arXiv:2601.04349v1 [cs.DC] 7 Jan 2026

亮点

面向科研计算的混合云架构：应用与用例

Xaver Stiensmeier、Alexander Kanitz、Jan Krüger、Santiago Insua、Adrián Rošinec、Viktória Spišaková、Lukáš Hejtmánek、David Yuan、Gavin Farrell、Jonathan Tedds、Juha Törnroos、Harald Wagener、Alexander Sczyrba、Nils Hoffmann、Matej Antol

- 我们指出，在研究基础设施、国家研究与教育网络和商业云之间，应对碎片化计算环境生态系统所面临的挑战，并将混合云架构定位为一种平衡性能、成本、可扩展性和可访问性的解决方案。

- 我们介绍了支持联邦计算、多云编排和工作负载调度的部署模型与工作流工具，同时应对互操作性、安全性和可复现性等关键挑战。

- 我们通过在 ELIXIR 计算平台工作计划中开发的功能演示器展示了实际实施，并提出了混合云采用路线图，优先考虑研究领域的治理框架和可持续基础设施发展。

面向科研计算的混合云架构：应用与用例

Xaver Stiensmeier[a]、Alexander Kanitz[b、c]、Jan Krüger[d]、Santiago Insua[e]、AdriánRošinec[f]、Viktória Spišaková[f]、Lukáš Hejtmánek[f]、David Yuan[e]、GavinFarrell[g、h]、Jonathan Tedds[g]、Juha Törnroos[i]、Harald Wagener[j]、Alexander Sczyrba[a、d]、Nils Hoffmann[d、*]、Matej Antol[f、*]

[a]计算宏基因组学研究组，技术学院，比勒费尔德大学，比勒费尔德，*33615*，德国[b]计算与系统生物学，生物中心，巴塞尔大学，巴塞尔，*4056*，瑞士[c]瑞士生物信息学研究所，生物中心，巴塞尔大学，巴塞尔，*4056*，瑞士[d]*IBG-5*，于利希研究中心有限公司，于利希，*52428*，德国[e]欧洲分子生物学实验室—欧洲生物信息学研究所，威康基因组园区，剑桥，*CB10 1SD*，英国[f]计算机科学研究所，马萨里克大学，舒马夫斯卡

*通讯作者。电子邮箱地址：xaver.stiensmeier@uni-bielefeld.de (Xaver Stiensmeier), alexander.kanitz@unibas.ch (Alexander Kanitz),j.krueger@fz-juelich.de (Jan Krüger), sinsua@ebi.ac.uk (Santiago Insua),adrian@ics.muni.cz (Adrián Rošinec), spisakova@ics.muni.cz (Viktória Spišaková), Hejtmanek@ics.muni.cz (Lukáš Hejtmánek), davidyuan@ebi.ac.uk (David Yuan), gavin.farrell@elixir-europe.org (Gavin Farrell), jonathan.tedds@elixir-europe.org (Jonathan Tedds), juha.tornroos@csc.fi (Juha Törnroos), harald.wagener@bih-charite.de (Harald Wagener), a.sczyrba@fz-juelich.de (Alexander Sczyrba), n.hoffmann@fz-juelich.de (Nils Hoffmann), antol@muni.cz (Matej Antol)网址：https://orcid.org/0009-0005-3274-122X (Xaver Stiensmeier), https://orcid.org/0000-0002-3468-0652 (Alexander Kanitz), https://orcid.org/0009-0006-4245-1653 (Jan Krüger), https://orcid.org/0000-0002-9247-243X (Santiago Insua), https://orcid.org/0000-0002-7748-5590 (Adrián Rošinec), https://orcid.org/0000-0002-2078-8638 (Lukáš Hejtmánek), https://orcid.org/0000-0003-1075-1628 (David Yuan), https://orcid.org/0000-0001-5166-8551 (Gavin Farrell), https://orcid.org/0000-0003-2829-4584 (Jonathan Tedds), https://orcid.org/0000-0001-9216-0455 (Juha Törnroos), https://orcid.org/0000-0003-1073-4991 (Harald Wagener), https://orcid.org/0000-0002-4405-3847 (Alexander Sczyrba), https://orcid.org/0000-0002-6540-6875 (Nils Hoffmann), https://orcid.org/0000-0002-1380-5647 (Matej Antol)

525/33，布尔诺，*60200*，捷克[g]*ELIXIR Hub*，威康基因组园区，，剑桥，*CB10 1SD*，英国[h]生物医学科学系，帕多瓦大学，乌戈·巴西街*58/B*，帕多瓦，*35131*，意大利[i]芬兰科学信息技术中心（*CSC*）有限公司，邮政信箱*405*，埃斯波，*02101*，芬兰[j]柏林健康研究所（隶属柏林夏里特医科大学），路易森大街*65*号，柏林，*10117*，德国

摘要

科学研究日益依赖稳健且可扩展的 IT 基础设施，以支持复杂的计算工作流。随着科研基础设施、国家研究与教育网络以及商业云服务提供商所提供的服务不断涌现，研究人员必须在由各种计算环境组成的碎片化生态系统中做出选择，并在性能、成本、可扩展性和可访问性之间寻求平衡。混合云架构通过整合多个计算环境来提升灵活性、资源利用效率以及对专用硬件的访问能力，为此提供了颇具吸引力的解决方案。

本文全面概述了混合云部署模型，重点介绍网格和云平台（OpenPBS、SLURM、Open- Stack、Kubernetes）以及工作流管理工具（Nextflow、Snakemake、CWL）。我们探讨了联邦计算、多云编排和工作负载调度策略，并解决互操作性、数据安全、可复现性和网络性能等关键挑战。本文借鉴了生命科学领域的实践，这些实践由 ELIXIR 计算平台协调，并融入更广泛的欧洲开放科学云（EOSC）背景；同时提出了一条路线图，以加速科研计算领域的混合云采用，重点强调治理框架和技术解决方案，从而推动

可持续且可扩展的基础设施开发。关键词：混合云、多云、工作流管理、科研基础设施、EOSC、ELIXIR、联邦计算

不同科学领域的研究社群需要日益强大且可扩展的 IT 基础设施来支持其项目。这些需求可能涵盖巨大的计算能力和存储容量，也可能涉及利用图形处理器等计算资源的专业应用。为满足此类基础设施需求，各国及国际层面正持续在 ESFRI研究基础设施、国家研究与教育网络及其他类似设施中建设计算资源。此外，商业IT服务提供商也开始提供种类更丰富的服务，为研究活动提供支持。

为了充分利用这些多样化的计算基础设施并优化其使用，研究人员及其支持机构必须不断将计算工作流部署到最合适的环境中。然而，与其留在可能并非最优的环境中，转而在不同计算环境之间迁移，需要研究人员投入额外的时间和精力，并具备相应的技术专长，以规划和执行此类迁移。

利用混合云架构可以部分应对这些挑战。混合云架构指无缝组合多个不同云环境的理念。这种多环境部署有望提高可扩展性、拓展可用功能、降低成本，并提供对图形处理器等特殊资源的访问。

在各类研究用例中，采用混合

云架构最主要的驱动因素是可扩展性、获取专用计算资源，以及日益增长的敏感数据访问需求 [1], [2], [3]。

本文为研究人员如何利用多种计算环境，并采用多样化的混合云部署模型来执行科学计算工作流，提供了新的见解。具体而言，我们聚焦于基于 OpenPBS [4], SLURM [5], OpenStack [6]和 Kubernetes [7]构建的网格和云系统。我们使用工作流管理器 NextFlow [8], Snakemake [9] 和 CWL [10]，探讨了若干用例场景。不同科学领域的研究人员都在使用这些环境和工作流管理器 [11]„ 不过我们的演示项目具体聚焦于生命科学领域的用例。

本文可视为迈向消除研究人员障碍的一块基石，这些研究人员希望通过 ELIXIR Europe 和欧洲开放科学云生态系统 [12]内外的科研基础设施，优化对计算能力的利用。具体而言，本文概述了多种方法，以便在单个计算流水线中无缝访问多种计算和存储环境。

术语和缩写

专用集成电路 应用专用集成电路

欧洲开放科学云 欧洲开放科学云

EHDS 欧洲健康数据空间

ELIXIR 欧洲生命科学基础设施

ESFRI 欧洲研究基础设施战略论坛

FAIR 数据 可查找、可访问、可互操作且可重用的数据**现场可编程门阵列** 现场可编程门阵列**GAIA-X** 欧洲数据与云
AISBLGDI 基因组学数据基础设施**GDPR** 通用数据保护条例

GÉANT 面向科研与教育群体的泛欧洲数据网络

图形处理器 图形处理单元**高性能计算** 高性能计算**基础设施即服务** 基础设施即服务**国际标准化组织** 国际标准化组织**函数即服务** 函数即服务**容器即服务** 容器即服务**软件即服务** 软件即服务**国家研究与教育网络** 国家研究与教育网络
OCRE 面向研究环境的开放云**操作系统** 操作系统
OpenPBS 可移植批处理系统 - 高性能计算作业调度

SLURM Linux 简易资源管理工具 - 高性能计算作业调度

流处理单元 流处理单元

1. 研究计算的演进格局：从网格到云及更广阔的领域

1.1. 科研基础设施与服务

科学界构成了一个庞大而充满活力的生态系统，其核心是大学、研究机构和科研基础设施。大学和研究机构为科学家专注于科研与教育提供了肥沃的土壤，而科研基础设施则将特定领域内的科学家联结起来，形成跨越国界并延伸至国界之外的网络，为合作奠定基础，并为领域特定创新的起步创造空间。因此，科研基础设施能够营造促进协作、创新和服务交付的环境，而不受国家及大学隶属关系的限制。

科研基础设施、科学界和其他设施之间的国际合作已持续数十年。在欧洲，所谓的 ESFRI[1] 认可了 60 多个具有泛欧洲意义的科研基础设施 [13]。除了科研基础设施之外，欧洲国家研究与教育网络中还出现了另一种支持研究的环境。这些网络在名为 GÉANT [14]的单一协会以及 EGI 基金会内共享专业知识，共同推动研究、教育和创新；EGI 基金会

[1]欧洲研究基础设施战略论坛

负责运营并为个别研究人员和科研基础设施提供计算基础设施 [15]。所有这些基础设施以及其他跨科学领域汇聚研究人员的机构，都在持续开发和维护稳健的环境，以存储、处理和分析数据，而这些工作正是现代研究活动的核心。

这些基础设施和机构之间以及内部的合作，最近得到了欧洲开放科学云（EOSC）相关努力的进一步加强。欧洲开放科学云旨在为欧洲研究人员、创新者、公司和公民提供一个联合且开放的多学科环境，使他们能够出于研究、创新和教育目的发布、查找并重复使用数据、工具和服务。这些数据应遵循FAIR原则 [16], ，即采用能够使数据更易发现、更易访问、可互操作且可复现的方法。因此，欧洲开放科学云不仅涵盖数据管理，也涵盖数据处理，因为科学数据的价值在于对其进行分析并应用于解决研究问题。

1.2. 学术计算——网格、超级计算机和云

目前，用于处理海量科学数据的最先进环境通常采用批处理 [17], ，而批处理通常被设计为由多个具备计算资源的站点组成的分布式系统。高性能计算（HPC）中使用的集中式系统是超级计算机，配备了用于计算、网络和存储的高度专用硬件。它们在资源访问方式和整体架构上都体现了网格系统的理念，但将硬件与计算资源的物理位置集中起来，以尽可能降低延迟并优化吞吐量，通常还会配备图形处理器等加速器硬件，或

流处理单元（图形处理器、流处理器）、神经网络处理器和张量处理器（神经网络处理器、张量处理器），或定制的专用集成电路。网格系统由于其专业化特性，在面对更复杂的场景时往往显得过于僵化，这为新兴云技术创造了发展空间。云技术正日益普及，因为它们消除了网格系统的一些特有缺点，同时也为分布式计算方法带来了新的机遇。

云计算中的 [18], 服务模型为虚拟化和专用计算资源的资源配置提供了一套全面的抽象框架。服务模型的首要作用是抽象控制层级并分配责任。在最低层，基础设施即服务（IaaS）用户自行管理完全专用的硬件资源、托管服务、操作系统（OS）及其后续各层。在最高层，软件即服务（SaaS）用户只需与微服务架构交互，并利用云服务提供商创建、管理和提供的各种服务构建自己的应用（图 1）。这两个极端勾勒出云服务模型的范围，其中各有诸多优缺点值得考量。近年来的发展，例如容器即服务（CaaS），兼具平台即服务（PaaS）和软件即服务（SaaS）的特点；而函数即服务（FaaS）则提供了更高层次的抽象，将可组合的独立函数直接开放给使用者或客户。

如今，网格和云环境在研究用途上相互补充。研究人员必须选择并权衡不同定价模型及其成本、功能、应用、可用性、专业支持、与资源的物理距离等因素。他们还

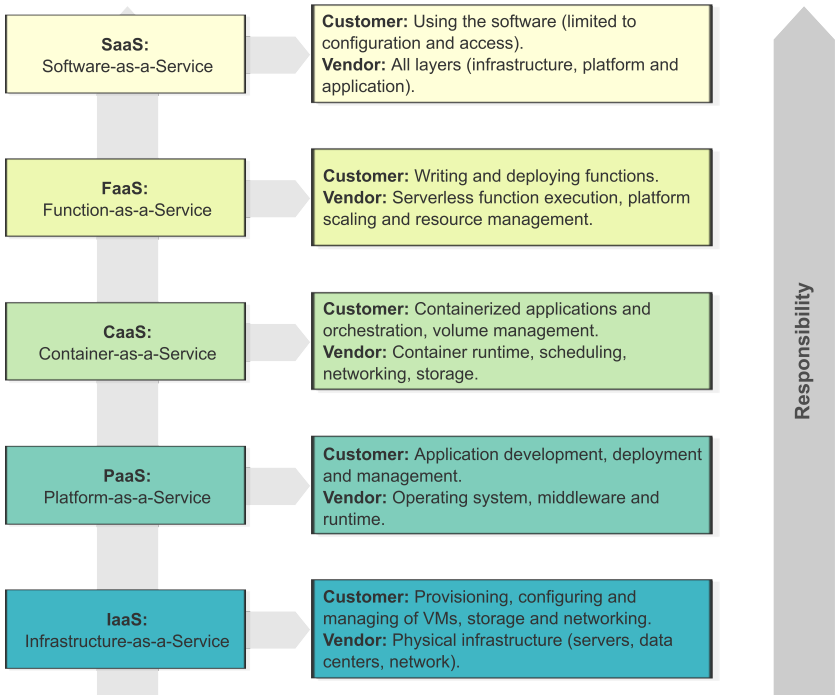

图 1：从下到上的服务类型抽象，以及客户与供应商在实施和运维方面所承担的相应责任级别。IaaS：基础设施即服务；PaaS：平台即服务；CaaS：容器即服务；SaaS：软件即服务；FaaS：函数即服务。从下到上，关于开发、资源配置和运维的更多责任逐渐从客户转移至供应商。

不仅要花费时间和资源来选择最佳环境，还要先梳理并比较所有可用选项。最后但同样重要的是，选择某个特定环境也意味着预先决定后续开发和未来投资，不论需求和可用解决方案如何变化，这种决定往往会持续到所选环境在物理上或经济上不再可行。部署在虚拟化商用硬件和基础设施上的容器化服务具有灵活性，已显著减轻了这一负担。但即便如此，迁移以往的工作以及学习新技术和服务仍然需要耗费时间和培训成本。

1.3. 部署模型

上述数据处理环境在使用方面各有优缺点，其中包括但不限于可扩展性、服务特性和功能。此外，不论技术层面存在何种限制，不同发行版和特定环境的实现都会根据已知偏好，在配置中进行必要的权衡；而真正的创新需要灵活性，这种做法却造成了人为障碍。因此，考虑能够将所有这些资源整合在一起、避免不必要壁垒，并充分发挥它们协同优势的架构，是顺理成章的。

根据 ISO/IEC 22123(2023) 的定义 [18], ，我们将采用以下云部署模型:

虽然部分云基础设施可归类为公有云，尤其是商业提供商提供的云基础设施，但大多数用于科学研究的云基础设施都属于社区云。根据其运维

模式，这些云可能由多个站点组成，这些站点由同一法律实体运营；也可能由多个站点组成，这些站点由彼此独立的法律实体运营，并通过共同的政策、流程和合同约束，形成联邦云。[19]

混合云的云基础设施 [20]由两个或更多相互独立的云基础设施组成，例如公有云和私有云。尽管这些基础设施各自独立，但它们通过标准化且通常为专有的技术相互连接。得益于这种连接，应用和数据可以在不同基础设施之间移植。当存在隐私问题时，以支持数据和应用可移植性的方式连接私有基础设施与公有基础设施会带来益处，因为机密数据可以存储在私有基础设施中。

多云 [18] 基础设施采用并支持使用两个或更多相同部署模型的环境（例如，多个独立的公有云）。这种架构的主要优势在于，通过构建高可用解决方案来提升可靠性：如果任何提供商的云服务暂时不可用，应用就会部署到另一家提供商的基础设施中，作为被动或主动故障转移方案。

1.4. 当前计算技术格局

容器化、工作流管理器和通用执行平台相结合，为管理多样化的计算工作负载奠定了基础。这使组织能够受益于更精简的运维和更强的可扩展性。

容器化。 容器化已成为现代云环境中的一项基石技术。Docker 等工具创建的容器

[21] 或 Apptainer（原名：Singularity） [22]将应用及其依赖项封装起来，确保它们在不同环境中都能一致运行。这项技术简化了应用的部署与管理，同时促进了可扩展性和可移植性。容器对于确保软件组件可靠且可复现地运行至关重要，因此成为云原生应用的基础构件。
BioContainers 等倡议 [23], 致力于推动容器技术在生命科学和生物信息学领域的应用，帮助规范容器的使用并提供快速获取工具的途径。这种方法应对了研究人员在生物信息学工具的可复现性、软件依赖项和可移植性方面面临的挑战。

工作流管理器。工作流管理器在科学计算和《生物信息学》中发挥着关键作用，为设计、执行和管理复杂的计算工作流提供了系统化的方法。它们帮助研究人员简化分析流程、提升可复现性并加强协作。常见的工作流管理器包括 Apache Airflow、Nextflow、CWL 和 Snakemake。

常见执行平台。 多个云平台以及 Kubernetes 等特定技术都原生支持常见的执行平台 [24]。例如，Nextflow 支持在单个工作流中使用多个执行器，在不同环境中执行任务并进行作业调度和执行，例如使用 SLURM 或 Kubernetes。

2. 研究计算面临的挑战

本章简要介绍科学家在使用计算环境时遇到的主要挑战。

质量和数量方面的资源匮乏。 资源匮乏是最大的挑战。通常，本地基础设施始终缺乏最先进的硬件和软件，尽管它们往往更适应其社群的需求。此外，由于共享资源池的限制，用户也可能无法使用现有资源。在这方面，主要的公共云服务提供商更加灵活，通常也能保证更高的资源可用性；但它们提供的服务性质更加通用，因此用户需要投入更多资源用于工作流和应用管理及开发。

集成与互操作性。另一个问题是不同环境中各项功能的集成与互操作性。商业云服务提供商更深入地参与创建服务，使科学界能够借助 GAIA-X 或 OCRE 项目使用这些服务，从而轻松获取额外资源，但与此同时，也意味着需要通过专有 API 进行集成，这可能导致供应商依赖。此类服务的例子包括 Google LifeScience API 和 Microsoft Genomics。使用这类服务通常有助于降低入门门槛，因为所有必需的服务都由同一家供应商提供，因此在同一生态系统内彼此兼容；但这也意味着灵活性降低，一旦当前服务停止提供，或因法律或财务原因不再可行，就难以切换到其他服务，

时更是如此。

可靠性与高可用性。 确保高可用性 [ISO 3.13.7“可用性”] 对于特定计算任务至关重要。在不同环境中执行作业的能力可提升高可用性，避免某一环境发生重大中断并影响其他环境。工作负载管理器发挥着关键作用，可自动将未成功的作业重新调度到仍在运行的环境中。

此外，这种跨环境能力还适用于灾难恢复场景。如果某个云无法访问，镜像到其他环境中的数据仍可访问，从而为维持数据可用性提供可靠的策略。

可复现性。 研究表明，科学家受到强烈激励，更倾向于发表正面结果而非负面结果 [25] ，并且有人鼓励他们在未验证研究方法和结果的情况下，反复重新提交被拒绝的论文 [26] 。因此，令人担忧的是，大量研究结果无法以任何方式复现、验证或确认 [27], [28]。计算基础设施应通过支持可复现性原则来解决这些问题[29]。值得探索的方向包括容器化服务、软件质量与保障实践（如持续构建与测试）、软件和计算流水线的版本管理，以及对计算资源（物料清单，例如处理器型号、GPU 型号、网络硬件等）和软件参数的清晰文档说明。

需要运行各种生物信息学工具，其中一些工具高度依赖常用库及其特定版本，这在更换执行环境或运行工作负载时构成了主要障碍之一

在多云或混合云环境中运行工作负载。Docker 和 Singularity 等容器技术通过捆绑软件及其依赖项，显著提升了可移植性，从而使这类软件能够更轻松地、不受平台限制地作为科学工作流的一部分重复使用。

溯源。由于资源分布式的特性，在混合云环境中进行溯源跟踪尤其具有挑战性，因此需要高效的元数据管理，并实施兼容的溯源跟踪工具，例如 ProvONE [30] 或 Apache Atlas [31]。这些工具有助于维护全面的数据沿袭和计算历史记录，这对确保科学诚信和验证至关重要。

此外，在混合云环境中贯彻 FAIR数据原则也面临额外的障碍。要确保数据在各种云环境中均可被发现和访问并非易事，因为每种环境都有各自的安全机制和访问协议。此类环境中普遍存在的数据格式和系统各不相同，使互操作性问题更加突出。为提高数据可重用性，研究人员必须重视标准化的数据文档实践，并在可行的情况下采用开放许可证。

数据量与流动性。在基因组学、蛋白质组学和高分辨率医学影像等领域，高效管理海量数据并确保数据能够顺畅流动至关重要。基因组学项目会产生数 TB 的测序数据，而蛋白质组学和影像研究则会生成复杂的多维数据集，需要可扩展存储、强大的处理能力，以及在研究中心与云环境之间快速传输数据。然而，网络限制、延迟和严格的安全协议使这些传输变得复杂，也凸显了分布式架构的必要性

以及可互操作的管理策略。通过结合分布式数据管理、自适应网络策略和可互操作的基础设施，混合云能够有效解决网络延迟、带宽限制和供应商锁定等问题，从而打造更灵活、更具韧性的研究环境。

数据完整性、敏感性与安全。 越来越多的研究活动要求科学家考虑所处理数据的敏感性质。在生命科学领域，敏感数据通常需要在医学、健康和药学研究的交界处进行处理，这带来了法律和技术挑战。必须应对与敏感数据研究相关的法律和安全问题。通用数据保护条例 [32] 等法规和法律在国家和国际层面持续发展，对科学家如何协作处理敏感数据提出了日益严格的要求和限制。

多个项目和倡议正致力于弥合协作需求与敏感数据处理之间的差距，涵盖从欧洲健康数据空间（EHDS） [2], 这一构想，到基因组数据基础设施（GDI） [33]等重点明确的活动。

因此，联邦式架构被用作蓝图，以促进自治、去中心化节点之间的互操作性和信息共享——数据仍保留在司法管辖边界内，而元数据则集中存储并可供搜索。混合云和多云架构完全属于这一类别，因此可能是处理敏感数据的分布式环境的合适模式。

运营成本与环境影响。 使用商业和学术服务提供商提供的云资源，需要同时优化成本和CO_2 碳足迹。在欧盟绿色协议议程 [34]的推动下，提高数据中心能效并转向可再生碳中和能源，得到了大力鼓励。然而，能源和供应商价格不成比例地上涨，可能会削弱这些效率提升在运营成本方面带来的收益。因此，需要利用自动扩缩容功能（由 SLURM 和 Kubernetes 提供）以及可抢占实例或竞价 实例，帮助客户降低运营成本；但由于这类实例具有短暂性，用户管理起来较为复杂。

3. 研究中的混合云架构

本章介绍五种截然不同的架构方案，可将其理解为面向科研应用的混合云。我们借助直观的“层”概念来介绍这些方案，从最基础、由用户驱动的场景出发，逐步探讨联邦、任务执行和工作流管理，最终介绍构建于基础设施层之上的混合云。这些方案是在 ELIXIR 计算平台 2022年至2023年工作计划的一部分中进行探索的。

为便于理解，我们将用例与其开发的初衷一并呈现，因为这些用例是由特定的服务应用场景和领域需求驱动的。不过，所呈现的实现方案也可以调整，以满足更广泛的需求。

3.1. 手动或朴素方法

混合/多云架构的手动方式包括：将相互独立的数据拆分为批次，手动将这些批次分发到不同的云，作为容器化工作流的输入，并将结果汇总到公共存储服务中。

每个云使用容器化工作流，即借助容器框架对工作流各步骤所需的工具进行打包与隔离，并使用工作流管理器来编排数据的输入/输出与计算。在生物信息学中，一个典型示例是在兼容 SLURM 的执行平台上运行的 Docker 与 Nextflow。该工作流为输出定义公共存储。

为使每个云获得可保证无缝执行的公共执行环境，建议采用基础设施即代码方法，并配合 BiBiGrid 或 Terraform 等自动化工具，以提高基础设施可复现性。

图 2 展示了针对 OpenStack 云的手动方法，其中 Nextflow 工作流在 SLURM 上执行。输出通过 FTP 存储到公共存储中。如果数据批次相互依赖，该方法并不实用，因为需要对数据批次进行多次手动分发。因此，以下方法将数据分发自动化。

3.2. 基于集中式元数据存储库的联邦计算与数据暂存

为改进前述方法的总体思路，可以自动化数据批次分发。还可以让混合云或多云环境中的作业调度更加灵活，以便高效处理持续

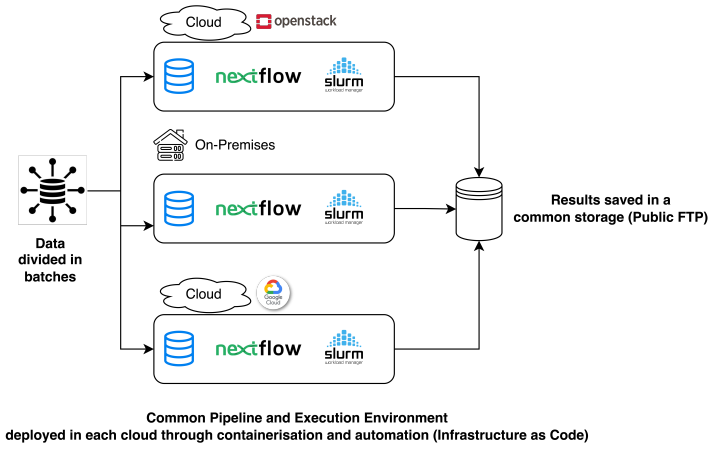

图 2：分别部署到三个不同云或本地部署环境中的 Nextflow 和 SLURM 环境的部署与执行流程。数据从源端（左侧）流入，随后被拆分为多个批次，分别在三个环境中的某一个环境内独立执行，之后结果数据在公共存储（右侧）中重新合并；本例中的公共存储为 FTP。

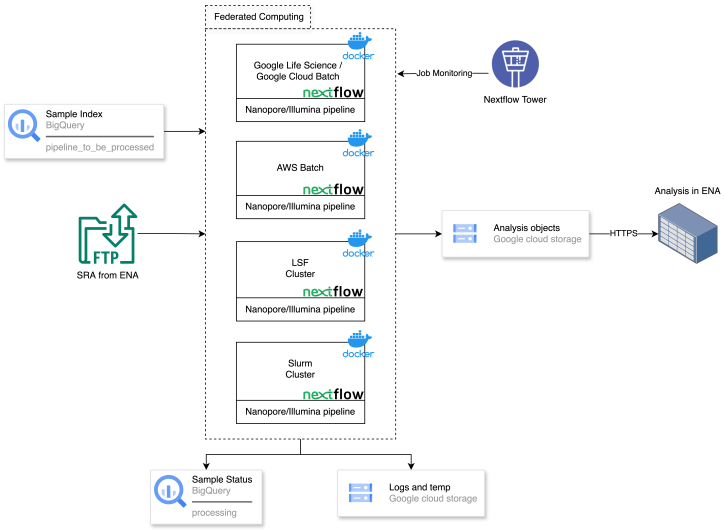

图3：第二种方法中高级解决方案的一种实施。利用多个高性能计算集群和多个云（如 GCP 和 AWS）之间的联邦计算，对 COVID-19 大流行期间的 SARS-CoV-2 基因组进行了系统分析。

不断演化且相互依赖的数据 [35]。第二种方法（图3）为这些改进提供了两种解决方案。两种方案都采用了一个轻量级集中式元数据服务器，所有独立云均可访问该服务器，以获取有关应使用哪些数据的信息。该数据跟踪系统可以跟踪数据流转过程：从待处理状态，经处理后进入成功或失败的输出状态。[36] 这是通过标记元数据实现的。虽然一种简单的方法是使用中央控制器——一个主导工作流系统——来调度作业至各个云的工作流系统，但这也引入了单点故障和性能瓶颈。更先进的方法则消除了中央控制器，依靠元数据仓库自主运行。

联邦执行环境

在这种方法中，每个执行环境都自主运行，仅与元数据仓库交互。执行环境通过在仓库中标记输入数据的元数据来预留一批输入数据，以自身的速度和容量执行分析，并在该批数据处理完成后再次更新元数据。随后，根据成功或失败的状态，相应地标记输入数据的元数据。所有联邦执行环境共同独立地朝着同一目标努力。输入数据和输出数据都无需存储在公共存储中，从而最大限度地减少昂贵的数据传输运维。得益于轻量级元数据仓库，联邦执行环境模型保证了近乎无限的可扩展性。

3.3. 虚拟专用网络基础设施上的覆盖网络与多云

这种方法着重于通过虚拟专用网络抽象来提升易用性，并借助云集群创建与管理工具 BiBiGrid [37] 自动部署以实现可复现性。目前，该工具仅支持 OpenStack。

通过 Wireguard VPN [38]，一个 SLURM 集群横跨整个混合云或多云部署；Dnsmasq [39] 提供名称解析，使用户能够将混合云或多云视为单个云。所有节点通过网络文件系统在虚拟专用网络中交换数据。此设置使单个工作流系统（例如 Nextflow）能够通过在 SLURM 集群上运行来利用整个混合云或多云；随后，SLURM 集群会将作业调度到虚拟专用网络中的任意节点（图 4）。

用户可以通过指定资源、特性和分区需求，完全掌控作业调度。BiBiGrid 会自动为每个环境创建一个 SLURM

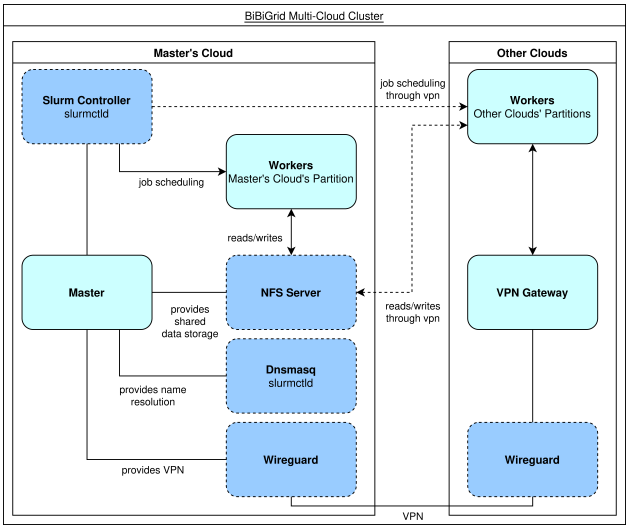

图 4：BiBiGrid 多云集群示意图。主部署（包括主服务器）负责本地和远程作业调度（后者通过 VPN 隧道实现）。使用 Dnsmasq 和 WireGuard 设置 VPN，可创建一个跨多个云的虚拟执行环境。读写数据的访问由中央网络文件系统服务器提供，远程云也可通过 VPN 访问该服务器。

分区，使作业能够调度到特定的云上。资源和特性需求可确保作业被调度到合适的节点。

后续开发将着重于在混合/多云部署场景中重新评估并改进 SLURM 的调度决策，以及优化不同云之间的数据共享。可使用 BiBiGrid 混合云 ELIXIR 实践教程 [40] 搭建所提出的混合/多云解决方案。

3.4. 构建于工作流管理层之上的多云

本节探讨如何在混合云环境中最大限度地提高资源利用率。该环境由一个规模较小但可靠的 Kubernetes 集群和一个规模较大但可靠性较低的 OpenPBS 集群组成。解决方案的核心是开发一种准入控制器，它能够透明地拦截 Kubernetes API 调用，并在 Kubernetes 达到最大容量时将这些调用无缝路由至 OpenPBS 集群。[41]

由于连接到 Kubernetes 和 OpenPBS 集群的存储系统之间无法直接访问，数据管理面临着重大挑战。OpenPBS 中运行的作业通过 sshfs 挂载输入和输出数据，并在类似临时目录的目录中进行计算。由于在我们的场景中 SSH 代理必须具有公网 IP 地址，而公网 IP 地址通常十分稀缺，因此我们使用单个代理来处理多个作业。

该运算符使用 Nextflow Sarek 流水线 [42] 实现。该流水线使用原生 Kubernetes 执行器（kuberun），通过 Kubernetes API 直接在 Kubernetes 中运行流水线的每个部分。该流水线中一些请求更多资源的作业可以由我们的运算符迁移到 OpenPBS 集群，随后整个流水线成功完成。

限制

拟议的运算符存在一些局限。首先，仅支持单节点任务，也就是说，由于 Kubernetes 集群与 OpenPBS 集群之间不支持网络连接，因此无法迁移基于 MPI 的多节点作业。其次，仅支持单容器作业。这主要是实施方面的限制，而非概念上的限制；不过，Singularity 不提供任何边车容器机制，因此在这种情况下，可能需要将 OpenPBS

作业部署在同一位置。第三，通过 sshfs 访问数据的性能未经过优化，不适合用于生产环境，因此需要更好的解决方案。事实证明，要找到一种足够通用、可部署于不同环境的解决方案颇具挑战。待应用和工具广泛采用 S3 存储后，可以将其用作替代方案。

3.5. 基于任务执行层构建多云

全球基因组学与健康联盟 (GA4GH) [43] 正在制定生命科学领域负责任的数据共享标准。其中一项标准——任务执行服务 (TES) API 规范 [44], ——支持在各种计算后端上执行容器化工作负载，从而实现混合云和多云用例。

围绕 TES 规范构建的服务生态系统正在不断壮大，其中包括用于原生云集群、高性能计算/高吞吐计算集群以及一家成熟的全球云服务提供商的多种实现；一种可将任意中间件注入 TES 请求的网关 TES 实现；以及客户端实现，包括支持 TES 的工作流引擎，如 Snakemake、 [45], Nextflow 和 CWL-TES。

为展示 TES API 的混合云和多云能力，ELIXIR Cloud 与 GA4GH 的 AAI Driver Project 正在不同类型的计算集群前搭建 TES 部署联邦网络。在此设置中，TES 网络位于一个网关之后，网关配备了中间件，充当反向代理 ，根据尽量减少数据传输的规则，将传入的 TES 任务（例如来自兼容的工作流引擎或另一个 TES 客户端）分发到整个网络中。具体而言，每个计算作业都会发送到物理位置最靠近输入数据的 TES 节点。作业

会在该节点上运行，输出则写入集中式的基于 S3 的云存储（图 5）。研究人员基于一个包含散播-收集步骤的简单 Snakemake 工作流开发了演示系统，以展示任务在该网络中的分发方式 [46]。

TES 社区正积极致力于解决现有局限（例如，缺乏用于传递存储访问凭据的标准化机制），具体措施包括改进标准、升级 TES 生态系统中的服务，以及实施更复杂、更贴近现实的用例。ELIXIR 计算平台的新计划也聚焦于改进身份验证、数据安全、多云配置和溯源跟踪，所有这些都有助于推动 TES 标准及其生态系统的发展。

4. 结论与未来工作

本文指出，选择合适的计算环境是一项具有挑战性且影响深远的决策（1.2）。混合云和多云解决方案可以整合多个环境，限制较少（1.3），因此正变得日益重要，前提是能够在底层基础设施之上实现适用于存储和计算的恰当抽象。

此外，研究计算面临的一些主要挑战，例如资源匮乏、互操作性、高可用性以及敏感数据的处理（2），都可以通过混合云或多云架构（3）来应对。

由于实现混合云和多云环境的方式多种多样，我们探索了从项目级（3.1、3.3）到组织级和联合体范围解决方案（3.2、3.4、3.5）的各种方法，展示了满足不同研究需求的灵活性。

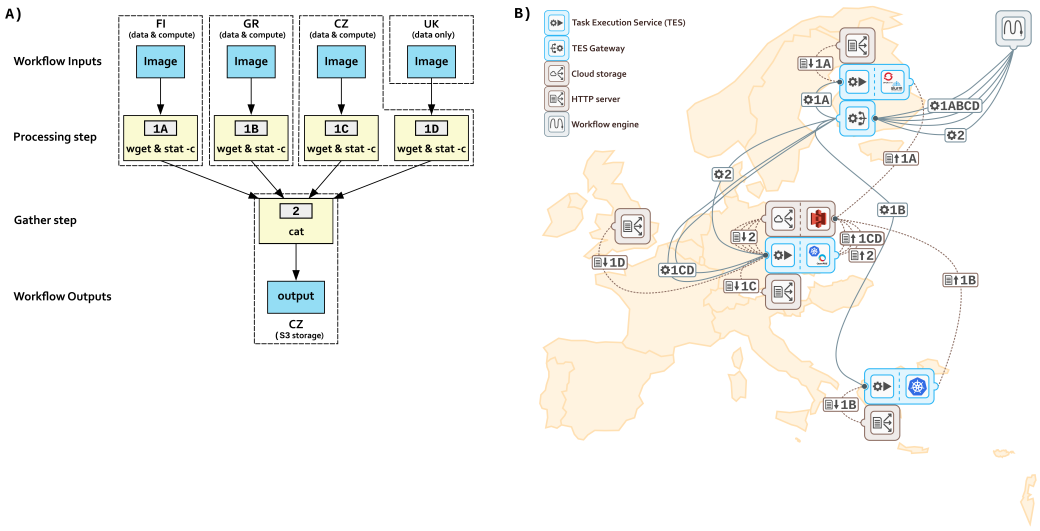

图 5：通过 TES 网关执行工作流，可将各个顺序或并行的工作流步骤细粒度调度至适合的 TES 节点上执行，例如地理位置最近的节点。TES 网关、节点和客户端之间的集成，可透明地执行映射／归约或分散／收集类型的工作流任务。由于支持 Nextflow、Snakemake 和 CWL 等多种工作流引擎，TES 能够实现与工作流引擎无关的执行。

通过实施复杂程度各异的多种多云方法（3），从手动配置到自动配置，我们表明多云方法已投入实际运用。接下来主要取决于基础设施来部署这些方法，以及研究人员决定是否使用这些部署方案。

我们认为，未来能否更广泛地采用多云解决方案，取决于两个关键因素。首先，尽管学术界和研究基础设施的多样性构成了丰富的计算环境生态系统，但也凸显了技术上的挑战：缺乏通用的服务供给模式、标准化和互操作技术。其次，这些系统的发展有赖于强有力的治理促进因素，通过协调一致的政策、可持续融资和支持性框架，推动组织间与国际合作。要充分释放混合云架构在生命科学研究中的潜力，解决技术和治理方面的挑战至关重要。

未来工作应着重利用欧洲开放科学云（EOSC）的协作框架以及技术和语义互操作性框架。随着首批 EOSC节点的建立，并遵循《EOSC 联盟手册》 [47], ，这些技术基础也有望支持建立共同治理模型，以实现无障碍互操作性，尽管这在很大程度上仍是一个政治和法律问题。只有与现有科研基础设施生态系统（如 ELIXIR）密切合作，才能实现这一模型；这些基础设施在协调技术社群和科学社群方面发挥着不可或缺的作用。

5. 利益冲突声明

作者声明，他们不存在已知的可能影响本文所报告工作的竞争性经济利益或个人关系。

6. 致谢

本研究是由 ELIXIR-Europe 资助的计算平台任务 2 委托服务 2022-ECP2 的一部分。本研究得到了德国生物信息学基础设施网络（de.NBI）旗下 de.NBI 云以及 ELIXIR-DE（于利希研究中心和 W-de.NBI-001、W-de.NBI-004、W-de.NBI-008、W-de.NBI-010、W-de.NBI-013、W-de.NBI-014、W-de.NBI-016、W-de.NBI-022）的支持。本研究的部分工作在 ELIXIR CZ 研究基础设施（项目编号 LM2023055，捷克教育、青年与体育部）的支持下完成。

7. 数据可用性

数据已尽可能公开，并在相应位置注明引用。根据请求，可针对个别情况提供其他数据。

8. 关于使用人工智能的声明

在准备本作品期间，作者使用 DeepL Write 改进原稿的语法、句子结构和文风。使用此工具/服务后，作者根据需要审阅并编辑了内容，并对已发表文章的内容承担全部责任。

参考资料

[1] EOSC TITAN 项目 [在线] (2026年1月) [引用日期：2026-01-07]。

[2]欧洲健康数据空间 - 欧盟委员会 [在线] (2024年4月) [引用于 2026-01-07]。

[3] 欧洲可信研究环境网络（EOSC-ENTRUST）项目 [在线](2025年2月) [引用于 2026-01-07]。

[4] OpenPBS 开源项目 [在线](2026年1月) [引用于 2026-01-07]。

[5] Slurm 工作负载管理器 [在线] (2023年7月) [引用于 2026-01-07]。

[6] OpenStack [在线] (2023年7月) [引用于 2026-01-07]。

[7] Kubernetes [在线] (2023年7月) [引用日期：2026-01-07]。

[8] P. Di Tommaso、M. Chatzou、E. W. Floden、P. P. Barja、E. Palumbo、C. Notredame，《Nextflow 支持可复现计算工作流》，《自然·生物技术》35 (4) (2017) 316–319 [引用日期：2024-08-14]。doi：10.1038/nbt.3820。网址：https://www.nature.com/articles/nbt.3820

[9] J. Köster、S. Rahmann，《Snakemake——一个可扩展的生物信息学工作流引擎》，《生物信息学》（英格兰牛津）28 (19) (2012) 2520–2522。doi：10.1093/bioinformatics/bts480。

[10] M. R. Crusoe、S. Abeln、A. Iosup、P. Amstutz、J. Chilton、N. Tijanić、H. Ménager、S. Soiland-Reyes、B. Gavrilović、C. Goble、T. C. 社区，《纳入的方法：通过通用工作流语言实现计算复用与可移植性的标准化》，《ACM 通讯》

ACM 65 (6) (2022) 54–63 [，引用于 2023-11-07]。doi:10.1145/3486897。网址：https://dl.acm.org/doi/10.1145/3486897

[11] L. Wratten、A. Wilm、J. Göke，《借助生物信息学工作流管理器构建可复现、可扩展且可共享的分析管线》，《自然方法》18 (10) (2021) 1161–1168。doi:10.1038/s41592-021-01254-9。

[12] 研究与创新总司（欧盟委员会），《实现欧洲开放科学云：欧盟委员会欧洲开放科学云高级别专家组的首份报告与建议》，欧盟出版局，卢森堡， 2016 [引用于 2023-11-07]。网址 https://data.europa.eu/doi/10.2777/940154

[13]欧洲研究基础设施战略论坛，《ESFRI 2021路线图——科研基础设施战略报告》，技术报告，欧洲研究基础设施战略论坛（2021年11月）[引用于 2026-01-07]。网址 https://roadmap2021.esfri.eu/media/1295/esfri-roadmap-2021.pdf

[14] GÉANT – 年度报告 2022 [在线] (2022) [引用于 2026-01-07]。

[15] EGI：面向数据驱动未来的高级计算 [在线](2026年1月)[引用于 2026-01-07]。

[16] M. D. Wilkinson, M. Dumontier, I. J. J. Aalbersberg, G. Appleton, M. Axton, A. Baak, N. Blomberg, J.-W. Boiten, L. B. da Silva Santos, P. E. Bourne, J. Bouwman, A. J. Brookes, T. Clark, M.Crosas, I. Dillo,

O. Dumon, S. Edmunds, C. T. Evelo, R. Finkers, A. Gonzalez-Beltran, A. J. G. Gray, P. Groth, C. Goble, J. S. Grethe, J. Heringa, P. A. C. ’t Hoen, R. Hooft, T. Kuhn, R. Kok, J. Kok, S. J. Lusher, M. E. Martone, A. Mons, A. L. Packer, B. Persson, P. Rocca-Serra, M. Roos, R. van Schaik, S.-A. Sansone, E. Schultes, T. Sengstag, T. Slater, G. Strawn, M. A. Swertz, M. Thompson, J. van der Lei, E. van Mulligen, J. Velterop, A. Waagmeester, P. Wittenburg, K. Wolstencroft, J. Zhao, B. Mons, 《科学数据管理与管理者的 FAIR 指导原则》, Scientific Data 3 (2016) 160018。doi:10.1038/sdata.2016.18。

[17] I. 2382:2015(en). ISO/IEC 2382:2015(en), 信息技术 — 词汇 [在线] (2015) [引用于 2026-01-07]。

[18] ISO/IEC 22123-1:2023(E)。信息技术 — 云计算 — 第 1 部分：词汇 [在线] (2023年2月) [引用于 2026-01-07]。

[19]N. Hoffmann、I. Maus、S. Beier、P. Belmann、J. Krüger、A. Tauch、A.Goesmann、R. Eils、P. Bork、O. Kohlbacher、U. Kummer、R.Back- ofen、I. Buchhalter、A. Sczyrba, 将 de.NBI 云嵌入国家研究数据基础设施的活动, 《研究数据基础设施会议论文集》1 (2023年9月) [引用于 2023-12-22]。doi:10.52825/cordi.v1i.387。网址 https://www.tib-op.org/ojs/index.php/CoRDI/article/ view/387

[20] P. Mell, T. Grance, 《NIST云计算定义》, 技术报告 NIST特别出版物 (SP)800-145, 美国国家标准与技术研究院（2011年9月） [引用于 2023-11-07]。doi:10.6028/

NIST.SP.800-145。网址
https://csrc.nist.gov/pubs/sp/800/145/final[21] Docker：加速容器应用程序开发 [在线]（2022年5月） [引用于2026-01-07]。[22]Apptainer - 可移植、可复现的容器 [在线] （2026年1月）[引用于2026-01-07]。[23] F. da Veiga Leprevost, B. A. Grüning, S. Alves Aflitos, H. L. Röst, J. Uszkoreit, H. Barsnes, M. Vaudel, P. Moreno, L. Gatto, J. Weber, M. Bai, R. C. Jimenez, T. Sachsenberg, J. Pfeuffer, R. Vera Alvarez, J. Griss, A. I. Nesvizhskii, Y. Perez-Riverol, 《BioContainers：一种由开源和社区驱动的软件标准化框架》, 《生物信息学》（英格兰牛津）33 (16) (2017) 2580–2582。doi:10. 1093/bioinformatics/btx192。[24] 执行器 — Nextflow 文档 [在线] （2026年1月） [引用于2026-01-07]。

[25] B. Duyx、M. J. E. Urlings、G. M. H. Swaen、L. M. Bouter、M. P. Zeegers, 《科学引文倾向于正面结果：系统综述与荟萃分析》, 《临床流行病学杂志》88 (2017) 92–101。doi:10. 1016/j.jclinepi.2017.06.002。

[26] L. Tiokhin, K.Panchanathan, D. Lakens, S.Vazire, T.Morgan, K.Zoll- man, 《学术出版中的诚实信号传递》, 《PLOS ONE》16 (2) (2021) e0246675。doi:10.1371/journal.pone.0246675。

[27] J. P. A. Ioannidis，《为什么大多数已发表的研究发现都是错误的》，《公共科学图书馆医学》2 (8) (2005) e124。doi:10.1371/journal.pmed.0020124。

[28]J. P. A. Ioannidis，如何让更多已发表研究结果为真，《公共科学图书馆医学》11 (10) (2014) e1001747。doi:10.1371/journal.pmed.1001747。

[29] M. Ziemann，P. Poulain，A. Bora，计算可复现性的五大支柱：《生物信息学》及其他领域，《生物信息学简报》24 (6) (2023) bbad375 [引用于2023-11-09]。doi:10.1093/bib/bbad375。URL https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC10591307/

[30] R. Bettivia，Y.-Y. Cheng，M. R. Gryk，ProvONE，载于：R. Bettivia，Y.-Y. Cheng，M. R. Gryk（编），《记录未来：探索来源元数据标准》，《信息概念、检索与服务综合讲座》，施普林格国际出版，Cham，2022年，第41–56 [页。引用于2024-02-16]。doi:10.1007/978-3-031-18700-1_4。URL https://doi.org/10.1007/978-3-031-18700-1_4

[31] ApacheAtlas– Hadoop 数据治理和元数据框架[在线]（2026年1月） [引用于 2026-01-07]。

[32] 通用数据保护条例（欧盟） [在线]（2016年） [引用于 2026-01-07]。

[33] 欧洲基因组数据基础设施（GDI）项目 [在线]（2024年8月） [引用于2026年1月07]。

[34] 绿色云和绿色数据中心 \textbar 塑造欧洲的数字未来 [在线] （2023年12月） [引用于2026年1月07]。

[35] N. C. Sheffield、V. R. Bonazzi、P. E. Bourne、T. Burdett、T. Clark、R. L. Grossman、O. Spjuth、A. D. Yates, 《从生物医学云平台到微服务：FAIR 数据与分析的下一步》, Scientific Data 9 (1) (2022) 553 [引用于 2024-02-16]。doi:10.1038/ s41597-022-01619-5。网址：https://www.nature.com/articles/s41597-022-01619-5

[36] D. Yuan。《Covid-sequence-analysis-workflow》 [在线] (2023) [引用于 2026- 01-07]。doi:10.48546/WORKFLOWHUB.WORKFLOW.664.1。

[37] X. Stiensmeier、J. Krüger、T. Dilger、M. Friedrichs、C. Henke、A. Wal- ender、D. Weinholz、A. Sczyrba、P. Belmann、P. R. Kensche、B. Os- terholz。《BiBiServ/bibigrid：3》1 [在线] (2025年9月) [引用于 2026年-01-07]。doi:10.5281/zenodo.17192507。

[38] J. A. Donenfeld。《WireGuard：快速、现代且安全的虚拟专用网络隧道》 [在线]（2024年2月） [引用于2026-01-07]。

[39] Dnsmasq——面向小型网络的网络服务。 [在线] （2026年1月） [引用于2026-01-07]。

[40] BiBiGrid混合云与多云实操 [在线] （2024年1月） [引用于2026-01-07]。

[41] V. Spišaková、L. Hejtmánek。CERIT-SC/k8shpc [在线]（2022年10月）[引用于 2026年1月-07]。

[42] NF-Core：Sarek 流水线 [在线] （2025年2月） [引用于 2026年1月-07]。[43] 全球基因组学与健康联盟 - GH4GA [在线] （2025年2月）[引用于 2026年1月-07]。

[44] A. Kanitz、M. H. McLoughlin、L. Beckman、V. S. Malladi、K. Ellrott, 《GA4GH 任务执行 API：实现便捷的多云任务执行》, 《计算科学与工程》（2024年）1–16 [引用于 2024 年 08 月-14] doi:10.1109/MCSE.2024.3414994。URL https://ieeexplore.ieee.org/document/10564576

[45] F. Mölder、K. P. Jablonski、B. Letcher、M. B. Hall、C. H. Tomkins-Tinch、V. Sochat、J. Forster、S. Lee、S. O. Twardziok、A. Kanitz、A. Wilm、M. Holtgrewe、S. Rahmann、S. Nahnsen、J. Köster。《使用 Snakemake 进行可持续数据分析》 [在线] （2021 年 4 月） [引用于 2026年-01-07]。doi：10.12688/f1000research.29032.2。

[46] V.Schneider-Lunitz, A. Kanitz. Elixir-cloud-aai/demo-tes-hybrid-cloud：1.0.0 [在线](2025年9月) [引用于 2026-01-07]。doi:10.5281/zenodo. 17038656。

[47] EOSC 协会。《EOSC 联盟手册》 [在线] (2026年1月)[引用于 2026-01-07]。