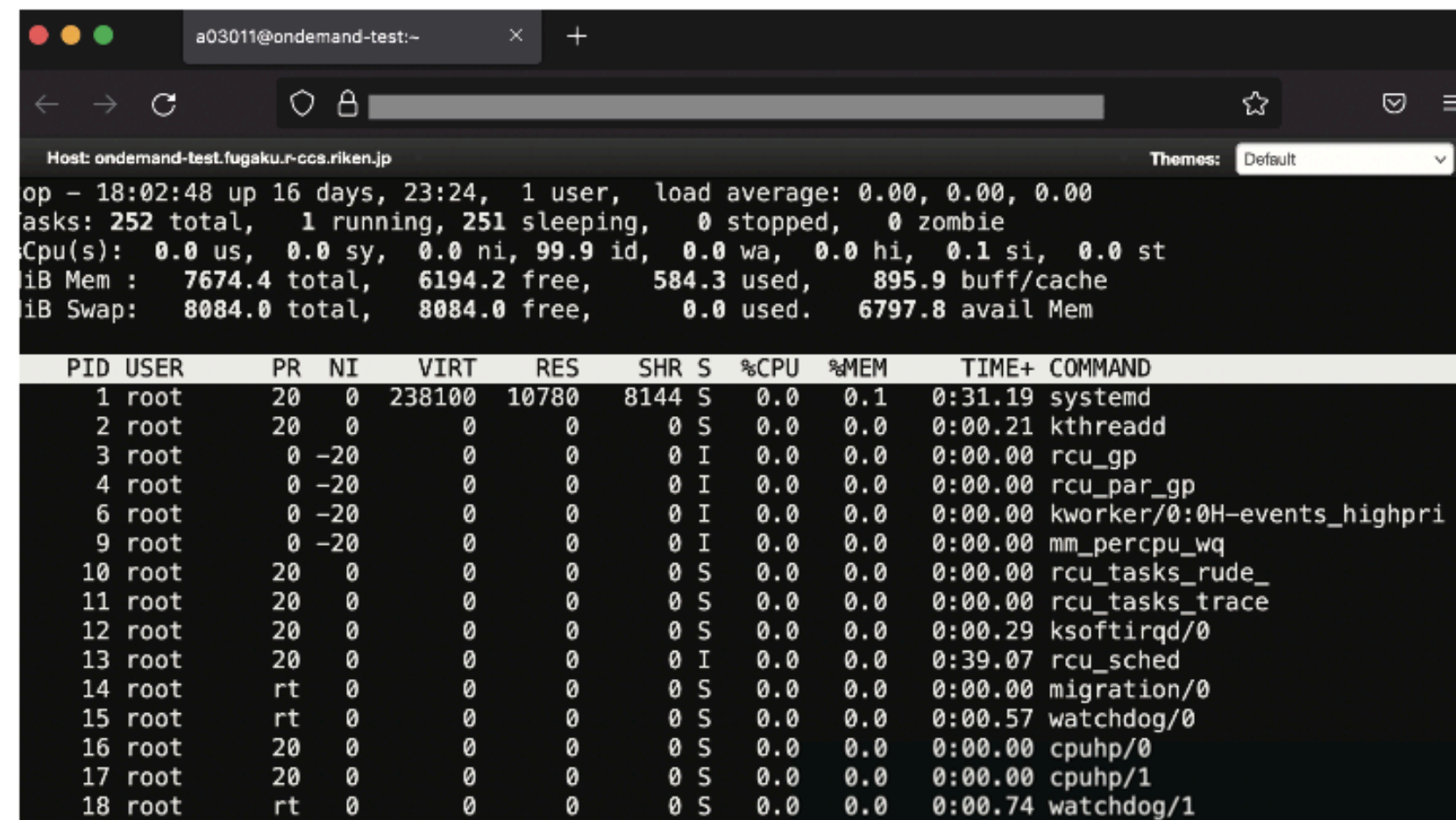
Home Directory



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（使いづらいため無効化して、代替りのアプリであるOpen Composerを開発した）
- Shell：Webターミナル

開発したPassenger Apps (1/2)

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

(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 months48 months+

Count:
100k - 1M100M+

Filter by Group:
(ALL)

Size (TiB):
0.01 - 0.1100+

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)

GakuNin RDM

Available Action	Mount Path	RDM Node ID	RDM Token
mount			

NIIが運用する研究データ管理基盤サービスとの間でデータ転送

HPCI Shared Storage

Please issue an access token from <https://elpis.hpci.nii.ac.jp>.

Action	HPCI ID	Passphrase
mount	hpcixxxxxx	

HPCI共用ストレージとの間のデータ転送

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

この3つは他のサイトのOpen OnDemandでも動作する

HomeApplication ▾History

Home DirectoryShell AccessOpen 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 "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

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

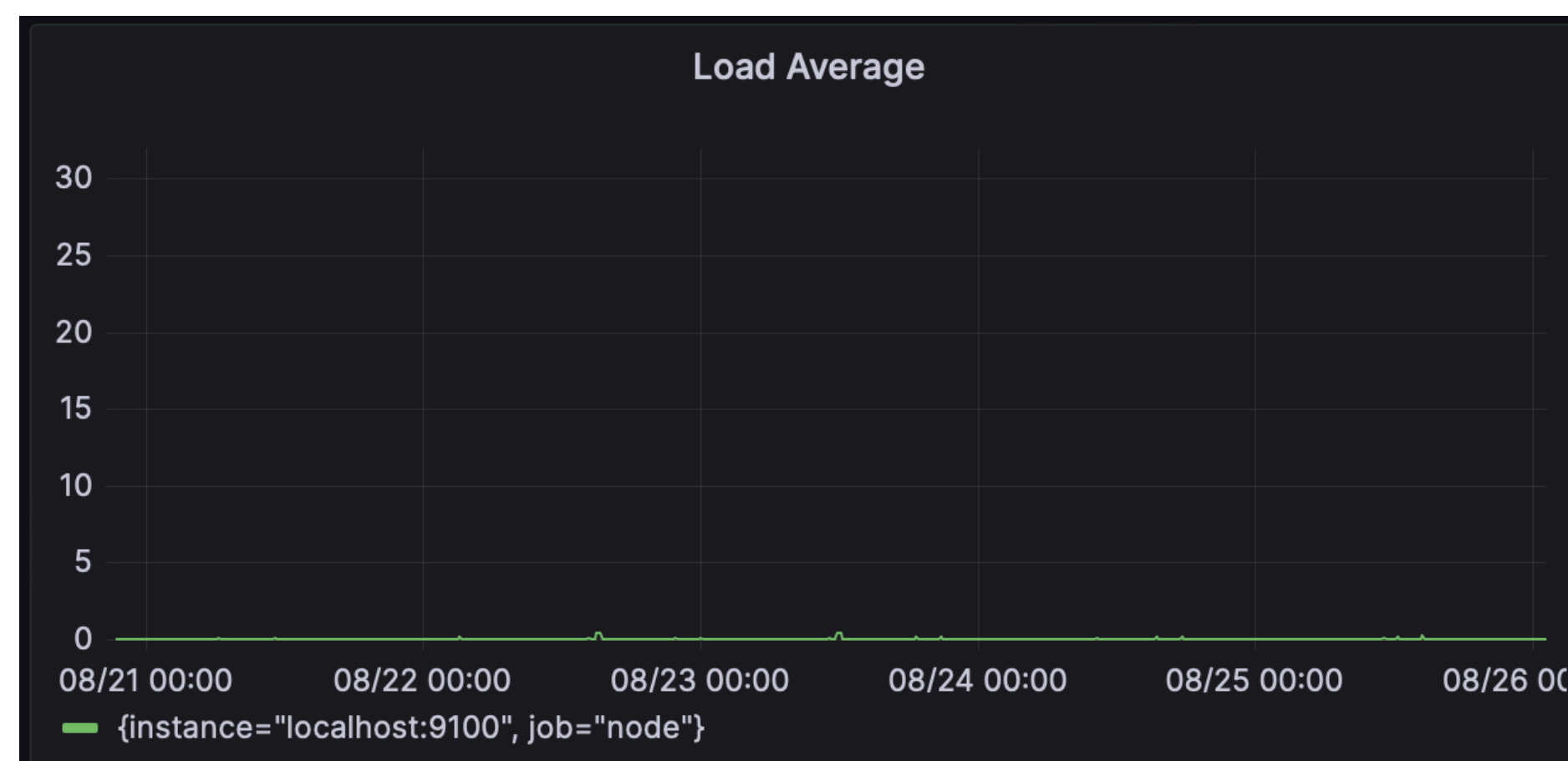
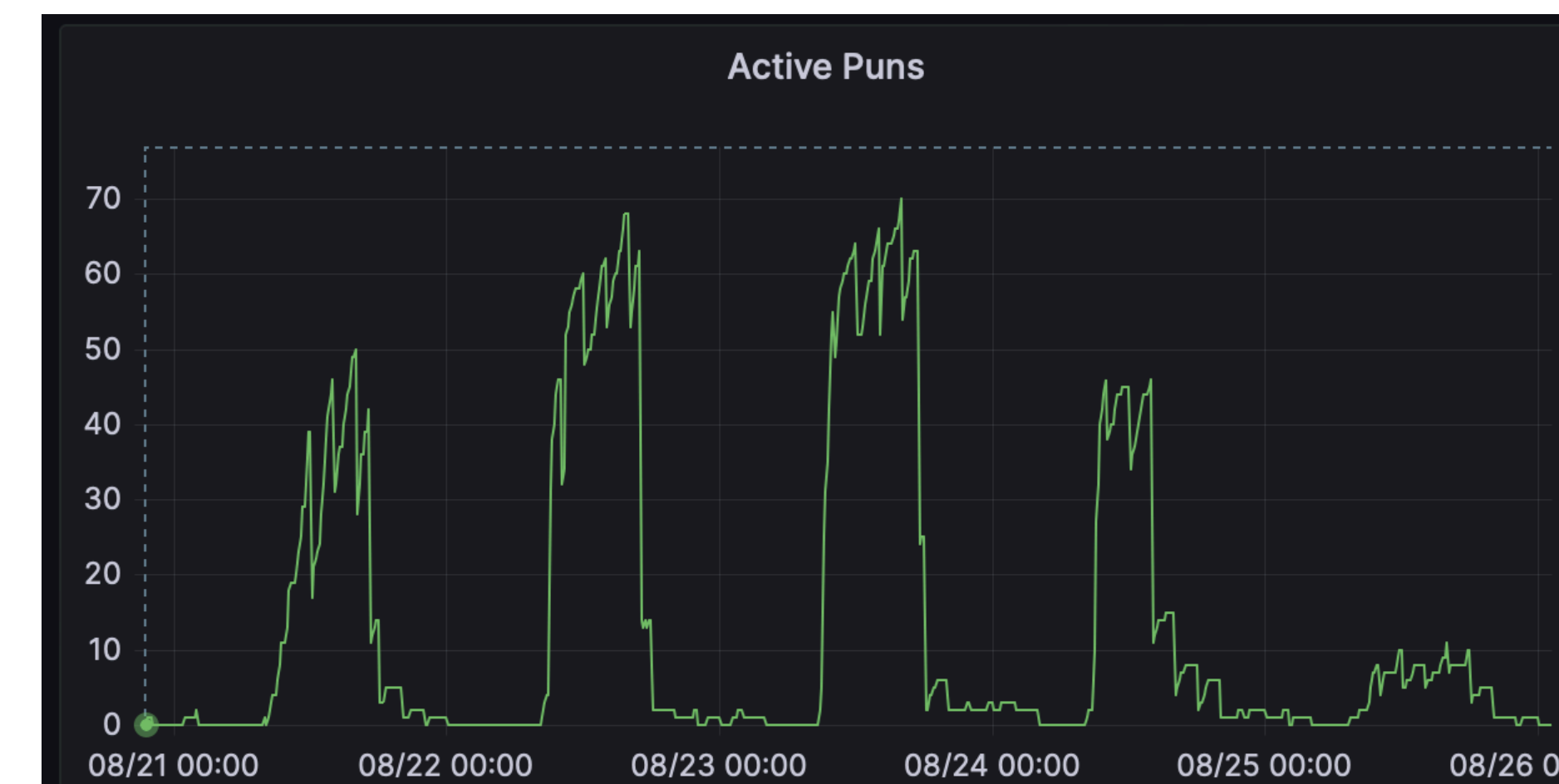
- Batch Jobs (Open Composerから投入)

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

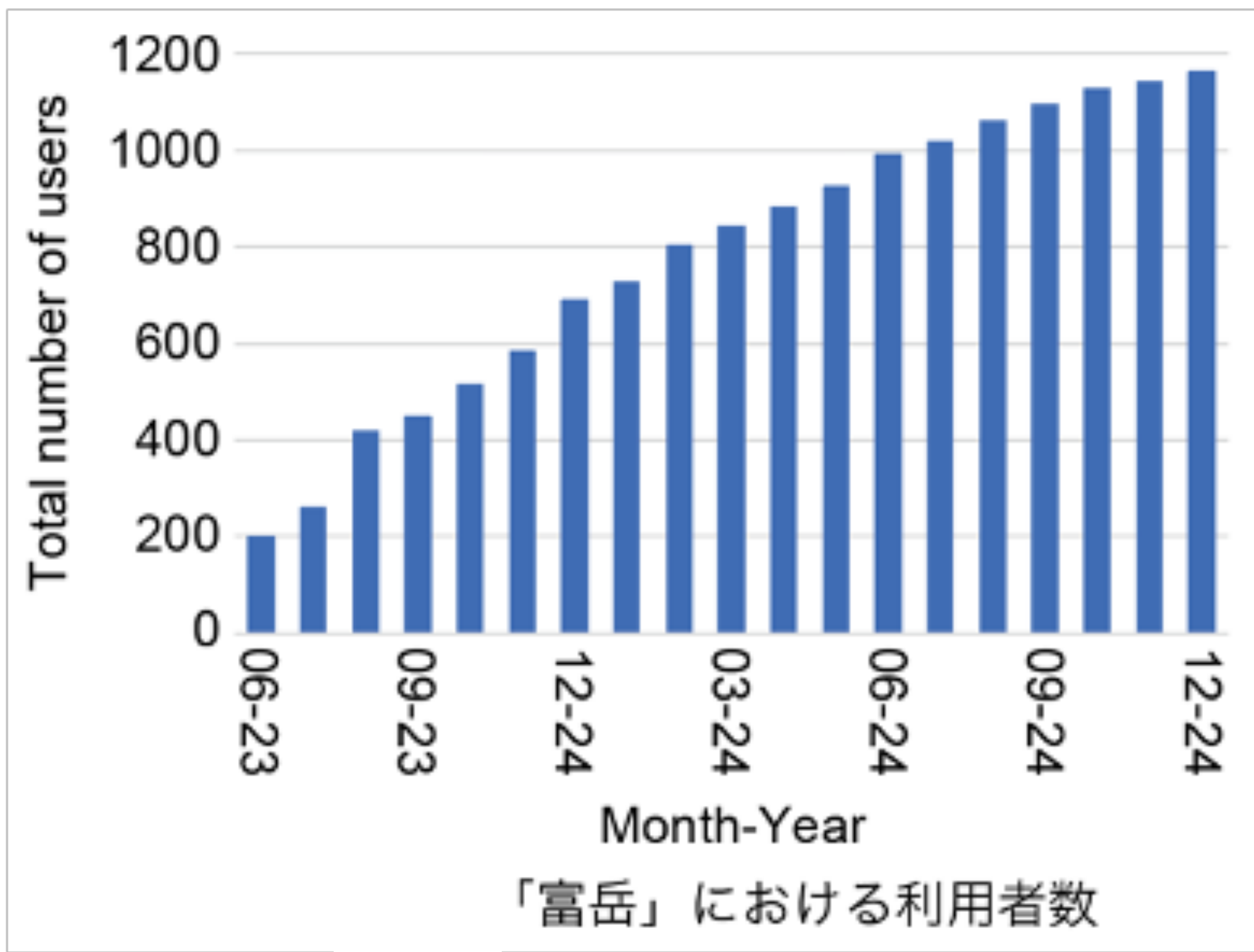
デモ

負荷について

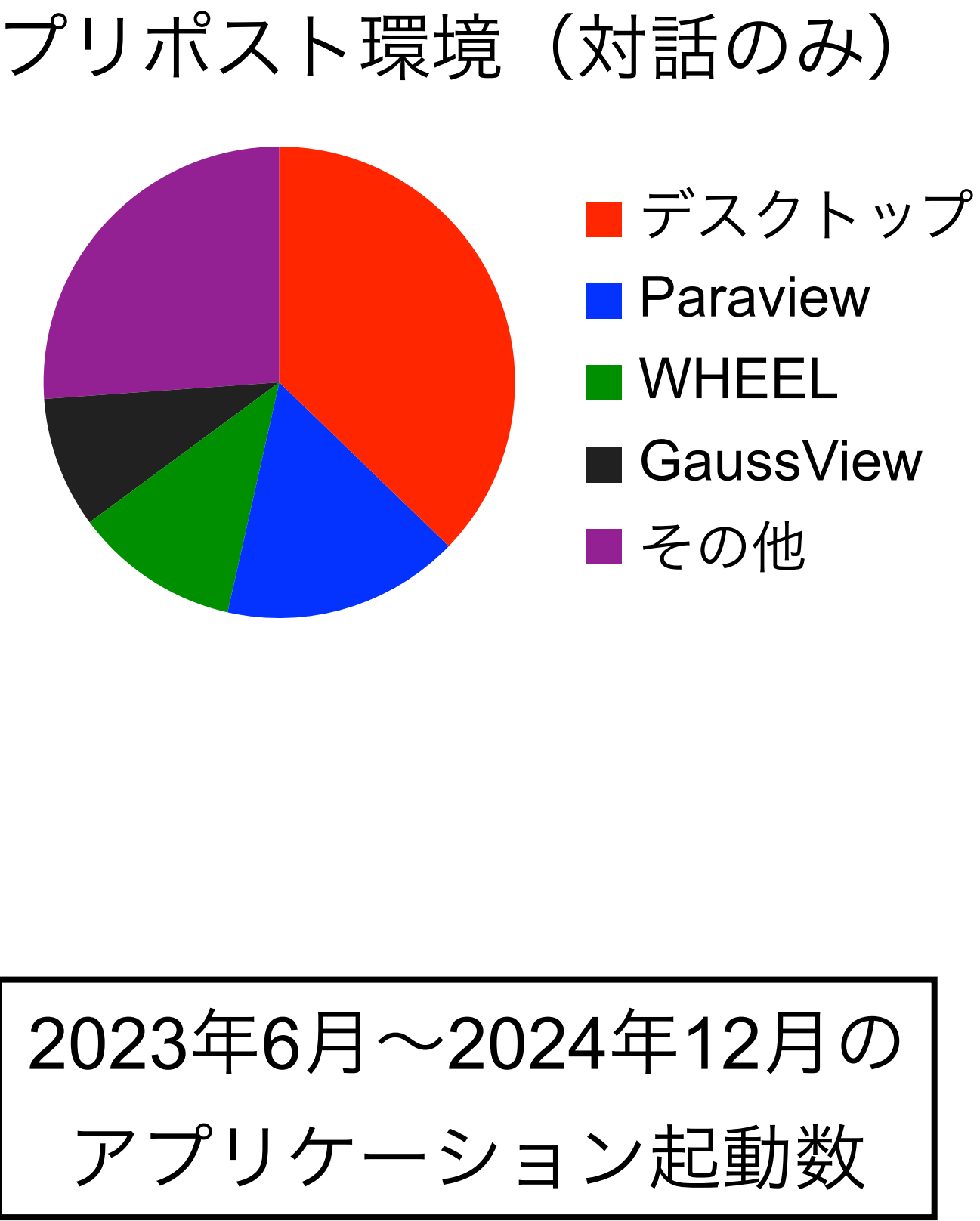
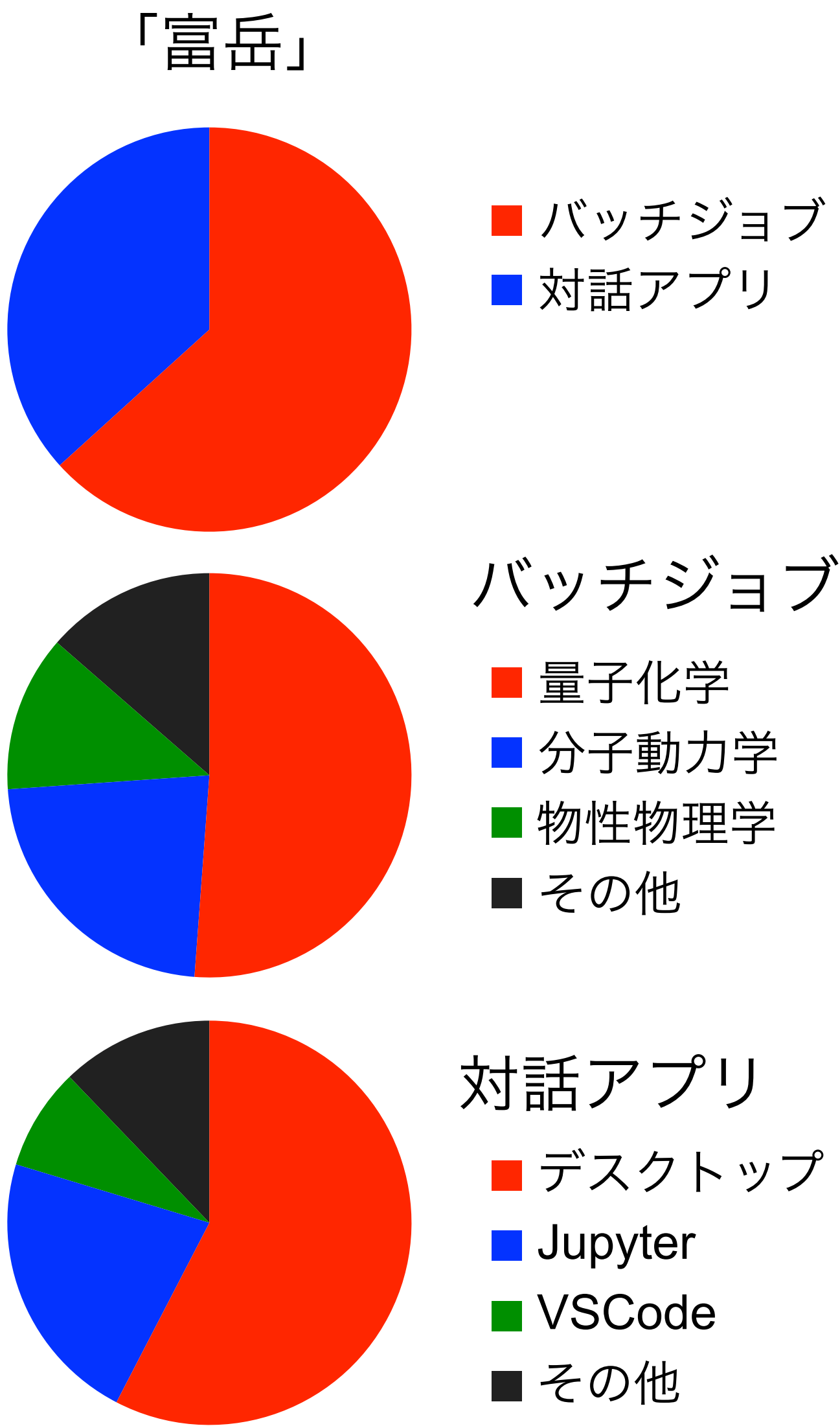
- 2023年8月21日～25日に、高校生を対象としたスーパーコンピューティングコンテストを「富岳」を使って開催
- 2022年まではSSH + ターミナルを使っていたが、2023年からはOpen OnDemandを採用
- チュートリアルで、PuTTYやWinSCPの利用、鍵の生成や登録の説明がなくなった。説明がOS非依存になった。
- 最大70名の同時利用だったが、問題なかった
- Intel Xeon Gold 6338 x 2、256GB、100GbEのサーバ



運用状況



現在の富岳のアカウント数は4900くらい。
上のグラフは、累積数なので、削除済のユーザも含まれている



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を「富岳」で運用
 - Fujitsu TCSへの対応、ダッシュボードの変更、様々なPassenger Applicationの開発
- 今後の予定（上はなるべく今月中）
 - 「富岳」のデフォルトのログイン方法をSSHからOpen OnDemandに変更
 - スタートアップマニュアルからSSHを削除し、Open OnDemandの章を追加
 - 現在は1台のWebサーバで運用しているので、Open OnDemandサーバの冗長化を行う
 - バーチャル富岳（「富岳」以外のスパコンやクラウド上に、「富岳」と同等のソフトウェア環境を再現したシステム）への対応