

LA GRILLE POUR LES NULS

QUE SAVOIR, QUOI FAIRE ET PAR OU COMMENCER SI VOUS N'Y CONNAISSEZ
VRAIMENT, VRAIMENT RIEN

Version 1 – février 2016

Gilles MATHIEU

INSERM DSI

Mission de Coordination de l'Informatique Scientifique de l'Inserm



<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

CONTENU

1. Introduction : ce document me concerne-t-il ?	3
1.1. À propos de ce guide	3
1.2. La grille : à quoi ça sert ?	3
1.3. Est-ce que la grille est une bonne solution pour moi ?	4
1.4. La grille, ça fait mal ?	5
2. La base : c'est quoi une grille ?	6
2.1. Les principes généraux	6
2.2. La grille en France et dans le monde	7
2.3. Les outils disponibles	8
2.4. Exemples	9
3. Comment ça marche ?	11
3.1. Aperçu des différents services	11
3.2. Système d'information, d'authentification et d'autorisation	11
3.3. Gestion du calcul et des données	13
3.4. Autres services	14
3.5. L'aventure d'un job sur la grille	14
4. Faire ses premiers pas sur la grille	16
4.1. La préparation	16
4.2. Le Grand Saut	16
4.3. Contreparties	18
4.4. Check List	18
4.5. Support, documentation et autres ressources	19
5. Crédits et remerciements	20
6. Bibliographie, références et Liens	21

1. INTRODUCTION : CE DOCUMENT ME CONCERNE-T-IL ?

1.1. À PROPOS DE CE GUIDE

Ce document n'est pas une documentation complète et exhaustive de la grille de calcul. Il n'a pas vocation à tout expliquer en détail, ni à rentrer dans trop de subtilités techniques. Il y a d'autres documents pour cela, qui sont référencés et listés ici si vous souhaitez aller plus loin.

Son objectif est de donner des **indications simples concernant l'utilisation de la grille de calcul**. Il s'adresse aux chercheurs, ingénieurs, étudiants ou toute autre personne qui souhaite savoir de manière simple et concise en quoi la grille peut lui être utile, et quelles étapes suivre pour pouvoir y faire ses premiers pas.

À qui s'adresse ce document ?

Ce guide s'adresse en priorité aux chercheurs et ingénieurs dont les travaux demandent l'utilisation d'outils informatiques : logiciels de calcul, de traitement ou d'analyse de données, gestion de données, etc.

EN BREF



Ce document est fait pour vous :

- Si vous utilisez déjà des outils informatiques dans votre quotidien scientifique ;
- Si vous ne savez pas trop ce qu'est la grille, ni si elle peut vous servir ou non ;
- Si vous voulez vous y mettre mais que vous ne savez pas par où commencer.

1.2. LA GRILLE : A QUOI ÇA SERT ?

La grille est le terme générique que nous utiliserons dans tout ce document pour désigner une infrastructure distribuée, utilisée pour le calcul et la gestion de données, et constituée d'un ensemble de ressources géographiquement réparties.

La grille est donc un ensemble de machines fonctionnant ensemble pour fournir une puissance de calcul et un espace de stockage importants.

On l'utilise principalement pour deux choses :

- Réaliser des calculs, analyses, simulations **bien plus rapidement** que sur un ordinateur ou un cluster local (grâce à la possibilité de paralléliser les calculs), et à **moindre coût** (grâce au partage et à la mutualisation);
- Permettre à des collaborateurs travaillant à distance sur la même expérience ou dans le même domaine de **partager des données, des applications et des outils**.

Ça, c'est du point de vue des utilisateurs. Évidemment, la grille présente aussi des avantages du point de vue des fournisseurs : elle permet de **rentabiliser de manière efficace** les machines d'un parc informatique (les machines de la grille sont utilisées à un taux bien supérieur que lorsqu'elles sont simplement utilisées en local).

L'un dans l'autre, la grille est une solution à (relativement) faible coût basée sur **la mutualisation et le partage**.

EN BREF



Utiliser la grille, c'est avoir accès à beaucoup plus de puissance de calcul et d'espace de stockage que vous ne pouvez en espérer en utilisant une infrastructure locale, tout en facilitant les échanges et les collaborations à distance.

La grille est utilisée dans des contextes très différents, et des disciplines diverses, notamment :

- La **physique** (physique des particules, physique des hautes énergies, astrophysique...)
- Les **sciences de la vie** (imagerie médicale, bioinformatique, pharmaceutique, génétique, neurosciences, biodiversité...)
- Les **sciences de la planète** (sismologie, géologie...)
- Mais aussi : les **mathématiques**, la **chimie**, les **systèmes complexes**, la **finance**... un nombre toujours croissant de disciplines et de contextes variés, qui vont de grandes communautés internationales à des communautés moins structurées composées de petites équipes que l'on nomme la « **long tail of science** ».

1.3. EST-CE QUE LA GRILLE EST UNE BONNE SOLUTION POUR MOI ?

La grille n'est pas une solution miracle qui convient pour tout. Avant de s'y mettre, il convient donc d'étudier ce que vous pouvez réellement gagner en utilisant la grille pour exécuter vos travaux, vos applications ou vos calculs. En particulier, se mettre à utiliser la grille demande parfois un effort initial important : il vaut mieux donc vérifier avant si le gain final va dépasser cet effort...

La grille est sans doute une bonne solution pour vous si :

- Vous devez répéter un grand nombre de fois le même algorithme sur des données différentes, ou des portions différentes d'un gros fichier
- Vos calculs comportent des tâches parallèles sans dépendance entre elles (tâches non-communicantes)
- Votre application est peu interactive (elle n'attend pas d'information de votre part au cours de son exécution)
- Vous travaillez avec des équipes distantes, qui ont besoin d'accéder aux mêmes données que vous

Attention, la grille peut vous poser problème si :

- Vos calculs élémentaires durent moins de quelques minutes, ou plus de 24 heures
- Vos données sont particulièrement sensibles, et ne doivent pas être répliquées/copiées sur des machines qui peuvent se trouver à l'autre bout du monde
- L'application que vous utilisez est une application dont la licence restreint l'usage (à une machine, à un site ou à des utilisateurs précis...).

Ce ne sont bien sûr que des grandes lignes, et la meilleure réponse à cette question d'adéquation est d'en parler avec un expert en la matière, qui pourra juger sur l'ensemble des éléments.

Pour cela, deux points de contact :

- A l'Inserm, l'équipe CISI (1) : cisi.dsi@inserm.fr
- Au niveau national, l'équipe de France Grilles (2) : info@france-grilles.fr

Nous reviendrons là-dessus dans la section « premiers pas » de ce guide.

EN BREF



La grille n'est pas une solution universelle : avant de vous y mettre, consultez un expert qui analysera avec vous s'il y a un intérêt pour vous de vous lancer dans l'aventure.

1.4. LA GRILLE, ÇA FAIT MAL ?

Se mettre à la grille, c'est un peu comme commencer un sport. Oui, ça fait un peu mal au début. On le répète : l'effort initial à fournir peut être important. Comprendre les principes, choisir ses outils, suivre le processus administratif pour pouvoir accéder à une infrastructure, se former, adapter son code... Tout cela demande du temps et de l'énergie.

Mais le jeu en vaut la chandelle : si vos travaux sont de bons candidats pour la grille, vous perdrez peut-être du temps au début, mais pourrez en gagner énormément à la fin !

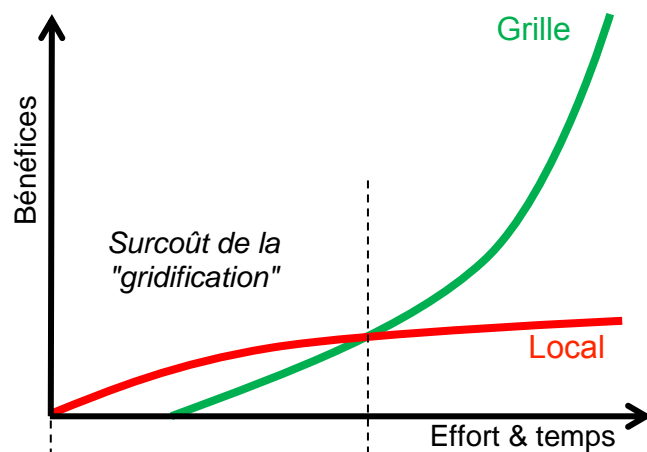


Figure 1 - Les gains de la grille sur le long terme

Alors forcément, ça fait moins mal si :

- On est convaincu du bénéfice que l'on va en retirer (gagner des mois de calcul, se faciliter la vie, traiter un plus grand nombre de données, publier plus vite, contourner un problème bloquant de ressources, partager ses applications et ses résultats...)
- On a bien analysé le rapport entre le bénéfice et l'effort demandé
- On a à sa disposition la documentation, le conseil et le support adéquats. Ce guide est justement là pour ça !

EN BREF



Oui, la grille peut faire mal. Mais il y a du monde pour vous aider, et au final, les bénéfices retirés vous feront dire que vous avez bien fait de vous jeter à l'eau... parce que comme on dit souvent : « Au début elle est froide, mais après, elle est bonne ».

2. LA BASE : C'EST QUOI UNE GRILLE ?

2.1. LES PRINCIPES GENERAUX

L'infrastructure de grille

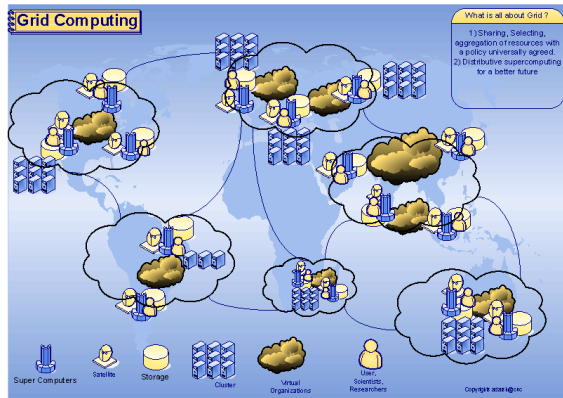


Figure 2 - Vue conceptuelle d'une grille informatique
(source : Adarsh Patil - <http://www.adarshpatil.com>)

Reprenons la définition : une grille, c'est une infrastructure virtuelle constituée d'un ensemble de ressources, géographiquement éloignés mais fonctionnant en réseau pour fournir une puissance globale.

Le concept a été formalisé en 1999 par Ian Foster et Carl Kesselman (3). Le terme grille est la traduction de l'anglais « Grid », utilisé par analogie avec le réseau électrique (« Power Grid ») :

« Accessing computer power from a computer grid should be as simple as accessing electrical power from an electrical grid ».

Foster et Kesselman définissent alors les 5 piliers de la grille :

- Les ressources sont **partagées**
- L'accès est **sécurisé**
- L'usage des ressources est **optimisé**
- La **distance** n'est pas importante
- Les ressources sont **interopérables** au travers de **standards ouverts**

Bon, essayons d'être un peu plus concrets.

Nous avons des **ordinateurs** aux quatre coins du monde. Ceux-ci sont connectés entre eux par l'intermédiaire de **réseaux** locaux, de campus, nationaux, et d'internet. En y installant une couche commune (ce qu'on appelle le **Middleware**), on peut les faire fonctionner ensemble, et les rendre accessibles au moyen d'une **interface simple** comme une bibliothèque de lignes de commandes ou un portail web.

Accéder à la grille pour un utilisateur

Pour ce qui concerne l'autorisation d'accès, la plupart des grilles en production actuellement utilisent un concept double :

- Chaque utilisateur doit être authentifié personnellement, au moyen d'un certificat électronique (nous y reviendrons) ou en tant qu'utilisateur d'un portail ayant accès à la grille.
- Pour accéder aux ressources, il doit appartenir à un groupe d'utilisateurs appelé « **Organisation Virtuelle** », ou VO pour *Virtual Organisation* en anglais.

Une VO est donc un groupe d'utilisateurs avec des intérêts communs : la discipline ou le domaine scientifique, les outils et applications utilisés, l'appartenance à un projet particulier, etc. La VO dispose d'un ensemble de ressources sur la grille. En date de janvier 2016, il y a 232 VO (pour 34000 utilisateurs) qui utilisent l'infrastructure EGI, dont nous reparlerons plus loin.

Pour utiliser la grille, il faut donc s'inscrire dans l'une de ces VO. Ce guide vous dira comment !

Utiliser la grille

Utiliser la grille, ça veut dire se servir des machines disponibles pour exécuter des tâches de calcul. Le jargon utilisé est le même que lorsqu'on utilise un cluster de calcul : chaque tâche élémentaire est appelée « job ». Généralement, les jobs sont envoyés par lots, que l'on appelle « productions ». Un utilisateur grille va donc soumettre des jobs par lots. Si ses travaux ont besoin de données d'entrée, il devra aussi les transférer sur la grille et apprendre à les gérer. Dans tous les cas, il lui faudra gérer les données de sorties pour récupérer ses résultats. Plusieurs outils facilitent la gestion de jobs et de données, c'est l'objet d'un prochain paragraphe (2.3).

Des exemples théoriques et concrets d'utilisation sont présentés en 2.4.

EN BREF



La grille est une infrastructure distribuée, les ressources fonctionnent entre elles grâce à une couche logicielle commune.

Les utilisateurs sont regroupés en organisations virtuelles (VO), et doivent s'authentifier pour utiliser la grille.

La grille s'utilise en exécutant des tâches de calcul appelées « jobs », qui peuvent interagir avec des données rendues disponibles. Ces jobs sont lancés depuis une interface utilisateur, et exécutés sur les ressources disponibles de l'infrastructure.

2.2. LA GRILLE EN FRANCE ET DANS LE MONDE

On l'a dit, mais on le redit : il n'y a pas UNE grille, mais DES grilles. Il s'agit d'un modèle technique et technologique qui a été décliné de plusieurs façons, en plusieurs endroits, pour répondre à plusieurs besoins.

L'impulsion ayant mené à la mise en place de grilles à grande échelle a été donnée par la physique des particules au début des années 2000, et notamment par le CERN qui a misé sur cette solution pour répondre aux énormes besoins liés à l'exploitation des données du *Large Hadron Collider* (LHC). Cela a donné ce qui s'appelle maintenant **WLCG** pour *Worldwide LHC Computing Grid* (4).

En Europe, une suite de projets européens a fédéré la grille de production depuis cette époque :

- Le projet **European Data Grid** (5) de 2001 à 2004
- Les 3 projets **EGEE** (Enabling Grids for E-sciencE) (6) de 2004 à 2010
- Les projets **EGI-InSPIRE** (7) (2010-2014) et **EGI-Engage** (8) (2015-2018)

Ces projets ont permis de penser, construire, développer, déployer et opérer une grille de production pluridisciplinaire à l'échelle internationale, et qui est maintenant devenue l'infrastructure **EGI** (9).

EGI fonctionne comme une fédération de grilles nationales, les *National Grid Initiatives* (NGI). La NGI française, **France Grilles** (2), a été créée en 2010 comme un Groupement d'Intérêt Scientifique qui regroupe le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche, le CNRS, le CEA, l'INRA, l'Inserm, INRIA, RENATER et la Conférence des Présidents d'Universités.

Il existe d'autres infrastructures et plateformes en France, notamment la grille de recherche Grid5000 (10) ou la plateforme e-Biothon (11). Toutefois dans le cadre de ce guide, nous nous focaliserons principalement sur la grille EGI et sa composante française France Grilles.

En date de Novembre 2015, les ressources partagées sur l'infrastructure EGI sont réparties sur environ 350 centres de ressources, et sont de l'ordre de 620,000 CPUs, 200 PB de stockage disque et 300 PB de stockage sur bande.

EN BREF



Plusieurs infrastructures de grilles sont déployées dans le monde. La plus importante est l'infrastructure pluridisciplinaire EGI.

La composante française d'EGI s'appelle France Grilles. L'accès à l'infrastructure est ouvert à tous les partenaires du GIS France Grilles pour les travaux liés à leurs recherches, ainsi qu'aux organismes ou entreprises dans le cadre de projets communs avec ces partenaires.

2.3. LES OUTILS DISPONIBLES

Quand on parle d'outils, on peut penser à deux choses : les outils pour accéder à la grille et l'utiliser, et les outils (applications) disponibles et utilisables sur la grille.

Les outils et les services d'accès à la grille

Le premier moyen d'utiliser la grille est d'utiliser les instructions et commandes du *middleware*, directement via un terminal ou au travers de scripts.

Cette méthode n'étant pas nécessairement la plus facile, de nombreux outils ont été développés pour optimiser l'utilisation de la grille et pour la rendre plus ergonomique et intuitive. Certains sont dédiés à une communauté spécifique, ou répondent à un besoin particulier, d'autres sont génériques et peuvent être utilisés par tous.

Ces outils sont pour la plupart :

- Des outils de soumission de calculs (*job schedulers*)
- Des outils de gestion de données
- Des portails web, plateformes intégratives ou environnements virtuels de recherche

Citons par exemple DIRAC (12), une solution générale intégrant un gestionnaire de calcul et des outils d'utilisation des différents services de l'infrastructure, OpenMole (13), un gestionnaire de calculs, iRODS (14), un gestionnaire de données qui peut être utilisé via la grille, ou encore VIP (15), une plateforme web d'accès aux ressources pour les applications d'imagerie médicale.

Certains de ces outils sont disponibles en tant que services dans l'offre de service de France Grilles (16) ainsi que dans le catalogue de services EGI (17).

Les applications utilisables

Bien sûr, si l'on souhaite utiliser la grille, c'est pour faire autre chose que d'afficher un « Hello World ». La plupart du temps, on souhaite utiliser un logiciel, un programme, une application particulière. Et la question légitime que l'on se pose est « pourrai-je l'utiliser sur la grille ? ».

De nombreuses applications sont disponibles et utilisables. La plupart sont listées dans le catalogue d'applications de EGI (18). Certaines de ces applications sont génériques, d'autres ne sont utiles qu'aux chercheurs d'une discipline ou d'un domaine donné (on se doute bien que les physiciens n'ont pas vraiment besoin d'une application de génomique, par exemple). C'est là tout l'intérêt des VO : dans chaque domaine, on partage les applications qui sont utiles à ce domaine...

Et si votre application préférée n'est pas dans la liste ?

Pas de panique. Le portage d'application est un processus quasi continu sur la grille, car de nouveaux besoins émergent chaque jour. Si vous souhaitez utiliser sur la grille une application qui n'est pas encore supportée, il faudra simplement voir dans quelle mesure cette application est « portable » pour ensuite pouvoir envisager son support. L'équipe France Grilles pourra vous conseiller dans cette démarche.

EN BREF



De nombreux outils et services sont disponibles pour exploiter les ressources de la grille. Vous pourrez retrouver leurs caractéristiques dans les catalogues de services de France Grilles et d'EGI.

Par ailleurs, un grand nombre d'applications est déjà utilisable, et de nouvelles applications peuvent être portées.

2.4. EXEMPLES

Exemple théorique et simpliste

Supposons que je dispose d'une image en couleur de 100 pixels de côté, chaque pixel de coordonnées (x,y) ayant comme valeur un triplet pour la couleur {rouge, vert, bleu}, et que je souhaite transformer cette image en noir et blanc.

Le calcul à effectuer est le même pour tous les pixels, et chaque calcul est indépendant des autres (on se moque de la valeur des pixels voisins). Il est donc fortement parallélisable au travers de tâches indépendantes (on dira qu'il s'agit d'un problème « *embarrassingly parallel* », puisque la possibilité d'utiliser le parallélisme est quasi-évidente).

Pour exécuter cette tâche dans un principe « grille », il faudrait donc :

- préparer une exécution parallèle du traitement, en divisant le calcul en plusieurs jobs qui traiteraient chacun un pixel, puis en préparant une agrégation du résultat
- Lancer cette « production » sur la grille c'est-à-dire:
 - Transférer l'image
 - Lancer les jobs de calcul
 - Lancer le job d'agrégation
 - Récupérer le résultat

On voit vite à travers cet exemple les avantages et limitations d'utiliser la grille. Notamment, si le temps de transfert et d'exécution des jobs est plus long que le gain espéré en parallélisant, alors la grille n'est pas intéressante. Il faut donc trouver l'équilibre entre le nombre de jobs et la quantité de calcul par jobs (dans le cas d'une image par exemple, créer moins de jobs en découpant par ligne

plutôt que par pixel).

Evidemment, la grille n'a que peu d'intérêt pour un calcul simpliste sur une image de 100x100, mais pour effectuer des calculs lourds sur une matrice à 3 dimensions de 10 000 de côté, la question peut se poser. Tout l'art d'une bonne « gridification » sera de trouver la stratégie de découpage des calculs qui sera la plus efficace, c'est-à-dire qui exploitera au mieux le parallélisme en fonction des ressources disponibles, tout en minimisant le temps perdu dans le transfert des données et l'exécution de nombreux calculs à distance.

Des exemples concrets et réels

Depuis le début des années 2000, la grille a été largement utilisée, et les exemples sont très nombreux, pour de multiples disciplines et domaines scientifiques.

L'utilisation la plus médiatisée à ce jour est sans conteste l'ensemble des calculs effectués sur la grille WLCG pour la recherche du boson de Higgs (19) (20).

Au niveau français, des rencontres permettent aux utilisateurs de grille de présenter leurs travaux. De nombreuses présentations, articles et posters sont ainsi proposés. Il s'agit des *Rencontres Scientifiques France Grilles* en 2011 (21), des *journées scientifiques Mésocentres et France Grilles* en 2012 (22), ainsi que des *journées SUCCES* en 2013 (23) et 2015 (24).

Une collection d'articles liés à l'utilisation de la grille est également en place dans HAL – Archives ouvertes (25).

Au niveau international, EGI a compilé un ensemble de cas d'utilisation, à retrouver en ligne (26).

3. COMMENT ÇA MARCHE ?

3.1. APERÇU DES DIFFERENTS SERVICES

On peut représenter les différents composants de la grille comme une pile, chaque couche s'appuyant sur celle qui est juste en dessous :

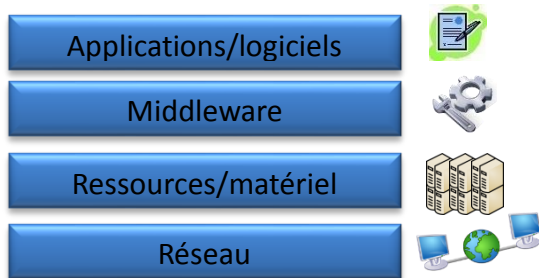


Figure 3 - la pile grille

Tout en bas, le **réseau** : c'est ce qui fait que les ressources sont connectées. Il s'agit de réseaux informatiques académiques, la version académique d'internet.

Ensuite, le **matériel**. Ce sont les machines, serveurs, disques, etc.

Tout en haut, les **applications** que nous allons faire tourner sur la grille. Et entre les deux, une couche spéciale, l'essence de la grille, que l'on appelle **middleware** (ou *intergiciel* dans sa version française). C'est cette couche qui permet d'utiliser l'ensemble des ressources de manière homogène et transparente.

C'est à cette couche que nous allons nous intéresser dans les paragraphes suivants.

EN BREF



La grille fonctionne en couches : les applications s'interfaçent avec le « middleware » de la grille, qui est installé sur les machines de l'infrastructure, elles-mêmes connectées via un réseau.

3.2. SYSTEME D'INFORMATION, D'AUTHENTIFICATION ET D'AUTORISATION

Le système d'information

Comme tout système informatique, la grille a besoin de faire connaître les informations qui la concernent, notamment :

- Où sont les ressources et les services
- Comment ces ressources et services sont configurés
- Dans quel état ils se trouvent à un moment donné

Ceci est géré par un ensemble de composants identifiés comme le système d'information de la grille. C'est ce système qui est interrogé lorsqu'un service souhaite obtenir une information particulière (par exemple, obtenir la liste de toutes les ressources disponibles à un moment donné).

Les données disponibles dans le système d'information sont renseignées de deux manières :

- **Automatiquement** : chaque service de la grille publie ainsi régulièrement les informations qui le concernent
- **Manuellement**, en particulier pour les informations administratives

L'authentification et l'autorisation

Nous avons déjà dit que pour utiliser la grille, il faut avoir un certificat et être inscrit dans une organisation virtuelle (VO). Au niveau de l'infrastructure de grille, il faut donc des services pour :

- **Délivrer et gérer les certificats** : c'est le rôle de l'autorité de certification (CA) grille GRID2-FR en France (27). GRID2-FR est une autorité opérée par Renater, reconnue, validée et habilitée à délivrer les certificats aux utilisateurs travaillant dans les établissements partenaires, mais aussi les certificats permettant d'identifier toutes les machines de la grille. Au niveau international, l'ensemble des CA nationales fait partie d'un groupe d'autorités reconnues, ce qui permet à des utilisateurs de différents pays d'utiliser les services fournis par d'autres pays.
- **Gérer les utilisateurs au niveau de la VO** : il s'agit d'un service appelé VOMS (VO Management Service), qui n'est ni plus ni moins qu'une base d'utilisateurs permettant d'associer un certificat aux permissions relatives à la personne qui l'utilise.

En pratique, lorsqu'un utilisateur souhaite soumettre des calculs sur la grille, il établit une chaîne de confiance en transmettant les informations issues de son certificat, afin de garantir qu'il est bien la personne soumettant ces calculs. De son côté, le service qu'il contacte lui présente son certificat, garantissant que l'utilisateur s'est bien connecté sur une machine reconnue. C'est la partie « authentification », qui est donc mutuelle.

Par ailleurs, le serveur VOMS est interrogé pour vérifier si la personne en question est bien inscrite dans la VO qu'il indique, et s'il a le droit de faire ce qu'il fait. C'est la partie « autorisation ».

Ces deux phases se font au moyen de ce que l'on appelle un « proxy de certificat », qui agit comme un laissez-passer à durée limitée. Pour obtenir ce laissez-passer, vous devez présenter votre carte d'identité (le certificat) et prouver que vous faites partie du club (votre inscription dans le serveur VOMS). Une fois le laissez-passer obtenu, vous pouvez ranger votre carte d'identité et votre carte de club, et vous balader où vous voulez en montrant simplement votre laissez-passer aux points de contrôle.

C'est un point important du mécanisme de sécurité sur la grille : seul le proxy circule, pas le certificat. Ainsi, en cas de problème de sécurité, le certificat n'est pas compromis et il suffit de révoquer le proxy.

Une variante : les portails et les certificats robots... non, nous ne sommes pas dans un remake de Stargate ni dans une nouvelle d'Asimov. Les portails (aussi appelés gateways) sont des interfaces web permettant d'utiliser les ressources de la grille plus simplement (voir l'exemple déjà cité du portail VIP (15)). Dans ce cas, le portail dispose d'un certificat, appelé « robot » car il est délivré pour le portail et non pour un individu réel. On s'authentifie sur le portail par un autre moyen (souvent, un nom d'utilisateur et un mot de passe), puis les calculs sont soumis avec ce certificat robot. Cette solution permet d'alléger un peu la procédure d'authentification et d'autorisation pour l'utilisateur.

EN BREF



Les informations relatives à la structure et l'état de la grille sont publiées dans un système d'information que l'on peut interroger.

L'accès à la grille est protégé grâce à l'utilisation de certificats électroniques, et à l'enregistrement des utilisateurs dans des organisations virtuelles, les « VO ».

3.3. GESTION DU CALCUL ET DES DONNEES

Les nœuds de calcul et de stockage

Sur la grille, on calcule et on stocke, il faut donc des services pour cela.

Pour le calcul, cela se passe de la manière suivante :
La machine visible pour l'utilisateur est appelée « Computing Element » (CE). Cette machine n'est en fait qu'un relai vers un ensemble d'autres machines, qui sont celles sur lesquelles le calcul va réellement être exécuté.
L'intérêt de fonctionner ainsi est de faciliter la gestion des calculs pour la grille : chaque « Computing Element » est en fait une mini-grille, qui peut recevoir et traiter plusieurs calculs grâce à un système d'ordonnancement (*batch*), qui organise et répartit les calculs au mieux sur les machines disponibles.

Du côté du stockage, on trouve également un service de haut niveau qui va ensuite gérer le stockage proprement dit sur des ressources qui lui sont attachées et qui peuvent être de différentes formes (disques, bandes, systèmes distribués...)

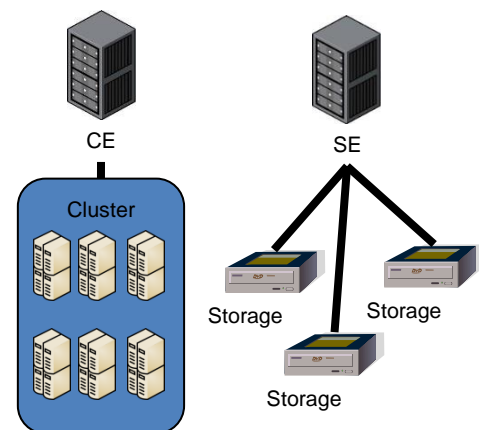


Figure 4 - Éléments de calcul et de stockage

L'ordonnancement

Nous l'avons dit en introduction : l'un des principes de la grille est l'utilisation optimisée des ressources disponibles. Pour que cela soit réalisable, il faut donc un service qui soit en mesure de savoir quelles ressources sont disponibles (en interrogeant le système d'information) et qui aiguille ensuite les calculs vers ces ressources, en fonction des prérequis éventuels de l'utilisateur.

Dans le principe donc, lorsqu'un calcul est soumis sur la grille, on fait appel à un *Workload Management System* (WMS) qui va ensuite diriger le calcul vers le meilleur nœud possible en fonction des informations qui sont à sa disposition : disponibilité des ressources pour la VO donnée, configuration nécessaire à l'exécution, proximité des données, etc.

En pratique, il y a maintenant de nombreux services et systèmes qui remplissent cette fonction sans passer par le service WMS proposé par le middleware de grille. Chaque VO, chaque outil a son système de prédilection, optimisé pour ses besoins propres. Ainsi, les fonctionnalités vont varier, mais le principe reste le même : trouver à l'instant t le meilleur schéma d'exécution possible pour mon calcul.

Les catalogues de fichiers

Le stockage sur la grille s'appuie sur des systèmes de référencement des données sous forme de catalogues : ainsi, tout fichier déposé aura une réalité physique (il sera déposé quelque part) et un référencement logique (une entrée dans un catalogue).

Ce mécanisme permet de gérer au mieux la question de la réplication des données, de leur accès et des règles de partage (une même entrée au catalogue pourra avoir plusieurs liens physiques).

EN BREF



Les calculs sur la grille sont exécutés sur des machines regroupées derrière un « Computing Element ». La répartition des calculs est faite par l'intermédiaire d'un système d'ordonnancement dont le but est de sélectionner les machines les plus adaptées parmi celles qui sont disponibles.

Le stockage est également réparti et distribué derrière des éléments visibles via la grille, les « Storage Elements ». Les fichiers stockés sur la grille sont listés dans des catalogues, ce qui permet de les retrouver plus facilement.

3.4. AUTRES SERVICES

Le fonctionnement de la grille s'appuie bien sûr sur d'autres services, plus ou moins visibles pour l'utilisateur. Notons juste pour exemple les services de supervision (monitoring) qui permettent de détecter et d'identifier les pannes ou problèmes, les services de comptabilité (accounting) qui mesurent l'usage fait des ressources, ainsi que les services de sécurité qui permettent par exemple d'exclure rapidement un utilisateur en cas de compromission de son certificat.

3.5. L'AVENTURE D'UN JOB SUR LA GRILLE

Que se passe-t-il, techniquement, lorsqu'un calcul (job) est soumis sur la grille ?

Dans les détails, la réponse varie bien sûr en fonction de l'outil utilisé et de ce que fait ce job. Mais dans les grandes lignes, voici un petit exemple d'un job simple que l'on aurait lancé via une ligne de commande.

La construction du job

Un « job » n'est ni plus ni moins qu'un bout de code encapsulé et envoyé pour être exécuté. Le bout de code fait en général appel à une application, qui est soit déjà installée sur la grille (en ce cas elle sera mentionnée dans les prérequis) soit envoyée avec le job (en ce cas elle sera installée pour l'exécution, puis désinstallée une fois le job terminé).

L'encapsulation se fait au moyen d'un fichier en JDL (Job Description Language), qui est une liste de clés/valeurs permettant de définir tout ce qui est nécessaire à l'exécution du calcul. Le JDL va servir à spécifier les attributs définissant :

- Le job lui-même (fichier exécutable, arguments, environnement, fichiers ou applications à envoyer avec le job...)
- Les ressources nécessaires (mémoire, nombre de cœurs, version d'OS ou bibliothèques...)
- Les données utilisées (référence aux entrées du catalogue de données, protocole d'accès...)

Un Job de type « Hello World », visant simplement à écrire un message dans un fichier, prendra la forme suivante en JDL :

```
Executable = "/bin/echo";
Arguments = "Hello World";
StdOutput = "message.txt";
StdError = "stderr";
OutputSandbox = {"message.txt", "stderr"};
```

Et voici le JDL d'un job qui va exécuter le programme « gridTest », envoyé avec le job, sur un set de données déjà stockées sur la grille et référencées dans un catalogue :

attribut job	{	Executable = "gridTest";
		StdError = "stderr.log";
		StdOutput = "stdout.log";
		InputSandbox = {"~/home/joda/test/gridTest"};
		OutputSandbox = {"stderr.log", "stdout.log"};
attribut données	{	InputData = "lfn:testbed0-00019";
		DataAccessProtocol = "gridftp";
attributs ressources	{	Requirements = other.Architecture=="INTEL" && \
		other.OpSys=="LINUX" && other.FreeCpus\
		>=4;
		Rank = other.GlueHostBenchmarksF00;

La vie du job

- Une fois le job préparé, il va être soumis sur la grille par l'utilisateur. En retour, l'utilisateur recevra un identifiant unique qui lui permettra de suivre l'état de son job. À cet instant, le job apparaîtra comme « **Submitted** ».
- Le système d'ordonnancement va ensuite déterminer la meilleure ressource pour l'exécution de ce job. Son statut sera « **waiting** ».
- Une fois cette ressource trouvée, le job est orienté vers cette ressource et passe en statut « **ready** ».
- À son arrivée sur le nœud de calcul, le job est mis en queue. Son statut devient « **scheduled** ».
- Lorsque vient son tour, il est exécuté sur le nœud de calcul. Son statut est alors « **Running** ».
- Une fois le calcul terminé, le job passe en statut « **done** ». C'est l'information scrutée par l'utilisateur pour lui signaler que son résultat est disponible.
- Lorsque l'utilisateur a récupéré ses résultats, la vie du job se termine et son statut devient « **cleared** ».

4. FAIRE SES PREMIERS PAS SUR LA GRILLE

4.1. LA PREPARATION

Bon. Si vous avez pris la peine de lire ce guide jusque-là, c'est bien qu'il doit y avoir quelque chose qui vous dit, dans le creux de l'oreille, que la grille est intéressante pour vous. Maintenant, reste à savoir comment faire pour s'y mettre... et le faire !

Préparer votre projet

Pour concrétiser votre intention d'utiliser la grille, le plus simple reste d'entrer en contact avec l'équipe de France Grilles, en écrivant à info@france-grilles.fr

Il vous sera transmis un questionnaire à remplir pour cerner au mieux votre besoin et vous orienter vers les meilleures solutions. Concrètement, cette étape consiste à bien valider que la grille est adaptée à votre problématique, et que l'infrastructure actuelle peut répondre à votre besoin.

Pour répondre au mieux à ce questionnaire, il vous faudra avoir un minimum d'informations sur votre environnement de travail (applications utilisées, besoins en terme de calcul, de mémoire, de stockage, problématiques particulières, etc.)

Un rendez-vous téléphonique pourra vous être proposé par l'équipe France Grilles afin d'échanger sur ces points.

Suivre une formation

Une fois que vous avez validé votre projet et identifié les outils que vous pourrez utiliser, il est utile de suivre une formation.

L'ensemble des formations proposées par France Grilles est affiché sur la page dédiée du site (28).

Au niveau de l'Inserm, vous pouvez également consulter le site CISI (1) sur lequel les différentes offres de formation, présentations, ateliers et séminaires sont également reprises.

4.2. LE GRAND SAUT

Comme mentionné dans la section 2.1, pour accéder à l'infrastructure France Grilles et EGI, il faut s'authentifier et disposer des autorisations nécessaires.

La première chose à faire est d'obtenir un certificat électronique délivré par l'autorité de certification reconnue pour la France. Ensuite, il faudra s'inscrire dans l'une des organisations virtuelles (VO) supportées sur l'infrastructure.

***Note :** Certains outils, comme par exemple la plateforme VIP (Virtual Imaging Platform) (15), disposent de leur propre mécanisme d'authentification, masquant ainsi à l'utilisateur le système d'autorisation généralisé sur la grille. Si vous utilisez un outil de ce type, vérifiez avec les administrateurs de cet outil si les étapes suivantes sont tout de même nécessaires.*

Le certificat électronique

Le certificat électronique de type X509 est ce qui va vous permettre de vous authentifier sur la grille. Il s'agit d'un couple de clés (une clé publique et une clé privée) stockées dans des fichiers, dont le principe repose sur la cryptographie asymétrique.

La **clé publique** peut être lue par tous. Présentée sur demande, elle a la même fonction que votre carte d'identité lors d'un contrôle de passeport aux frontières. La **clé privée** joue le rôle de votre signature : elle est apposée sur les documents, on peut la contrôler, mais vous êtes le seul à pouvoir la produire.

Le certificat est délivré par une autorité reconnue, appelée Autorité de Certification ou CA. En France, c'est le CNRS et RENATER qui délivrent conjointement les certificats pour la grille (GRID2-FR).

Pour demander votre certificat, rendez-vous sur la page de l'autorité de certification française (27). Si vous ne trouvez pas le nom de votre unité de rattachement dans la liste déroulante, contactez l'équipe France Grilles (info@france-grilles.fr) pour que nous puissions demander ensemble sa création.

Suite à la demande, une procédure de validation se met en route (échange de mails avec les correspondants concernés). À l'issue de cette procédure, vous recevrez un message vous indiquant comment récupérer, et sauvegarder, votre certificat.

Attention : ce certificat doit être protégé ! Ne le laissez pas trainer, ne le « prêtez » pas, et n'oubliez pas de le sauvegarder.

EN BREF



On accède à l'infrastructure France Grilles au moyen d'un **certificat**, qui joue le rôle de **carte d'identité**. Ce certificat est **personnel** et **incessible**. Il s'obtient auprès de l'autorité de certification grille pour la France.

C'est lui qui vous permettra de soumettre des calculs sur la grille, mais aussi d'utiliser de nombreux outils en ligne (portails, documents...)

L'inscription dans une VO

Avoir un certificat est la base, mais ça ne suffit pas. L'agent de sécurité à l'entrée est formel : vous devez montrer votre carte d'identité, mais vous devez également être sur la liste des invités !

La liste des invités, c'est la qualité de membre d'une organisation virtuelle (VO) reconnue et supportée. Avec votre certificat tout neuf, vous devez donc maintenant vous inscrire dans la VO qui correspond le plus à vos besoins.

Comment la trouver ?

1. En consultant la liste en ligne des VO supportées sur l'infrastructure EGI (29). La liste indique, pour chaque VO, la page de demande d'inscription.
2. En demandant de l'aide auprès de France Grilles (info@france-grilles.fr) si vous êtes un peu perdu, ou pas sûr de vous.

N.B. Il est possible d'être membre de plusieurs VO si besoin.

L'accès aux outils

Selon la VO dans laquelle vous vous êtes inscrit, et selon les outils que vous souhaitez utiliser, il vous faudra peut-être (encore) demander quelques accès supplémentaires. À ce stade, les administrateurs de votre VO seront le meilleur point de conseil pour vous orienter !

4.3. CONTREPARTIES

France Grilles est une infrastructure ouverte à tous les utilisateurs du monde académique français sans contrepartie financière directe. Ce n'est pas gratuit pour autant : les partenaires du GIS paient une cotisation annuelle, et l'infrastructure fonctionne sur budget ministériel (elle est labélisée IR).

La principale contrepartie demandée aux utilisateurs est de décrire ou déposer dans HAL (25) les publications réalisées grâce à l'apport de la grille.

Par ailleurs, il est également demandé à tous les utilisateurs des ressources des grilles de production nationale, que ce soit à travers des organisations virtuelles thématiques ou géographiques, d'ajouter la phrase suivante dans les remerciements de leurs publications :

“The authors acknowledge the support of France Grilles for providing computing resources on the French National Grid Infrastructure.”

4.4. CHECK LIST

En résumé, voici une petite liste des choses à faire - comme avant de partir en randonnée :

EN BREF – THE GRID CHECKLIST



1. **Vérifier et valider la motivation de départ.** Lire ce guide peut être un bon début. Parler à des personnes qui utilisent déjà la grille, c'est encore mieux.
2. **Prendre contact avec l'équipe France Grilles,** qui vous fera préciser votre besoin, vérifiera avec vous quelles solutions sont les plus adaptées, et vous accompagnera dans la suite du processus.
3. Si possible, **suivre une formation** pour la solution que vous avez choisie ou qui vous a été conseillée, ou au minimum suivre des présentations, séminaires, forums... présentant ces solutions et vous donnant des éléments utiles pour vous lancer
4. **Obtenir un certificat électronique,** qui vous permettra de vous identifier sur la grille.
5. **Vous inscrire dans l'organisation virtuelle (VO)** qui correspond le mieux à votre contexte de travail
6. **Vous inscrire, demander un compte ou obtenir un accès aux services que vous avez choisi** (par exemple, DIRAC, iRODS, VIP...)
7. Ne pas oublier de **remercier dans vos publications** les infrastructures utilisées, et de **référencer** ces publications dans HAL

Voilà, ça y est, vous êtes prêt ☺

4.5. SUPPORT, DOCUMENTATION ET AUTRES RESSOURCES

Tout cela peut encore vous paraître un peu compliqué. La bonne nouvelle, c'est que vous pouvez obtenir de l'aide !

Les liens et références vers les sources principales de documentation ont été donnés au fil de ce guide, mais voici les points d'entrée essentiels :

- Au niveau de l'Inserm, n'hésitez pas à contacter l'équipe CISI, via <http://cisi.inserm.fr> ou directement par mail à cisi.dsi@inserm.fr
- Au niveau de France Grilles, retrouvez tous les points de contact sur <http://www.france-grilles.fr> ou en vous adressant à info@france-grilles.fr
- Et pour la documentation en ligne, un point d'entrée unique pour les utilisateurs France Grilles : <https://forge.in2p3.fr/projects/france-grilles-documentation/> . Cette documentation étant collaborative, n'hésitez pas demandez accès pour y participer !

Maintenant, y'a plus qu'à... Alors, *"May the grid be with you"* !

5. CREDITS ET REMERCIEMENTS

Ce guide a été réalisé dans le cadre de l'activité « conseil » de l'équipe CISI (Coordination de l'Informatique Scientifique de l'Inserm) du Département du Système d'Information de l'Inserm. Il s'inscrit également dans le cadre de la participation de l'Inserm à France Grilles.

Merci à toutes les personnes qui ont contribué à l'élaboration de ce guide, que ce soit directement ou par le biais de la réutilisation de schémas ou textes : Ian Foster, Carl Kesselman, Adarsh Patil, ainsi que tous les membres du groupe de travail France Grilles sur la documentation aux utilisateurs.

Merci également aux relecteurs experts ou novices, pour leurs conseils et suggestions d'améliorations, principalement (par ordre alphabétique) : Géraldine Fettahi, Vincent Gatignol, Vincent Legoll, Eliška Mathieu, Jérôme Pansanel et Geneviève Romier.

Ce guide est diffusable, utilisable, modifiable selon les termes de la licence *Creative Commons CC-by version 4.0* : <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

Dernière mise à jour : 10 février 2016

6. BIBLIOGRAPHIE, REFERENCES ET LIENS

1. Coordination de l'Informatique Scientifique de l'Inserm. [En ligne] <http://cisi.inserm.fr>.
2. France Grilles. [En ligne] <http://www.france-grilles.fr>.
3. **Foster, Ian et Kesselman, Carl.** *The Grid: blueprint for a new computing infrastructure*. s.l. : Morgan Kaufmann Publishers Inc. San Francisco, CA, USA, 1999.
4. L'infrastructure WLCG. [En ligne] <http://wlcg-public.web.cern.ch/>.
5. The Datagrid Project. [En ligne] <http://eu-datagrid.web.cern.ch/eu-datagrid/>.
6. Les projets EGEE. [En ligne] <http://eu-egee-org.web.cern.ch/eu-egee-org/index.html>.
7. Le projet EGI-InSPIRE. [En ligne] <https://www.egi.eu/about/egi-inspire>.
8. Le projet EGI-Engage. [En ligne] <https://www.egi.eu/about/egi-engage/>.
9. Infrastructure EGI. [En ligne] <https://www.egi.eu/>.
10. Grid5000. [En ligne] <http://www.grid5000.fr>.
11. *E-Biothon : une plate-forme pour accélérer les recherches en biologie, santé et environnement.* **Bard, N, et al., et al.** Paris : s.n., 2013. Journées SUCCEs. <http://succes2013.sciencesconf.org/28462/document>.
12. *DIRAC Interware*. [En ligne] <http://www.diracgrid.org>.
13. *OpenMole*. [En ligne] <http://www.openmole.org>.
14. *iRODS*. [En ligne] <http://irods.org/>.
15. *VIP - Virtual Imaging Platform*. [En ligne] <http://www.creatis.insa-lyon.fr/vip/>.
16. Catalogue de services France Grilles. [En ligne] <http://www.france-grilles.fr/catalogue-de-services/>.
17. EGI service Catalogue. [En ligne] <https://www.egi.eu/services/catalogue/>.
18. EGI Applications Database. [En ligne] <https://appdb.egi.eu/>.
19. *Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC.* **Collaboration, CMS.** 1, s.l. : Elsevier, 2012, Physics Letters B, Vol. 716, pp. 30-61.
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370269312008581>.
20. *Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC.* **collaboration, ATLAS.** 1, s.l. : Elsevier, 2012, Physics Letters B, Vol. 716, pp. 1-29.
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037026931200857X>.
21. Rencontres Scientifiques France Grilles. [En ligne] 2011. <http://www.france-grilles.fr/2011-rencontres-scientifiques-france-grilles/>.
22. Journées scientifiques mésocentres et France Grilles. [En ligne] 2012.
<http://mesogrilles2012.sciencesconf.org/>.

23. Journées SUCCES . [En ligne] 2013. <http://succes2013.sciencesconf.org/>.
24. Journées SUCCES. [En ligne] 2015. <http://succes2015.sciencesconf.org/>.
25. *Collection France Grilles - HAL*. [En ligne] <https://hal.archives-ouvertes.fr/FRANCE-GRILLES>.
26. EGI Case Studies. [En ligne] 2014. <http://www.egi.eu/case-studies/>.
27. Autorité de Certification GRID2FR. [En ligne] <https://igc.services.cnrs.fr/GRID2-FR/>.
28. Page Formations du site France Grilles. [En ligne] <http://www.france-grilles.fr/category/formation/>.
29. Liste des VOs de l'infrastructure EGI. [En ligne] <http://operations-portal.egi.eu/vo/search>.
30. **Bzeznik, Bruno**. Et les grilles dans tout ça ? [En ligne] 2007. <https://resinfo.org/IMG/pdf/josy-grilles-Bruno-Bzeznik.pdf>.
31. Documentation utilisateurs France Grilles. [En ligne] <https://forge.in2p3.fr/projects/france-grilles-documentation/>.
32. **Vialle, Stéphane**. Introduction au Grid Computing. [En ligne] 2009. <http://www.metz.supelec.fr/metz/personnel/vialle/course/IIC-CPDG/notes-de-cours-specifiques/CPDG-06-GridOverview-2spp.pdf>.