

Pourquoi la science a besoin d'environnements logiciels reproductibles ?

Konrad HINSEN

Centre de Biophysique Moléculaire, Orléans, France
et
Synchrotron SOLEIL, Saint Aubin, France

17 mai 2021

La reproductibilité, un fondement de la science



Royal Society of London for Improving Natural Knowledge (1663)



Crise de la reproductibilité

La **crise de la reproductibilité** (*replication crisis* ou *replicability crisis* ou *reproducibility crisis* en [anglais](#)) est la crise [méthodologique](#) dans le domaine des [sciences](#) selon laquelle de nombreux résultats publiés dans des [revues scientifiques](#) sont difficiles, voire impossibles à [reproduire au cours d'études subséquentes](#). Initiée au milieu des années 2000, la crise prend de l'ampleur au milieu des années 2010, nourrie par la publication de plusieurs articles sur le phénomène.

La crise n'est pas propre à un domaine unique bien qu'elle semble moins toucher les [sciences fondamentales](#) et [appliquées](#) que les sciences médicales. Les facteurs qui en sont responsables semblent nombreux. Des pistes d'amélioration de la reproductibilité au sein des publications scientifiques, dont notamment l'amélioration des critères de publication, sont explorées.

Sommaire [\[masquer\]](#)

- 1 [Historique](#)
- 2 [Étendue du phénomène](#)
 - 2.1 [Médecine](#)
 - 2.2 [Psychologie](#)
- 3 [Causes](#)
 - 3.1 [Fraudes](#)
- 4 [Pistes de solutions](#)

La trinité de la reproductibilité

Reproductibilité **expérimentale**

- Refaire une expérience d'après la description publiée
- Obtenir des résultats suffisamment proches

Reproductibilité **statistique**

- Refaire une étude avec un autre échantillon ou une autre technique
- Inférer des conclusions suffisamment proches

Reproductibilité **computationnelle**

- Refaire un calcul à l'identique
- Obtenir des résultats identiques

Reproduire ou répliquer ?

Reproductibilité

- Niveau technique
- Est-ce bien fait ?
- Évaluation simple
- Réponse simple : oui/non
- **Vérification**

Répliquabilité

- Niveau scientifique
- Est-ce la bonne chose à faire ?
- Évaluation laborieuse
- Réponse complexe : si...
- **Validation**

En calcul scientifique :

- Même code
- Mêmes paramètres
- Mêmes données
- **Résultat identique ?**
- **Est-ce le même calcul ?**

- Nouveau code
- Mêmes paramètres
- Mêmes données (ou pas)
- **Résultat équivalent ?**
- **Le calcul est-il robuste ?**

Reproduire ou répliquer ?

La méthode scientifique demande la **réplicabilité** qui atteste de la **robustesse** des résultats.

Pour examiner la répliquabilité, il faut

- être sûr de ce qui a été calculé
- pouvoir étudier le code source
- pouvoir modifier le code source

Autrement dit :

- avoir la totalité du code source
- être sûr que le code source correspond au calcul effectué
- pouvoir recompiler le code source

PHYSICS TODAY

[HOME](#)

[BROWSE](#)▼

[INFO](#)▼

[RESOURCES](#)▼

[JOBS](#)

DOI:10.1063/PT.6.1.20180822a

22 Aug 2018 in [Research & Technology](#)

The war over supercooled water

How a hidden coding error fueled a seven-year dispute between two of condensed matter's top theorists.

Ashley G. Smart

[A.G. Smart, Physics Today, 2018](#)

La science a besoin de calculs reproductibles.

C'est quoi un calcul ?

Input

```
100111100001001100110101101100
001010011101010111110001001101
010111101100011110111011110001
001100001110111000100100000111
110101100111001110100000100110
11011110011100001111101101111
111001001011110001100110000101
011100001000010001011110000010
110101110011101111001010100111
111000101110011001101101001001
011001010100101011000001001100
11010011100101111100001011101
011110111110001111011110101101
000001110110011001010101011100
100010110001100000111001100010
000000111011100100100101010111
000010000001100001000010110110
101111101111000111100101110101
100101010100001001110100010001
011110011010100101111011110101
100011000110110001011101100110
110100000100000011011000001101
100000011100100111101101011011
010110010001000101110111001010
```



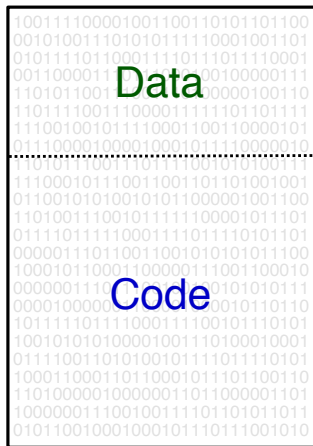
Output

```
0000001110110010100001001110111
110000101110111011111110101010
000110010101111100101110110100
001110110011010110000101011010
111101111100000100010111010111
111010001000010010111100111001
111001100101000111101000011100
10111110000011011011011110001
10010010111101111000101010100
111110011010111011010011011100
111011100011110101011111000100
010111011010100100011110100011
001111000001111110001011100111
101101100000100011100111110011
001101000010011000110011000011
101011110111101010000011010001
010111100101010010011100011011
0010101011100101000001010000110
100000101001110011010000011100
0011100110001111111111000001100
100100010100000110001011010000
010110010111101001000010100010
101011110001001001010010111000
011000100000010000000011100111
```

Computer by Creative Stall from the Noun Project

C'est quoi un calcul ?

Input



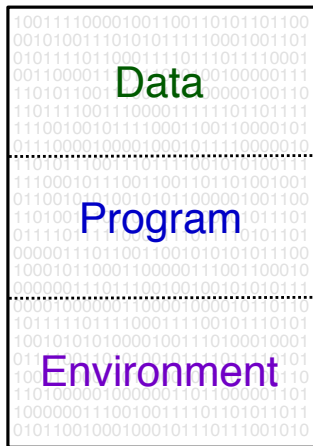
Output



Computer by Creative Stall from the Noun Project

C'est quoi un calcul ?

Input

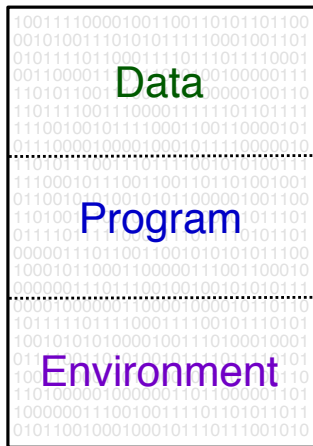


Output



Computer by Creative Stall from the Noun Project

Input



Data

my research

Program

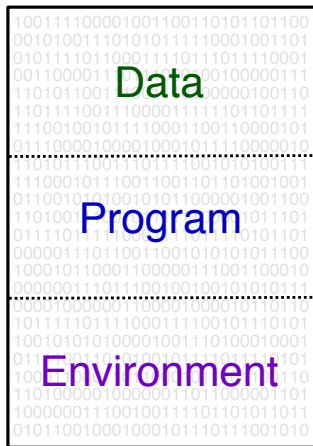
my colleagues' code

Environment

stuff I don't care about

Donner un sens aux bits

Input



Data

zeros and ones

Program

interpretation of the data

Environment

interpretation of the program

TURING AWARD LECTURE

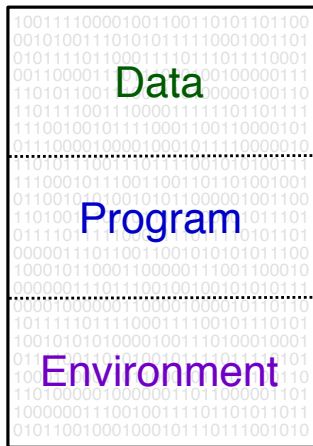
Reflections on Trusting Trust

To what extent should one trust a statement that a program is free of Trojan horses? Perhaps it is more important to trust the people who wrote the software.

KEN THOMPSON

Provenance d'un calcul

Input



Output

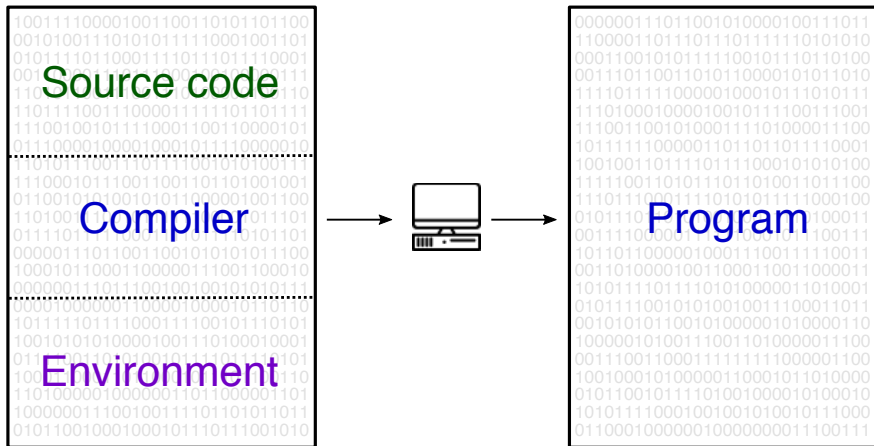


Computer by Creative Stall from the Noun Project

D'où vient le programme ?

Input

Output



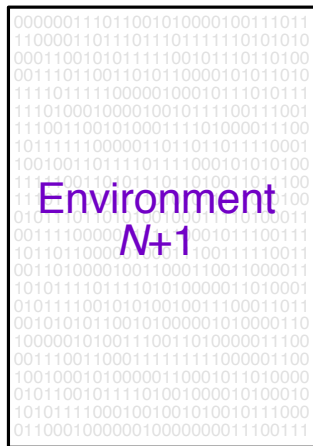
Computer by Creative Stall from the Noun Project

Et d'où vient l'environnement ?

Input



Output

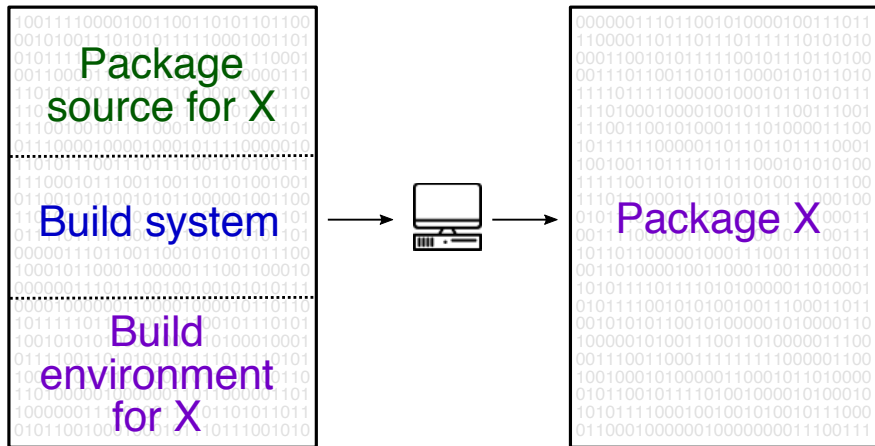


Computer by Creative Stall from the Noun Project

Bon, alors, d'où viennent les paquets ?

Input

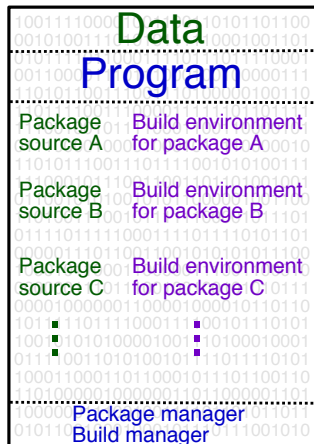
Output



Computer by Creative Stall from the Noun Project

En résumé...

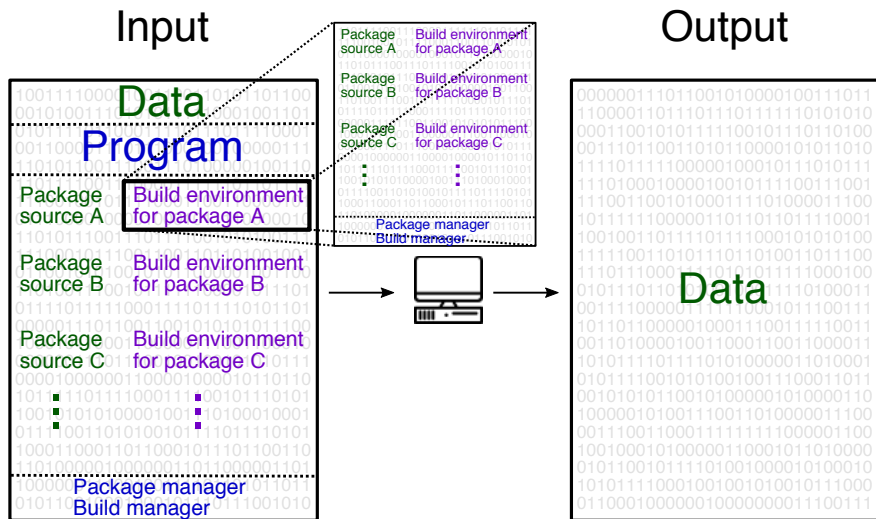
Input



Output

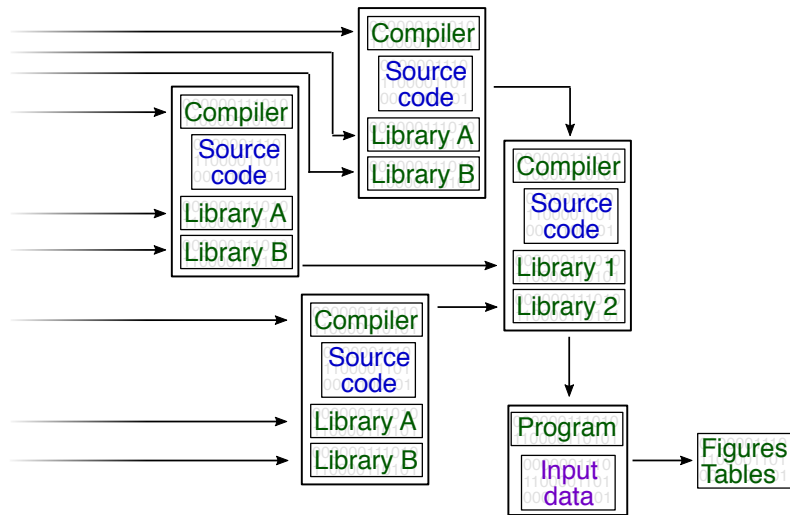


Computer by Creative Stall from the Noun Project



Computer by Creative Stal from the Noun Project

Un autre point de vue



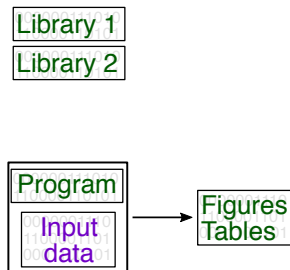


Source
code

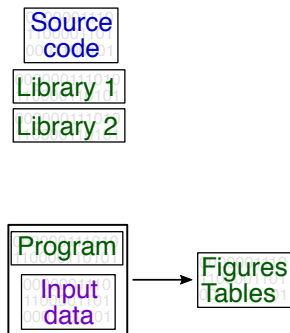
Input
data

Figures
Tables

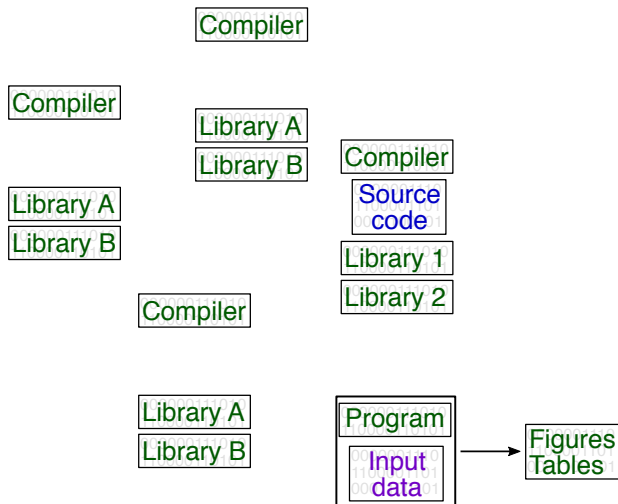
Papier avec conteneur Docker et données



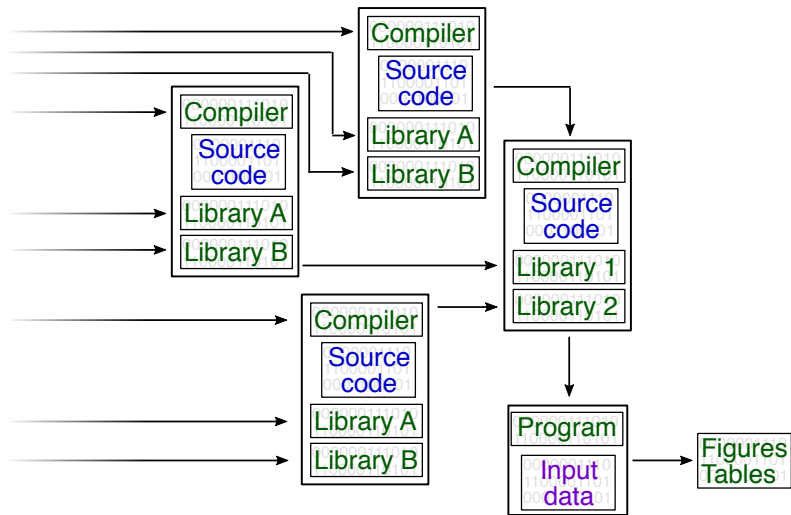
Papier avec code source, conteneur Docker, et données



Papier avec code source, paquets, et données



Papier avec code source, données, et paquets Guix/Nix



La reproductibilité, c'est possible !

- ① Point de départ : un environnement préservé, archivé, récupérable à l'identique à tout moment.
- ② Conserver une trace précise de chaque étape d'exécution :
 - Programme exécuté.
 - Données d'entrée.

À appliquer de façon recursive, jusqu'au bout !