
外部計算資源の利用について

リリース **0.2.0**

SIP-MI

2021 年 06 月 21 日

目次:

第 1 章	はじめに	1
第 2 章	概要	3
2.1	利用イメージ	3
2.2	SSH 方式と WebAPI 方式の比較	3
第 3 章	動作原理	5
3.1	SSH 方式	5
3.1.1	動作イメージ	5
3.1.2	動作イメージ (★この節は必要か?★)	5
3.1.3	ワークフロー例	5
3.1.4	モジュール内の処理	7
3.2	WebAPI 方式	9
3.2.1	動作イメージ	9
3.2.2	動作イメージ (★この節は必要か?★)	10
3.2.3	ワークフロー例	10
3.2.4	モジュール内の処理	10
第 4 章	使用方法	12
4.1	事前決定事項	12
4.2	SSH 方式の認証情報	13
4.3	WebAPI 方式の認証関連情報	13
4.4	資材の入手	13
4.4.1	外部計算機側のディレクトリ構造	14
4.4.2	MInt 側のディレクトリ構造	14
4.5	SSH 方式の外部計算機側準備	15
4.6	SSH 方式の MInt 側準備	15
4.7	WebAPI 方式の外部計算機側準備	15
4.8	WebAPI 方式の MInt 側準備	16
4.9	その他 MInt 側事項	16
4.10	ワークフローサンプル	16
4.11	ワークフローの廃止	17

第 1 章

はじめに

MIInt には、ワークフローを構成するモジュール内の一部分の処理を、MIInt の計算ノード以外の「外部計算機」に行わせる機能がある。本機能によって、ユーザには下記に挙げる利点がある。

- 部外秘プログラムの使用
- 部外秘データの使用
- 特殊構成 (MIInt の計算ノードでは対応できない) の計算機を使用できる
- 商用ソフトの使用 (MIInt の計算ノードにも商用ソフトがインストールされているが、ライセンスの規定上、ほとんどの場合 NIMS 外からは利用できない)

外部計算資源の利用に際しては、MIInt、外部計算機の双方が後述のセキュリティ水準を満たす必要がある。

1. 産学共同研究契約、MIInt システム利用規定、その他の MIInt 利用に関わる契約・規定の各条項を遵守すること。
2. MIInt 側は、下記のセキュリティ対策を実施すること。
 - 第三者による MIInt のセキュリティ分析・セキュリティリスク診断を実施し、リストを避ける設計を維持すること。
 - MIInt を構成するサーバの OS・ミドルウェア・ライブラリ等に対し、継続的に脆弱性データベースを確認し、必要なアップデートを実施すること。
 - 不正アクセス監視やネットワーク負荷監視を実施すること。

3. 外部計算機側は、外部計算機として利用されるコンピュータに対し、十分なセキュリティ対策を実施すること。継続的に利用する場合には、定期的に対策状況を確認し、セキュリティレベルを維持すること。

外部計算資源利用には、SSH 方式と WebAPI 方式がある。前者は MIInt から外部計算機へ SSH で必要なデータとコマンドをプッシュする方式である。単純で、外部計算を遅延なく開始できる利点があるが、外部計算機側で MIInt に対し SSH のポートを開放してプッシュを受け入れる必要がある点は、特に企業ユーザではハードルが高いことが想定される。これに対し、後者は数分間隔で外部計算機側から MIInt に WebAPI(https) でポーリングし、処理すべき案件が存在した場合は、必要なデータとコマンドがプルされる方式である。この方式では外部計算機側にポート開放の必要が無いが、外部計算の開始までにポーリング間隔に相当する遅延が生じる。

MIInt が収集する情報はワークフローの各モジュールの入出力ポートの情報のみであるため、モジュールの内部で完結する本機能のためにモジュールと外部計算機の間で送受信される情報は収集対象外である。

SSH では、`authorized_keys` の設定で外部計算機が MIInt に実行を認めるコマンドを固定できる。WebAPI 方式では、外部計算機は自分でコマンドを実行する。また、もちろん外部計算が返却するデータは十分に限定することができる。

上記の機構によって安全な外部計算が保証される。下記の各章で、具体的な利用方法について記す。また、外部計

算資源の利用に際して本書では不明な点は、ユーザと MInt 担当者との協議のうえで決定するものとする。

第 2 章

概要

2.1 利用イメージ

外部計算資源の利用イメージを下図に示す。

- MInt は NIMS 構内の DMZ^{*1} に存在する。
- ユーザは MInt 上に、外部計算を利用するモジュールを含んだワークフローを持つ。当該モジュールやワークフローの参照・実行権限は自機関内などに限定できる。
- ユーザは当該ワークフローに必要な入力を与えて実行する。
- MInt はモジュールを順次実行する。
- 各モジュールは定義された処理を実行する。外部計算を利用するモジュールでは、一部の処理が外部計算機に受け渡される。
- 外部計算機は処理の過程で、MInt に置けないデータやプログラムにアクセスできる。これらへのアクセスを外部計算機での処理の中で完結させることで、安全な利用が可能となる。
- モジュールは外部計算機から返送された結果を受け取り、定義されていれば必要な後処理を行ってモジュールとしての出力を行う。
- MInt はワークフローの残りの部分を実行し、ユーザに最終結果を出力する。

2.2 SSH 方式と WebAPI 方式の比較

- SSH 方式
 - MInt から SSH で外部計算機にアクセスし、必要なファイルとコマンドをプッシュし、コマンドを発行し、結果を得る。
 - ファイルは内部で `rsync -av` を利用して送受信され、サイズは無制限である。
 - コマンドラインなどの文字列は Base64 エンコード無しで送受信される。
 - 外部計算機側 SSH サーバのポート (TCP/22 以外でも可) のインバウンドアクセスの開放が必要である。
- WebAPI 方式
 - 外部計算機から MInt の API サーバにポーリングを行い、要処理案件の有無を確認する。ポーリング間隔は数分程度を想定している。案件があれば必要なデータとコマンドをプルし、自らコマンド

^{*1} 物理的には NIMS 構内のサーバ室に存在するが、ネットワーク的には機構内 LAN とインターネットの双方からファイアウォールで切り離された領域。

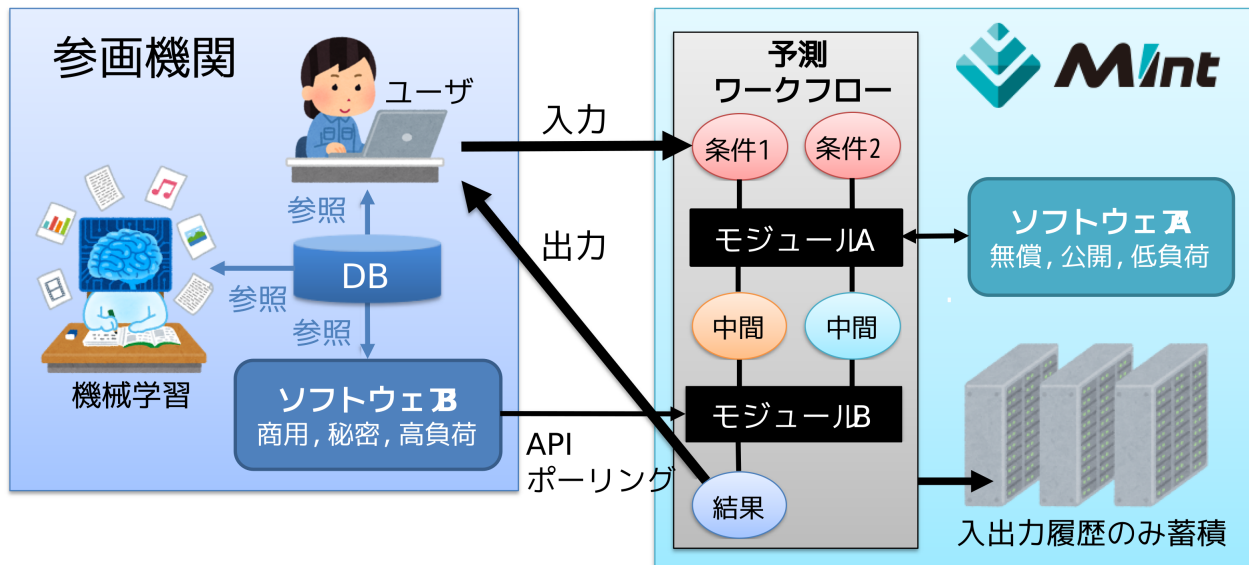


図 2.1 外部計算資源の利用イメージ

を実行し、API で結果を送信する。

- ファイルは Base64 エンコードされ、サイズはエンコード後に 2GiB 未満である必要がある。
- コマンドラインなどの文字列は Base64 エンコード無しで送受信される。(★ホント?★)
- MInt の API サーバへの https(TCP/443) のアウトバウンドアクセスの許可が必要である。

第 3 章

動作原理

3.1 SSH 方式

3.1.1 動作イメージ

SSH 方式での外部計算の実行イメージを下図に示す。

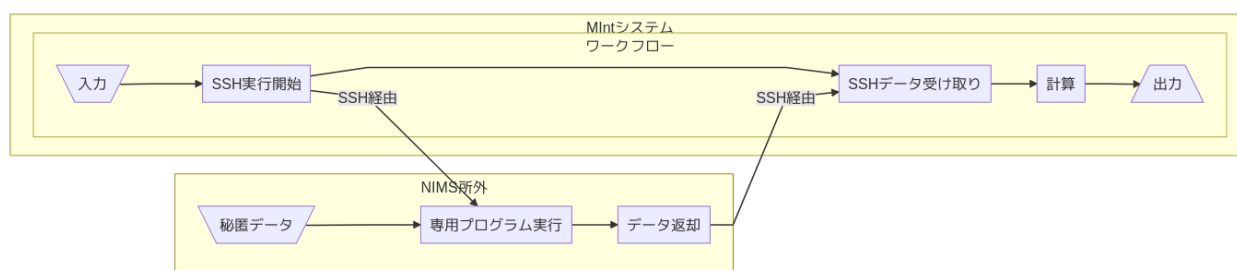


図 3.1 SSH 実行のイメージ

3.1.2 動作イメージ (★この節は必要か？★)

下記のサンプルが用意されている。

モジュール (Abaqus2017) と、外部計算用の計算ノード (計算ノード 2) を用意することで、外部計算資源を利用したワークフローが実行可能となる。また Abaqus2017 と謳ってはいるが実行するプログラムはこれに限らず、様々なコマンド、プログラム、アプリケーションを実行することが可能のように作られている。

3.1.3 ワークフロー例

※赤枠の部分が遠隔実行の行われるモジュールである。

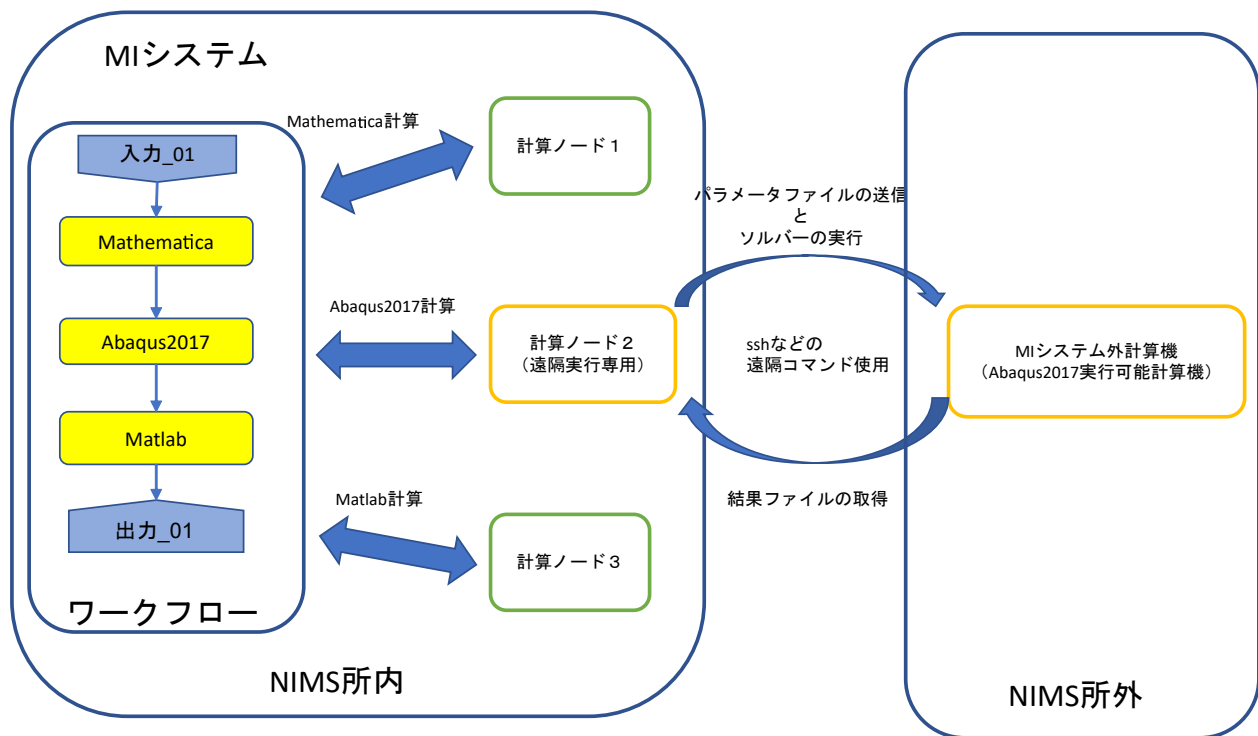


図 3.2 遠隔実行のイメージ

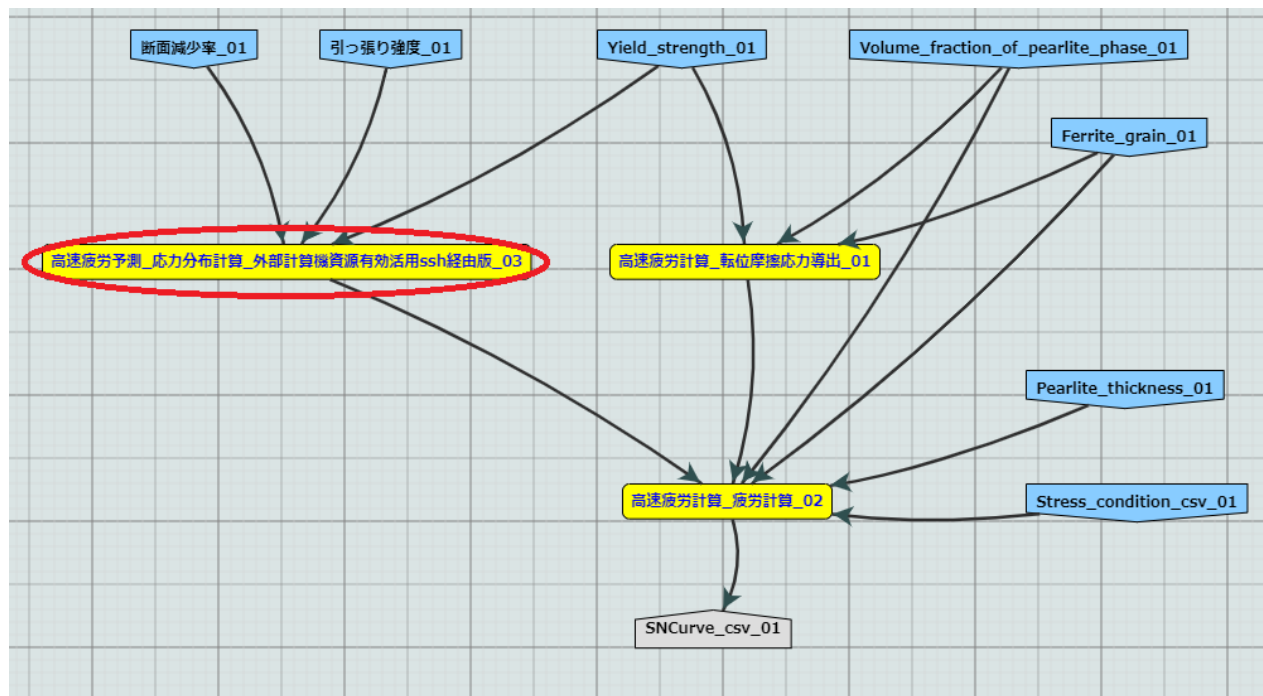


図 3.3 動作検証用のワークフロー

3.1.4 モジュール内の処理

ワークフローの当該モジュール内で外部計算機側の処理がコマンドが実行されるまでの流れを下記に示す。

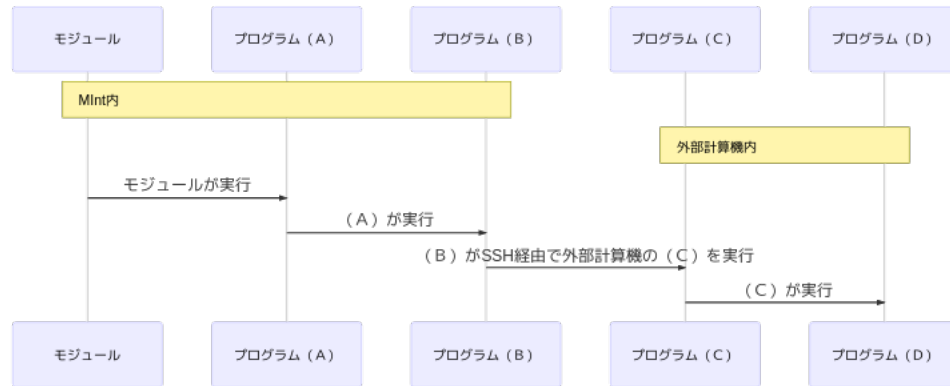


図 3.4 SSH 接続経路によるコマンド実行の流れ

- ワークフロー：予測モジュール
 - MInt が実行する予測モジュール
 - (A) を実行する
- プログラム (A)：kousoku_abacus_ssh_version2.sh（例）
 - モジュール固有の前処理を行う。
 - モジュールごとに任意の名前で用意する。
 - ref:how_to_use で説明する編集を行う。
 - (B) を実行する。
- プログラム (B)：execute_remote_command.sample.sh

このプログラムが外部計算機と通信を行う。

- 外部計算の準備を行う。
- 名前は固定である。
- 使用方法 で説明する編集を行う。
- SSH 経由で (C) を実行する。
 - 送信するファイルはパラメータとして記述する。
 - 外部計算機上の一時ディレクトリ^{*2}の内容を全部受信するため、MInt に送信しないデータは外部計算機側で (C) の実行終了前に削除する。
- プログラム (C)：execute_remote-side_program_ssh.sh
 - 名前は固定である。(インストール時は execute_remote-side_program_ssh.sample.sh^{*3} となっているため、リネームが必要)
 - 外部計算機上で実行するプログラムは、ここへシェルスクリプトとして記述する。
- プログラム (D)：remote-side_scripts

^{*2} 外部計算機では、処理は/tmpなどに作成した一時ディレクトリで実行される。

^{*3} 本システムでは、MInt は「execute_remote_command.sample.sh」を実行し、外部計算機で実行するプログラムとして「execute_remote-side_program_ssh.sh」を呼び出す。外部計算機側ではインストール後にこのファイル（インストール直後は、execute_remote_program_ssh.sample.sh(★正しい?★)と言う名前)を必要に応じて編集して使用することで、別なコマンドを記述することが可能になっている。

- 必要に応じて（C）から実行される外部計算用スクリプト群。
- 外部計算機上のプログラムを（C）のみで完結させ、本スクリプト群は用意しない運用も可。

3.2 WebAPI 方式

3.2.1 動作イメージ

WebAPI 方式での外部計算の実行イメージを下图に示す。

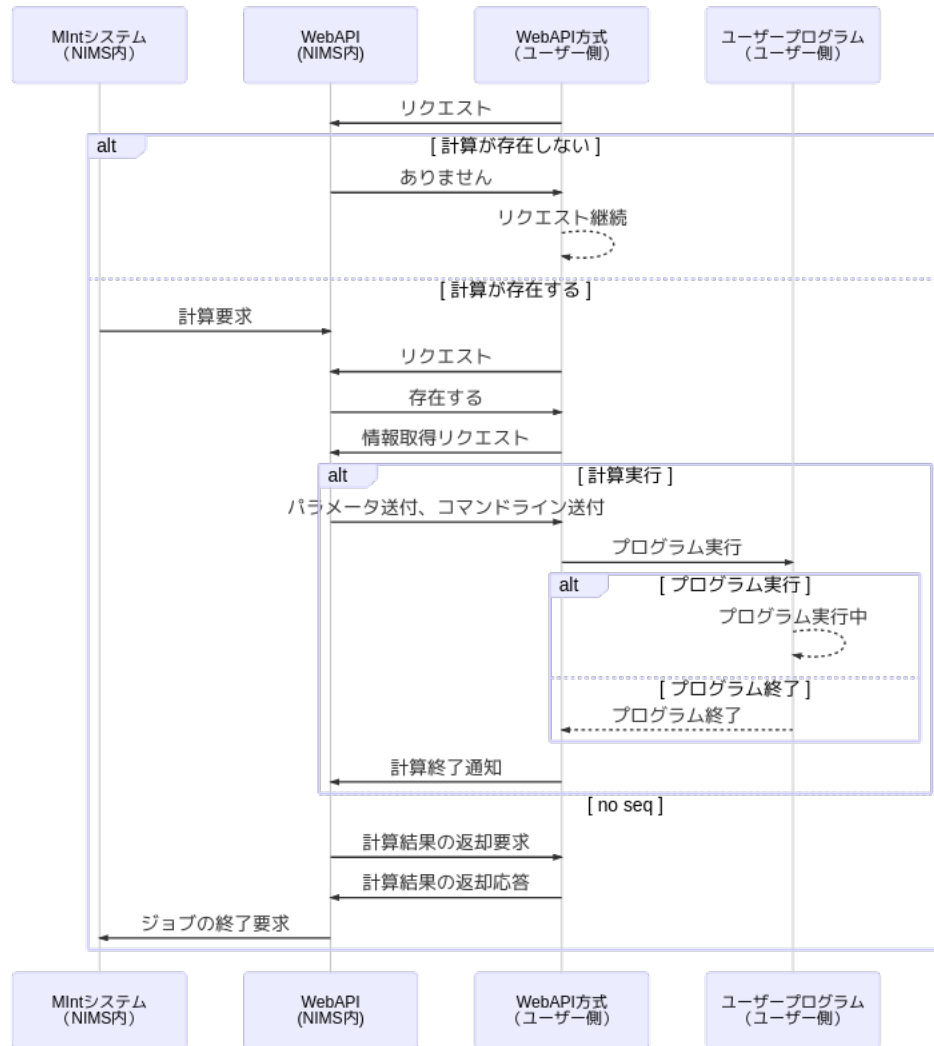


図 3.5 WebAPI 方式の流れ

3.2.2 動作イメージ (★この節は必要か?★)

下記のサンプルが用意されている。

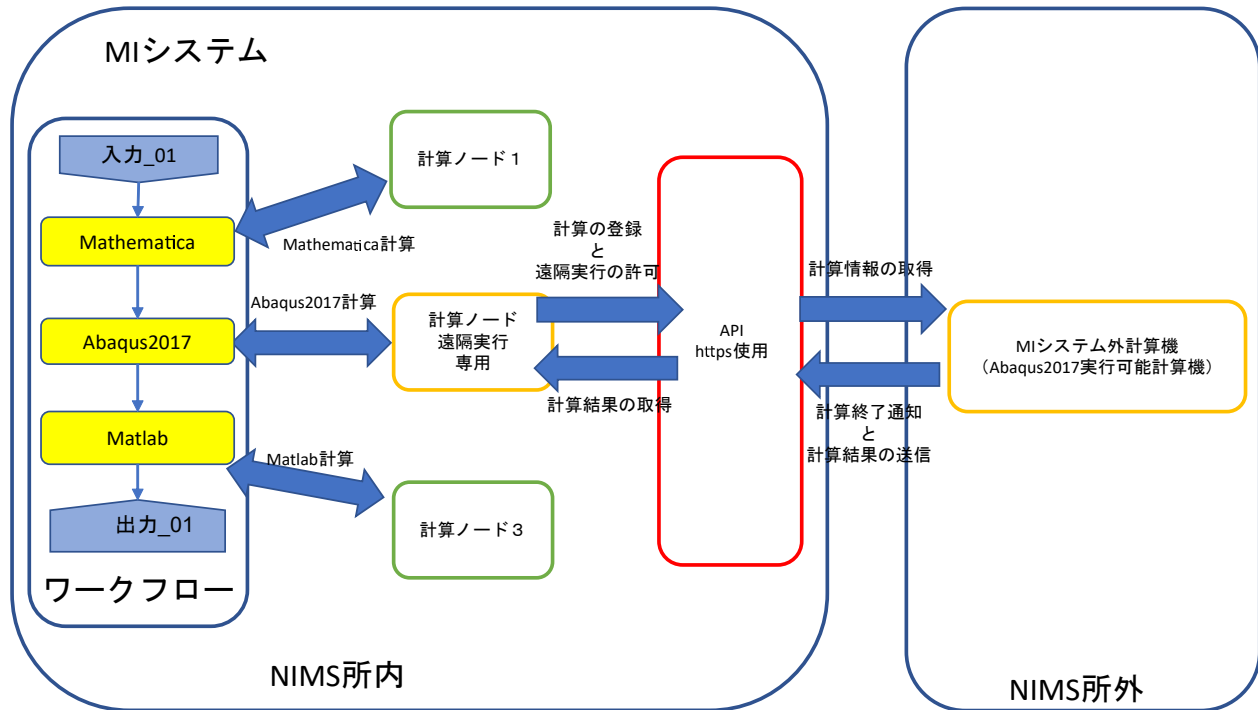


図 3.6 WebAPI 方式を利用した外部計算資源の利用イメージ

モジュール (Abaqus2017) と、外部計算用の計算ノード (計算ノード 2) を用意することで、外部計算資源を利用したワークフローが実行可能となる。また Abaqus2017 と謳ってはいるが実行するプログラムはこれに限らず、様々なコマンド、プログラム、アプリケーションを実行することが可能のように作られている。

3.2.3 ワークフロー例

※赤枠の部分が外部計算資源を利用するモジュールである。

3.2.4 モジュール内の処理

ワークフローの当該モジュール内で外部計算機側の処理が実行されるまでの流れを下記に示す。

API に設定したプログラムを外部計算機での実行に使用する。サンプルワークフローでは「execute_remote_side_program_api.sh」となっている。外部計算機側ではインストール後にこのファイル（インストール直後は、execute_remote_program_api.sample.sh という名前）を必要に応じて編集して使用する。

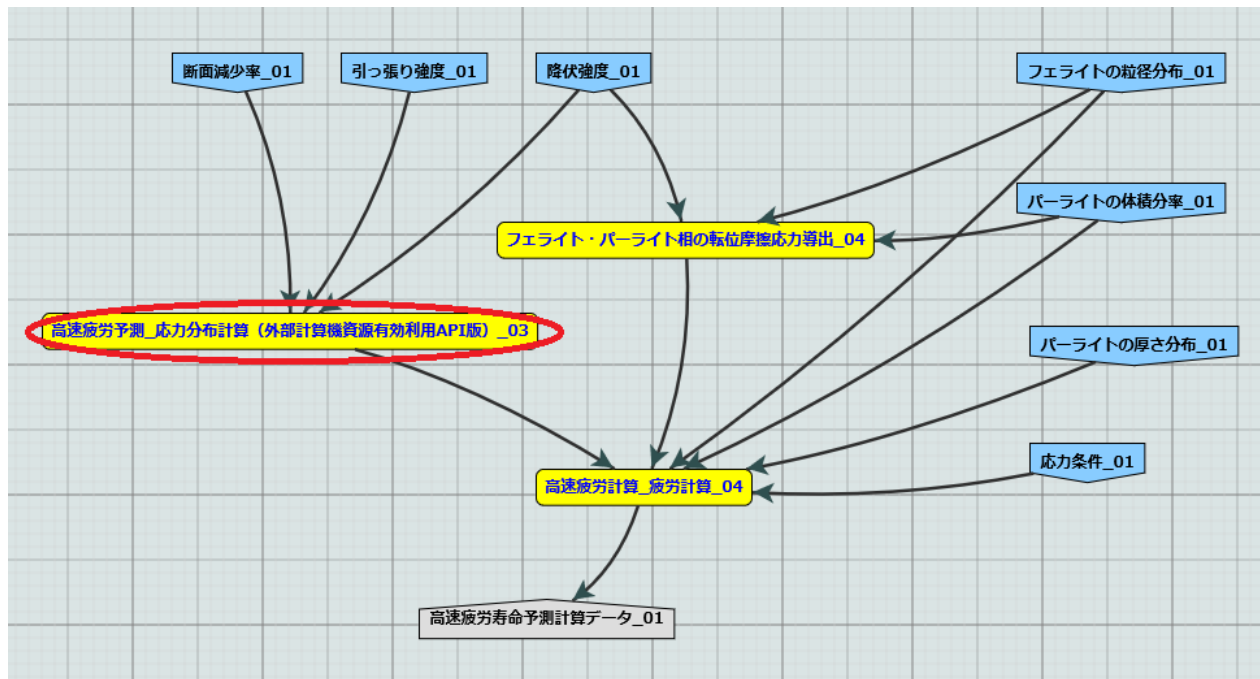


図 3.7 検証用ワークフロー

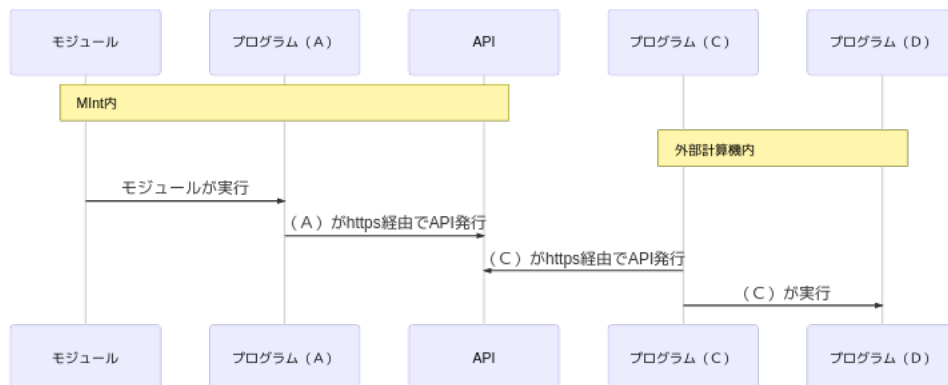


図 3.8 WebAPI 方式でのコマンドの流れ

第 4 章

使用方法

SSH 方式、WebAPI 方式それぞれのインストールおよびプログラムの実行までを説明する。なお、外部計算機は bash スクリプトと Python スクリプトの動作する Linux ホストを想定しているが、MInt 側の通信が正常に確立できるならば、これ以外の環境でも構わない。また、外部計算機側で秘匿データを扱う際は、これに関する仕様を MInt 側に開示する必要も無い。

4.1 事前決定事項

事前に決定しておく項目は以下の通り。

1. 環境構築
 - 外部計算機側, MInt 側のユーザアカウントの準備
 - SSH or WebAPI の方式選択
 - 認証関連情報の準備
2. ワークフロー・モジュールの仕様策定 (実装調査書の作成)
 - MInt と外部計算機の役割分担の決定
 - MInt と外部計算機の間を受け渡すパラメータ・ファイルの設計
 - MInt 側の前処理・後処理の設計
 - 外部計算機側スクリプトの設計
3. 資材の展開場所 (パス) の決定
 - misrc_remote_workflow リポジトリの展開場所の決定
 - クライアント側のプログラム実行場所として使用する
 - 実行プログラム用のテンプレートなどが入っているのでこれを利用する
 - misrc_distributed_computing_assist_api リポジトリの展開場所の決定
 - WebAPI 方式の場合に必要

4.2 SSH 方式の認証情報

パスフレーズ無しの公開鍵認証を原則とする。外部計算機側で作成した RSA 公開鍵 (例: `~/.ssh/id_rsa.pub`) を MInt 担当者に送付する。鍵は既存のものでも良いが、下記のコマンドで新規に作成しても良い。

4.3 WebAPI 方式の認証関連情報

MInt 側担当者に問い合わせて下記の情報を用意する。

- ホスト情報
 - MInt 側で API の発行者を識別するための文字列。ユーザ企業のドメインなどと一致させる必要は無い。
- API トークン
 - MInt の API 認証システムを使用するためのトークン。MInt 担当者に問い合わせて取得する。
- MInt の URL
 - MInt の URL(エンドポイントは不要) を、MInt 担当者に問い合わせておく。

4.4 資材の入手

外部計算資源の利用に必要な資材は GitHub 上のリポジトリ^{*4} に用意されている。ユーザは外部計算機上にこれらを展開し、必要なカスタマイズを行う。

- `misc_remote_workflow`
 - 主に外部計算機側で実行されるスクリプトのサンプルが同梱されている。
- `misc_distributed_computing_assist.api`
 - WebAPI 方式用のプログラムおよびサンプルが同梱されている。
 - MInt 側資材は「`debug/mi-system-side`」、外部計算機側資材は「`debug/remote-side`」にある。

リポジトリ上の資材に関しては、以下の条件が適用される。

1. 一部のファイル^{*5}を除いてライセンスは「★何?★」が適用され、ソースコードの著作権は MInt が保持する。
2. ユーザはダウンロードしたファイルを改変できるが、この改変が原因で外部計算を利用するワークフローが動作しなかった場合、MInt 側は責を負わない。(★この表現で良いのか?★)
3. ユーザが改変したファイルの帰属は……………(★なに?★) 3. 外部計算機側独自の改変を 1. 以外のスクリプトに適用したい場合は、MInt 担当者 (★これで OK?★) と個別に協議する。

^{*4} 本機能を実現する資材などを格納したサーバ。GitHub を利用しているが、MInt がアカウントを発行したユーザのみダウンロードが可能である。

^{*5} `misc_remote_workflow/scripts` 以下にある、SSH 方式での `execute_remote-side_program_ssh.sample.sh` を複製したファイルと、WebAPI 方式での `execute_remote-side_program_api.sample.sh` およびこれらを複製したスクリプトファイルを指す。

4.4.1 外部計算機側のディレクトリ構造

資材展開後の外部計算機側のディレクトリ構造は以下のようになる。

- ユーザーディレクトリ

```
~/ユーザーディレクトリ
+ remote_workflow
+ scripts
  + input_data
+ misrc_distributed_computing_assist_api
+ debug
  + remote-side
```

- ワーキングディレクトリ

```
/tmp/<uuid>
```

4.4.2 MInt 側のディレクトリ構造

資材展開後の MInt 側のディレクトリ構造は以下のようになる。

- ユーザーディレクトリ

```
~/misystem ディレクトリ
+ remote_workflow
+ scripts
+ misrc_distributed_computing_assist_api
+ debug
  + mi-system-side
```

- ワーキングディレクトリ
 - 複雑なので省略する。

4.5 SSH 方式の外部計算機側準備

1. `misrc_remote_workflow` リポジトリを展開する。

```
$ git clone https://gitlab.mintsys.jp/midev/misrc_remote_workflow
$ cd misrc_remote_workflow
$ ls
README.md  documents  inventories  misrc_remote_workflow.json  modulesxml  sample_
↳data  scripts
$ cd scripts
$ ls
abacus                                     execute_remote_command.sample.sh  ↳
↳kousoku_abacus_ssh.sh
create_inputdata.py                       input_data                          ↳
↳kousoku_abacus_ssh_version2.py
execute_remote-side_program_api.sample.sh  kousoku_abacus_api_version2.py    ↳
↳kousoku_abacus_ssh_version2.sh
execute_remote-side_program_ssh.sample.sh  kousoku_abacus_api_version2.sh    ↳
↳remote-side_scripts
execute_remote_command.sample.py           kousoku_abacus_http.py
```

2. 外部計算機側で実行するスクリプトがあれば「remote-side_scripts」に配置する。
3. MInt が外部計算機へログインして最初に実行するプログラム名は前述のとおり「execute_remote-side_program_ssh.sh」に固定されている。このため「execute_remote-side_program_ssh.sample.sh」をこの名前でコピーするか、新規に作成して、必要な手順をスクリプト化する。

4.6 SSH 方式の MInt 側準備

1. 外部計算資源を利用するモジュールが「`misrc_remote_workflow/scripts/execute_remote_command.sample.sh`」に相当するスクリプト (実際にはリネームされている) が必要なパラメータとともに実行するように構成する。
2. 1. を実行可能なワークフローを、外部計算を含まないものと同じ手順で作成する。

4.7 WebAPI 方式の外部計算機側準備

1. `misrc_distributed_computing_assist_api` リポジトリを展開する。

```
$ git clone https://gitlab.mintsys.jp/midev/misrc_distributed_computing_assist_api
$ cd misrc_distributed_computing_assist_api
$ ls
README.md  logging.cfg  mi_dicomapi_infomations.py  syslogs
debug      mi_dicomapi.py  mi_distributed_computing_assist.ini
$ cd debug
$ ls
api_status.py  api_status_gui.py  api_status_gui.pyc  mi-system-side  remote-side
$ cd remote-side
$ ls
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
api-debug.py  debug_gui.py  mi-system-remote.py
```

2. mi-system-remote.py を実行する

```
$ python mi-system-remote.py rme-u-tokyo (★具体名が出ちゃってる?★) https://nims.  
↳mintsys.jp <API token>
```

4.8 WebAPI 方式の MInt 側準備

1. misrc_distributed_computing_assist_api リポジトリを展開する。
2. mi_dicomapi.py が未動作であれば、mi_distributed_computing_assist.ini に外部計算機の設定を実施する。動作中であれば、設定を再読み込みする。

```
$ python  
>>> import requests  
>>> session = requests.Session()  
>>> ret = session.post("https://nims.mintsys.jp/reload-ini")  
>>>
```

3. mi_dicomapi.py を動作させて待ち受け状態にする。

```
$ python mi_dicomapi.py
```

4. モジュールの実行プログラム内で、misrc_distributed_computing_assist_api/debug/mi-system-side/mi-system-wf.py を必要なパラメータとともに実行するように構成する。

4.9 その他 MInt 側事項

SSH, WebAPI によらず、予測モジュールでは下記に注意する。

- pbsNodeGroup 設定で ssh-node01 を設定する。他の計算機では外へアクセスすることができないため。
- pbsQueue など CPU 数などは指定できない。
- 外部計算機側で別途 Torque などのバッチジョブシステムに依存する。

4.10 ワークフローサンプル

misrc_remote_workflow/sample_data に、ワークフロー実行用のサンプルが用意されている。これを利用して、ワークフローおよび外部計算機側のテストが可能である。

また、misrc_remote_workflow/scripts に、この時のモジュール実行プログラムがある。これを参考に、他のモジュール実行プログラムを作成することが可能である。

- kousoku_abaqus_api_version2.py : WebAPI 方式のモジュール実行スクリプト
- kousoku_abaqus_ssh_version2.py : SSH 方式のモジュール実行スクリプト

4.11 ワークフローの廃止

ユーザがワークフローの廃止届を提出する。当該ワークフローは MInt 上で「無効」のステータスを付与され参照・実行不能となる。

以上

参考文献

[activities_of_NIMS] NIMS の取り組みについて.pdf (★添付?★)