外部計算資源の利用について

リリース ***0.1.0***

SIP-MI

2020 年 **12** 月 **18** 日

目次:

第 1 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。

1.1 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。

1.2 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いある。

- 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。

第 2 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。

2.1 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。

2.1.1 概要

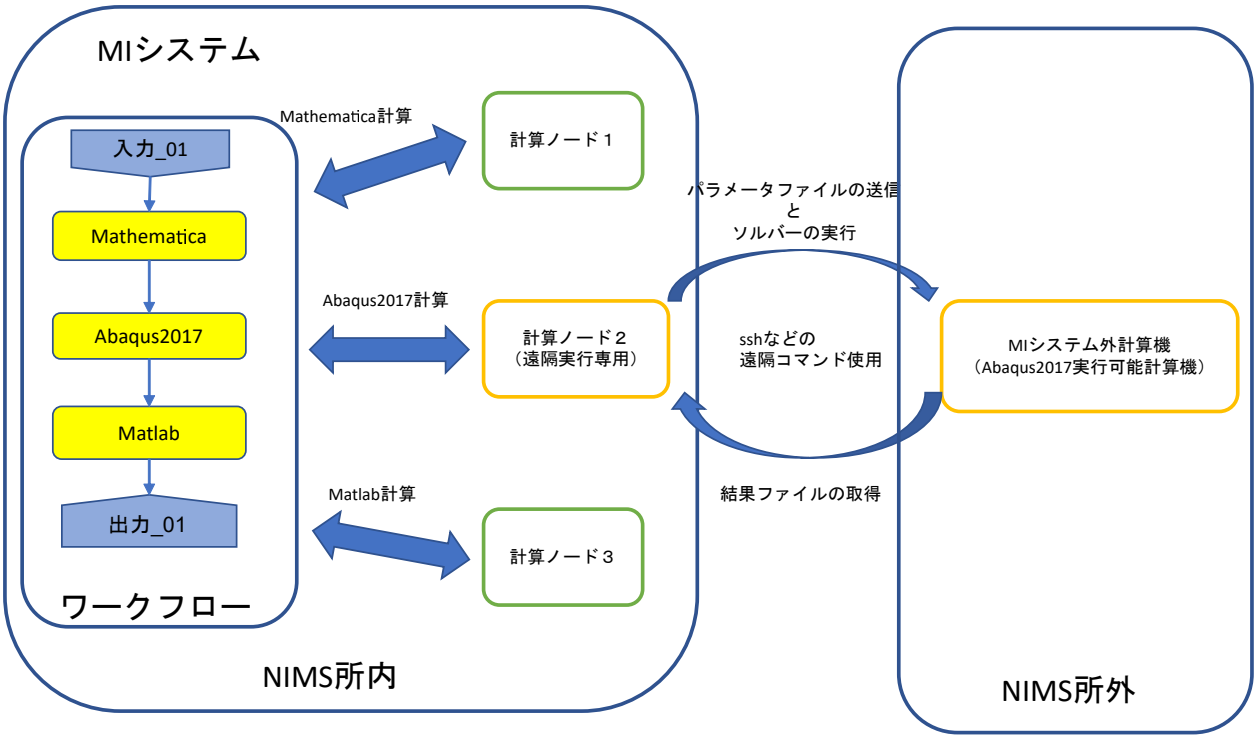
ssh を利用した遠隔実行とは、ssh プロトコルを利用してネット上でアクセス可能な場所にある計算機をあたかも MInt システムの計算機の一部として使用すること言う。この場合 ssh パケットが到達可能な場所であればどこでも対象となり得る。ssh アクセスではパスワードなしでの運用も可能であり、本システムも基本的にパスワードなし接続での運用が前提であるが、必ずしも必須ではない。スクリプト内で実現可能であればパスフレーズ付きなど多彩なアクセス方法を採用可能である。

図 2.1　SSH 実行のイメージ

2.1.2 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。



2.1.3 システム要件

- 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）

2.1.4 MInt 側詳細

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。

2.1.5 外部計算機資源の詳細

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

2.1.6 用意されているサンプルワークフロー

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。

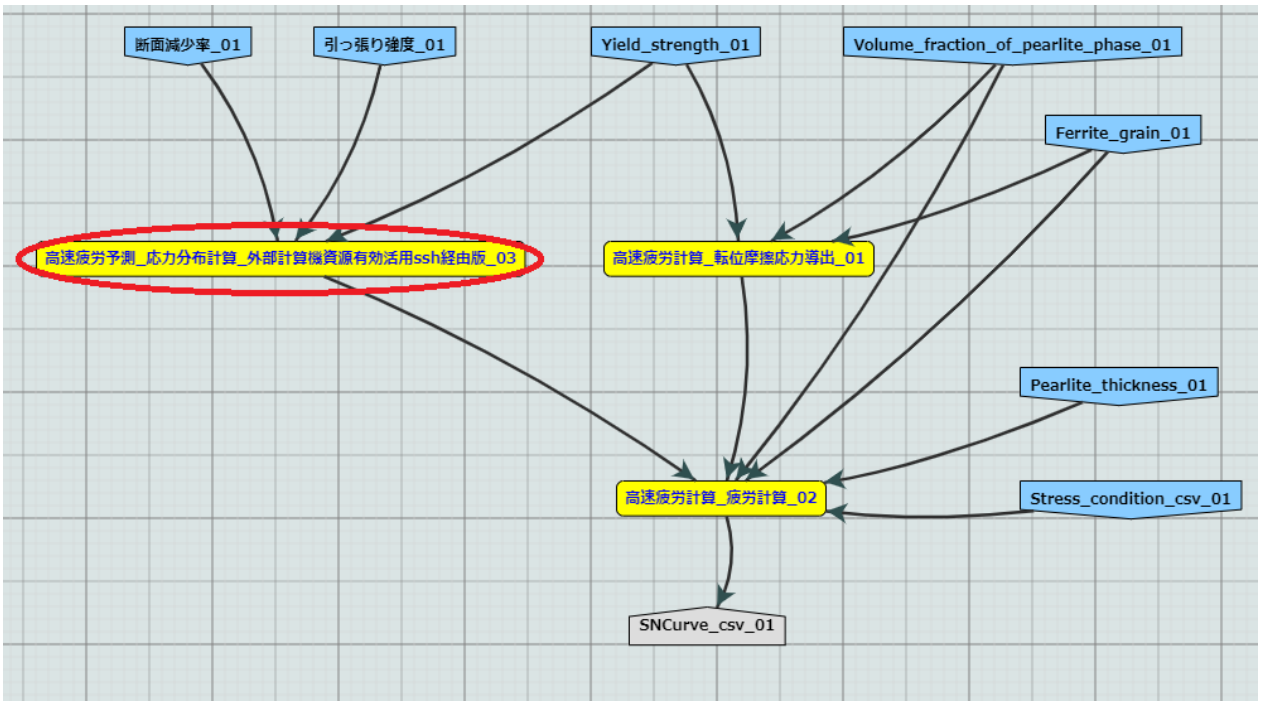


図 2.2　動作検証用のワークフロー

※赤枠の部分が遠隔実行が行われるモジュールである。

2.1.7 外部計算機でのディレクトリ

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
```

2.1.8 コマンドの流れ

サンプル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。

図 2.3　SSH 接続経由によるコマンド実行の流れ

- プログラム（A）: kousoku_abaqus_ssh_version2.sh
  - MInt システムの予測モジュールが実行する。
  - 予測モジュール定形の処理などを行い、（B）を実行する。
  - サンプル専用。
- 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。
  - サンプル専用。
  - 送信するファイルはパラメータとして記述
  - 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。
  - 実行されるプログラムは外部計算機側で任意のものが指定可能。
  - 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

[*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。

  - （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。

2.1.9 MInt システムと送受信されるデータ

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、返信の必要の内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。

※ 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。

2.2 API を利用したポーリング方式

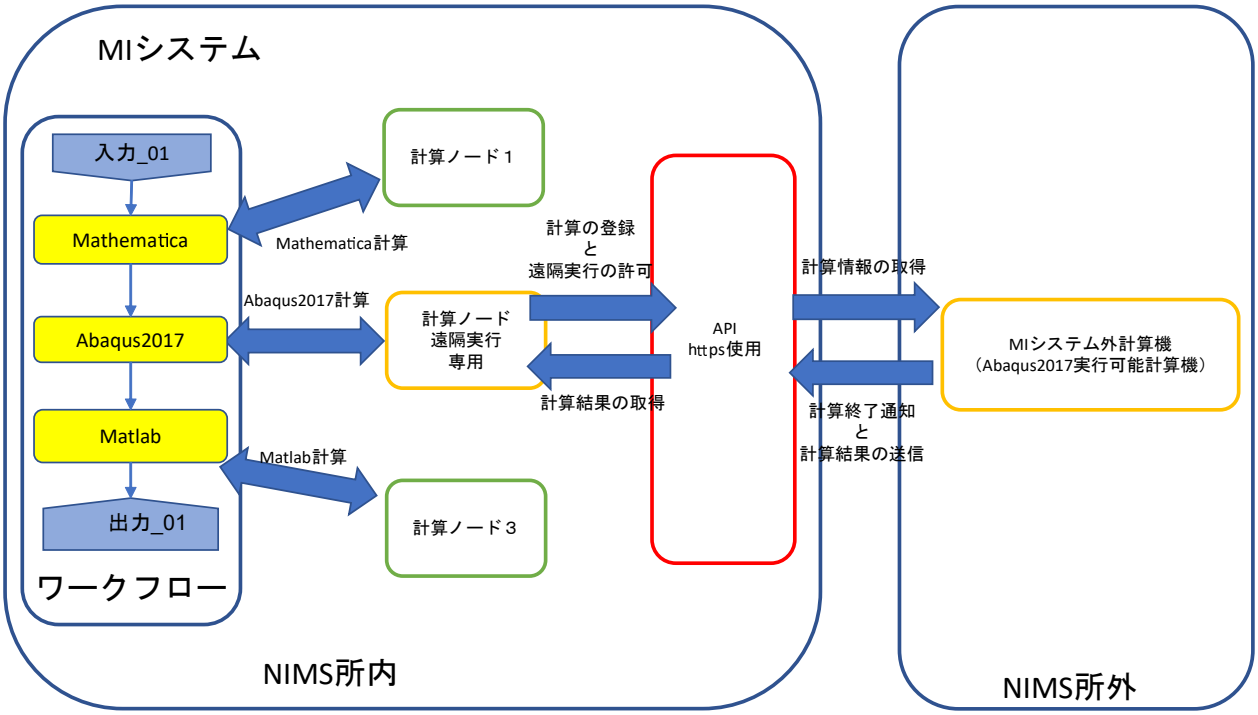
続いては API(MInt システムの API ではない) を利用したポーリング方式による方式の説明である。ssh などで直接通信が行えない組織間でも http または https での通信は可能なことが多く、これを利用することで外部計算資源の有効活用できることを狙った。

2.2.1 概要

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 http または 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。

2.2.2 実行のイメージ

この方式では以下のようなシステムを想定している。



2.2.3 ポーリングシステムの流れ

この方式でのポーリングシステムのフロー概要。

図 2.4　ポーリングシステムの流れ

2.2.4 システム要件

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）

2.2.5 用意されているサンプルワークフロー

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。

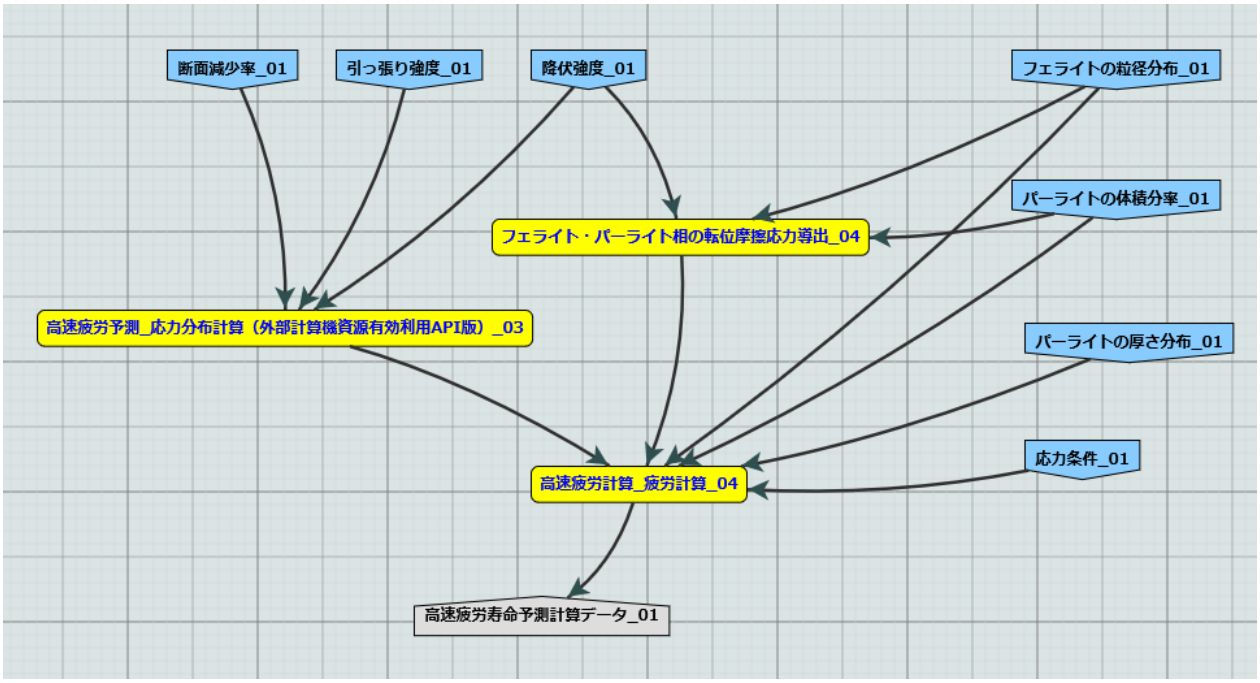


図 2.5　検証用ワークフロー

※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。

2.2.6 MInt システムでのディレクトリ

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。

2.2.7 外部計算資源でのディレクトリ

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>
```

2.2.8 外部計算機で MInt システムから実行されるプログラム

図 2.6　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。

2.2.9 MInt システムで送受信されるデータ

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 3 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。

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

3.1 事前決定事項

事前に準備する項目は以下の通り。

- 実行するプログラム
  - 事前に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を行う。
- SSH の場合
  - ssh ログインのための情報（鍵暗号方式によるパスワードなし接続が望ましい）
  - misrc_remote_workflow リポジトリの展開
- 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、利用可能なコマンドは API に事前登録しておく必要がある。
- misrc_remote_workflow リポジトリと misrc_distributed_computing_assist_api リポジトリの展開

3.2 SSH 方式

3.2.1 事前準備

3.2.2 MInt システム側

3.2.3 外部計算機資源側

3.2.4 ワークフローの準備

3.3 API 方式

3.3.1 MInt システム側

3.3.2 外部計算機資源側

3.3.3 ワークフローの準備

3.4 秘匿データの扱い

第 4 章

API 形式を独自実装するための情報

4.1 共通

4.2 リソース

4.2.1 MInt システム用

4.2.2 外部計算資源用

4.3 設定

4.4 エラー情報

以上

図目次

表目次