HPCクラスタにおけるバッチジョブ投入のための Webアプリケーション Open Composerの開発

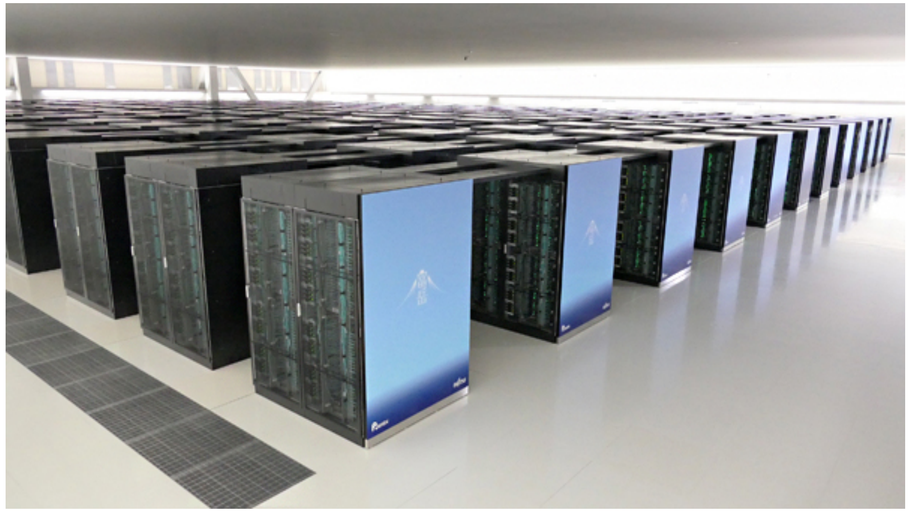
中尾 昌広、山本 啓二（理化学研究所 計算科学研究センター）

情報処理学会 第197回HPC研究発表会、2024年12月

研究背景（1/2）

- HPCクラスタを利用するまでの学習コストが非常に大きい
  - ターミナルソフトウェアのインストールと設定
  - SSH鍵ペアの生成と公開鍵の登録
  - シェルなどのコマンドラインインタフェースの学習
  - バッチジョブや対話ジョブを投入するためのジョブスケジューラの学習（Slurm、PBS、Fujitsu_TCSなど）
    - バッチジョブとは非対話的に実行される計算タスク
    - 色々なジョブスケジューラがあり、各指示文の記法やジョブの投入方法などの使い方は異なる

異なるHPCクラスタを使うたびに再学習が必要



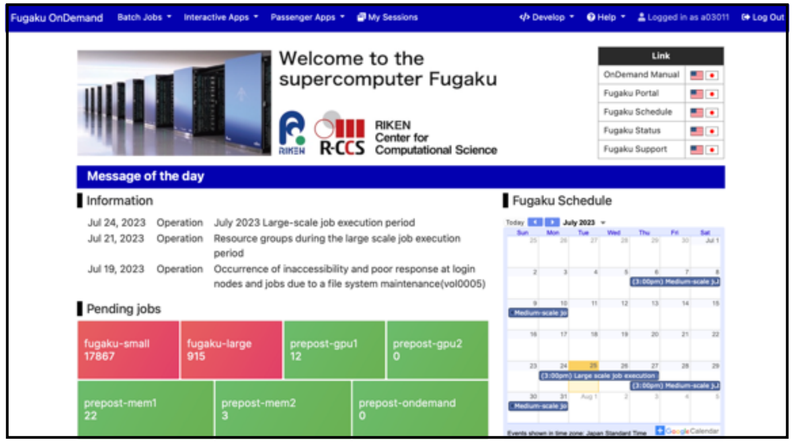
スーパーコンピュータ「富岳」

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"  // キュー
#PJM -L "node=1"  // ノード数
#PJM -L "elapse=1:00:00" // 時間
mpiexec ./a.out
```

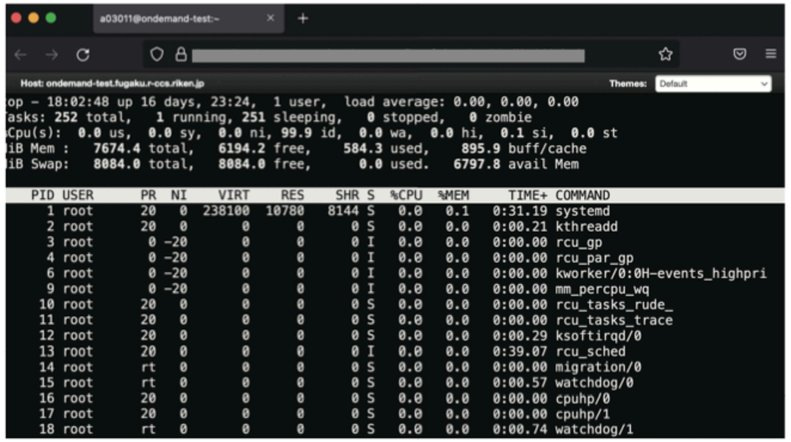
Fujitsu_TCSのバッチジョブスクリプトの例

研究背景（2/2）

- HPCクラスタ用WebポータルOpen OnDemandに着目
  - オハイオ州立大学が開発したオープンソースソフトウェア
  - 理研の富岳、産総研のABCI、東京科学大のTsubame、九大の玄界、東大のMiyabiなど。世界的にも広く利用
  - SSHの代わりにWebブラウザからHPCクラスタを利用可能
    - GUIが統一化されているので、再学習のコストが小さい
  - アプリケーションプラットフォームとしての機能があり、他のWebアプリケーションを動作させる仕組みを有している
  - 可視化ソフトウェアなどのGUIを伴う対話ジョブの実行、ファイル操作、データ送受信、ターミナル接続などを、Webブラウザから実行できる



富岳のOpen OnDemandのトップページ



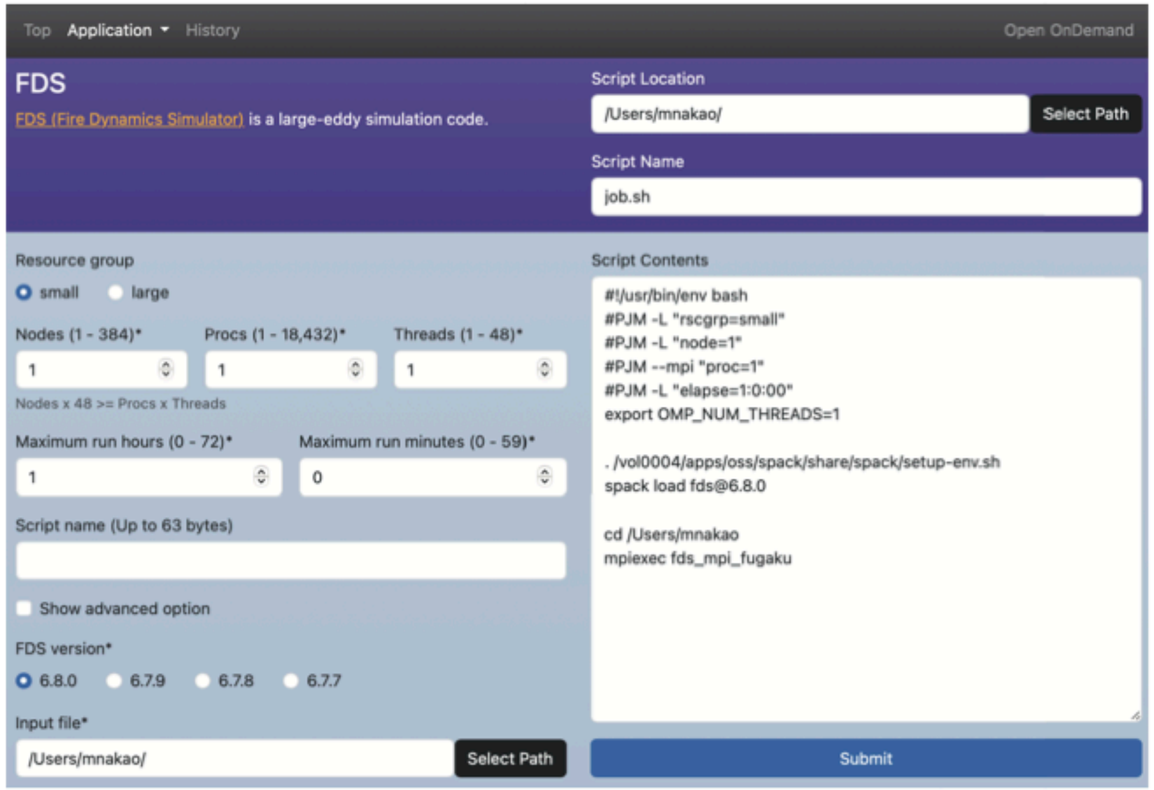
Webターミナル

HPCクラスタの主な利用用途であるバッチジョブの投入も行いたい

本発表の目的

- バッチジョブスクリプトの自動生成・投入可能なWebアプリケーションOpen Composerの開発
- オープンソースソフトウェア
- アプリケーション毎に用意されたWebフォームにパラメータを入力することでジョブスクリプトを生成する
- ジョブスケジューラに対する学習コストの削減とジョブスクリプトの書き間違いの頻度の削減
- ジョブ投入だけでなく、ジョブの削除や状態確認などを行う機能もある

https://github.com/RIKEN-RCCS/OpenComposer

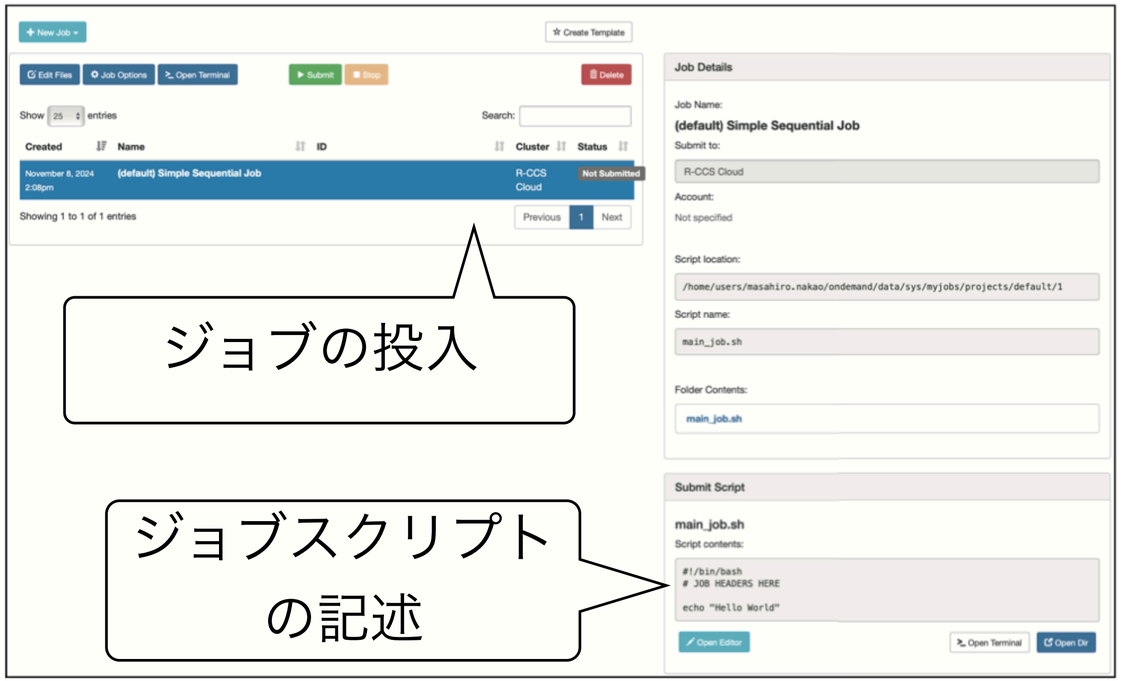


- Open ComposerはOpen OnDemand上で動作するWebアプリケーションであり、Open OnDemandが動作している環境ではデプロイが非常に簡単

もくじ

バッチジョブスクリプトの関連研究（1/3）

- Open OnDemandにプリインストールされているWebアプリケーションJob Composer
- GUIでバッチジョブの投入が可能
- Webブラウザ上でジョブスクリプトを手動で記述

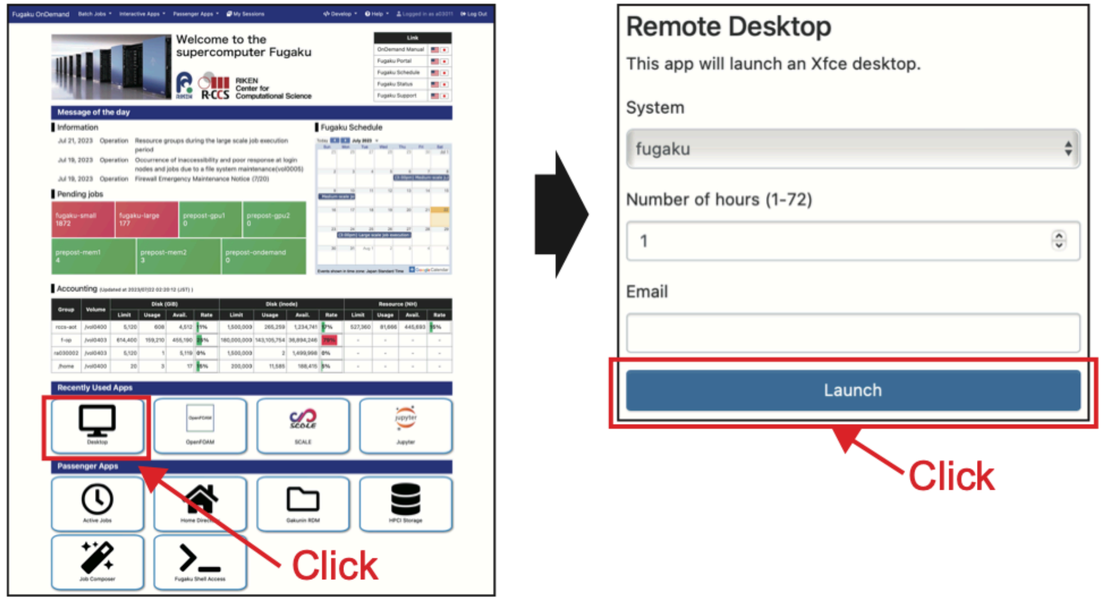


- 利点
  - ジョブスクリプトが編集できる
  - ジョブスクリプトの再利用が可能
- 欠点
  - ジョブスクリプトを指示文も含めて手動で書く必要があるため、学習コストが高く、書き間違いの可能性もある

バッチジョブスクリプトの関連研究（2/3）

- Open OnDemandの対話ジョブ実行のWebフォームの利用
- Webフォームは簡単なYAMLで記述できる
- Webフォームの入力内容とジョブスクリプトの
  テンプレートとを使ってジョブスクリプトを生成

富岳ではこの方式を利用して実アプリの
バッチジョブを投入するサービスを提供

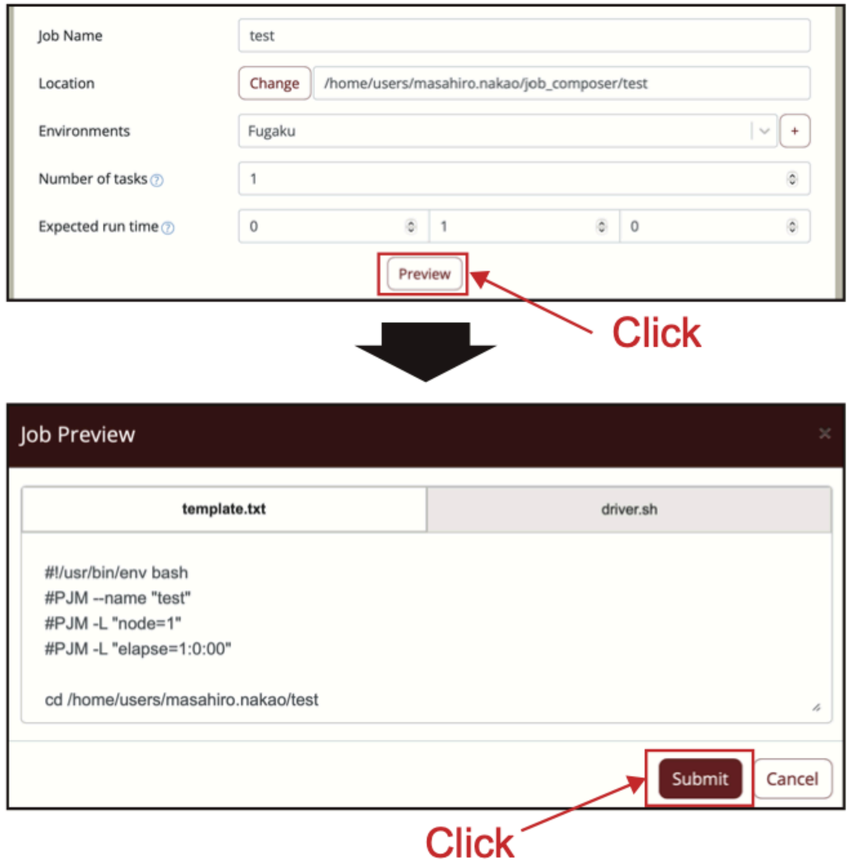


- 利点
  - ジョブスクリプトの自動生成
  - ジョブスクリプトの再利用が可能（v4.0から）
- 欠点
  - ジョブスクリプトが編集できない（投入前のジョブスクリプトの確認と編集ができない）

対話ジョブの仕組みを流用しているので、仕方がない

バッチジョブスクリプトの関連研究（3/3）

- Open OnDemand上で動作するWebアプリケーションDrona Composer
- テキサスA&M大学が開発したオープンソースソフトウェア
- アプリケーション毎に用意されたWebフォームにパラメータを入力すると、編集可能なジョブスクリプトが生成され、編集後にジョブを投入する。WebフォームはJSONで作成



- 利点
  - ジョブスクリプトの自動生成
  - ジョブスクリプトが編集できる
- 欠点
  - ジョブスクリプトの再利用ができない

関連研究のまとめ

	Job Composer	Open OnDemandの 対話ジョブの仕組み	Drona Composer
自動生成	Not Supported	Supported	Supported
編集	Supported	Not Supported	Supported
再利用	Supported	Supported	Not Supported

Open Composerの設計指針

	Job Composer	Open OnDemandの 対話ジョブの仕組み	Drona Composer	Open Composer
自動生成	Not Supported	Supported	Supported	Supported
編集	Supported	Not Supported	Supported	Supported
再利用	Supported	Supported	Not Supported	Supported

これを目指す

もくじ

- 研究背景
- バッチジョブスクリプトの関連研究
- Open Composerの開発
- Open Composerの利用方法
- まとめと今後の課題

Open Composerの開発方針と開発内容

- Open OnDemand上で動くように開発する
  - Open OnDemandが動作している環境ではデプロイが非常に簡単
  - Open OnDemandの認証機能やデータ転送機能などが利用可能（開発コストの削減）
- 以下の機能を開発する
  - バッチジョブスクリプトの自動生成
  - バッチジョブの投入前に編集を可能にする機能
  - バッチジョブスクリプトの再利用
  - バッチジョブスクリプトのエラーチェック機能
  - バッチジョブの投入・削除・状態確認を行う機能
  - 投入したジョブの一覧表示
  - ジョブスケジューラ間の差異を隠蔽する統一的なインターフェース
  - 様々なアプリケーション用のバッチジョブスクリプトを生成できる柔軟な記法

Open Composerの実装

- バックエンド
  - Open OnDemandはRuby on Railsで作成されているため、Open OnDemandがインストールされた環境では必ずRubyが利用できる
  - オープンソースのRubyフレームワークSinatra（https://sinatrarb.com/）を用いた
- フロントエンド
  - レスポンシブなWebページを作成できるBootstrap（CSS + JavaScript）
  - ジョブスクリプトをリアルタイムで更新するためにJavaScriptとHTMLを用いた
    （外部ライブラリとの依存関係は少なくしたかったので、外部ライブラリは不使用）
- Open Composerの実装に要した各言語の行数は下記の通り（2024年11月）
  - Ruby：1,269 行
  - JavaScript ：737行
  - ERB（Embedded Ruby）を含むHTML：291行

もくじ

Open Composerのインストール方法

- 管理者の場合

```
# cd /var/www/ood/apps/sys/
# git clone https://github.com/RIKEN-RCCS/OpenComposer.git
```

- 一般ユーザの場合（管理者権限でApp Developmentの機能の有効化が必要）

```
$ cd ${HOME}/ondemand/dev
$ git clone https://github.com/RIKEN-RCCS/OpenComposer.git
```

一般ユーザの場合は、Open OnDemand上からGUIで行う方法もある

Open ComposerのWebフォームの作成方法

- YAMLの定義ファイルを作成する（Open OnDemandの対話ジョブのWebフォームを参考）
- YAML + ERBも可能なので、複数のアプリケーションで定義を共通化可能
- 作成できる入力フォームの種類は下記の通り
  - number：数値を入力
  - text：テキストを入力
  - email：email アドレスを入力する
  - select：セレクトボックスから項目を1 つ選択
  - multi_select：セレクトボックスから項目を複数選択
  - radio：ラジオボタンから項目を1 つ選択
  - checkbox：チェックボックスから項目を複数選択
  - path：サーバ上のファイルやディレクトリのパスを選択

適用した実アプリケーション

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

HPCIのページにある「富岳」で利用可能な実アプリケーションを参考

https://www.hpci-office.jp/for_users/appli_software

公開はまだ

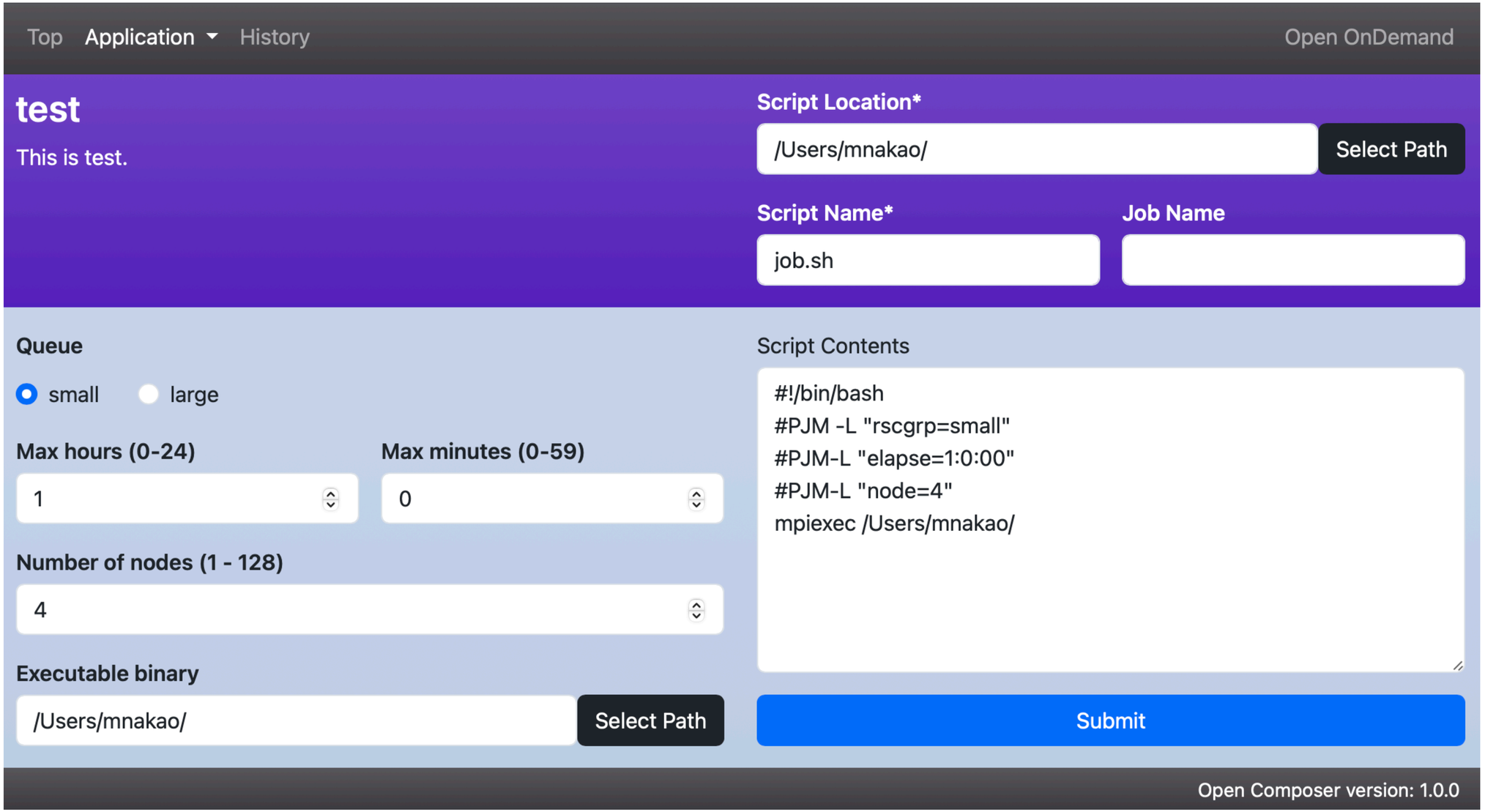
Open ComposerのWebフォームの作成方法

```
form:
  queue:
    widget: radio
    label: Queue
    value: small
    direction: horizontal
    options:
      - [small]
      - [large]
  time:
    widget: number
    size: 2
    label: [Max hours (0-24), Max minutes (0-59)]
    value: [ 1, 0]
    min: [ 0, 0]
    max: [24, 59]
    step: [ 1, 1]
  nodes:
    widget: number
    label: Number of nodes (1 - 128)
    value: 4
    min: 1
    max: 128
    step: 1
  binary:
    widget: path
    label: Executable binary

script: |
  #!/bin/bash
  #PJM -L "rscgrp=#{queue}"
  #PJM -L "elapse=#{time_1}:#{time_2}:00"
  #PJM -L "node=#{nodes}"
  mpiexec #{binary}
```

動的にラベルや数値の最大値などを変える機能や、入力内容のチェック機能もある

Open ComposerのWebフォームの作成方法



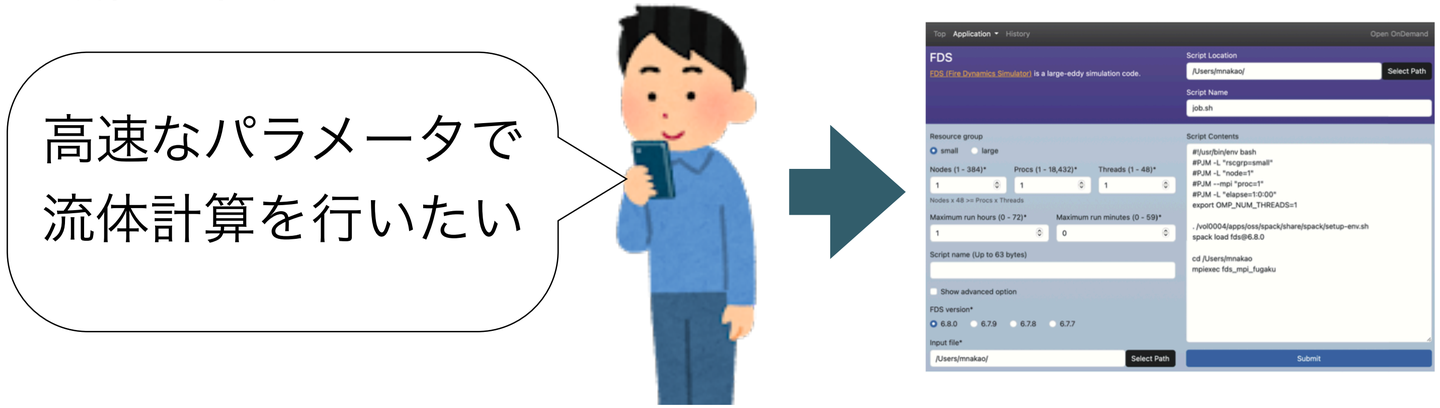
もくじ

- 研究背景
- バッチジョブスクリプトの関連研究
- Open Composerの開発
- Open Composerの利用方法
- まとめと今後の課題

まとめと今後の課題

- まとめ
  - バッチジョブスクリプトの自動生成・投入可能なWebアプリケーションOpen Composerの開発
  - 学習コストの削減とジョブスクリプトの書き間違いの頻度の削減

- 今後の課題
  - 様々なジョブスケジューラのサポート（現在はFujitsu_TCSとSlurmのみ）
  - 可視化ソフトウェアとの連携（ジョブ一覧に、可視化ソフトウェアを起動させるアイコンも表示）
  - AIサポート機能の開発



アプリケーションの自動選択と
パラメータの自動入力