外部計算資源の利用について

リリース ***0.1.1***

SIP-MI

2021 年 **05** 月 **28** 日

目次:

第 1 章

初めに

外部計算機資源を有効活用するには、1. MI コンソーシアム規程、MInt システム利用規程にしたがうこと。2. 外部計算機及び接続ネットワークが十分なセキュリティ対策を実施いていること。3. SSH による外部計算機資源を利用するばあには、外部計算機資源の受け入れとして、接続元 IP のみ接続可能とする設定を行い、脆弱性対策を講じていることとする。

1.1 NIMS の取り組み

1.1.1 セキュリティ分析の実施

MInt システムに対して、ISO/IEC 15408、JARO TP15002 に基づくセキュリティ分析を第三者より実施して問題がないことを確認済。

1.1.2 脆弱性対策

システムで用いられている OSS 等について、CVE および JVN で脆弱性情報を確認し、脆弱性対策を実施済み。また、定期的に検知ツールを利用して検知・対策を講じている。

1.1.3 基準・規程

政府統一基準、NIMS のセキュリティポリシーおよびセキュリティ対策基準に基づいて開発・運用を行っている。

1.1.4 セキュリティ診断

システムを外部公開（新規、改修）する際には、第三者によるセキュリティ診断を受けた上で、PSIRT による公開前レビューを受けて問題が無いことを確認している。セキュリティ診断の実施は NIMS のセキュリティ対策基準で定められている。

1.1.5 監視

監視は 24 時間 365 日のセキュリティ監視を専門ベンダーに委託して実施。不審な動きが検知された場合は、PSIRT に連絡して素早く対処（呪法も 24 時間 365 日）。監視ツールを利用しての検知をし、対応を実施している。

1.1.6 トレーニング

NIMS 全体として毎年セキュリティトレーニングを実施している。

第 2 章

概要

MI システムから任意のモジュールの計算を MI システム外の計算機 (これを外部計算機資源と言う) を使用してワークフローを実行することを外部計算機資源の有効活用として SIP1 期の検証項目として実装し動作検証を行った。本システムはこの検証を踏まえ、より簡易に実装が可能なシステムを構築した。

- NIMS DMZ に配置した MInt システムを対象とする。
  - SSH 等で外部の計算機を計算資源として計算を行う
  - 専用 API システムを構築して SSH 接続が不可能な外部の計算機を計算資源として計算を行う
- 外部計算機資源においての秘匿データなどの扱い
  - 秘匿データの指定は簡易な方法
  - MInt システム側からはその存在は感知できない

本ドキュメントは外部計算機資源の有効活用について、動作原理などを説明し、次いで簡単にインストール、実行する方法を説明する。インストール、実行は MInt システム側と外部計算機資源側に分かれている。

2.1 扱う方式

本書で扱う外部計算機資源の有効化強うの方法は以下の 2 つの形式である。

- ssh などで MI システムの任意のモジュールから直接遠隔計算を実行する。
- WEBAPI を利用して MI システムの任意のモジュールからポーリング形式で遠隔計算を実行させる。

2.2 使用するリポジトリ

外部計算機資源の有効利用のために、以下２つのリポジトリを用意してある。外部計算機資源側はこれらを外部資源計算用計算機に配置し、必要なコマンドを埋め込むだけでよい。

- misrc_remote_workflow
  - 主に外部計算機資源側で実行されるスクリプトのサンプルが登録されている。
- misrc_distributed_computing_assist.api
  - API 方式のためのシステム構築用のプログラム、サンプルが登録されている。
  - API 本体は直下に
  - ワークフローで使用するプログラムは ```debug/mi-system-side``` に
  - 外部計算機側で使用するプログラムは ```debug/remote-side``` に
    - ここから実行されるプログラムのサンプルは上記 misrc_remote_workflow リポジトリを使用している。

2.3 SSH アクセスのために

ワークフローから ssh コマンドを利用して、外部計算機にアクセスするために外部計算機を設置する企業または機関には ssh 接続が可能な処置が必要である。

2.4 WEB API でのアクセスのために

ワークフローから外部計算機を利用する場合、ssh でのアクセスが不可能な場合、本方式を使用するが、ワークフロー側は直接外部計算機にアクセスせず、外部計算機側で定期的に問い合わせ（ポーリング）する必要があります。ポーリングには通常の https 通信を用いる。

2.5 実行されるコマンド

SSH の場合、リポジトリにあるコマンドしか外部計算機上では実行しない。その場所も事前に取り決めた場所となる。API も同様である。

第 3 章

外部計算機資源を MInt システムから有効に活用するための手法とは

最初に各手法の動作原理を説明する。

3.1 SSH を利用した遠隔実行

最初に ssh を利用して、MI システムの任意のモジュールから外部計算機資源を利用する方法を説明する。

ssh を利用した遠隔実行とは、ssh プロトコルを利用してネット上でアクセス可能な場所にある計算機をあたかも MInt システムの計算機の一部として使用すること言う。この場合 ssh パケットが到達可能な場所であればどこでも対象となり得る。ssh アクセスではパスワードなしでの運用も可能であり、本システムも基本的にパスワードなし接続での運用が前提であるが、必ずしも必須ではない。スクリプト内で実現可能であればパスフレーズ付きなど多彩なアクセス方法を採用可能である。

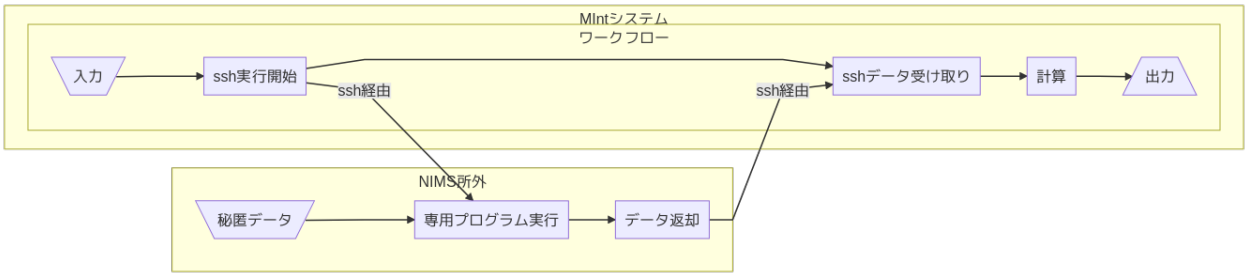
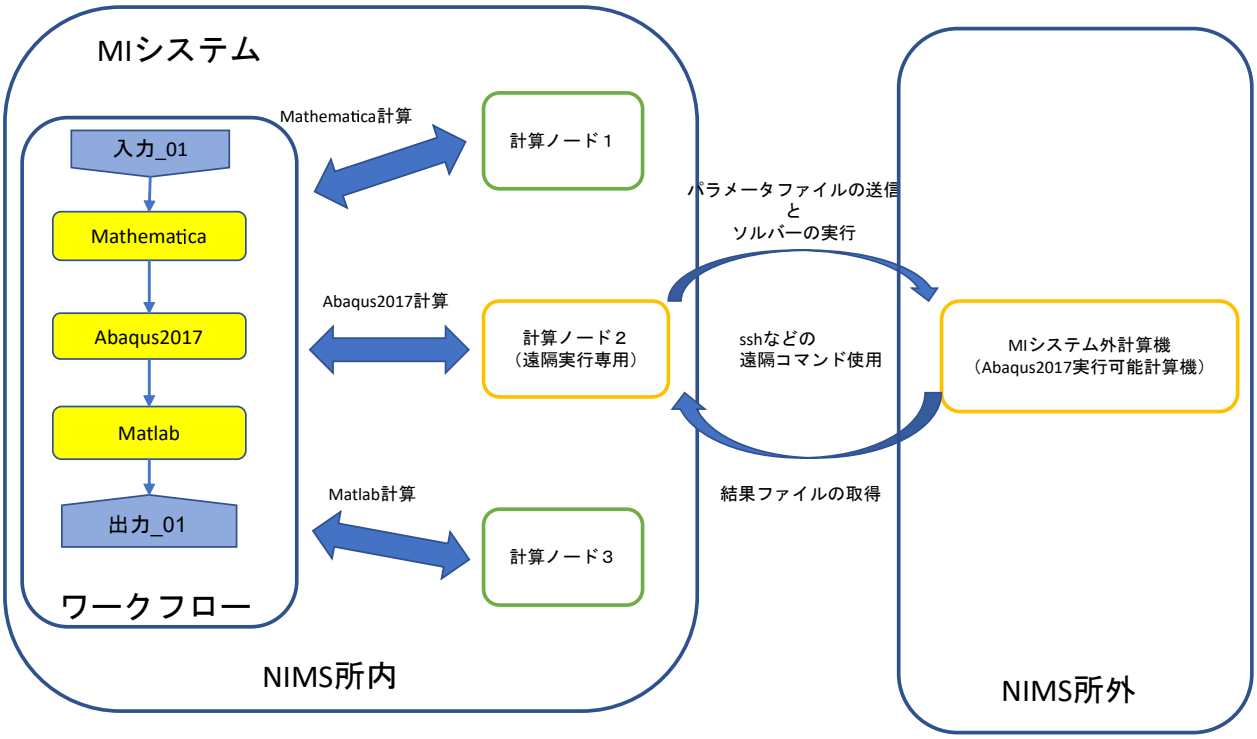


図 3.1　SSH 実行のイメージ

この方式では、以下のようなシステムで動作サンプルが用意されている。

このようにして、特定のモジュール（Abaqus2017）と特定の計算ノード（計算ノード２）を用意し、計算ノード２が MI システム外にある計算機を遠隔実行できるように設定して、使用することで MI システム外の計算機または計算機群を MI システム内にあるかのごとく計算（ワークフロー）を実行することが可能になる。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なように作られている。

- MInt システム側。
  - 遠隔実行専用の計算ノードを設置してある。
  - 遠隔実行用予測モジュールを作成。
  - このモジュールは専用計算ノードを指定して計算を行うよう設計。
  - モジュールおよび専用計算ノードに ssh 操作の設定。
- MInt システム外（主に要件）
  - 外部から到達可能な場所。
  - 可能なら Linux（Mac でも可能。Windows は ssh 到達に問題があるため非推奨）。
  - 必要な資材を取得、展開。
  - 必要な情報を設定（主にソルバーパス、パラメータ、秘匿データの配置）

専用計算ノードでは以下のような動作が行われるように、専用モジュールが定義するプログラムを実行する。

必要な資材は gitlab に登録してある。

- パラメータ類の遠隔計算機へ送信（遠隔計算機側にあるパラメータまたはファイルを指定することも可）。
- 遠隔計算機でソルバー（プログラム）の実行。
- 実行が終了したら結果ファイルの取得。

外部計算機資源側計算機では、必要なファイルの配置が主な手順である。

必要な資材は github に登録してある。

- 資材の展開
- ソルバーパスの調整
- 秘匿データ（ある場合）に指定のディレクトリへの配置

この方式ではサンプルとして下記のようなイメージの動作検証環境用ワークフローを用意した。

※赤枠の部分が遠隔実行が行われるモジュールである。

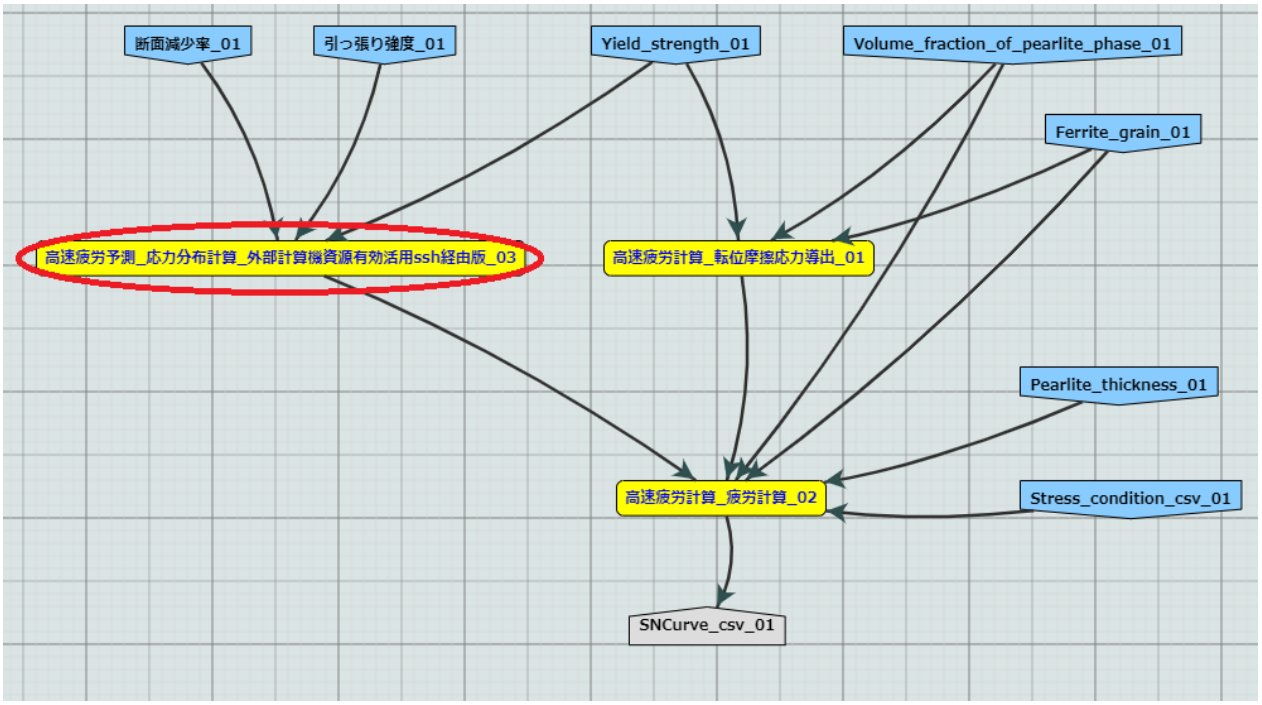


図 3.2　動作検証用のワークフロー

外部計算機のディレクトリ構造は以下のようになっている。インストール方法については後述する。

- 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
```

- ワーキングディレクトリ

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

ワークフローの該当モジュールから外部計算機のコマンドが実行されるまでの流れを下記に示す。

- ワークフロー　[予測モジュール]
  - MInt システム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_abaqus_ssh_version2.sh（サンプル用）
  - MInt システムの予測モジュールが実行する。
  - 予測モジュールごとに用意する。名前は任意。使用方法 で説明する編集を行う。

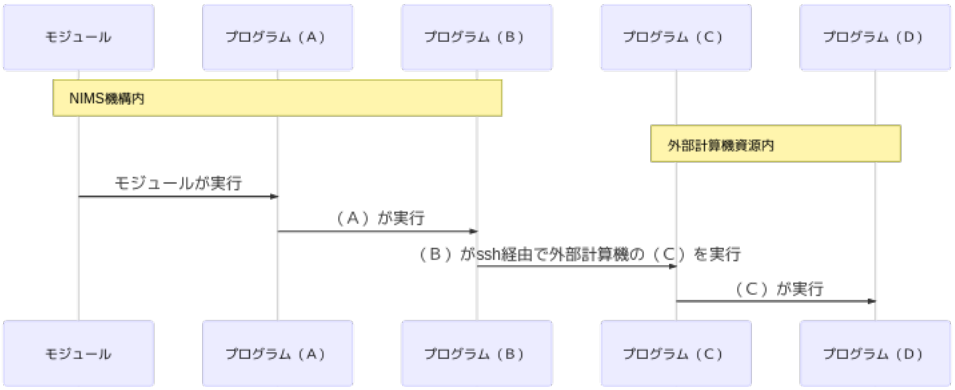


図 3.3　SSH 接続経由によるコマンド実行の流れ

  - 予測モジュール定形の処理などを行い、（B）を実行する。
    - （B）の名前は固定である。

- プログラム（B）: execute_remote_command.sample.sh
  - （A）から実行された後、外部計算機実行のための準備を行い、ssh 経由で（C）を実行する。
  - 名前は固定である。このプログラムが外部計算機資源との通信を行う。
  - 使用方法 で説明する編集を行う。
    - 送信するファイルはパラメータとして記述。
    - （C）の名前は固定である。
  - 受信するファイルは外部計算機資源上の計算用ディレクトリ[*1] のファイル全部。
- プログラム（C）: execute_remote-side_program_ssh.sh
  - （B）から ssh で実行される。
  - 外部計算機で実行され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。
  - インストール時は execute_remote-side_program_ssh.sample.sh[*2] となっている。
- プログラム（D）: remote-side_scripts
  - （D）から実行されるようになっており、いくつかのスクリプトを実行するよう構成されている。
  - サンプル専用であり、必ず使うものではない。（C）に依存する。

[*1] 外部計算機では計算は/tmp などに一時的なディレクトリを作成し計算が実行される。

[*2] 本システムでは、MInt システムは「execute_remote_command.sample.sh」を実行し、外部計算機で実行を行うプログラムとして「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 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。

MInt システムへ送受信されるデータは、「execute_remote_command.sample.sh」で決まっており、以下の通り。

- 送信されるデータ
  - 「execute_remote_command.sample.sh」にパラメータとして記述したファイル。（モジュール内）
- 返信されるデータ
  - 計算結果としての出力ファイル。
    * 計算専用ディレクトリを作成して計算され、そのディレクトリ以下のファイルは全て
    * このディレクトリでの計算は、「execute_remote-side_program_ssh.sh」で行われるので、返信不要のファイルはあらかじめこのスクリプト終了前に削除しておくようにスクリプトを構成しておく。

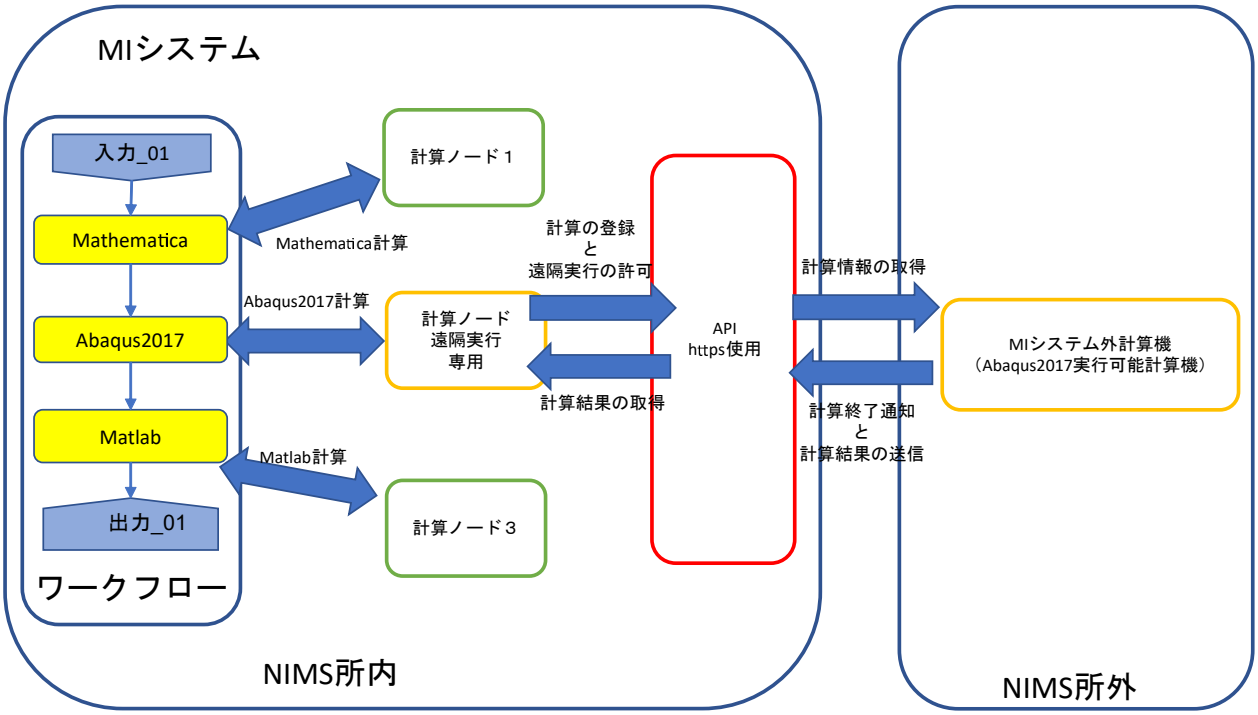
※ 秘匿データを配置してあるディレクトリまたはインストール後のセットアップで実行に必要なファイル、データとして指定されたものは MInt システムで感知できないこと、およびシステム的に記録（GPDB など）するための設定がなされていないため送り返されることは無い。

3.2 API を利用したポーリング方式

続いては API(MInt システムの API ではない) を利用したポーリング方式による方式の説明である。ssh などで直接通信が行えない組織間でも http または https での通信は可能なことが多く、これを利用することで外部計算資源の有効活用できることを狙った。ただし現実的には https または TLS1.2 以上での通信しか許可されないことが多いので、本方式は https での通信のみに絞って使用することとし、そのための説明も https の使用を想定した上で行う。

API を利用したポーリングシステムとは外部計算資源を ssh などで直接操作するのではなく、中間に計算を仲介する API を立て、MInt システム側、外部計算資源側がその API を利用して https 通信で計算の依頼、実行などを行うシステムである。この場合、外部計算資源側、MInt システム側（予測モジュール）は計算工程の随所で定期的に通信する必要がある（ポーリング）ので、ポーリングシステムと言う。ssh の場合と比べて外部計算資源の利用および実行のための手続きが多くなり、用意するプログラムも複雑になる。

この方式では以下のようなシステムを想定している。



この方式でのポーリングシステムのフロー概要。

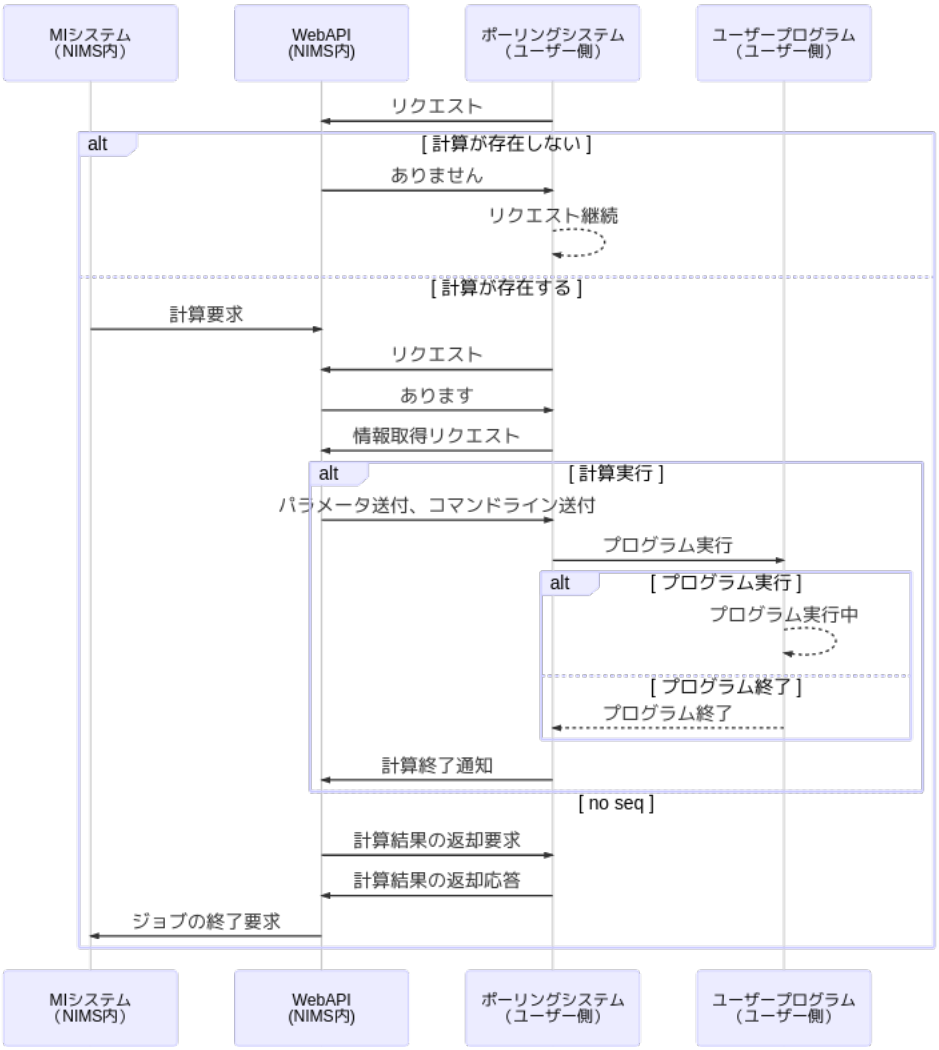


図 3.4　ポーリングシステムの流れ

この方式における必要な条件を記す。おもに外部計算資源側の条件となる。

- 双方で設定必要な事項
  - 実行可能な計算またはプログラム
  - 送受信するファイル
  - この情報を API がワークフローから遠隔計算機へ、遠隔計算機からワークフローへと受け渡す。
    - 遠隔計算機へはコマンドとパラメータ
    - ワークフローへは計算結果などのファイル
- MInt システム側
  - 外部計算資源有効利用用の計算ノードを設置してある。(以下専用計算機または専用ノードとする）
  - 外部計算資源有効利用モジュールを作成
  - このモジュールは専用計算機を指定して計算を行うよう実装する。
  - ポーリング用 API を実行する。MInt システムへ到達可能ならどこでもよい。
  - この API プログラムはモジュールごとに専用の設定を必要とする。
  - このモジュールはこの API とだけ通信する。
- MInt システム外（外部計算資源側）
  - NIMS 所外にあって、https で本 API へ到達可能なネットワーク設定の場所にあること。
  - 本 API と計算を行うためのポーリングプログラムのサンプルを python で用意した。
    - ほとんどの場合このサンプルプログラムで事足りる。
  - 用意する計算機は Linux が望ましいが、サンプルを利用する場合 python が実行可能な PC なら何でもよい。
  - 必要な資材を取得、展開。
  - 資材をローカライズ（プログラム等を環境に合わせて編集）

下記イメージの動作検証用サンプルワークフローを用意してある。

※赤枠の部分が外部計算機資源を利用するモジュールである。

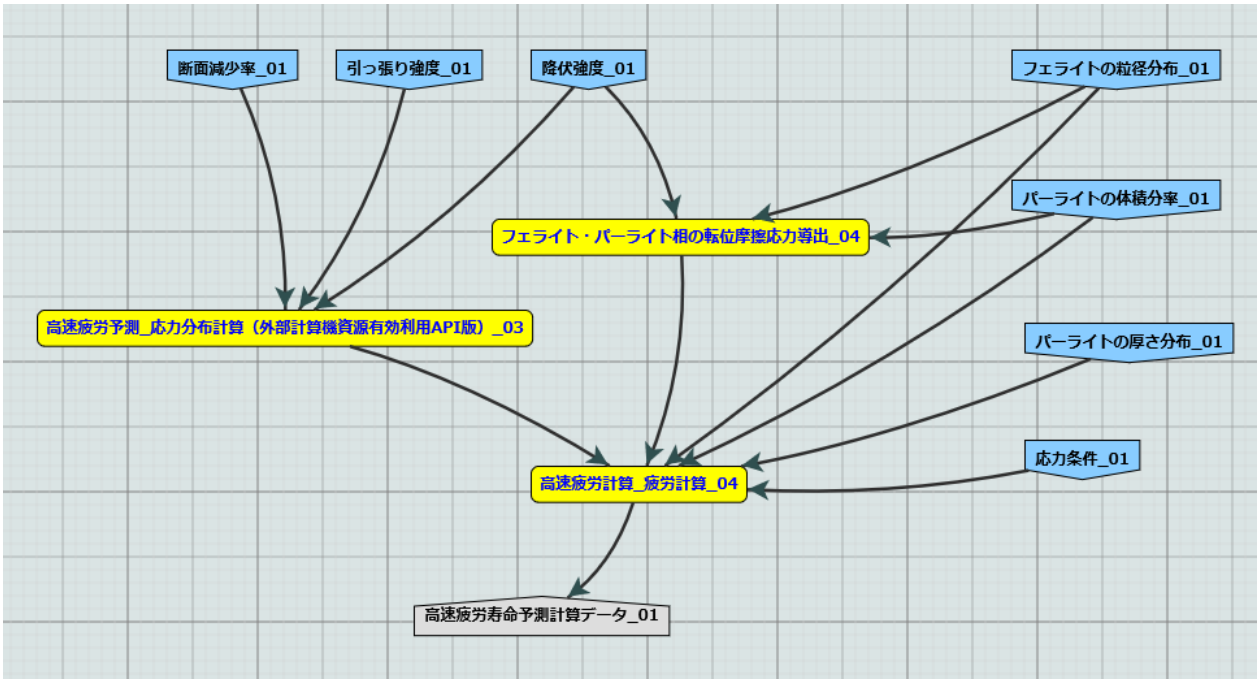


図 3.5　検証用ワークフロー

MInt システム側のディレクトリ構造は以下のようになっている。

- 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。

外部計算資源のディレクトリ構造は以下のようになっている。インストール方法については後述する。

- 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>
```

ワークフローの該当モジュールから API 経由で外部計算機のコマンドが実行されるまでの流れを下記に示す。

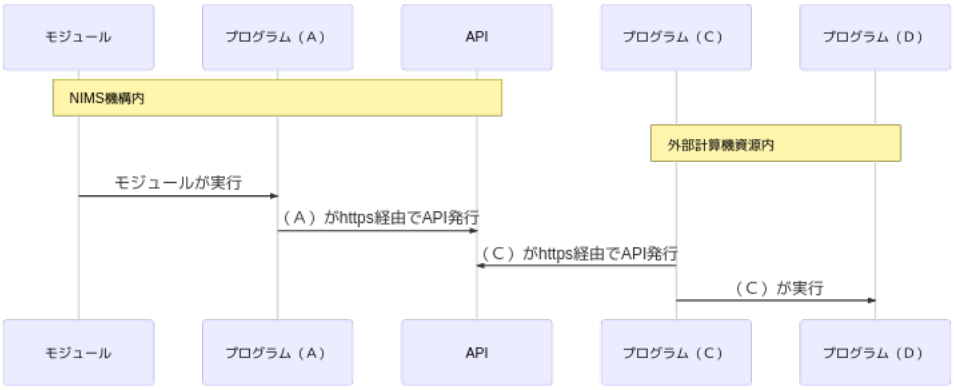


図 3.6　ポーリング方式でのコマンドの流れ

本システムでは、MInt システムの 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 と言う名前）を必要に応じて編集して使用する。

MInt システムで送受信されるデータは、MInt システム側の API と通信するモジュールの実行ファイルであらかじめ決め置く。API にはその情報によって外部計算資源とデータのやりとりをする。この情報に必要なファイルのみ設定することで、それ以外のファイルの存在を MInt システム側で感知できず、したがって不要なファイルのやりとりは発生せず、秘匿データなどの保護が可能となる。

第 4 章

使用方法

インストールおよびプログラムの準備など説明する。SSH 方式、API 方式のそれぞれの準備から実行までを記述する。

本システムの利用者は MInt システムのアカウントは既に発行済であるものとし、その手順は記載しない。また git コマンドなどの利用方法はシステム管理者などに問い合わせることとし、ここではそれらのインストール、詳細な使用方法は言及しない。

手順は以下のようになっている。

- 事前に決めておくこと
- 事前準備
- MInt システム側の準備
- 外部計算機側の準備
- ワークフローの準備

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。

- misrc_remote_workflow リポジトリの展開場所
  - 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
  - API 方式の場合に必要
  - debug/remote-side/mi-system-reote.py がポーリングプログラムで、これを実行しておく。

- 実行するプログラム
  - 外部計算資源側で実行するプログラム及び必要なパラメータの調査。
  - MInt システムから最初に呼び出されるスクリプトを決める
- SSH の場合
  - MInt 側からクライアント計算機への ssh ログインのための情報
  - 鍵暗号化方式によるパスワードなし、パスフレーズなし接続が望ましい。
- API の場合
  - API 方式の場合は不特定多数の利用者と API プログラムを共有するので、設定事項を MInt システム側に事前設定しておく。

API 方式では、ssh とはまた違う認証情報が必要なため、それらを記述する。以下の情報は外部計算機側でポーリングプログラムを実行する際に必要である。

- API トークン
  - 本方式では MInt システムの API 認証システムを使用しているので、そのトークンが必要となる。NIMS 側に問い合わせて取得しておく。
- ホスト情報
  - MInt システム側で API 問い合わせに対する個別の識別を行うためにサイト情報（文字列として区別できれば何でもよい）が必要である。
- MInt システムの URL
  - MInt システムの URL（エンドポイントは不要）が必要である。NIMS 側に問い合わせておく。

4.2 SSH 方式

SSH 方式での準備を決定事項にしたがって実施する。

1. misrc_remote_workflow リポジトリを以下の手順で作成しておく。

```
$ 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
abaqus                                    execute_remote_command.sample.sh ␣
↪kousoku_abaqus_ssh.sh
create_inputdata.py                       input_data                        ␣
↪kousoku_abaqus_ssh_version2.py
execute_remote-side_program_api.sample.sh  kousoku_abaqus_api_version2.py   ␣
↪kousoku_abaqus_ssh_version2.sh
execute_remote-side_program_ssh.sample.sh  kousoku_abaqus_api_version2.sh   ␣
↪remote-side_scripts
execute_remote_command.sample.py          kousoku_abaqus_http.py
```

2. 外部計算機資源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 システム側から外部計算機資源側へ ssh ログインして最初に実行されるプログラム名は「execute_remote-side_program_ssh.sh」です。このため「execute_remote-side_program_ssh.sample.sh」を「execute_remote-side_program_ssh.sh」にコピーするか、「「execute_remote-side_program_ssh.sh」」を独自に作成し、2. などの実行および必要な手順をスクリプト化しておきます。

1. ワークフローを作成する場合に「misrc_remote_workflow/scripts/execute_remote_command.sample.sh」を必要な名称に変更し、内容を参考にして ssh 経由実行が可能なように編集し、ワークフローから実行させる。

2. 1. を実行可能な通常どおりのワークフローを作成する。作成方法に差は無い。

4.3 API 方式

1. misrc_distributed_computing_assist_api リポジトリを以下の手順で作成しておく。

```
$ 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
```

(次のページに続く)

(前のページからの続き)

```
api_status.py  api_status_gui.py  api_status_gui.pyc  mi-system-side  remote-side
$ cd remote-side
$ ls
api-debug.py  debug_gui.py  mi-system-remote.py
```

2. my-system-remote.py を実行しておく。

```
$ python mi-system-remote.py rme-u-tokyo https://nims.mintsys.jp <API token>
```

1. misrc_distributed_computing_assist_api リポジトリを展開。

2. mi_dicomapi.py が本体であるが、まだ動作させてなければ、mi_distributed_computing_assist.ini に外部計算機資源側の設定を実施する。動作させていたら、設定の再読み込みを実施する。

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

3. まだ動作していなかったら、動作させて待ち受け状態にしておく。

```
$ python mi_dicomapi.py
```

4.4 ワークフローについて

外部計算機資源利用を行うワークフローの作成の仕方を記述する。

SSH 方式と API 方式の両方に共通する事項である。

- 予測モジュール
  - 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。
  - 外部計算機資源側で別途 Torque などのバッチジョブシステムに依存する。

予測モジュールの実行プログラムから misrc_remote_workflow/scripts/execute_remote_command.sample.sh またはこのファイルを専用に別名コピー編集したものを必要なパラメータとともに実行するように構成する。

予測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。

misrc_remote_workflow リポジトリにある、sample_data ディレクトリにテストで使用したワークフロー実行用のサンプルファイ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動作の実行テストが可能である。

また、misrc_remote_workflow/scripts にこの時の予測モジュール実行プログラムがある。これを参考に別な予測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 : API 方式の予測モジュール実行スクリプト
- kousoku_abaqus_ssh_version2.py : SSH 方式の予測モジュール実行スクリプト

以上

図目次

表目次