



Open OnDemand上で動作するバッチジョブ投入ツール Open Composerの紹介

中尾昌広（理化学研究所 計算科学研究センター）

本発表の目的

2024年12月HPC研究発表会@沖縄

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（理研）

- 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の紹介
- 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
- 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簡単（Fujitsu_TCS, Slurm, PBSに対応）

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

The screenshot shows the Open Composer web interface for configuring an FDS (Fire Dynamics Simulator) job. The interface is divided into several sections:

- Top:** Navigation tabs for "Top", "Application", and "History". A "Open OnDemand" button is in the top right.
- Application Header:** "FDS" with a description: "FDS (Fire Dynamics Simulator) is a large-eddy simulation code."
- Script Location:** A text input field containing "/Users/mnakao/" and a "Select Path" button.
- Script Name:** A text input field containing "job.sh".
- Resource group:** Radio buttons for "small" (selected) and "large".
- Nodes (1 - 384)*:** A numeric input field with "1" and a spinner.
- Procs (1 - 18,432)*:** A numeric input field with "1" and a spinner.
- Threads (1 - 48)*:** A numeric input field with "1" and a spinner.
- Nodes x 48 >= Procs x Threads:** A constraint label.
- Maximum run hours (0 - 72)*:** A numeric input field with "1" and a spinner.
- Maximum run minutes (0 - 59)*:** A numeric input field with "0" and a spinner.
- Script name (Up to 63 bytes):** An empty text input field.
- Show advanced option:** A checkbox that is currently unchecked.
- FDS version*:** Radio buttons for "6.8.0" (selected), "6.7.9", "6.7.8", and "6.7.7".
- Input file*:** A text input field containing "/Users/mnakao/" and a "Select Path" button.
- Script Contents:** A text area containing the following script:

```
#!/usr/bin/env bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM --mpi "proc=1"
#PJM -L "elapsed=1:0:00"
export OMP_NUM_THREADS=1

./vol0004/apps/oss/spack/share/spack/setup-env.sh
spack load fds@6.8.0

cd /Users/mnakao
mpiexec fds_mpi_fugaku
```
- Submit:** A blue button at the bottom right.

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

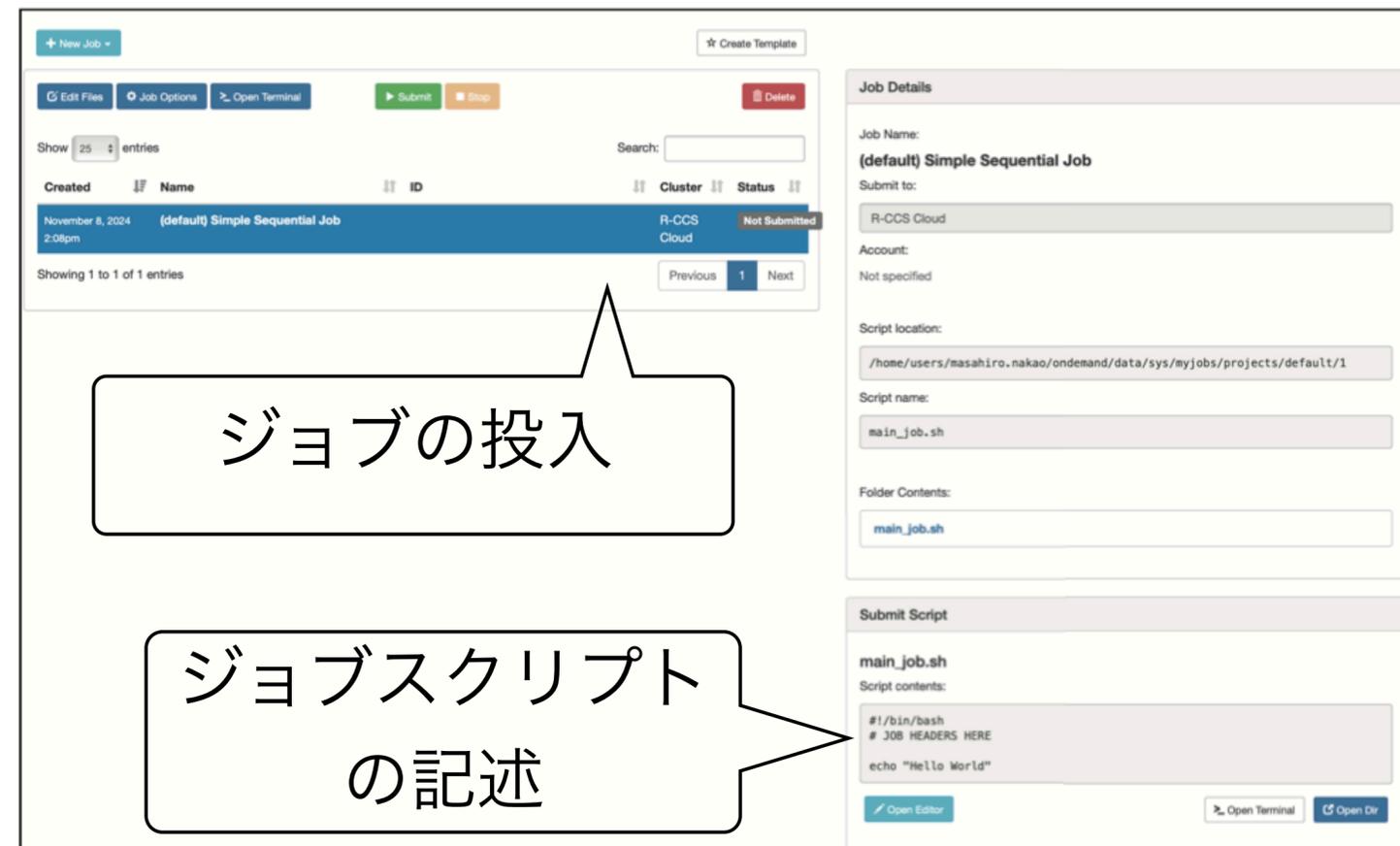
- 利点

- 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

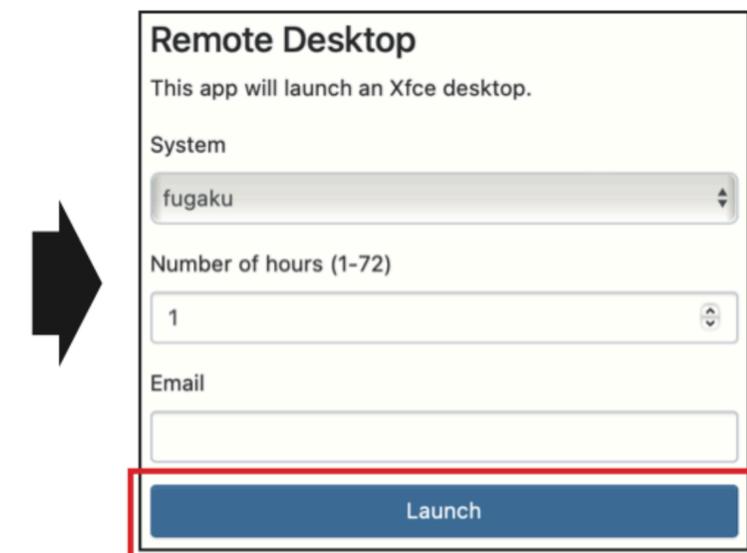
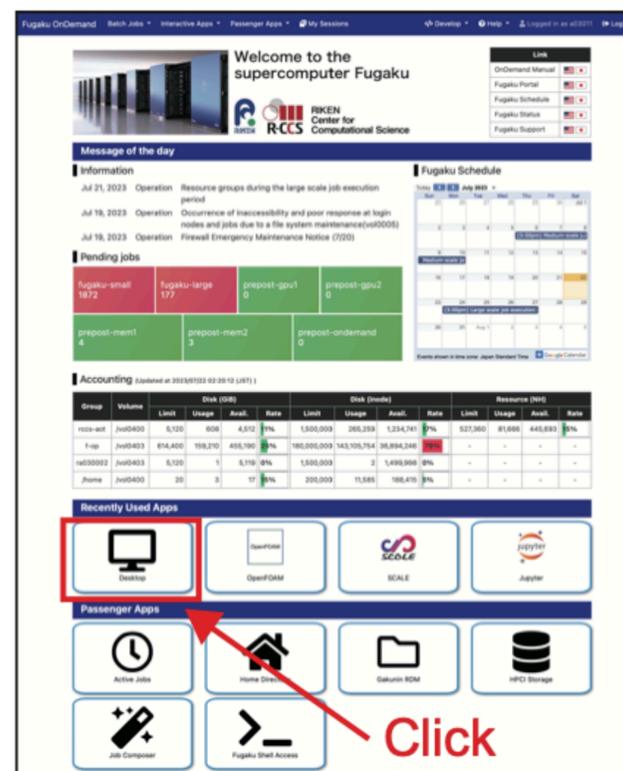


バッチジョブスクリプトの関連研究 (2/3)

- 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)



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

The screenshot shows a web form with the following fields: Job Name (text input: test), Location (text input: /home/users/masahiro.nakao/job_composer/test with a 'Change' button), Environments (dropdown menu: Fugaku), Number of tasks (spin box: 1), and Expected run time (spin box: 0 to 1 to 0). A 'Preview' button is highlighted with a red box and a red arrow labeled 'Click'.

Click

The screenshot shows a 'Job Preview' window with a file editor. The editor has two tabs: 'template.txt' and 'driver.sh'. The 'driver.sh' tab is active and contains the following script content:

```
#!/usr/bin/env bash
#PJM --name "test"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "elapse=1:0:00"

cd /home/users/masahiro.nakao/test
```

At the bottom of the window, there are 'Submit' and 'Cancel' buttons. The 'Submit' button is highlighted with a red box and a red arrow labeled 'Click'.

Click

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

<https://discourse.openondemand.org/t/proposal-to-add-a-function-to-check-job-scripts/>
の議論が元になっている



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 (2025年1月)
 - Ruby : 1,680 行
 - JavaScript : 938 行
 - ERB (Embedded Ruby) を含むHTML : 367 行

Open Composerのインストール方法

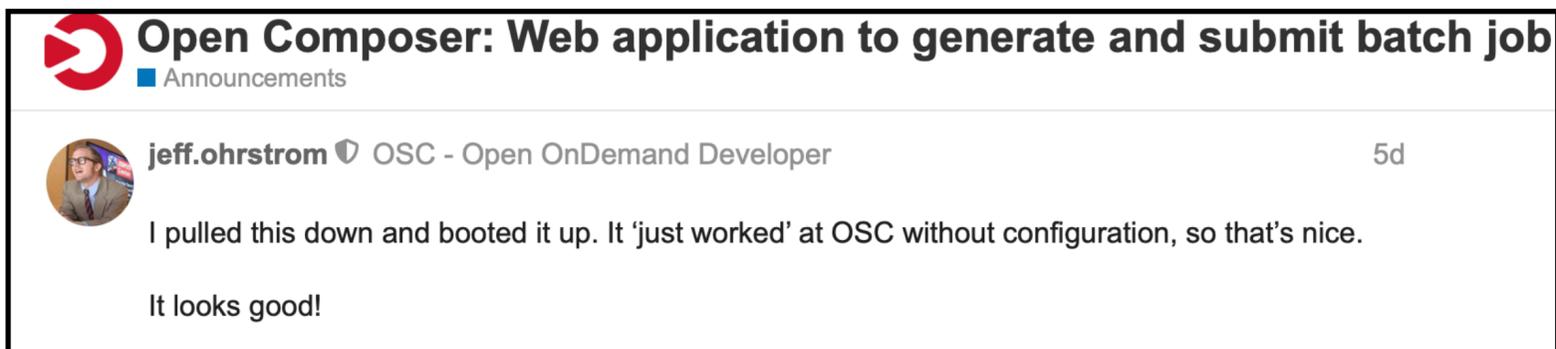
- 管理者の場合

```
# 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



開発者からも褒められた

<https://discourse.openondemand.org/t/open-composer-web-application-to-generate-and-submit-batch-job-scripts/3973/>

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

Top Application ▾ History Open OnDemand

test

This is test.

Script Location*

 Select Path

Script Name*

Job Name

Queue

small large

Max hours (0-24) **Max minutes (0-59)**

Number of nodes (1 - 128)

Executable binary

 Select Path

Script Contents

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM-L "elapse=1:0:00"
#PJM-L "node=4"
mpiexec /Users/mnakao/
```

Submit

Open Composer version: 1.0.0

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 "elapsed=#{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のトップページ

The screenshot shows the Open Composer application interface. At the top, there is a navigation bar with 'Top', 'Application', and 'History' links, and an 'Open OnDemand' button. Below this, the interface is divided into three main categories, each with a purple header bar:

- Climate**: Contains one application icon labeled 'SCALE'.
- Computer Aided Engineering**: Contains five application icons labeled 'FDS', 'FFVHC-ACE', 'FrontFlow', 'FrontISTR', and 'OpenFOAM'.
- Condensed Matter Physics**: Contains six application icons labeled 'AkaiKKR', 'ALAMODE', 'HΦ', 'mVMC', 'OpenMX', and 'PHASE/0'. Below these, two more icons are visible: 'Quantum Espresso' and 'SALMON'.

アプリケーションのアイコンが
カテゴリ毎に表示されます。
クリックするとアプリケーション
ページが開きます。

アプリケーションページ

Top Application History Open OnDemand

FDS

FDS (Fire Dynamics Simulator) is a large-eddy simulation code.

Script Location* Select Path

Script Name* Job Name

Resource group
 small large

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

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

Show advanced option

FDS version*
 6.8.0 6.7.9 6.7.8 6.7.7

Input file* Select Path

Script Contents

```
#!/usr/bin/env bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM --mpi "proc=1"
#PJM -L "elapse=1:0:00"
export OMP_NUM_THREADS=1

./vol0004/apps/oss/spack/share/spack/setup-env.sh
spack load fds@6.8.0

cd /home/rccs-aot/a03011
mpiexec fds_mpi_fugaku
```

Submit

Open Composer version: 1.0.0

ジョブスクリプトを生成します。
ページ左のWebフォームに値を入力すると、
ページ右のテキストエリアに
ジョブスクリプトが動的に生成されます。
テキストエリアは自由に編集できます。
テキストエリアの下の「Submit」ボタンを
クリックすると、ジョブスクリプトが
ジョブスケジューラに投入されます。

履歴ページ

Job ID	Application	Partition	Script Location	Script Name	Job Name	Submission at	Status
36448197	GENESIS	small-s5	/home/rccs-aot/a03011	job.sh	aa	2025/01/15 16:41:32	Completed
36428390	Fujitsu_TCS	small-s5	/home/rccs-aot/a03011	job.sh	job.sh	2025/01/14 20:39:27	Completed
36366012	GENESIS	small-s5	/home/rccs-aot/a03011	job.sh	job.sh	2025/01/11 15:02:09	Completed
36345839	GENESIS	small-s5	/home/rccs-aot/a03011	job.sh	job.sh	2025/01/10 15:39:57	Completed
36345567	GENESIS	small-s5	/home/rccs-aot/a03011	job.sh	job.sh	2025/01/10 15:20:36	Completed
36124379	FDS	small-s3	/home/rccs-aot/a03011/FDS/	job.sh	test	2024/12/26 17:44:34	Completed
36124193	FDS	small-s3	/home/rccs-aot/a03011/FDS/	job.sh	test	2024/12/26 17:16:17	Completed
36124182	FDS	small-s3	/home/rccs-aot/a03011/FDS/	job.sh	test	2024/12/26 17:13:04	Completed
36124115	FDS	small-s3	/home/rccs-aot/a03011/FDS/	job.sh	test	2024/12/26 17:05:26	Completed
36124100	FDS	small-s3	/home/rccs-aot/a03011/FDS/	job.sh	job.sh	2024/12/26 17:03:09	Completed

Showing 1 to 10 of 32 entries
Show 10 entries

Open Composer version: 1.1.0

これまでのジョブ履歴を閲覧できます。
ジョブの実行状況の確認や実行中のジョブの
停止も可能です。

Open OnDemandのHome Directoryや
Webターミナルが起動する

アプリケーションに関連付けられたアイコンをクリックすると、
Open OnDemandのアプリケーションが起動する（可視化アプリなど）

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
 - Grid Engineへの対応（現在は、Fujitsu_TCS, Slurm, PBSに対応）
 - プロジェクト管理機能の開発（+ ワークフローツールとの連携？）
 - AIサポート機能の開発

高速なパラメータで
流体計算を行いたい



The screenshot shows the Open Composer interface for FDS. It includes fields for Script Location, Script Name, Resource group (small/large), Nodes, Procs, Threads, Maximum run hours, Maximum run minutes, Script name, and Input file. The Script Contents field contains a shell script for running FDS with MPI and environment setup.

アプリケーションの自動選択と
パラメータの自動入力