



HAL
open science

DataGrid, projet Européen de Grille de calcul

Fabio Hernandez, Nicolas Jacq, Sophie Nicoud

► **To cite this version:**

Fabio Hernandez, Nicolas Jacq, Sophie Nicoud. DataGrid, projet Européen de Grille de calcul. 2001. lirmm-03149447

HAL Id: lirmm-03149447

<https://hal-lirmm.ccsd.cnrs.fr/lirmm-03149447>

Submitted on 23 Feb 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

DataGrid, projet Européen de Grille de calcul

Fabio HERNANDEZ
Centre de Calcul de l'IN2P3 (CNRS)
fabio@in2p3.fr

Nicolas JACQ
Laboratoire de Biologie des Protistes (CNRS)
jacq@clermont.in2p3.fr

Sophie NICOUD
Unité des Réseaux du CNRS
Sophie.Nicoud@urec.cnrs.fr

Résumé

Le concept de «Grille de calcul » (Grid) est apparu pour répondre à la demande croissante des scientifiques en puissance de calcul et en ressources de stockage.

Les centres de calcul ne suffiront plus d'ici quelques années. Le concept de Grille de calcul sera sans doute une réponse à cette demande.

Cet article décrit le projet Européen de Grille de calcul « DataGrid »[5], la mise en place de la plate-forme de tests au niveau européen et les implications pour le Centre de Calcul de l'IN2P3. En outre, le CNRS a la responsabilité du déploiement d'applications biologiques sur cette plate-forme. Préalable à ce déploiement, les besoins informatiques de la génomique et de l'imagerie médicale ont donc été évalués.

Le projet DataGrid a débuté en Janvier 2001 et se terminera en Décembre 2003. A la date d'écriture de cet article, le projet a neuf mois d'existence.

Remerciements : R. Medina (LIMOS – UBP) ; J. Montagnat (Creatis – INSA Lyon).

1. Contexte actuel

Le concept de « grille de calcul » (Grid) [8][17][22][26][2] est apparu suite à la demande des scientifiques de disposer d'une très grande puissance de calcul et d'une capacité de stockage de l'ordre du Péta Octet. Le travail collaboratif des chercheurs nécessite en permanence l'accès et l'échange d'importantes bases de données à travers l'Internet afin de corréliser entre elles leurs informations, établir des statistiques, analyser...

De même, ponctuellement, les chercheurs ont besoin d'effectuer des calculs importants pour modéliser une situation ou un appareil, exécuter un programme de CAO... Ces traitements exigent la plupart du temps des moyens de calculs et de stockage considérables. De plus, ils correspondent à une utilisation intensive des ressources de calcul mais seulement pendant un laps de temps réduit. L'investissement nécessaire ne peut être pris en charge par des entités isolées, mais exige la mise en place de collaborations plus larges, au niveau international.

Les centres de calcul en tant que tels ne suffiront plus d'ici quelques années. Le concept de grille de calcul sera sans doute une réponse à cette demande.

2. Concept de grille de calcul

Une grille de calcul se veut l'analogie d'un réseau électrique. Celui-ci fournit à chaque utilisateur toutes les ressources dont il a besoin au moyen d'une interface simplifiée à l'extrême (comme une prise de courant) à peu près standardisée dans le monde. Toute la complexité du réseau sous-jacent (de la centrale électrique au particulier) est complètement cachée. De plus, l'utilisateur peut faire varier sa consommation sans démarche préalable (dans le cadre d'un abonnement).

Une telle grille suppose bien sûr une infrastructure réseau sous-jacente suffisamment performante. L'évolution des technologies de communication rend aujourd'hui disponibles des réseaux à très hauts débits sur de longues distances, alors que jusqu'à présent les hauts débits étaient réservés aux réseaux locaux.

Il est généralement reconnu que les domaines d'application des « grilles de calcul » se divisent essentiellement en cinq grandes classes :

- Le calcul intensif distribué, où l'on utilise les grilles de calcul pour additionner les capacités de plusieurs machines inefficaces individuellement afin de résoudre un problème donné. Ce peut être l'agrégation de plusieurs super-ordinateurs ou simplement de stations de travail. Les applications typiques sont la simulation, que ce soit de situations complexes (manœuvres militaires par exemple) ou du déroulement précis de processus physiques.
- Le calcul à haut débit où l'on utilise les grilles de calcul pour ordonnancer un grand nombre de tâches, peu ou pas du tout couplées, sur des machines inutilisées. Comme dans le cas du calcul intensif distribué, le résultat peut être focalisé sur la résolution d'un problème unique, mais la nature indépendante des tâches impliquées fait que l'on s'intéresse à des problèmes très différents. Le constructeur de microprocesseurs AMD a utilisé cette technique lors de la conception de ses modèles K6 et K7.
- Le calcul à la demande, qui permet une utilisation temporaire de ressources dont la possession permanente ne serait pas rentable : capacités de calcul, logiciels, bases de données... Ici, c'est le rapport qualité-prix qui est l'argument principal, plutôt que les performances absolues.
- Le traitement intensif de données, où l'on produit de nouvelles informations à partir de données géographiquement distribuées. C'est le cas typique de la Physique des Particules à l'échéance du LHC (2006), des systèmes de prévisions météorologiques, des programmes d'observation terrestre...
- Le calcul collaboratif, qui privilégie la mise en place d'interactions entre personnes humaines pour l'exploration conjointe de bases de données, des systèmes de réalité virtuelle à objectifs éducatifs ou de distraction...

Les utilisateurs potentiels d'une grille de calcul couvrent un très large éventail de la société. Cela peut aller d'un gouvernement voulant simuler des situations de crise ou simplement fournir une grande capacité de calcul à la recherche fondamentale, jusqu'à la fourniture en ligne de jeux interactifs. Un nombre incalculable d'applications peut être envisagé dans les domaines de la santé publique, de la finance... Des PME-PMI pourront ainsi avoir accès à des outils informatiques et à des banques de données qui leur étaient autrefois interdits du fait même du coût des moyens requis.

3. Le projet DataGrid

Le projet DataGrid [5] va utiliser des applications scientifiques pour montrer comment un système de calcul et de stockage de masse hautement distribué peut être exploité de façon cohérente et intégrée. Des outils et des méthodes seront alors disponibles pour les organisations commerciales qui pourront fournir des produits de qualité industrielle pour supporter et exploiter les environnements de calcul distribué. Les logiciels seront disponibles sous forme "ouverte" (du type licence publique GNU). Un forum réunissant chercheurs et industriels permettra la communication nécessaire à un partenariat efficace. Des publications dans des journaux et des communications à des conférences donneront le maximum de publicité aux résultats obtenus.

Le projet concevra et développera des solutions et des plates-formes de tests permettant de manipuler des Péta Octets de données distribuées géographiquement, des dizaines de milliers de ressources informatiques (processeurs, disques, etc.), et des milliers d'utilisateurs simultanés des divers établissements de recherche.

Pour pouvoir mettre en place une architecture distribuée capable de répondre aux besoins d'une grille, il faut pouvoir disposer à grande échelle de réseaux de communication à très hauts débits, de l'ordre du Giga Bit par seconde ou davantage, de façon à pouvoir faire migrer efficacement les programmes de traitement et/ou les données. Le stockage de données et leur accès à une échelle encore inconnue est également un sujet d'étude. La sécurité, en termes de pérennité et de confidentialité, doit être étudiée soigneusement. Enfin, la supervision de dizaines de milliers de machines distribuées sur des sites distants les uns des autres pose d'énormes problèmes de gestion des ressources et de monitoring.

L'Union Européenne finance le projet à hauteur de 10 Millions d'Euro sur une durée de 3 ans, 2001 à 2003. Le projet est mené et issu du CERN (European Organization for Nuclear Research, Genève Suisse) avec cinq partenaires principaux : CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique, France), ESRIN (European Space Agency's Centre à Frascati, Italie), INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Italie), NIKHEF (National Institute for Nuclear Physics and High Energy Physics, Hollande), PPARC (Particle Physics and Astronomy Research Council, Angleterre). Quinze partenaires¹ associés issus des mondes de la recherche et de l'industrie participent également à ce projet ; c'est le cas du Commissariat à l'Energie Atomique (CEA) et la société Communication et Systèmes (CS) en France.

Le projet DataGrid est organisé en douze groupes de travail (Work Package) répartis en quatre catégories :

Middleware, Infrastructure, Application, Gestion du projet.

¹ CEA (France), CS (France), CNR (Italie), CESNET (République Tchèque), IFAE (Espagne), DATAMAT (Italie), CARI (Hongrie), HIP (Finlande), IRST (Italie), IBM (Angleterre), KNMI (Hollande), RPKUH (Allemagne), SARA (Hollande), NFR (Suède), KZZ (Allemagne). Les universités de Russie participent également au projet.

3.1 Middleware

La partie middleware est divisée en cinq groupes de travail, WP1 à WP5, chargés de :

- développer une architecture capable d'ordonnancer les tâches et de gérer les ressources disponibles (WP1- Grid Work Scheduling)
- développer la gestion de données sur la grille (WP2 - Grid Data Management)
- mettre en place des outils de monitoring de ressources et de services (WP3 - Grid Monitoring Services)
- gérer les infrastructures locales à chaque site de la grille (WP4 - Fabric Management)
- fournir une interface uniforme pour l'accès aux données (WP5 - Mass Storage Management)

Le middleware du projet DataGrid est développé à partir du logiciel Globus [18]. Le projet Globus développe la technologie de base utilisée pour construire des grilles de calcul. Les domaines d'application de cet outils sont la communication, l'ordonnancement des tâches, la gestion des accès aux données, la sécurité des accès à la grille et le monitoring de la grille.

Le Toolkit Globus utilise les dernières technologies disponibles, authentification des utilisateurs et des nœuds de la Grille par certificats, utilisation de serveurs LDAP pour le monitoring.

3.2 Infrastructure

La catégorie infrastructure comporte deux groupes de travail, WP6 et WP7.

- Mise en place des plate-formes de tests et d'intégration (WP6 - Testbeds and Demonstrators). Ce groupe de travail est sous la responsabilité du CNRS/IN2P3. Il réalisera l'intégration des versions successives du middleware et assurera la coordination de la résolution des problèmes de mise au point.
- Mise en place des services et de la sécurité réseau (WP7- Network Services)

3.3 Applications

Des applications provenant de trois disciplines scientifiques utiliseront la grille, chacune d'entre elle constitue un un groupe de travail, WP8 à WP10. Chaque groupe de travail développe les interfaces nécessaires pour utiliser l'infrastructure et le middleware de la grille.

- Applications en Physique des Hautes Energies (WP8 - HEP Applications)
- Applications en Sciences de la Terre (WP9 - Earth Observation Applications)
- Applications en Sciences de la Vie (WP10 - Biology Applications). Le CNRS a la responsabilité de ce groupe de travail.

3.4 Gestion du projet

La catégorie gestion du projet se compose de deux groupes de travail :

- Dissémination et exploitation des résultats (WP11 – Dissemination)
- La direction du projet proprement dite qui est assurée par le CERN (WP12 - Project Management)

4. Plate-formes de tests

Le CNRS coordonne la mise en place des plates-formes de tests et d'intégration (WP6) [6]. La plate-forme de tests comportera quatre itérations que nous appelons au sein du projet « Testbed » de 0 à 3. Testbed 3 étant la version finale de la grille de calcul issue du projet DataGrid.

Au cours du projet, quatre Testbeds vont se succéder et se chevaucher. Lorsque un Testbed sera stable, il sera en phase de production et un nouveau Testbed de développement sera mis en place.

Les principales tâches de ce groupe sont de :

- planifier, organiser et permettre l'accès des utilisateurs aux « Testbeds ».
- assurer le support technique pour les sites de la grille.
- fournir la documentation nécessaire à l'utilisation des Testbeds pour les groupes de travail middleware et applications ainsi qu'aux utilisateurs des Testbeds.
- réaliser l'intégration des versions successives du middleware et assurer la coordination de la résolution des problèmes de mise au point.
- fournir aux différents groupes de travail les réactions des utilisateurs en vue de l'amélioration des produits.
- prendre en compte les demandes des autres groupes de travail pour l'évolution de la grille ainsi que mettre à leur disposition les logiciels utilisés et/ou développés.

4.1 Testbed 0

Le Testbed 0, première itération de la plate-forme de tests a débuté en Janvier 2001 et s'est terminé en Septembre 2001.

Le Testbed 0 est constitué de quarante sites en Europe. Au cours de cette première année les nœuds de la grille se sont constitués, le Toolkit Globus a été testé.

Pendant de cette période, l'organisation générale des Testbeds a été mise en place, ainsi que les applications et procédures indispensables à leur bon fonctionnement

Des groupes de travail par sujet ont été mis en place. A titre d'exemple, on peut citer :

- Le groupe des administrateurs des Autorités de Certification qui a pour objectif la mise en place des Autorités de Certification, une par nation ou partenaire. Actuellement le projet a reconnu onze Autorités de Certification.
- Le groupe Information Service qui a mis en place l'arborescence de l'Information Service, serveurs LDAP utilisés pour le monitoring ; ce groupe est en relation avec groupe de travail de monitoring (WP3)
- Le groupe de travail sur la gestion des autorisations d'accès au Testbed qui est chargé de développer des outils facilitant la gestion des autorisations d'accès au Testbed.

4.2 Testbed 1

En cours depuis le mois d'Octobre 2001, l'équipe d'intégration du WP6 reçoit les différents développements des groupes de travail middleware et procède aux tests de ces modules, afin de les intégrer au Testbed 1. Fin 2001, une première version du Testbed 1 sera disponible.

Le Testbed 1 est, dans les premiers mois constitué d'un site, le CERN, sur lequel a lieu la phase d'intégration. Puis, plusieurs sites rejoindront le Testbed 1, notamment en France. Le Centre de Calcul de l'IN2P3 (CNRS) à Lyon est le second site du Testbed 1. Enfin, progressivement sur l'ensemble du Testbed 0 migrera vers Testbed 1 en début 2002.

Deux autres itérations de Testbed suivront.

5. Les implications du modèle grille pour un centre de services informatiques

Le CNRS, partenaire français du projet DataGrid, a chargé l'Institut National de Physique Nucléaire et de Physique de Particules (IN2P3) et l'Unité des Réseaux du CNRS (UREC) de coordonner les activités du projet au niveau national. Dans ce contexte, le centre de calcul de l'IN2P3 situé à Lyon [11] a pour mission d'adapter ses services afin de les rendre compatibles avec la grille de calcul en construction.

Offrant ses services à plus de deux milliers de chercheurs français et étrangers organisés en plus d'une trentaine de collaborations internationales, le centre de calcul de l'IN2P3 constitue un outil informatique indispensable pour la recherche française en physique nucléaire et en physique de hautes énergies. Les services de calcul intensif et de stockage de masse sont sa vocation première. En effet, le caractère indéterministe de la physique quantique requiert l'analyse de milliards d'interactions entre particules afin d'observer et de comprendre les processus fondamentaux. L'analyse de ces énormes quantités de données demande une vaste capacité de traitement et de stockage.

Le centre de calcul de l'IN2P3 participe activement au projet européen DataGrid [5] en tant que plate-forme de test pour la validation du logiciel développé au sein du projet. Cette participation a pour objectif d'évaluer les implications d'un modèle de calcul et de stockage où les ressources sont accessibles globalement d'un point de vue du fournisseur de services informatiques que nous sommes mais aussi du point de vue des utilisateurs de ces services, en préparation de nouveaux défis qui se présentent à nous pour les années à venir.

A l'horizon 2006 et pour une durée d'une quinzaine d'années, des nouvelles expérimentations scientifiques débiteront le traitement des données à une échelle bien supérieure à celle des expérimentations actuelles [13][14][15][16]. Quatre nouvelles collaborations utilisant les appareils installés autour de l'accélérateur de particules LHC (Large Hadron Collider) actuellement en construction au CERN (Centre Européen pour la Recherche Nucléaire) à Genève commenceront la prise de données dans cette période. Le LHC [9] est un accélérateur de particules conçu pour provoquer des collisions entre protons et ions à des niveaux d'énergie très élevés. Cet instrument permettra aux chercheurs d'approfondir la structure de la matière et de recréer les conditions de l'univers dans les premiers instants après le « Big Bang ».

Une capacité de calcul et de traitement de l'ordre de la dizaine de péta-octets par an est prévue pour les expérimentations qui débiteront dans cette période. Pour des raisons aussi bien techniques que économiques, il ne paraît pas envisageable de disposer des ressources nécessaires pour traiter ces énormes quantités de données sur un seul site géographique. C'est dans cette optique que les grands centres de calcul de la discipline ont entrepris un travail de mise en commun de ces ressources afin de constituer une grille de calcul planétaire pour la physique de hautes énergies [1][2].

Un modèle de calcul multi-tiers hiérarchique a été adopté pour la mise en place de l'infrastructure informatique pour les expérimentations LHC [10]. Dans ce modèle, la prise de données brutes et la reconstruction de ces données seront effectuées dans le site expérimental. Les ressources informatiques pour la simulation, l'analyse, le

stockage et une partie de la reconstruction seront fournies par des centres de calcul régionaux (nationaux ou supra-nationaux). Des centres informatiques institutionnels (universitaires, laboratoires, etc.) et les postes de travail des chercheurs complètent cette infrastructure.

Dans cette organisation à plusieurs niveaux, il est estimé que pour cette période le centre de calcul de l'IN2P3 doit disposer de plus d'un million de SpectInt95, de 3 Péta Octets de capacité de stockage sur bande et de 1,7 Péta Octets de capacité de stockage sur disque. Un débit des liaisons réseau de 12 Gbps sera nécessaire. Ces chiffres correspondent à une très forte croissance par rapport à la capacité actuellement installée.

La mise en commun des ressources informatiques disponibles sur des sites géographiquement dispersés suivant le modèle de grille est une approche intéressante : ce modèle permettrait aux chercheurs de disposer d'un ordinateur virtuel avec une capacité de calcul et de stockage suffisante pour satisfaire leurs attentes. Néanmoins, la mise en place d'une telle infrastructure pose un certain nombre de problèmes qui doivent être résolus afin de construire une plate-forme opérationnelle. Les paragraphes suivants présentent ces problèmes et les solutions adoptées dans cette première phase d'expérimentation du projet.

5.1 Hétérogénéité

Une des caractéristiques inhérentes aux grilles de calcul est l'hétérogénéité de plusieurs points de vue : matériel, logiciel, politiques de sécurité, contraintes d'exploitation, profil des utilisateurs, etc [18][19]. Toute la complexité liée aux différences concernant ces aspects doit être invisible pour l'utilisateur final. Un grand effort de coordination est donc nécessaire entre tous les sites participant à une grille comme celle en construction dans le cadre du projet DataGrid. Ceci constitue une tâche importante à part entière.

Les contraintes d'exploitation et de qualité de service de chaque site ne doivent pas être sacrifiées par leur intégration à une grille. Nous pensons que chaque site doit conserver une totale autonomie concernant ses politiques d'accès, d'exploitation et d'évolution aussi bien côté matériel que logiciel, tout en gardant la compatibilité avec les services offerts à travers la grille. Un juste équilibre entre ses forces doit être trouvé par chaque site participant à une grille de calcul.

Dans cette optique, l'approche de Globus [18] nous intéresse. En effet, Globus est une boîte à outils permettant d'interfacer des services existants de façon à ce qu'ils soient accessibles à travers la grille en utilisant des interfaces communes. Il laisse ouvert le choix de l'outil spécifique pour chaque composant (calcul, stockage, transfert de données, duplication de données, etc.) à la discrétion de chaque site.

5.2 Ouverture

La globalisation de ressources suppose un certain degré d'ouverture des sites vers le monde extérieur. Cette ouverture peut poser des problèmes auxquels une solution doit être trouvée sans compromettre la sécurité du site.

Un exemple qui illustre bien ce point concerne l'authentification des utilisateurs. Un des apports du modèle de grille de calcul est l'accès transparent pour le chercheur aux ressources informatiques dispersées. En d'autres termes, il n'est pas tenu de se connecter sur une machine appartenant à un site quelconque pour utiliser les ressources de ce site. Une connexion sur un des sites appartenant à la grille devrait suffire pour lui donner accès aux autres sites de la même grille.

Des solutions basées sur une infrastructure de clé publique sont adoptées par des outils comme Globus, utilisé dans DataGrid [3]. La solution mise en place dans le cadre du projet consiste à utiliser des certificats utilisateur émis par un ensemble d'autorités de certification bien identifiées et fiables. A titre d'exemple, le CNRS assure la délivrance des certificats pour les utilisateurs des sites français participant à la grille DataGrid. Un individu détenteur d'un certificat émis par une de ces entités, est reconnu formellement par tous les sites comme un utilisateur potentiel de ses ressources. Chaque site se réserve le droit d'accorder les autorisations qu'il juge adaptées à l'utilisateur en question.

Dans cette approche, le site délègue l'identification formelle de ses utilisateurs à des organismes partenaires auxquels il fait confiance. Un changement de culture et une volonté d'ouverture et de coopération sont donc nécessaires.

Cette ouverture n'est pas sans risques. Pour tirer partie des ressources disponibles dans une grille, un système d'information de l'état et de la structure de ces ressources est nécessaire [4]. Il permet la découverte de ressources utilisables à un moment donné et des relations entre elles. La publication de ces informations généralement sensibles d'un point de vue sécurité doit se faire sans compromettre l'intégrité ni la sécurité de chaque site ni de l'ensemble de sites partenaires. Des travaux dans ce domaine sont en cours, mais les solutions ne sont pas satisfaisantes à l'heure actuelle.

5.3 Adaptation de l'existant

Pendant ces dernières années, plusieurs produits logiciels ont été développés sur site pour satisfaire les besoins des utilisateurs tout en exploitant au mieux les ressources disponibles. Il s'agit par exemple de gestionnaire des travaux par lots, des systèmes de stockage de masse, des systèmes de surveillance et de contrôle de la production, des systèmes pour le transfert de données haute performance, des systèmes de remontée d'alertes, etc.

L'adaptation du logiciel existant afin de le rendre compatible pour une utilisation à travers la grille a été entreprise. L'utilisation cohérente des mécanismes d'authentification des usagers par les moyens cités ci-dessus demande une modification des logiciels utilisables à l'extérieur du périmètre du site. C'est le cas des logiciels de transfert de données haute performance entre les sites qui ont du être étendus pour utiliser ces nouveaux mécanismes d'authentification. [12]

L'ordonnanceur des travaux par lots a du être adapté afin de le rendre compatible avec un ordonnanceur central pour toute la grille DataGrid. Une interface uniforme

pour l'utilisation du système de stockage de masse a été développée et intégrée. Toutes ces modifications vont dans le sens de rendre les ressources disponibles sur toute la grille accessibles de façon uniforme pour l'utilisateur final.

D'autre part, les logiciels scientifiques doivent à leur tour être adaptés pour tirer partie des nouveaux services offerts par la grille : découverte de services et de sites, localisation de données et de ressources, transfert des données, etc. Une grande partie de ces logiciels sont et seront développés au sein des collaborations scientifiques ou se trouvent dans le domaine publique : leur adaptation est donc possible. Il y a néanmoins un certain nombre de logiciels commerciaux qui devront s'adapter aux nouvelles infrastructures dans les années qui suivent. Nous sommes persuadés que le modèle grille sera suffisamment répandu dans quelques années et que les éditeurs de logiciels commerciaux tiendront compte de cette réalité dans leurs produits.

5.4 Perspectives

Le projet DataGrid constitue une expérimentation intéressante pour un centre de services informatiques pour la recherche scientifique. Les leçons apprises pendant cette phase initiale du projet DataGrid nous permettent d'être confiants sur la voie entreprise et sur les capacités d'adaptation aux rapides changements dans ce domaine. Nous pensons que cette expérience pourra être utile pour d'autres sites voulant s'engager dans une voie similaire.

6. La grille au service des sciences de la vie

Les biologistes et les physiciens des hautes énergies ont des utilisations complémentaires de la grille.

Les physiciens impliqués dans les quatre expériences LHC doivent générer et stocker des millions d'événements simulés avant le démarrage de LHC en 2006. Une fois les événements simulés, ils sont enregistrés sur des fichiers et dans une base de données. Ces fichiers seront ensuite relus par les logiciels d'analyse de l'expérience mais ils ne seront pas modifiés.

Les biologistes impliqués dans la génomique quant à eux doivent faire face à une croissance exponentielle de leurs bases de données. Chaque fois qu'un nouveau génome est séquencé et annoté, la base de données toute entière doit être indexée pour chercher de nouvelles homologues. Des données supplémentaires issues de la post-génomique (puces à ADN, structure de protéines,...) font partie des informations qui s'accumulent sur les disques durs des ordinateurs. Cette information issue de tous les laboratoires dans le monde se présente dans de multiples formats.

Une croissance comparable du volume des données est observée dans le secteur de l'imagerie médicale. En effet, les images médicales sont distribuées sur les sites de production (département de radiologie, hôpitaux, ...). Bien qu'il n'y ait pas aujourd'hui de standard pour le transfert des données entre sites, il existe un besoin croissant d'accès et de traitement distant de ces données. Les bases de données d'imagerie médicale sont énormes (plusieurs TB de données produites chaque année) du fait du volume des images 3D.

Nous allons voir comment le concept de grille répond à certains besoins actuels des sciences du vivant.

6.1 Les besoins de la génomique

Aujourd'hui, les biologistes peuvent accéder de façon anonyme à des bases de données génomiques et à des algorithmes d'analyse sur des portails internet (généralement via un serveur web).

Des centres collectent et mettent à jour les informations sur les séquences nucléiques et protéiques. Ces mises à jour ont lieu quotidiennement. Les bases de données de séquences croissent exponentiellement (leur taille double tous les 18 mois). De plus, il est admis qu'actuellement seulement 40% des séquences connues sont présentes dans les bases de données. De nouvelles bases de données apparaissent, certaines spécialisées (dans la protéomique et le métabolisme de génomes spécifiques comme la drosophile, les parasites, les végétaux... ou les données post-génomiques telles que les résultats des puces à ADN). La technologie disponible aujourd'hui rend possible la production massive de données et il est prévu que la taille des bases de données atteindra le téraoctet dans les 3 années à venir.

Un des programmes d'analyse les plus couramment utilisés aujourd'hui par les biologistes est le programme BLAST qui cherche les homologues entre les séquences d'ADN ou de protéines d'une base et la ou les séquences d'ADN ou de protéines soumises. Ce programme consomme beaucoup de CPU et travaille avec une grande quantité de données en entrée et sortie. Mais il ne s'agit que d'un

programme parmi une multiplicité d'algorithmes bio-informatiques de génomique comparative, de modélisation de la structure des protéines, de fouille de données dont les biologistes ont besoin aujourd'hui pour exploiter l'information contenue dans les génomes.

L'approche DataGrid peut concerner de nombreux domaines de la biologie [7] :

- les séquences d'ADN annotées issues des génomes complets, comme la souris et l'homme,
- Les traces issues du séquençage génomique à haut débit,
- Les SNP (Single Nucleotide Polymorphisms) d'ADN,
- Les séquences de protéines annotées,
- Les structures d'ADN et de protéines
- Les expériences d'expression génique et protéique
- Les interactions protéines-protéines et protéines-ligands
- La littérature biologique et médicale

Lors du traitement de données génomiques, les problèmes les plus couramment rencontrés sont les suivants : accès aux données, organisation/structure des données, données erronées et interprétation des données.

6.1.1 Accès aux données

En raison du grand volume de données disponibles, les biologistes font face à des problèmes majeurs lorsqu'ils essayent d'accéder aux données.

Où sont localisées les données dans le monde ? Les bases de données génériques sont accessibles au public et rendues disponibles par leurs fournisseurs. Mais d'autres banques avec des informations très spécialisées sont seulement disponibles sur des sites spécifiques (habituellement, ces bases contiennent des résultats d'expériences disponibles sur le site web des laboratoires où elles ont lieu). La façon dont les données sont disséminées autour du monde est très similaire au web. De plus, il n'y a pas de moteur de recherche général qui pourrait aider le biologiste à trouver l'information sur un objet biologique donné.

Il n'y a pas de format standard pour les bases de données à cause de la façon dont elles sont créées et maintenues (habituellement, les bases de données sont disponibles sous forme de fichiers plats). Ainsi, il n'existe pas de standard SQL comme langage de requêtes qui pourrait aider le biologiste à réaliser des requêtes sur une unique base de données (une requête à cheval sur plusieurs bases de données semble impossible actuellement en raison de l'apparente anarchie des formats de données).

Le dernier problème majeur rencontré par les biologistes lorsqu'ils désirent accéder aux bases de données est le temps de réponse. Seulement quelques centres existent. La communauté des biologistes analysant des données génomiques est très large (estimée à 30 000). Cela provoque la congestion des principaux centres de

ressources. C'est pourquoi les biologistes préfèrent télécharger localement les bases de données dont ils ont besoin pour réduire ce temps de réponse. Mais ainsi ils n'ont pas accès aux mises à jour des bases de données. De plus, ces téléchargements massifs empirent la congestion des principaux centres.

6.1.2 Organisation/structure des données

Il n'y a pas de gestion centralisée des données génomiques dans le monde ou en Europe. Plusieurs fournisseurs ont fait un effort pour offrir un tel service, mais ils font face à des problèmes pour obtenir des données.

En raison du format particulier des bases de données spécifiques, une base peut être présente dans différents formats dans un tel centre de ressources. De plus, les programmes d'analyse peuvent utiliser un format d'entrée spécifique et ne peut pas être utilisé sur un certain nombre de bases de données.

En raison de la croissance de ces données, les mises à jour des bases de données peuvent être très longues. Par exemple, la mise à jour de l'indexation de la base EMBL demande 24 heures.

La synchronisation de la mise à jour des bases dans les centres de ressources principaux est également un problème. Chaque centre collecte plusieurs mises à jour de bases pour mettre à jour leurs bases. Régulièrement, ces centres échangent leur mises à jour pour synchroniser leurs banques. Ainsi, selon la base de données et le moment d'accès, un biologiste peut obtenir différents résultats. C'est pourquoi les objets peuvent être nommés différemment dans les bases de données créant des ambiguïtés pour les biologistes.

La déficience de structure apparaît aussi dans le nombre de bases de données traitant du même objet biologique ! Par exemple, l'information concernant des protéines peut être trouvée dans différentes banques (séquence et fonction d'une protéine dans une base, structure 3D dans une autre...).

6.1.3 Données erronées

En raison de la manière de mettre à jour les bases de données et au vu de leur forte croissance, le contrôle de la qualité des données est très lâche. Cela a une influence sur la confiance que les biologistes ont sur l'information présente dans nombre de bases de données. Il y a un équilibre entre avoir la base de données contenant les informations les plus récentes et la qualité des données présentes dans cette base.

6.1.4 Interprétation des données

Les programmes d'analyse utilisés par les biologistes sont très consommateurs de CPU et d'entrées/sorties. Par exemple, la prédiction de la structure spatiale des protéines est extrêmement consommatrice de CPU. Cela favorise la congestion des centres de ressources.

En raison de la manière dont sont gérées les bases de données, l'interprétation d'informations croisées sur plusieurs bases de données est vraiment difficile.

6.2 Les besoins de l'imagerie médicale

L'analyse automatique de bases de données d'imagerie médicale est une nécessité pour la médecine de demain. En effet, la mise à disposition récente de multiples équipements d'acquisition d'images digitales a conduit à la croissance du volume de ces données. Une architecture de grille permettrait à une communauté large et dispersée de médecins de partager des ressources de calcul, de stockage et d'analyse des images médicales disponibles.

La recherche autour de l'analyse des images médicales s'oriente vers des stratégies d'utilisation de modèles qui incluent de plus en plus de connaissance a priori du contexte. Ces modèles sont très complexes et requièrent des ressources importantes de calcul et de mémoire qu'une grille peut fournir.

6.2.1 Bases de données d'images médicales

Du fait de la taille des images médicales, les besoins en puissance de calcul et en stockage sont très importants. Une simple image 3D de haute résolution peut contenir 1024^3 voxels, chaque voxel étant codé sur 16 bits, soit un total de près de 2Gb de données. Les séquences temporelles d'images 2D et 3D sont ainsi de très grosses consommatrices d'espace disque. Par exemple, le département de radiologie de l'Hôpital Cardiologique de Lyon produit annuellement environ 12Tb de données.

Il n'y a pas aujourd'hui de standard pour le stockage et la gestion des images médicales. Chaque centre de production d'images gère ses propres données, généralement à l'aide du système propriétaire lié à l'imageur. DICOM est le standard généralement accepté pour la description et le transfert d'information médicale. Ce standard, DICOM Information Object Definition Standard, est un bon candidat pour le format des fichiers médicaux sur la grille. En effet, les applications d'imagerie médicale qui tourneront sur la grille doivent utiliser un format commun pour importer les données. A long terme, un service de la grille implémentant le standard d'échanges DICOM devrait être envisagé pour importer directement les images issues des systèmes d'acquisition.

Cependant, DICOM ne traite pas la question de l'organisation des bases de données. L'étude à grande échelle de certaines pathologies implique le traitement d'un large échantillon d'images caractérisées par une zone anatomique, des paramètres d'acquisition et/ou des informations pathologiques. Dès lors, les images devraient être stockées dans un format permettant l'indexation. Les bases de données SQL semblent de bons candidats pour stocker et filtrer des informations liées à l'image.

Les images médicales ont généralement avant l'image elle-même une en-tête contenant les informations concernant le patient et des informations liées à l'acquisition, la région d'intérêt et les paramètres d'acquisition. Ces deux parties, l'image et l'en-tête, peuvent être traitées comme un seul ou comme deux fichiers indépendants. La préservation du secret médical est bien entendu un souci majeur. L'accès aux données concernant un patient doit être contrôlé par un mécanisme de

droit d'accès. Si l'en-tête est répliqué sur un autre site de la grille, elle doit être cryptée de telle sorte qu'une tierce personne ne puisse la lire.

6.2.2 Les images médicales en réseau

Les informations concernant un patient doivent être cryptées au cours de leur transfert. Pour certaines études, ces informations sont inutiles. Les images peuvent être diffusées sur le réseau après que toutes les informations concernant le patient aient été enlevées.

Les images médicales peuvent être compressées, bien que les algorithmes de compression avec perte de données comme JPEG ne sont généralement pas adaptés.

De nombreuses applications médicales requièrent un temps de réponse rapide (de l'ordre de quelques minutes) pour le contexte clinique. Il devrait dès lors être possible d'envoyer une image à un centre distant pour traitement et de recevoir la réponse très rapidement (une image médicale non compressée représente typiquement aujourd'hui un fichier de 20 à 200 Mb). Certaines applications requièrent la transmission de données médicales de façon interactive, comme par exemple un échange entre spécialistes sur des images dans le cadre d'une vidéo-conférence. Il s'agit alors d'échanger une image entre sites distants en quelques secondes. L'image peut être mise à jour de façon incrémental si seulement quelques coupes d'une image 3D sont visualisées sur l'écran de l'ordinateur.

6.2.3 Traitement distant d'images médicales

Les centres d'imagerie comme par exemple les hôpitaux ne possèdent pas la puissance de calcul nécessaire pour traiter les images médicales. L'image doit donc être transférée du centre de stockage – centre de production – et centre de traitement. La grille doit proposer une architecture qui permette à une large communauté d'utilisateurs médicaux d'accéder à des ressources de calcul partagées.

Les structures publiques ou privées disposant des ressources de calcul et de mémoire suffisantes peuvent traiter des données à la demande des médecins. Une interface utilisateur conviviale est indispensable pour cet usage clinique. Les algorithmes disponibles sont distribués sur la grille et un médecin doit être en mesure de demander un traitement spécifique sans avoir connaissance du lieu où le traitement va s'effectuer. La grille prend soin de l'agencement des tâches, de la charge du réseau et des ressources de calcul. De même, la liste des algorithmes mis à la disposition des utilisateurs cliniciens doit être accessible.

Les requêtes de traitement provenant de différents centres équipés d'imageurs, un algorithme de traitement devrait être capable de traduire les données dans son propre format d'entrée. De ce fait, un langage standardisé de haut niveau de description des données est nécessaire.

Si l'on souhaite généraliser le traitement distant des données médicales dans les services d'urgence ou les salles d'opérations, il faut donner un accès privilégié à des

ressources de calcul. La grille se chargera de donner des priorités aux tâches et, s'il le faut, d'interrompre les tâches de faible priorité.

6.3 Conclusion concernant les sciences de la vie

L'utilisation généralisée de l'informatique en génomique et en imagerie médicale dans chaque laboratoire et chaque hôpital rend le concept de grille très attrayant pour ces domaines scientifiques :

- le concept de grille permet de distribuer le calcul et les bases de données sur des clusters interconnectés par des réseaux à haut débit. Ceci ouvre des perspectives en télé-médecine : (i) la possibilité de partager des ressources informatiques et (ii) la mise à disposition d'une puissance de calcul inaccessible jusqu'alors
- la grille permet de protéger le secret des informations grâce à des grilles virtuelles
- la répllication des données permet de faire des copies miroirs des bases de données de la plus haute importance pour la bio-informatique
- une grille contribue à définir et propager des standards pour les objets biologiques et les modèles de données.

Le travail pionnier du projet DataGRID dans le secteur des sciences du vivant n'est que le premier pas vers la mise en place d'une grille de calculs biologique.

Références

[1] I. Foster, C. Kesselman, S. Tuecke. The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations (to be published in *Intl. J. Supercomputer Applications*, 2001).

[2] I. Foster, C. Kesselman (eds). *The Grid: Blueprint for a new computing infrastructure* Morgan Kauffman, 1999.

[3] I. Foster, C. Kesselman, G. Tsudik, S. Tuecke. A Security Architecture for Computational Grids. *Proc. 5th ACM Conference on Computer and Communications Security Conference*, pg. 83-92, 1998.

[4] S. Fitzgerald, I. Foster, C. Kesselman, G. von Laszewski, W. Smith, S. Tuecke. A directory service for configuring High-Performance distributed computations. *Proc. 6th IEEE Symp. On High-Performance Distributed Computing*, pg. 365-375, 1997.

Références du projet DataGrid :

[5] Site officiel du projet DataGrid: <http://www.eu-datagrid.org>

[6] Site du groupe de travail de test et intégration (WP6) :
<http://marianne.in2p3.fr/>

[7] Site du groupe de travail de l'application des sciences de la vie (WP10) :
<http://marianne.in2p3.fr/datagrid/wp10>

[8] Global Grid Forum: <http://www.gridforum.org>

Références Physique des Hautes Energies :

[9] <http://user.web.cern.ch/user/Index/LHC.html>

[10] <http://monarc.web.cern.ch/MONARC>

[11] <http://www.in2p3.fr/CC>

[12] <http://doc.in2p3.fr/bbftp/index.html>

[13] <http://atlas.web.cern.ch/Atlas>

[14] <http://alice.web.cern.ch/Alice>

[15] <http://cmsinfo.cern.ch/Welcome.html>

[16] <http://lhcb.web.cern.ch/lhcb>

[17] *Technologies de Grille et projets :*

[18] Globus : <http://www.globus.org>

[19] Legion : <http://www.cs.virginia.edu/~legion/>

[20] EcoGrid : <http://www.csse.monash.edu.au/~rajkumar/ecogrid/>

[21] Condor : <http://www.cs.wisc.edu/condor/>

[22] *Projets de Grille utilisant Globus :*

[23] Grid Physics Network (GriPhyN) : <http://www.griphyn.org/>

[24] Particle Physics Data Grid : <http://www.ppdg.net>

[25] DOE Science Grid : <http://www-itg.lbl.gov/Grid/>

[26] *Autres projets de Grille :*

[27] SUN : <http://gridengine.sunsource.net/>

[28] IBM : <http://marianne.in2p3.fr/datagrid/documents/lbmgrid.pdf>

[29] UNICORE : <http://www.unicore.de/>

[30] EuroGrid : <http://www.eurogrid.org/>

[31] EcoGrid : <http://www.csse.monash.edu.au/~rajumar/ecogrid/>

[32] Condor : <http://www.cs.wisc.edu/condor/>