

© Харитонов Д.И.¹, Грибова В.В.²**КОНТЕЙНЕРИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ МОНИТОРИНГА КЛИМАТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯ В ЦКП «ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ РЕСУРС»**¹ Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, e-mail: demiurg@dvo.ru, SPIN-код: 5432-3621;² Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, e-mail: gribova@dvo.ru, SPIN-код: 7481-5878

Наблюдение за климатом и моделирование природных явлений переживает фазу активного внедрения новых методов обработки данных, в числе которых технологии машинного обучения, BigData, эвристическое и статистическое моделирование, а также комбинации существующих методов, требующие значительных вычислительных ресурсов. В работе рассмотрен подход к организации вычислительного процесса обработки данных наблюдений за климатическими явлениями, распределённого в корпоративной сети институтов ДВО РАН между источниками и системами хранения данных и высокопроизводительными вычислительными ресурсами коллективного пользования. В статье рассматривается проблемы изоляции программных пакетов в многопользовательской среде с использованием непривилегированных НРС контейнеров, а также доставки данных для обработки в эти контейнеры.

Ключевые слова: информационно вычислительная экосистема, технологии контейнеризации, мониторинг климатических явлений, моделирование природных явлений

Введение. В научных институтах РАН, в частности в институтах ДВО РАН накоплены массивы наблюдений за различными климатическими явлениями. Наличие достаточно больших объёмов информации позволяет применять разнообразные методы моделирования, обработки и анализа информации для получения новых знаний. ЦКП «Дальневосточный вычислительный ресурс» (ЦКП ДВВР) традиционно предоставляет свои ресурсы для обработки таких данных, при этом пытаясь автоматизировать технологические процессы. В частности, производится обработки спутниковых данных, из ЦКП Регионального спутникового мониторинга окружающей среды ДВО РАН [1,2], например, данные со спутников TERRA, NOAA, AQUA, MODIS, METEOR-M, используются для наблюдения за цветением вредоносных водорослей специалистами сразу нескольких институтов [3]. Спутниковые данные используются также для оценки толщины льда, его структуры и динамики, состояния прибрежных вод, что важно для навигации, рыболовства и обеспечения безопасности морских операций в Арктике [4], и, в частности, использовались для определения причин резкого стратосферного потепления в Антарктике [5]. Специалистами ТОИ ДВО РАН используются данные спутниковой интерферометрии для измерения изменчивости высот, в частности по разломам. В то же время для наблюдения за местными разломами – можно использовать облачность как предвестник природных явлений, т.к. разломы сопровождаются выделениями газов [6, 7], выделения газов образуют ядра конденсации от аэрозольных частиц, которые в видимом диапазоне представляют облака. Форма облаков может описывать разлом, концентрация и состав газов – процессы, протекающие в земной коре. Однако нужно отделить облачность естественную от облачности возникающей вследствие разломов. Такая задача может решаться с использованием LiDAR'ов, так как он может различить облачность по химическому составу [8]. При этом изменения концентрации газов более показательны для определения опасных явлений [6]. Что приводит к выводу о необходимости организации механизмов постоянного периодического мониторинга, с использованием вычислительного моделирования и технологических процессов, обеспечивающих согласованность и своевременность действий всех агентов, вовлечённых в реагирование на сигналы предвещающие опасные явления.

Схема обработки данных. Институты ДВО РАН объединены между собой в распределённую среду, связанную коммуникационными каналами самой разной производительности, начиная от высокопроизводительных сетей пропускной способностью до 100 Gbps внутри суперкомпьютерного центра, и заканчивая сетями Интернет с пропускной

способностью в 100 Mbps и межсетевыми экранами, блокирующими нежелательный трафик. Такое различие в пропускной способности не позволяет всегда полагаться на интерактивное взаимодействие с системами хранения данных в процессе их обработки. В результате процесс обработки данных состоит из шагов, включающих в себя: копирование данных между различными узлами в сети экосистемы, конвертацию данных между различными форматами, и непосредственную их обработку.

В ЦКП ДВВР разрабатывается среда обработки данных, в которой пользователь имеет возможность сформировать схему обработки данных в виде простого ациклического графа в котором в качестве вершин выступают шаги обработки данных, вычислительные узлы, источники и системы хранения данных в системе. В схеме обработки данных каждому входящему параметру соответствует ребро графа, входящее в узел обработки, а каждому выходящему – исходящее ребро. Количество и формат данных поступающими на входе функции обработки должны соответствовать сигнатуре функции обработки, также как и формат результирующих данных. Для выполнения схемы обработки должно быть определено конкретное месторасположение для каждого параметра. По мере развития среды обработки схема сможет достраиваться алгоритмически, путём подбора квазиоптимального решения, либо с применением нейронных сетей, обученных на наколенном объёме успешно отработанных схем. Выполнение схемы обработки происходит интеллектуальными агентами асинхронно на разных узлах и для получения корректного результата необходим агент, координирующий действия каждого из узлов. Задачей контролирующего агента является назначение интеллектуальным агентам в разных узлах сети конкретных функций по обработке данных, получению от этих агентов информации о выполнении функции и регистрация состояния процесса выполнения схемы обработки. Чтобы все функция обработки могла выполняться, к моменту её вызова данные для параметров должны быть собраны в доступном для обработки месте.

Контейнеризация вычислений. Простые задачи, такие как преобразование, визуализация, предобработка и постобработка данных могут выполняться интеллектуальными агентами самостоятельно. Сложные задачи обрабатываются на кластерах и суперкомпьютерных ресурсах ЦКП ДВВР. Для этого используется концепция проекта, в котором могут участвовать ученые из различных институтов. В рамках проекта предоставляются квоты на использование вычислительных ресурсов и систем хранения данных. Для передачи вычислительных заданий в систему очередей в качестве посредника используется агент доступа к вычислительным ресурсам и непривилегированные контейнеры с программным обеспечением. Принцип применения контейнеров для организации обработки данных

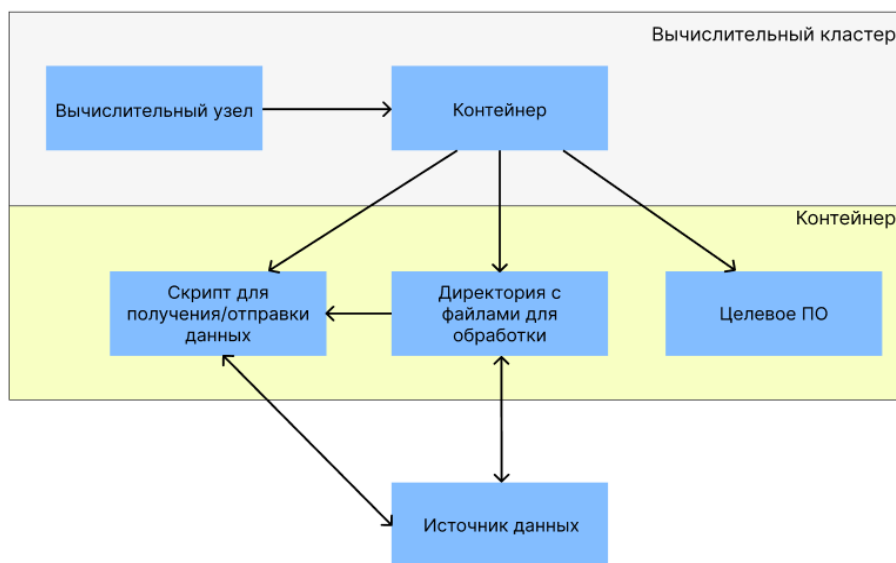


Рис. 1 - Применение контейнеров для организации обработки данных

изображён на рисунке 1. Основная идея состоит в том, что контейнер при загрузке подключается к заранее определённой сетевой файловой системе, где размещаются файлы и при необходимости скрипты для обработки данных. Организация каталогов в этой системе позволяет, во-первых, отслеживать выполнение процесса обработки, а во-вторых, запускать несколько процессов обработки одновременно.

Контейнеры традиционно используются для изоляции приложений в среде, где трудно управлять полным стеком программного обеспечения [9], позволяя полностью разделить программные сервисы, драйверы и библиотеки, необходимые для запуска разных программных пакетов. Однако для эффективного использования вычислительных кластеров необходимо обеспечить высокую утилизацию традиционного процессорного времени и сопроцессоров GPU, а также возможность межпроцессного взаимодействия посредством библиотек MPI, использующих аппаратные средства коммуникаций. Такой тип контейнеров, условно называемый HPC-Ready, может быть создан, например, с помощью сервиса eFlows4HPC, использующего среды Docker buildx и Spack для автоматизации создания контейнеров для конкретных HPC-платформ. При этом декларируется, что сервис обеспечивает простоту выполнения без дополнительных шагов и ту же производительность, что и при нативной установке [10]. Чтобы сформировать контейнер с программным обеспечением на новой аппаратной системе, разработчику необходимо сформировать два файла. Первый - файл манифеста `spack.yaml` среды Spack для каждого приложения. Второй - общий файл `package.py`, включающий описание установки в соответствии со схемами Spack. Эти два файла используются повторно при создании контейнеров для разных HPC-платформ. Далее, необходимо создать JSON файл конфигурации контейнера для конкретной HPC-платформы и запустить сервис eFlows4HPC, который сформирует контекст сборки и передаст его в инструмент Docker buildx.

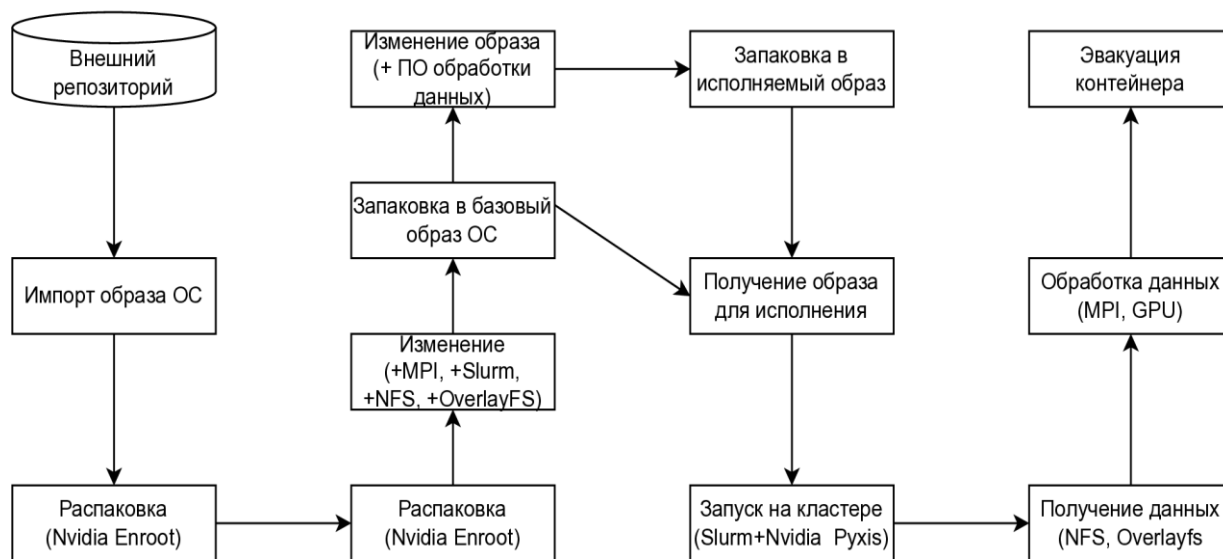


Рис. 2- Жизненный цикл контейнеров обработки данных

Принимая во внимание, что далеко не всё программное обеспечение может быть установлено с использованием среды Spack, особенно самописное программное обеспечение, используемое в экосистеме, в качестве альтернативы сервису eFlows4HPC были применены два программных пакета от компании NVidia, предназначенные для использования в высокопроизводительных многопроцессорных комплексах при работе с контейнерами. Первый пакет – Enroot – позволяет формировать и запускать непривилегированные контейнеры с прямым доступом к аппаратным ресурсам основной операционной системы. Ещё одной особенностью пакета Enroot является возможность импорта базового контейнера из Docker образов, которые находятся в репозиториях, доступных по сети интернет. Вторым программным пакетом является плагин Pyxis, который интегрируется в механизм Slurm и предназначен для запуска и управления очередями заданий на кластерах. Пакет Pyxis позволяет

запускать контейнеры Enroot, причём как уже развёрнутые в локальные персональные директории пользователей, так и находящиеся в доступных на кластере репозиториях. На рисунке 2 изображён жизненный цикл контейнеров в экосистеме. Если рассматривать этот цикл с самого начала, то на первом шаге происходит импорт образа операционной системы из внешнего репозитория Docker контейнеров. Далее Docker контейнер преобразуется при помощи пакета Enroot в непривилегированный контейнер в локальной директории инженера-администратора экосистемы. В этот момент над ним могут быть произведены действия по внедрению дополнительного программного обеспечения, предназначенного для получения базового образа ОС, исполняемого на многопроцессорных системах. После настройки контейнера он запаковывается при помощи пакета Enroot и размещается во внутренней репозитории экосистемы, откуда он при необходимости может быть получен для построения контейнеров с конкретными пакетами обработки данных наблюдений за природными явлениями. В функциональность базового контейнера входит:

- настройка на использование сетевой файловой системы NFS с папками вычислительного задания;
- копирование при необходимости входящих файлов из удалённых хранилищ данных;
- поддержка библиотек MPI с прямым доступом к сетевым аппаратными ресурсам;
- поддержка библиотек CUDA с прямым доступом к сопроцессорам GPU, используемым на вычислительных узлах.

Далее, при необходимости использования программного обеспечения из этого контейнера он распаковывается в директорию прокси-пользователя на кластере и выполняется системой очередей заданий Slurm с плагином Ruxis. Для того чтобы программное обеспечение могло получить исходные данные, в него монтируются сетевые директории, в которых размещаются либо сами данные, либо конфигурационные файлы, необходимые для получения данных из СУБД и файловых хранилищ.

Заключение. Контейнеризация программного обеспечения является современным трендом, обеспечивающим быстрый ввод в эксплуатацию распределённых программных систем. Использование контейнеров в многопроцессорной вычислительной среде позволяет абстрагироваться от конкретных условий выполнения, обеспечивая в то же время масштабируемость и адаптивность системы в самых широких рамках, что особенно важно в условиях растущих объемов накапливаемой информации, постоянно меняющихся природных условий и появления новых видов климатических опасностей. Предложенный подход к контейнеризации обработки данных наблюдений за климатом направлен на повышение эффективности мониторинга и моделирования природных климатических явлений, минимизацию времени реагирования на угрозы и создание унифицированной платформы для междисциплинарных исследований. Используемые в подходе программные компоненты обеспечивают устойчивую архитектуру вычислительной среды, позволяя обрабатывать большие объёмы данных с минимальной задержкой.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (госбюджетная тема No FFWF-2025-0005).

Список литературы

1. Алексанин А.И. Развитие спутникового мониторинга в ИАПУ ДВО РАН / А.И. Алексанин, М.Г. Алексанина, В.А. Левин // Вестник ДВО РАН. – 2021. – № 4(218). (doi: 10.37102/0869-7698_2021_218_04_14)
2. Aleksanin A.I. The Influence of Observation Conditions on the Accuracy of NDVI Vegetation Index Calculation from Earth Remote Sensing Data / A.I. Aleksanin, A.N. Timofeev // Cosmic Research. – 2023. – Vol. 61, Suppl. 1. – P. S188–S194. (doi: 10.1134/S0010952523700521)
3. Orlova T.Y. A massive bloom of *Karenia* species (Dinophyceae) off the Kamchatka coast, Russia, in the fall of 2020 / T.Y. Orlova, A.I. Aleksanin, E.V. Lepskaya, K.V. Efimova, M.S. Selina, T.V. Morozova, I.V. Stonik, V.A. Kachur, A.A. Karpenko, K.A. Vinnikov, A.V. Adrianov, M. Iwataki // Harmful Algae. – 2022. – Vol. 120. – Art. 102337. (doi: 10.1016/j.hal.2022.102337)

4. Алексанина М.Г. Спутниковый мониторинг на Дальнем Востоке как составляющая информационной безопасности в Арктике / М.Г. Алексанина // *The Newman in Foreign Policy*. – 2022. – No. 65(109).
5. Mitnik L.M. Microwave Radiometer MTVZA-GY on New Russian Satellite Meteor-M No. 2-2 and Sudden Stratospheric Warming Over Antarctica / L.M. Mitnik, V.P. Kuleshov, M.L. Mitnik, G.M. Chernyavsky, I.V. Cherny, A.M. Streltsov // *IEEE Journal of Selected Topics in Applied Earth Observations and Remote Sensing*. – 2022. – Vol. 15. – P. 820–830. (doi: 10.1109/JSTARS.2021.3133425)
6. Aiuppa A. Volcanic gas changes prior to Stromboli's major explosions are statistically significant / A. Aiuppa, M. Bitetto, L. Curcio, D. Delle Donne, J. Lages, G. Lo Bue Trisciuzzi, G. Tamburello, A. Vitale, F. Cannavò, M. Coltelli, D. Coppola, L. Innocenti, L. Insinga, G. Lacanna, M. Laiolo, F. Massimetti, M. Pistolesi, E. Privitera, M. Ripepe, G. Cilluffo // *Journal of Volcanology and Geothermal Research*. – 2025. – Vol. 462. – Art. 108325. (doi: 10.1016/j.jvolgeores.2025.108325)
7. Кузин А.М. Дегазация Земли: от землетрясений до образования месторождений полезных ископаемых флюидного генезиса / А.М. Кузин // *Актуальные проблемы нефти и газа*. – 2018. – № 4(23). (doi: 10.29222/ipng.2078-5712.2018-23.art36)
8. Bukin O.A. Lidar sensing of the atmosphere with gigawatt laser pulses of femtosecond duration / O.A. Bukin, [M.Yu. Babii](#), S.S. Golik, A.A. Il'in, A.M. Kabanov, A.V. Kolesnikov, Yu.N. Kulchin, V.V. Lisitsa, G.G. Matvienko, V.K. Oshlakov, K.A. Shmirko // *Quantum Electronics*. – 2014. – Vol. 44, no. 6. – P. 563–569. (doi: 10.1070/QE2014v044n06ABEH015431)
9. Flauzac O. A review of native container security for running applications / O. Flauzac, F. Mauhourat, F. Nolot // *Procedia Computer Science*. – 2020. – Vol. 175. – P. 157–164. (doi: 10.1016/j.procs.2020.07.025)
10. Abdulah S. Portability and scalability evaluation of large-scale statistical modeling and prediction software through HPC-ready containers / S. Abdulah, J. Ejarque, O. Marzouk, H. Ltaief, Y. Sun, M.G. Genton, R.M. Badia, D.E. Keyes // *Future Generation Computer Systems*. – 2024. – Vol. 161. – P. 248–258. (doi: 10.1016/j.future.2024.06.057)