

## OpenOnDemandの対話的な開発環境の利用(Jupyter, VS Code)

### 目次

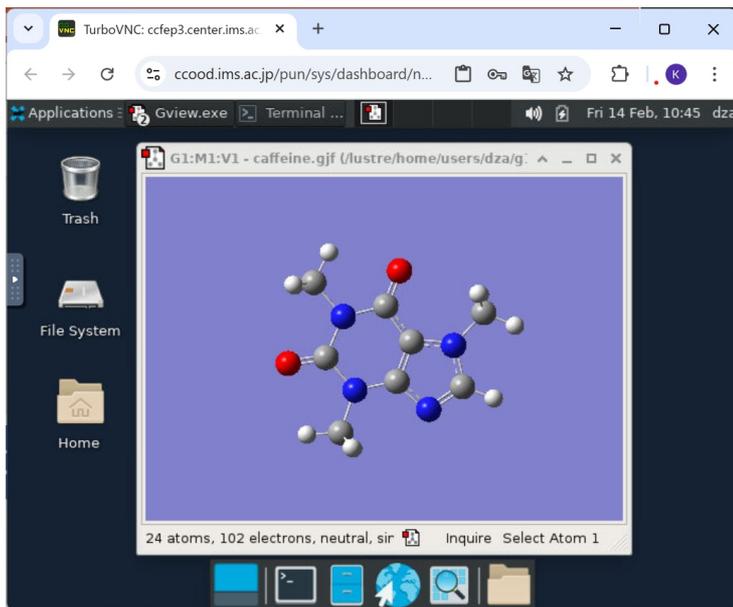
- デスクトップ環境
- Jupyter Notebook
- VS Code (Code Server)

### デスクトップ環境

OpenOnDemandのデスクトップ環境では、グラフィカルなインターフェース(GUI)を通じてアプリケーションを利用できます。

主な用途：

- GaussViewなどのGUIベースのソフトウェアの利用
- ファイルマネージャーでの直感的なファイル操作



### セッションの起動方法

#### Desktop

This app will launch an interactive desktop on one or more compute nodes. You will have full access to the resources these nodes provide. This is analogous to an interactive batch job.

Number of hours

Launch

\* The Desktop session data for this session can be accessed under the [data root directory](#).

Desktop (launched-by-ondemand-af99baad-e406-49a7-9f58-7ffd71d6f12a@ccfep1)

1 node | 1 core | Running

Host: [>\\_ ccfep1.center.ims.ac.jp](#)

Delete

Created at: 2025-01-31 17:14:41 JST

Time Used: less than 1 minute

Session ID: 04911667-409a-4f2b-8277-7396dd9be04e

Compression

0 (low) to 9 (high)

Image Quality

0 (low) to 9 (high)

Launch Desktop

View Only (Share-able Link)

1. ダッシュボードから「Desktop」アイコンをクリック
2. セッション設定画面で以下を設定：
  - Number of hours: 利用時間を指定
3. [Launch]ボタンをクリック
4. セッションの準備が完了したら、[Launch Desktop]ボタンをクリック

### セッションの管理

- 実行中のデスクトップセッションは、ダッシュボードの「My Interactive Sessions」から確認できます
- セッションを終了するには、「My Interactive Sessions」から該当するセッションの「Delete」をクリックしてください。

## 注意事項

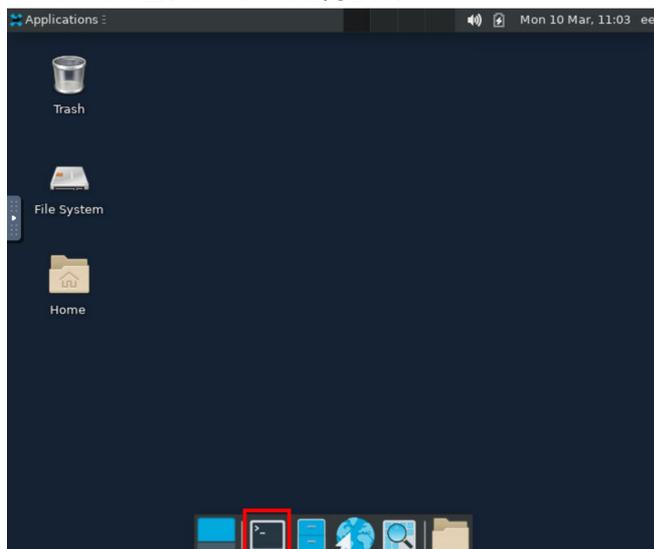
- ブラウザのタブを誤って閉じた場合でも、セッションは維持されています。「Launch Desktop」から再接続可能です
- 指定した利用時間を過ぎると、セッションは自動的に終了します
- リソースの効率的な利用のため、作業終了後は速やかにセッションを終了してください

## GaussViewの使い方

OpenOnDemandのデスクトップ環境を使用してGaussViewを起動することができます。

### GaussViewの起動方法

1. OpenOnDemandのデスクトップ環境にログインします
2. デスクトップ上のターミナルを開きます



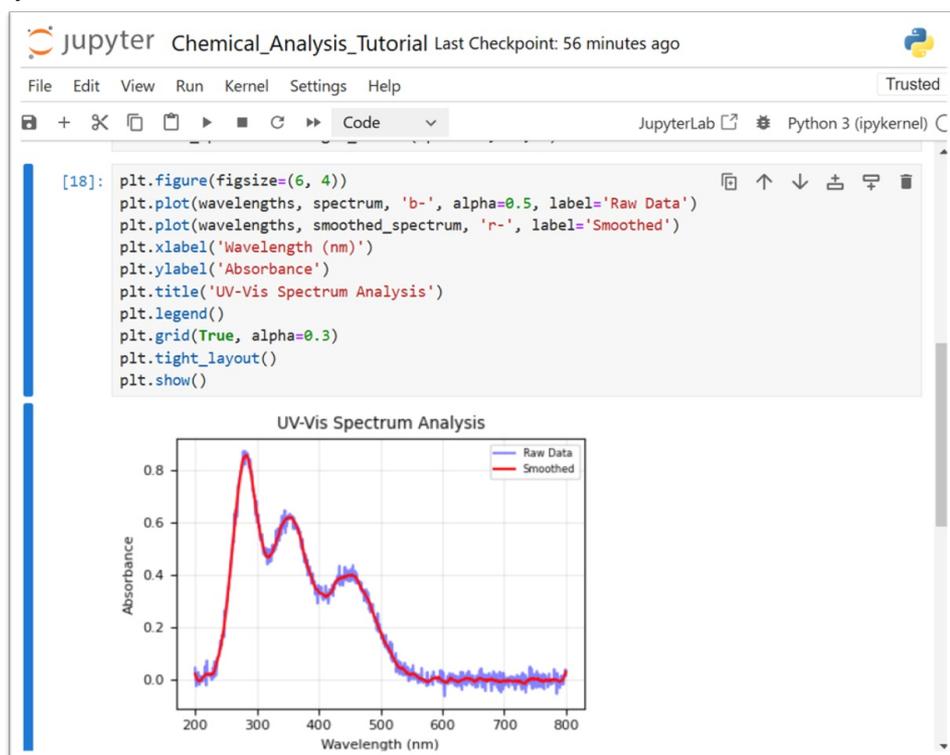
3. 以下のコマンドを入力して、GaussViewを起動します：

```
gview6
```

4. GaussViewのメインウィンドウが表示されます

## Jupyter Notebook

Jupyter Notebookは、プログラムコードと実行結果、説明文を1つのノートブック形式でまとめることができる対話的な開発環境です。Pythonをはじめとする様々なプログラミング言語に対応しています。



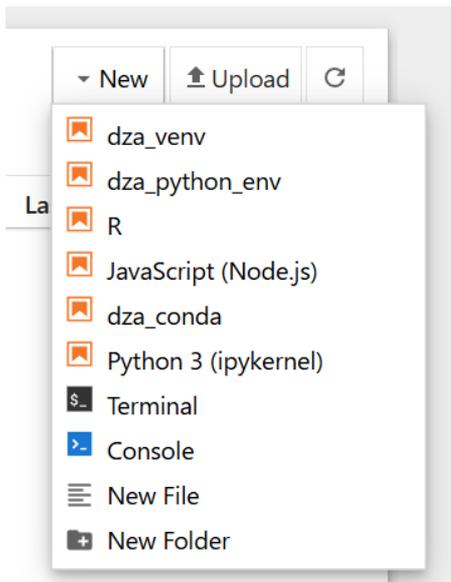
## 基本的な使い方

### ■ セッションの開始

1. OpenOnDemandのダッシュボードから「Jupyter Notebook」アイコンをクリック
2. 設定画面で以下の項目を指定：
  - Number of hours: セッション時間（時間単位）
3. 「Launch」ボタンをクリック
4. 準備完了後、「Connect to Jupyter」ボタンをクリック
  - 新しいタブでJupyter環境が開きます

### ■ 新規ノートブックの作成

1. 画面右上の「New」ボタンをクリック
2. プログラミング言語・実行環境の選択
  - 表示される一覧から利用したい環境を選択します
  - デフォルトは「Python3 (ipykernel)」: /apl/conda/20240305 のPython 3.10環境



※作成後でも画面右上のメニューから別の実行環境に切り替えることができます。

補足：ここで選択する実行環境のことを「カーネル」と呼びます。カスタマイズした環境の追加方法については、後述の「Python環境のカスタマイズ」セクションで説明します。

### ■ ノートブックの基本操作

#### セルについて

ノートブックは「セル」と呼ばれるブロックの集まりで構成されています。各セルには以下の種類があります：

- コード：プログラムを書き、実行するための領域
- マークダウン：説明文を書くための領域（Markdown形式で書式設定可能）
- Raw：書式設定なしの純粋なテキスト用の領域

#### 基本的な操作方法

##### セルの操作：

- 新しいセルの追加: 画面上部の [ + ] ボタン
- セルの種類の変更: ツールバーのドロップダウンで「Code」、「Markdown」など選択
- セルの実行: Shift + Enterキー（または実行ボタン▶）
  - コード：プログラムが実行され、結果が表示されます
  - マークダウン：書式が適用された文章が表示されます
- セルの選択：セルをクリック（青枠が表示されます）

##### その他の操作：

- ファイルの保存：Ctrl + S または画面上部の保存アイコン
- セルの削除：セルを選択して D キーを2回押す
- 実行順序の確認: セルの左側に表示される番号で確認できます

## Python環境のカスタマイズ

## ■ デフォルト環境

デフォルトで `/apl/conda/20240305` と同じPython環境 (Python 3.10) が利用可能です。

\* 当環境にインストールされているPython/パッケージがそのまま使用できます

## ■ カスタム環境の追加手順

独自のPython環境をJupyterで使いたい場合は、シェルにて以下の手順で設定します：

Conda環境を使用する場合：

```
# 環境の作成と有効化
conda create -n myenv python=3.10 # 任意の環境名とPythonバージョン
conda activate myenv

# 必要なパッケージのインストール
conda install ipykernel # Jupyter用カーネル
conda install <必要なパッケージ名>

# Jupyterのカーネルとして登録
python -m ipykernel install --user --name myenv --display-name "My Python Env"
```

venv環境を使用する場合：

```
# 環境の有効化
python -m venv myenv
source env_name/bin/activate

# ipykernelのインストール
pip install ipykernel
pip install <必要なパッケージ名>

# Jupyterのカーネルとして登録
python -m ipykernel install --user --name myenv --display-name "My Python Env"
```

登録が完了すると、追加したカーネルが選択可能になります。

## 注意事項

- ブラウザのタブを誤って閉じた場合でも、「My Interactive Sessions」から再接続可能です
- 指定した利用時間を過ぎると、セッションは自動的に終了します

## VS Code (Code Server)

VS Code は多機能なコードエディタで、プログラミングやテキスト編集を効率的に行うことができます。ファイルの編集、プログラムの実行、デバッグなど、開発に必要な機能が統合されています。

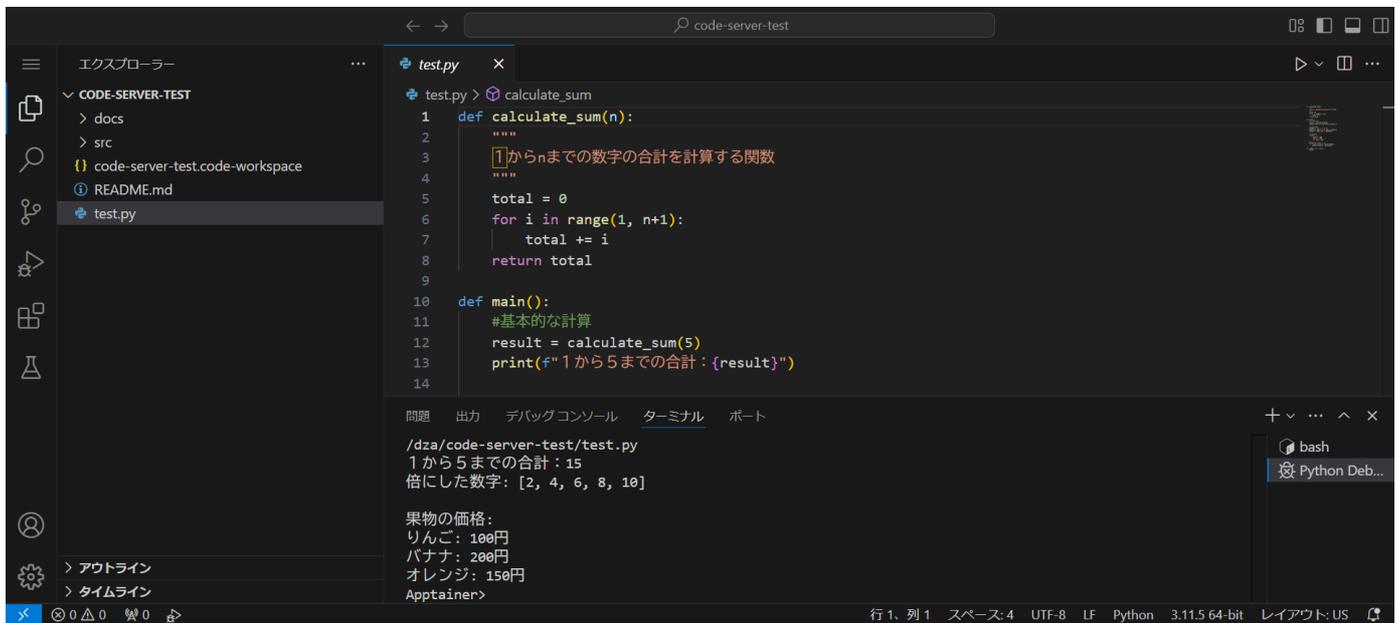
## 基本的な使い方

### ■ セッションの開始

1. OpenOnDemandのダッシュボードから「Code Server」アイコンをクリック
2. 設定画面で以下の項目を指定：
  - Number of hours：セッション時間を指定します (時間単位)
  - Working Directory：作業ディレクトリを指定します
    - \* デフォルトではホームディレクトリ (\$HOME)
    - \* 「Select Path」ボタンで別のディレクトリを選択可能
  - Codeserver Version：使用するバージョンを選択
    - \* 特別な理由がない限り、最新版 (4.8) を推奨
3. 「Launch」ボタンをクリック
4. 準備完了後、「Connect to VS Code」ボタンをクリック→新しいタブでVS Code環境が開きます

### ■ 基本的な画面構成

- 左側のサイドバー：ファイル一覧や拡張機能などの各種機能にアクセス
- メインエディタ：ファイルの編集領域
- 下部パネル：ターミナル、出力、デバッグ情報などを表示



## ■ ファイル操作

- ファイルを開く：
  - サイドバーのファイルエクスプローラーからファイルをクリック
  - または Ctrl + O で開くファイルを選択
- ファイルの保存：Ctrl + S
- 新規ファイル作成：Ctrl + K N

## ■ ターミナルの利用

ターミナルを利用してコマンドライン操作が可能です：

- ターミナルを開く：
  - メニューから [Terminal] → [New Terminal] を選択
  - または Ctrl + ` (バックウオート)
- 複数のターミナル：
  - 新規ターミナル：[+]ボタン
  - ターミナルの分割：[Split Terminal]アイコン
  - ターミナルの切り替え：ターミナルパネル右のメニューを使用

## ■ 拡張機能

VS Codeでは、必要に応じて拡張機能をインストールできます。

インストールした拡張機能は、セッションを終了した後も保持されます。

1. サイドバーにある Extensions アイコン（四角が4つ重なったアイコン）をクリック
2. 検索バーに、必要な拡張機能の名前やキーワードを入力
3. 目的の拡張機能を見つけたら、[Install]をクリック

## ■ 便利な機能

- コマンドパレット：Ctrl + Shift + P
  - VS Codeの全機能に素早くアクセス
- ファイル内検索：Ctrl + F
- プロジェクト内検索：Ctrl + Shift + F

## 注意事項

- ブラウザのタブを誤って閉じた場合でも、「My Interactive Sessions」から再接続可能です
- 指定した利用時間を過ぎると、セッションは自動的に終了します