# 外部計算資源の利用について リリース **0.2.0**

SIP-MI

# 目次:

第1章	概要		1	
第2章	初めに			
2.1	特徵.		2	
2.2	扱う方	式	3	
2.3	使用す	るリポジトリ	3	
2.4	諸条件		4	
	2.4.1	SSH 方式でのアクセスのために	4	
	2.4.2	ポーリング方式でのアクセスのために	4	
2.5	実行さ	れるコマンド	4	
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	5	
3.1	SSH を	利用した遠隔実行	5	
	3.1.1	概要	5	
	3.1.2	実行のイメージ	6	
	3.1.3	システム要件	7	
	3.1.4	MInt システム側詳細	7	
	3.1.5	外部計算機資源の詳細	7	
	3.1.6	用意されているサンプルワークフロー	8	
	3.1.7	外部計算機でのディレクトリ	9	
	3.1.8	コマンドの流れ	9	
	3.1.9	MInt システムと送受信されるデータ	10	
3.2	API を利用したポーリング方式			
	3.2.1	概要	11	
	3.2.2	実行のイメージ	12	
	3.2.3	ポーリングシステムの流れ	13	
	3.2.4	システム要件	14	
	3.2.5	用意されているサンプルワークフロー	15	
	3.2.6	MInt システムでのディレクトリ	16	
	3.2.7	外部計算機資源でのディレクトリ	16	
	3.2.8	外部計算機で MInt システムから実行されるプログラム	17	
	3.2.9	MInt システムで送受信されるデータ	17	

第 4 章	使用方法		
4.1	事前決定	宦事項	18
	4.1.1	API 方式の場合の設定事項	19
4.2	SSH 方	式	20
	4.2.1	外部計算機資源側	20
	4.2.2	MInt システム側	20
4.3	API方	£	20
	4.3.1	外部計算機資源側	20
	4.3.2	MInt システム側	21
4.4	ワーク	フローについて	21
	4.4.1	共通事項	21
	4.4.2	SSH 方式	22
	4.4.3	API 方式	22
	4.4.4	サンプル	22
参考文献			23

# 第1章

# 概要

MInt には、ワークフローを構成する各モジュール中の任意の部分を MInt の計算ノード以外に処理させることができる「外部計算資源利用」機能がある。ユーザはこの機能を利用してローカルで処理を行わせることにより、下記のような利点が得られる。

- ローカルの部外秘プログラムを使用できる
- ローカルの部外秘データにアクセスできる
- ローカルの特殊 (MInt の計算ノードでは対応できない) 構成の計算機を使用できる
- ローカルの商用ソフトを使用できる (MInt 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、ライセンス規定により、ほとんどの場合 NIMS 所外からは利用できない)

外部計算資源の利用に際しては、MIntシステム、外部システムの双方が必要なセキュリティ水準(後述)を満たしている必要がある。また、両者間のネットワークは常時 SSL で暗号化されている。

外部計算資源には、SSH と WebAPI というふたつの方式がある。前者は MInt から外部計算機へ SSH でアクセスし、必要なデータとコマンドをプッシュする方式である。単純明快であり、外部処理を遅延なく開始できるという利点があるが、外部システム側で MInt に対し SSH アクセスを認める (ポート開放する) 必要がある点は、特に企業ではハードルが高いと想定される。一方、後者は数分程度の間隔で外部システム側から MInt に WebAPI 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 API への応答としてプルされてくる方式である。この方式では外部システム側にポート開放の必要が無いが、外部処理の開始までに最大でポーリング間隔分の遅延が生じる。

MInt でシステムが収集する情報はワークフローの各ラン (run) におけるモジュールの入口と出口の情報のみであり、モジュールの内部で一部処理を「外注」する本機能は情報収集の対象外である。SSH や WebAPI の通信内容が収集されることはない。また、SSH でもっとも広く利用されている OpenSSH には、標準で (.authorized\_keys の設定で) ユーザが MInt に実行させるコマンドを固定する機能がある。さらに、ユーザはローカルから送出されるデータを自らの裁量で十分限定することができる。

これらの仕組みによって、ユーザは安全に外部計算資源利用機能を活用することができる。下記の各章で、必要なセキュリティ条件、ならびに具体的な実装方法について記す。

# 第2章

# 初めに

外部計算機資源利用機能を活用するには、

- 1. 共同研究利用規程、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場合には、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。

# 2.1 特徴

- NIMS DMZ に配置した MInt システムの機能の一部である
  - SSH 等で外部の計算機を外部計算機資源として活用可能。
  - 専用 API システムを利用し、SSH 接続が不可能な外部計算機資源を活用可能。
- 外部計算機資源においての秘匿データを扱うことが可能である
  - 秘匿データの指定は外部計算機資源側で設定され隠蔽可能。
  - MInt システム側からはその存在は感知できない。
- 独自アプリケーションの利用を想定
  - 外部からアクセスした場合に MInt システムにアクセスした場合に利用できないアプリケーション の利用を想定。
  - アプリケーションの実行設定も外部計算機資源側で行われる。
  - MInt システムは計算結果だけを送付されるのでアプリケーション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。

NIMS の取り組みについてはこちら [activities\_of\_NIMS] を参照。

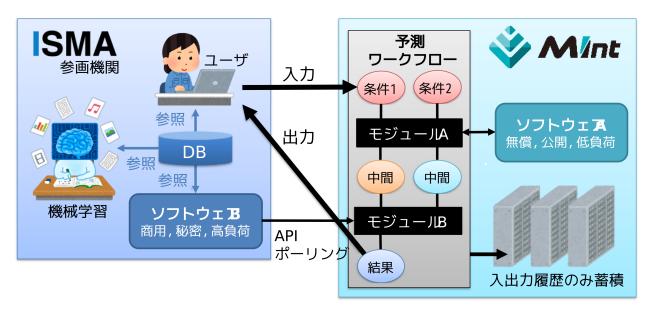


図 2.1 外部計算機資源利用機能を活用した計算のデータの流れ

## 2.2 扱う方式

本書で扱う外部計算機資源の有効活用の方法は以下の2つの形式である。

- SSH 方式
  - SSH 機能を利用して MInt 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。すべての通信は SSH 機能を利用したリモートコマンド実行により行われる。
- ポーリング方式
  - MInt システム、外部計算機資源の中間に位置する API サーバーを構築。これを利用して MInt システムの任意のモジュールの計算を外部計算機資源側からポーリングすることで遠隔計算を実行する。全ての通信はこの API サーバーを経由して行われる。

# 2.3 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 $^{*1}$  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。
  - ワークフローで使用するプログラムは「debug/mi-system-side」にある。
  - 外部計算機側で使用するプログラムは「debug/remote-side」にある。

2.2. 扱う方式 3

<sup>\*1</sup> 本機能を実現する資材などを格納したサーバーのこと。GitHub を利用する。格納場所は MInt システムが用意する。アカウント制御されており、限られたアカウントのみダウンロード可能。アップロードは MInt システムが許可したアカウントのみ可能である。クラウドサーバーの様な使い方が可能であり、ネット経由で必要なファイル(ソースコードや各種ドキュメント)をダウンロード可能なので USB メモリや CD-ROM などの物理メディアに頼る必要が無い。

## 2.4 諸条件

各方式の最低限の条件を以下に挙げる。各方式の使用開始前に必要な設定事項は後述(使用方法を参照)する。

#### 2.4.1 SSH 方式でのアクセスのために

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。

• SSH プロトコルの使用許可および使用ポートの開放。

#### 2.4.2 ポーリング方式でのアクセスのために

SSH での利用が不可能な場合、本方式を使用する。本方式はワークフロー側は直接外部計算機資源にアクセスせず、外部計算機資源側で定期的に問い合わせ(ポーリング)する必要がある。ポーリングには通常の https 通信を用いる。このための処置が必要である。

• https プロトコルの使用許可および使用ポートの開放。

### 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。

4 第 2 章 初めに

# 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、MInt 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。

#### 3.1.1 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。

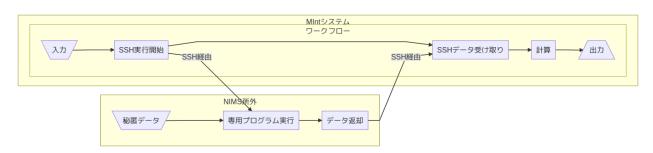


図 3.1 SSH 実行のイメージ

#### 3.1.2 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。

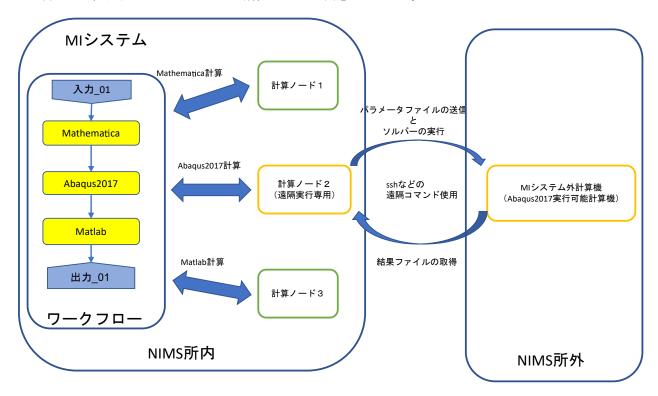


図 3.2 遠隔実行のイメージ

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 MInt 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 MInt システム外の計算機または計算機群を MInt 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。

#### 3.1.3 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。
- 外部計算機資源側
  - 外部から到達可能な場所。
  - Linux 計算機を想定する。(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。(主に実行プログラムパス、パラメータ、秘匿データの配置)

#### 3.1.4 MInt システム側詳細

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 GitHub 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。

#### 3.1.5 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

### 3.1.6 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。

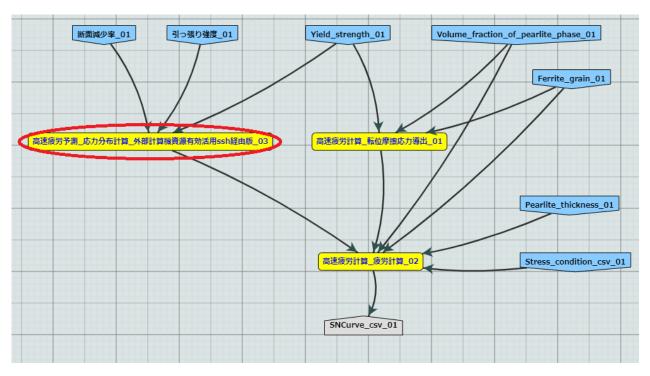


図 3.3 動作検証用のワークフロー

※赤枠の部分が遠隔実行の行われるモジュールである。

#### **3.1.7** 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
  - ワーキングディレクトリ

/tmp/<uuid>

#### **3.1.8** コマンドの流れ

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。

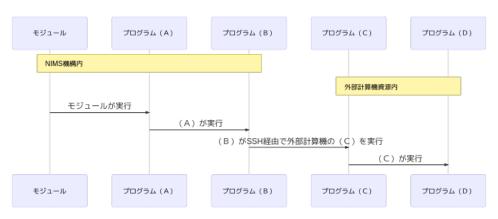


図 3.4 SSH 接続経由によるコマンド実行の流れ

- ワークフロー [予測モジュール]
  - MInt 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。
  - 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\*<sup>2</sup>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\*3 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。

#### 3.1.9 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。

<sup>\*2</sup> 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。

<sup>\*3</sup> 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。

# 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機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。

### 3.2.1 概要

API を利用したポーリングシステムとは外部計算機資源を 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、外部計算機資源側がその 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、外部計算機資源側、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機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。

### 3.2.2 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。

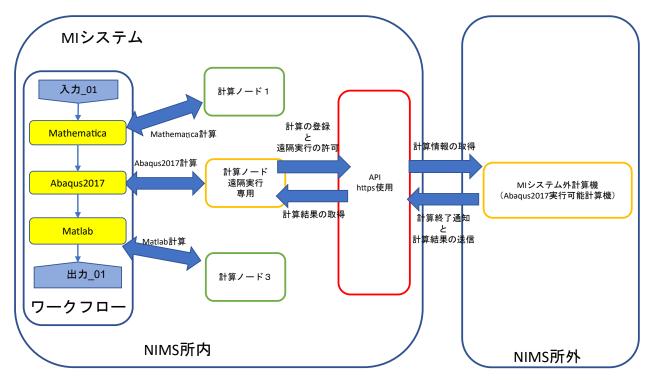


図 3.5 API を利用した外部計算機資源の利用イメージ

# 3.2.3 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。

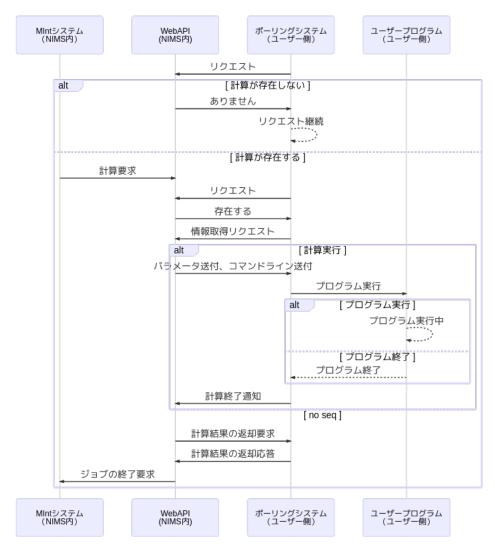


図 3.6 ポーリングシステムの流れ

#### 3.2.4 システム要件

この方式における必要な条件を記す。おもに外部計算機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である。

#### • MInt システム側

- 外部計算機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)
- 外部計算機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。

#### • 外部計算機資源側

- 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)

### 3.2.5 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。

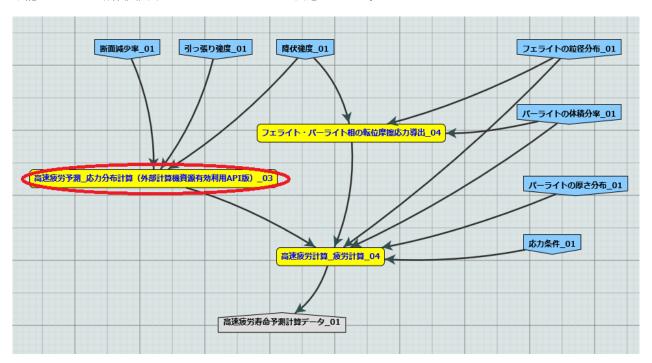


図 3.7 検証用ワークフロー

※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。

### 3.2.6 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。

#### 3.2.7 外部計算機資源でのディレクトリ

外部計算機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>

#### 3.2.8 外部計算機で MInt システムから実行されるプログラム

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。

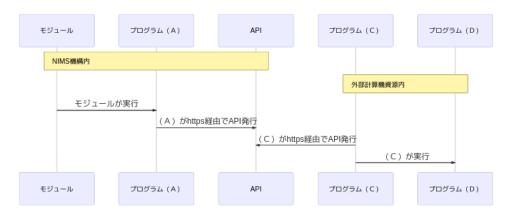


図 3.8 ポーリング方式でのコマンドの流れ

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。

#### 3.2.9 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機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
  - 外部計算機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。

#### 4.1.1 API 方式の場合の設定事項

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。

4.1. 事前決定事項 19

## 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。

#### 4.2.1 外部計算機資源側

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
$ 1s
README.md documents inventories misrc_remote_workflow.json modulesxml sample_
→data scripts
$ cd scripts
$ 1s
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」である。このため「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く。

#### 4.2.2 MInt システム側

- 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

#### 4.3.1 外部計算機資源側

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
```

(次のページに続く)

**20** 第 **4** 章 使用方法

(前のページからの続き)

```
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
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>
```

#### **4.3.2 MInt** システム側

- 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。

#### 4.4.1 共通事項

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。

#### 4.4.2 SSH 方式

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。

#### 4.4.3 API 方式

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。

#### 4.4.4 サンプル

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

# 参考文献

[activities\_of\_NIMS] NIMS の取り組みについて.pdf