Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

Christophe Pouzat, Arnaud Legrand, Konrad Hinsen

3 septembre 2018

Plan du cours

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

M4-S3 : L'enfer du calcul

M4-S4 : Conclusion

Où en sommes nous?

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

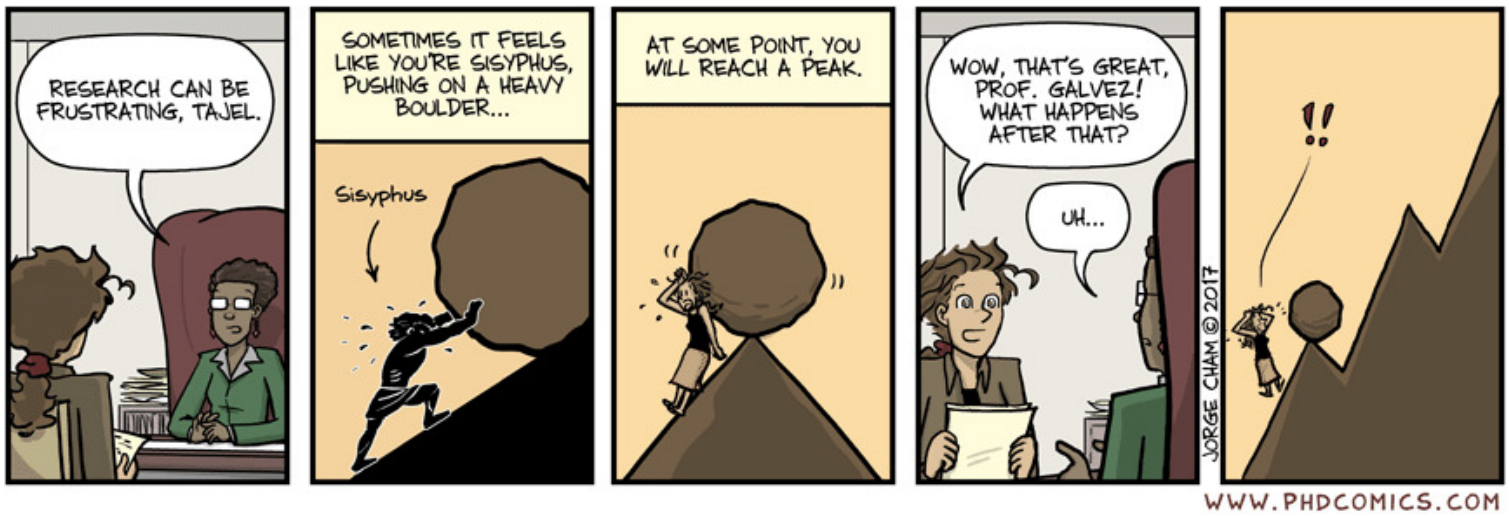
M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

M4-S3 : L'enfer du calcul

M4-S4 : Conclusion

L'enfer de la Recherche Reproductible



Où en sommes nous?

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

M4-S3 : L'enfer du calcul

M4-S4 : Conclusion

Deux « nouveaux » problèmes

Lorsque nous commençons à travailler sur de « vraies » données nous nous trouvons généralement confrontés à deux problèmes :

- les données sont de nature « diverse »
- les données occupent un grand espace mémoire

Les données « non homogènes »

- Les données grippales du module 3 se prêtent bien à une présentation en table (objet à 2 dimensions)
- Souvent la forme table doit être abandonnée car :
  - les colonnes n'ont pas la même longueur
  - les données peuvent être des suites chronologiques et des images, etc.

Les données sont « trop grosses »

- Format texte pas toujours approprié pour des nombres
- Choix d'un format binaire car :
  - Les nombres prennent moins de place mémoire
  - Nombres en format texte $\Rightarrow$ conversion en binaire pour calculs

Ce qu'il faut garder du format texte : les métadonnées

- Le format texte permet de stocker les données et tout le reste...
- $\Rightarrow$ ajouter des informations sur les données :
  - provenance
  - date d'enregistrement
  - source
  - etc.
- Ces informations sur les données sont ce qu'on appelle les métadonnées
- Elles sont vitales pour la mise en œuvre de la recherche reproductible

Ce qu'il faut garder du format texte : le boutisme

- Format texte « universel »
- Formats binaires dépendent de l'architecture ou de l'OS
- 1010, codé sur 4 bits peut être lu comme :
  - 1x1 + 0x2 + 1x4 + 0x8 = 5, c'est le petit-boutisme
  - 1x8 + 0x4 + 1x2 + 0x1 = 10, c'est le gros-boutisme
- Un stockage binaire pour la recherche reproductible doit spécifier le boutisme

Des formats binaires, pour données composites, permettant la sauvegarde de métadonnées

Rechercher des formats binaires pour :

- travailler avec de grosses données de natures différentes
- stocker des métadonnées avec les données
- avoir un boutisme fixé une fois pour toute

‘FITS‘ et ‘HDF5‘

- Le Flexible Image Transport System (‘FITS‘), créé en 1981 est toujours régulièrement mis à jour
- Le Hierarchical Data Format (‘HDF‘), développé au National Center for Supercomputing Applications, en est à sa cinquième version, ‘HDF5‘

‘FITS‘

- ‘FITS‘ introduit et mis à jour par les astrophysiciens
- Format suffisamment général pour utilisation dans différents contextes

Anatomie d'un fichier 'FITS'

- 1 ou plusieurs segments : Header/Data Units (HDUs)
- HDU constituée :
  - d'une en-tête (Header Unit) suivie, mais ce n'est pas obligatoire, par
  - des données (Data Unit)
- En-tête = paires mots clés / valeurs $\rightarrow$ métadonnées
- Données tableaux binaires (une à 999 dimensions) ou tables (texte ou binaire)

Manipulation des fichiers ‘FITS‘

- Les développeurs du format fournissent une bibliothèque ‘C‘ et des programmes associés (faciles à utiliser)
- Les utilisateurs de ‘Python‘ pourront utiliser ‘PyFITS‘
- Les utilisateurs de ‘R‘ pourront utiliser ‘FITSio‘

‘HDF5‘

- Organisation hiérarchique, ressemble à une arborisation de fichiers
- Élément structurant : le group (répertoire) contient un ou plusieurs datasets (jeux de données)
- Les groups peuvent être imbriqués
- Les métadonnées n’ont pas de structure imposée
- Les données n’ont pas de structure imposée — elles peuvent être des textes.

Manipulation des fichiers ‘HDF5‘

- Format plus souple $\Rightarrow$ bibliothèque ‘C‘ plus compliquée que son équivalent ‘FITS‘
- La bibliothèque distribuée avec ‘HDFView‘ : outil puissant d'exploration et de visualisation
- ‘Python‘ dispose d'une interface très complète avec ‘h5py‘
- Il y a trois paquets ‘R‘ : ‘h5‘, ‘hdf5r‘ et ‘rhdf5‘

L'archivage

Git(hub/lab/...) : pas bien adapté au stockage de données

Conclusions

- Vraies données $\Rightarrow$ problèmes de taille et de structure
- Vraies données complexes $\Rightarrow$ métadonnées
- ‘FITS‘ et ‘HDF5‘ = solutions pratiques
- En complexité et flexibilité : ‘FITS‘ $<$ ‘HDF5‘
- Plateformes d’archivage $\Rightarrow$ stockage pérenne accessible à tous

Où en sommes nous?

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

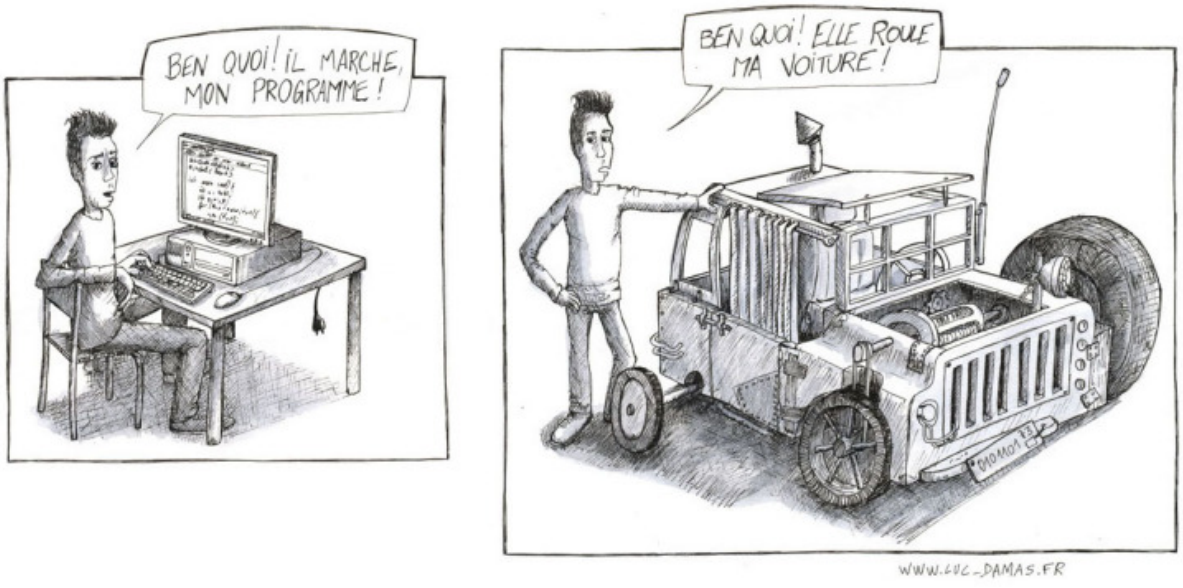
M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

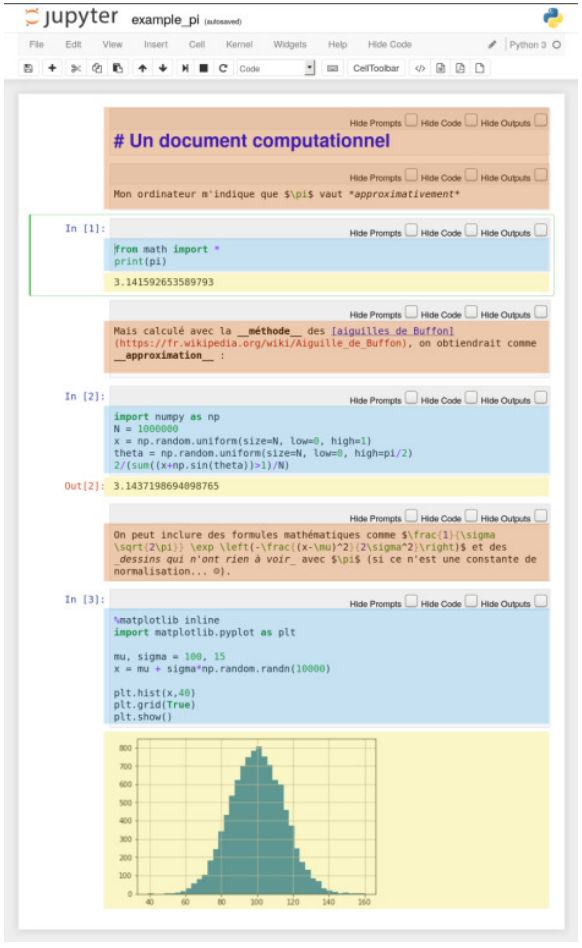
M4-S3 : L'enfer du calcul

M4-S4 : Conclusion

Passage à l'échelle

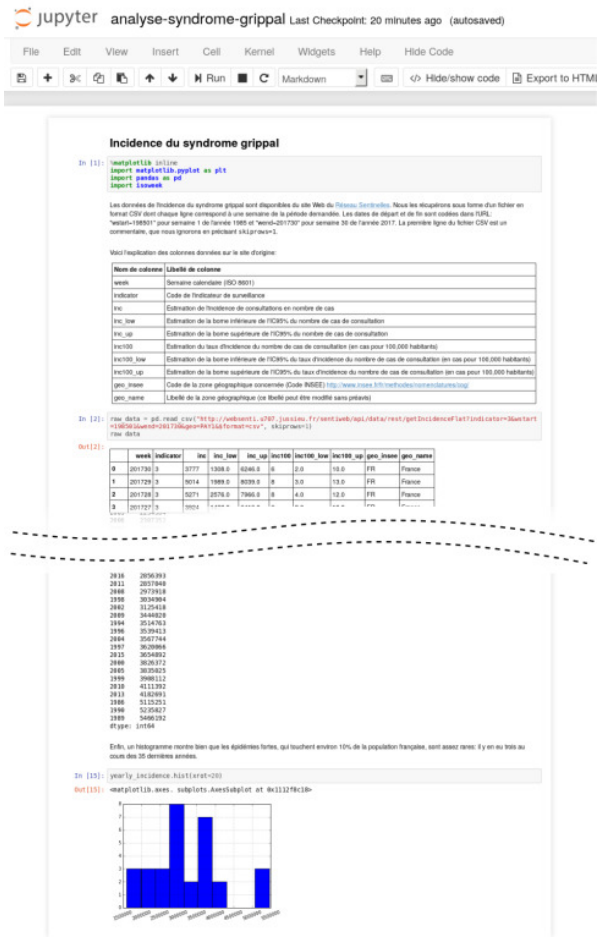


Des codes complexes. . .



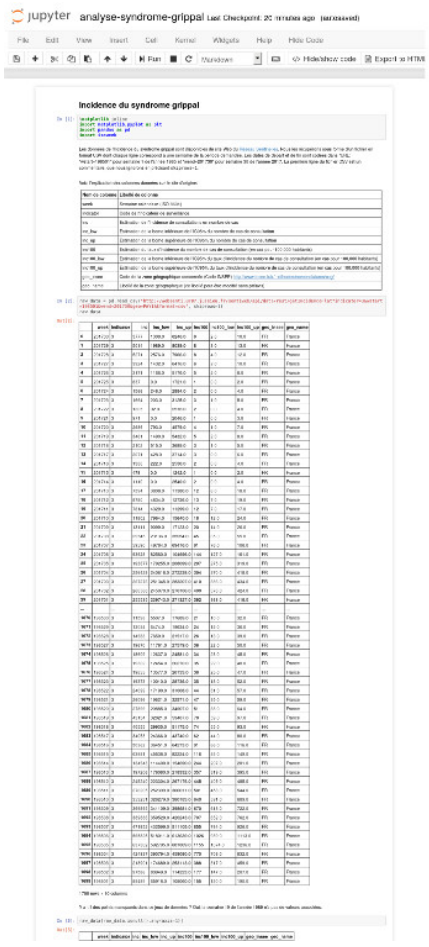
- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

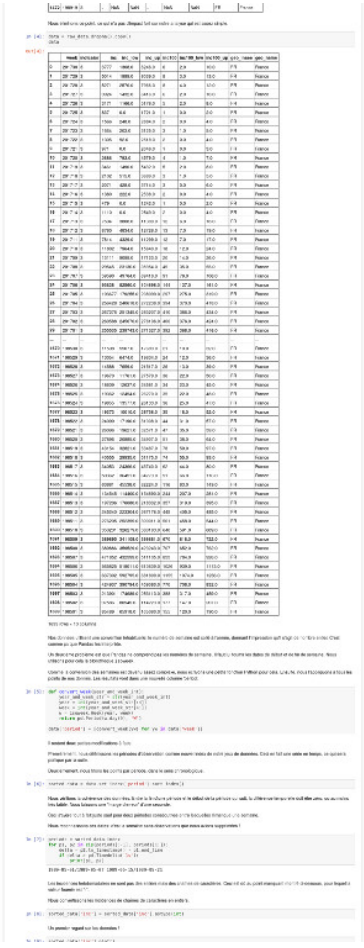
Des codes complexes. . .

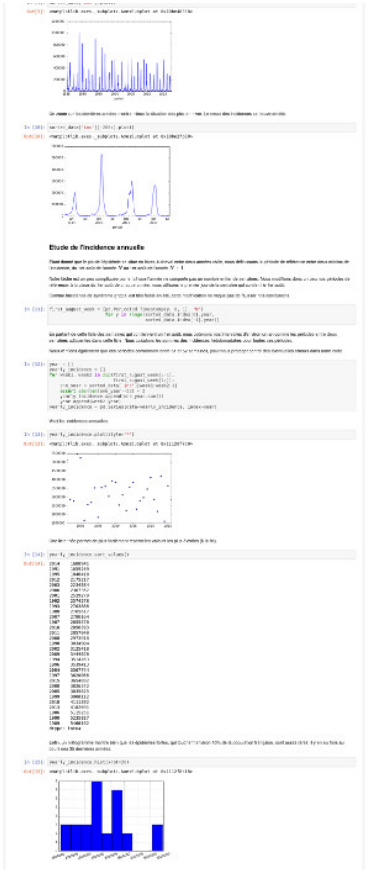


- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

Des codes complexes…





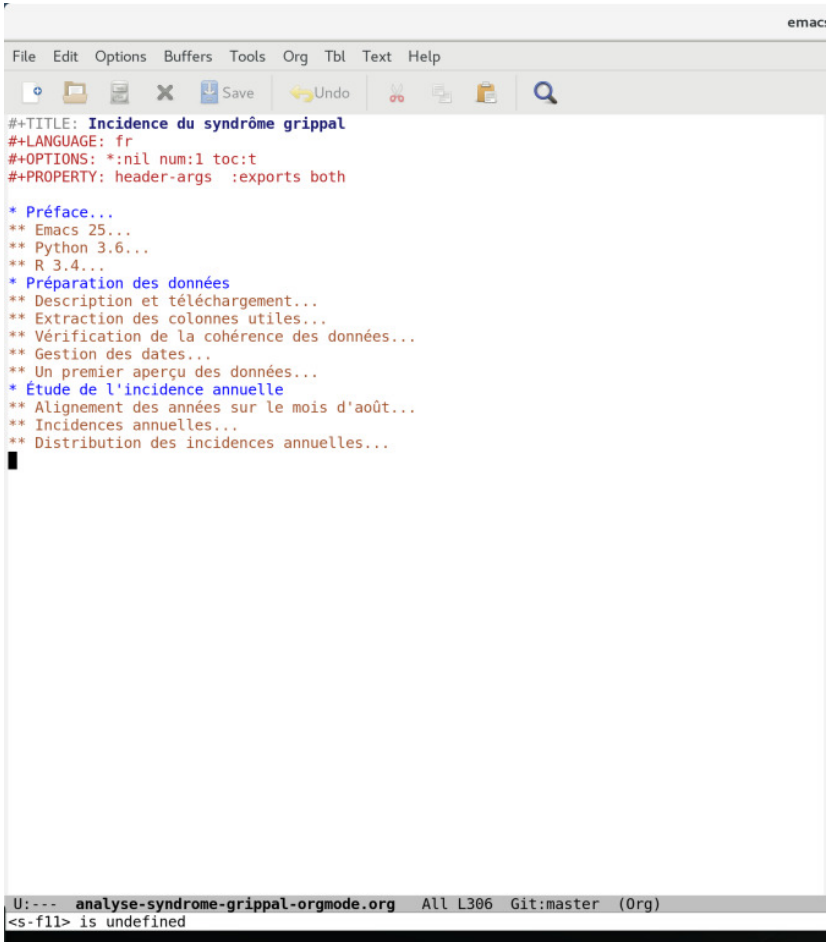


- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

Des codes complexes...

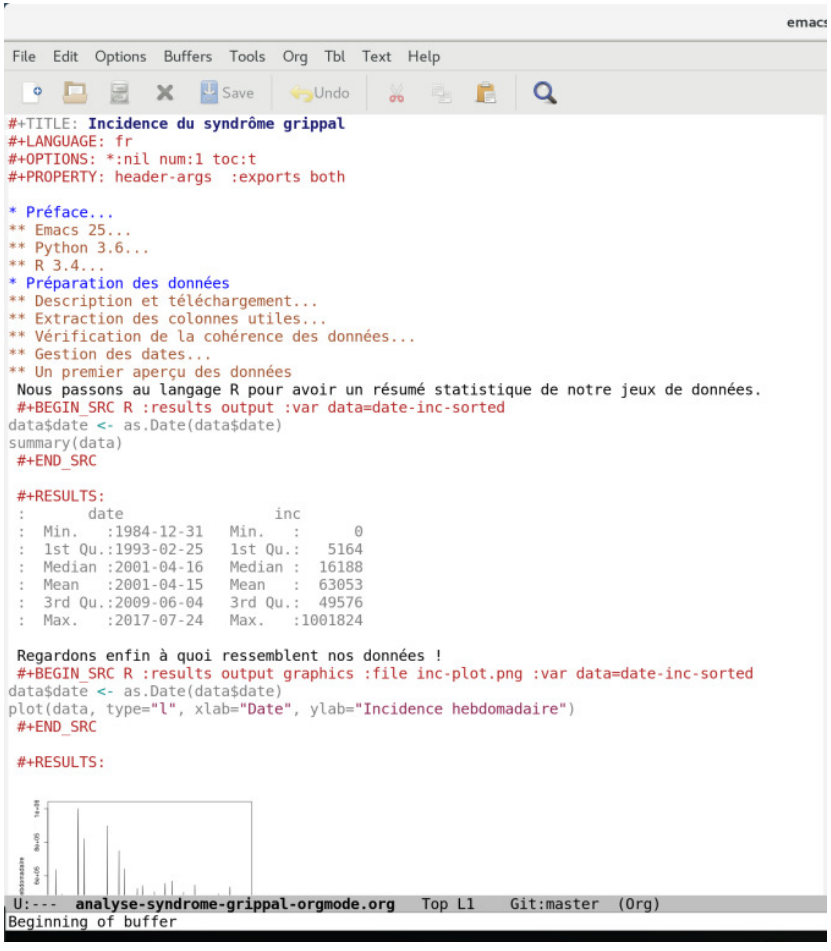
- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

Des codes complexes...



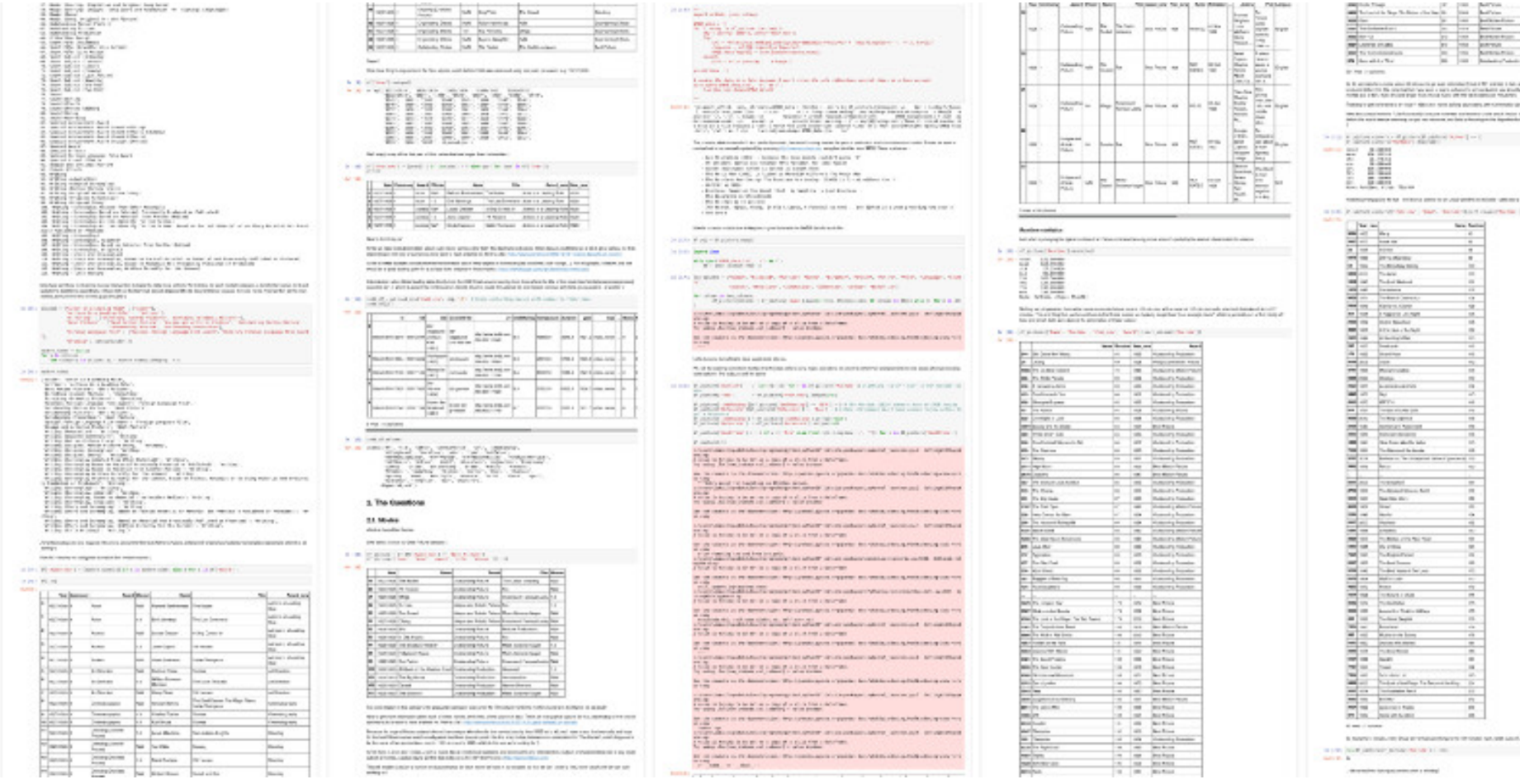
- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

Des codes complexes...



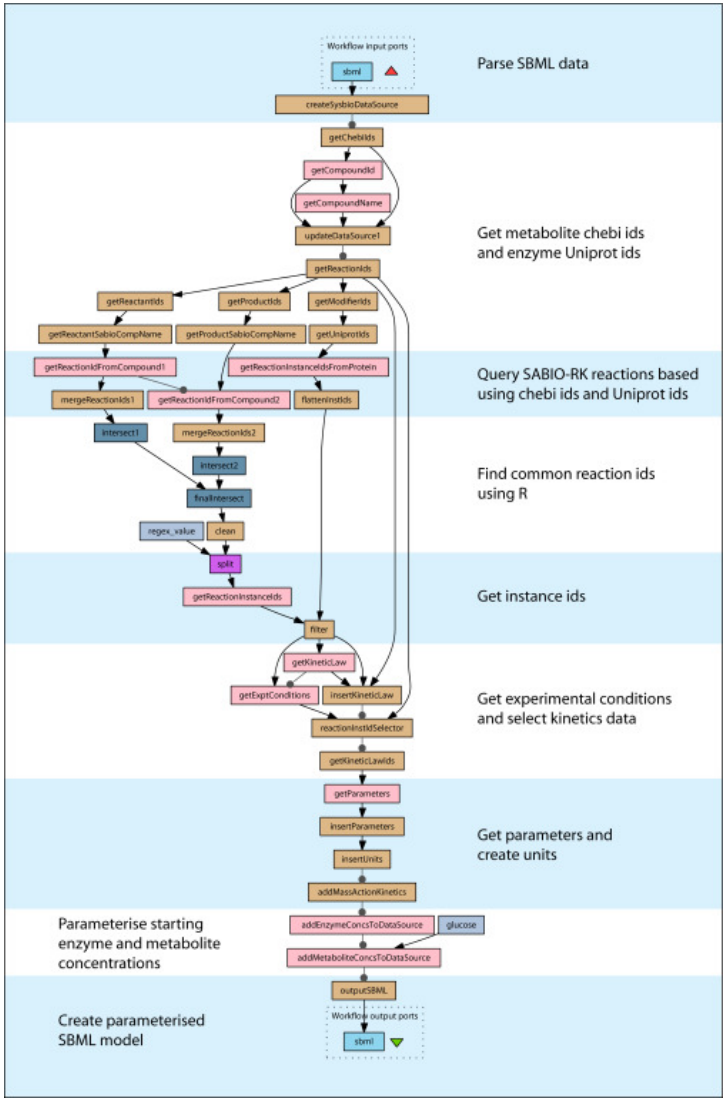
- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

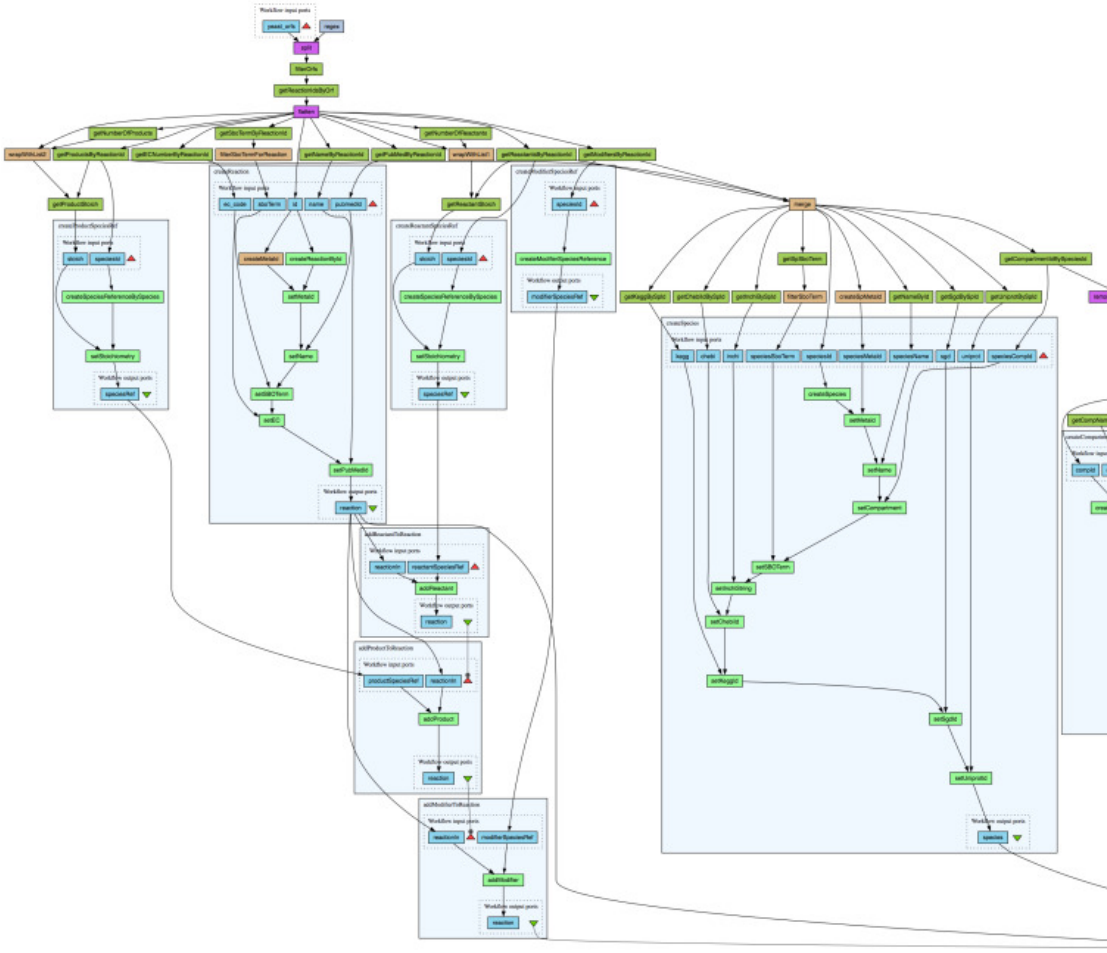
Des codes complexes...



- Un vrai plat de spaghettis
  - Pas de vision d'ensemble
  - Interaction entre plusieurs langages = danger

. . . et difficiles à orchestrer





. . . et difficiles à orchestrer

Le Workflow :

- Vue de haut niveau plus claire
- Compositions de codes et mouvements de données explicites
- Partage, réutilisation, et exécution plus sûre
- Le notebook en est une forme à la fois appauvrie et plus riche
- Pas de façon simple/mature de passer d'un notebook à un workflow

Exemples :

- Galaxy, Kepler, Taverna, Pegasus, Collective Knowledge, VisTrails
- Légers : dask, drake, swift, snakemake. . .
- Hybrides : SOS-notebook. . .

L'usine à gaz des calculs coûteux

Les calculs interminables et les gros volumes de données

- JupyterHub et les supercalculateurs : en développement
- Checkpoint et Cache
- Le workflow permet de passer à l'échelle

Des éco-systèmes complexes

Que se cache-t-il derrière ce simple

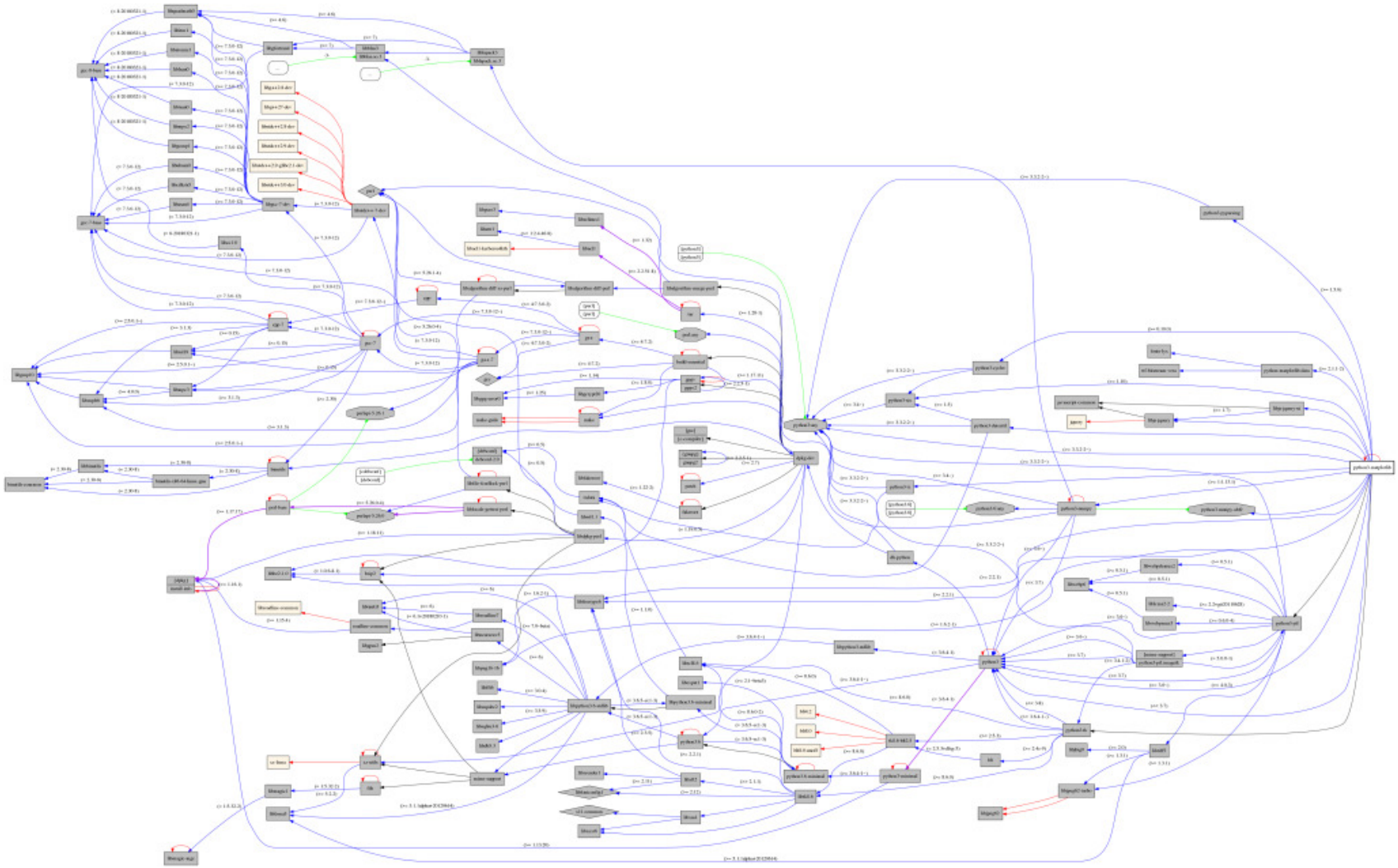
```
1  import matplotlib
```

```
Package: python3-matplotlib
Version: 2.1.1-2
Depends: python3-dateutil, python-matplotlib-data (>= 2.1.1-2),
python3-pyparsing (>= 1.5.6), python3-six (>= 1.10), python3-tz,
libjs-jquery, libjs-jquery-ui, python3-numpy (>= 1:1.13.1),
python3-numpy-abi9, python3 (<< 3.7), python3 (>= 3.6~),
python3-cycler (>= 0.10.0), python3:any (>= 3.3.2-2~), libc6 (>=
2.14), libfreetype6 (>= 2.2.1), libgcc1 (>= 1:3.0), libpng16-16 (>=
1.6.2-1), libstdc++6 (>= 5.2), zlib1g (>= 1:1.1.4)
```

Des éco-systèmes complexes

Que se cache-t-il derrière ce simple

```
1 import matplotlib
```



Des éco-systèmes complexes

Pas de standard :

- Linux (`apt`, `rpm`, `yum`), MacOS X (`brew`, `McPorts`, `Fink`), Windows (?)
- Ni pour l'installation ni pour récupérer les informations. . . ☹

```python
import sys
print(sys.version)
import matplotlib
print(matplotlib.__version__)
import pandas as pd
print(pd.__version__)
```

```
3.6.3 (default, Oct  3 2017, 21:16:13)
[GCC 7.2.0]
2.1.1
0.20.3
```

```r
library(ggplot2)
sessionInfo()
```

```
R version 3.4.3 (2017-11-30)
Platform: x86_64-pc-linux-gnu (64-bit)
Running under: Debian GNU/Linux buster/sid

Matrix products: default
BLAS: /usr/lib/x86_64-linux-gnu/blas/libblas.so.3.7.1
LAPACK: /usr/lib/x86_64-linux-gnu/lapack/liblapack.so.3.7.1

locale:
 [1] LC_CTYPE=fr_FR.UTF-8       LC_NUMERIC=C
 [3] LC_TIME=fr_FR.UTF-8        LC_COLLATE=fr_FR.UTF-8
 [5] LC_MONETARY=fr_FR.UTF-8    LC_MESSAGES=fr_FR.UTF-8

other attached packages:
[1] ggplot2_2.2.1

loaded via a namespace (and not attached):
 [1] colorspace_1.3-2 scales_0.5.0     compiler_3.4.3   laz
 [5] plyr_1.8.4       pillar_1.1.0     gtable_0.2.0     tib
 [9] Rcpp_0.12.15     grid_3.4.3       rlang_0.1.6      mun
```

Contrôler son environnement

Un environnement contrôlé :

- Travailler dans une machine virtuelle (lourd) ou un conteneur docker (léger)

Conserver le bazar

- Capture automatique de l'environnement
- CDE, ReproZip, CARE

Faire le ménage

- Partir d'un environnement vierge
- Installer uniquement le nécessaire (et l'expliciter)
- Docker, Singularity, Guix, Nix...

L'épreuve du temps

Compatibilité ascendante

- Python et tout son écosystème à évolution hyper rapide

```
1 python2 -c "print(10/3)"
2 python3 -c "print(10/3)"
```

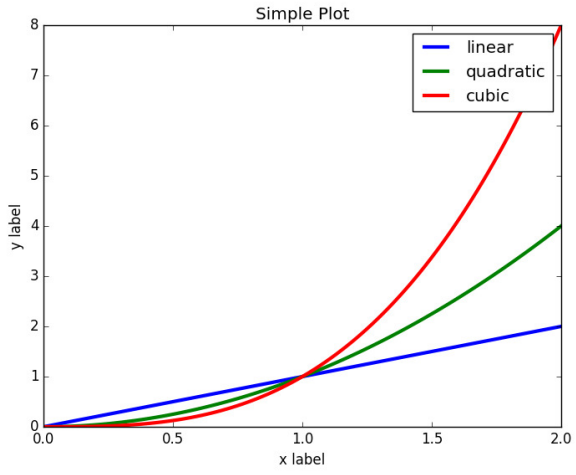
```
3
3.3333333333333335
```

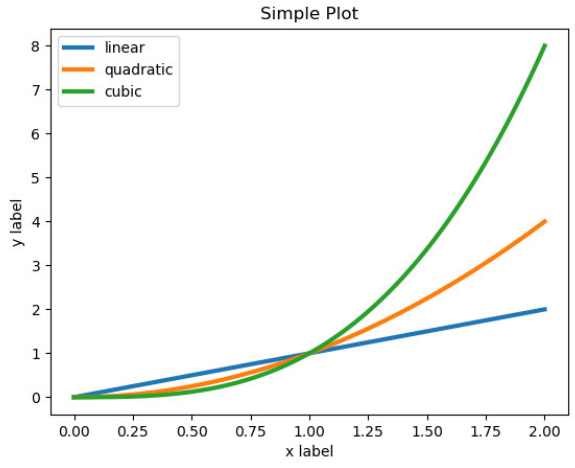
Compatibilité ascendante

- Python et tout son écosystème à évolution hyper rapide

```
1 python2 -c "print(10/3)"
2 python3 -c "print(10/3)"
```

```
3
3.3333333333333335
```



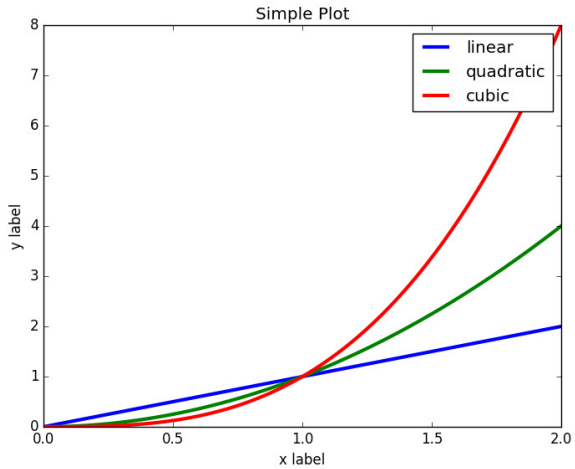


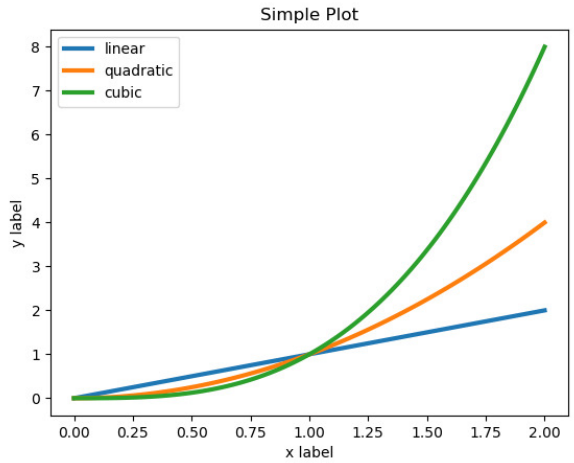
Compatibilité ascendante

- Python et tout son écosystème à évolution hyper rapide

```
1 python2 -c "print(10/3)"
2 python3 -c "print(10/3)"
```

```
3
3.3333333333333335
```





- Cortical Thickness Measurements (PLOS ONE, June 2012) : *FreeSurfer* : *differences were found between the Mac and HP workstations and between Mac OSX 10.5 and OSX 10.6.*
- Incompatibilité de formats entre orgmode 7.*, 8.*, 9.*, etc.

Les outils à développement rapide

Rapides, mais fragiles et peu pérennes :

- Correction ou introduction de bug
- Il devient nécessaire de vérifier régulièrement la reconstructibilité et la fonctionnalité de ces environnements (intégration continue et tests de non régression)

Popper : http://falsifiable.us/

Autre possibilité :

- Se restreindre à ce qui est maîtrisable (C par exemple)

L'archivage

Gestion du code source

- Github/Gitlab/... : stables, ouverts, ... pérennes ?
  - ~~Google Code~~, ~~Gitorious~~, ~~Code Spaces~~


Software Heritage
HAL archives-ouvertes.fr

Gestion des environnements

- Pérénité de l'accès à dockerhub, nix repository, code ocean... ?
- Une fois l'environnement gelé, quelle est la pérennité d'une VM, d'une image docker... ?

Conserver le plus d'informations possible en automatisant

- Logiciels, versions, procédure d'installation

Où en sommes nous?

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

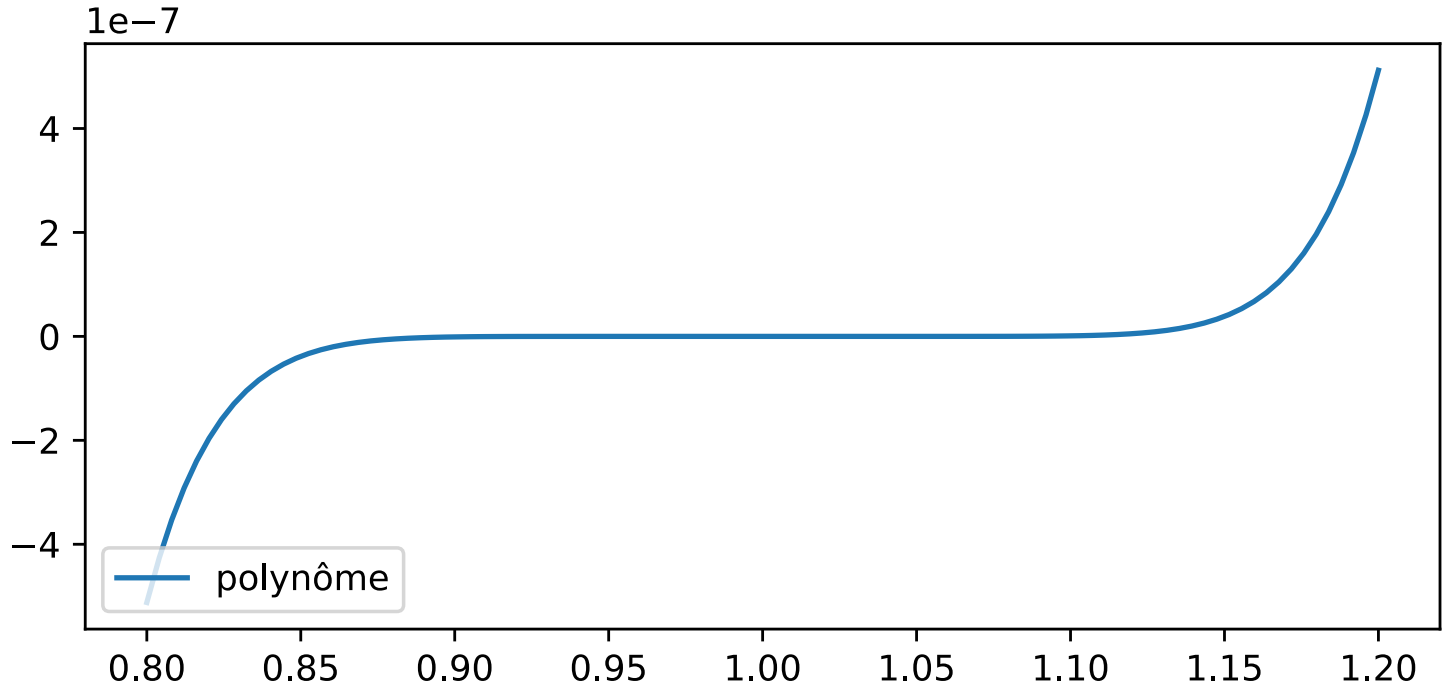
M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

M4-S3 : L'enfer du calcul

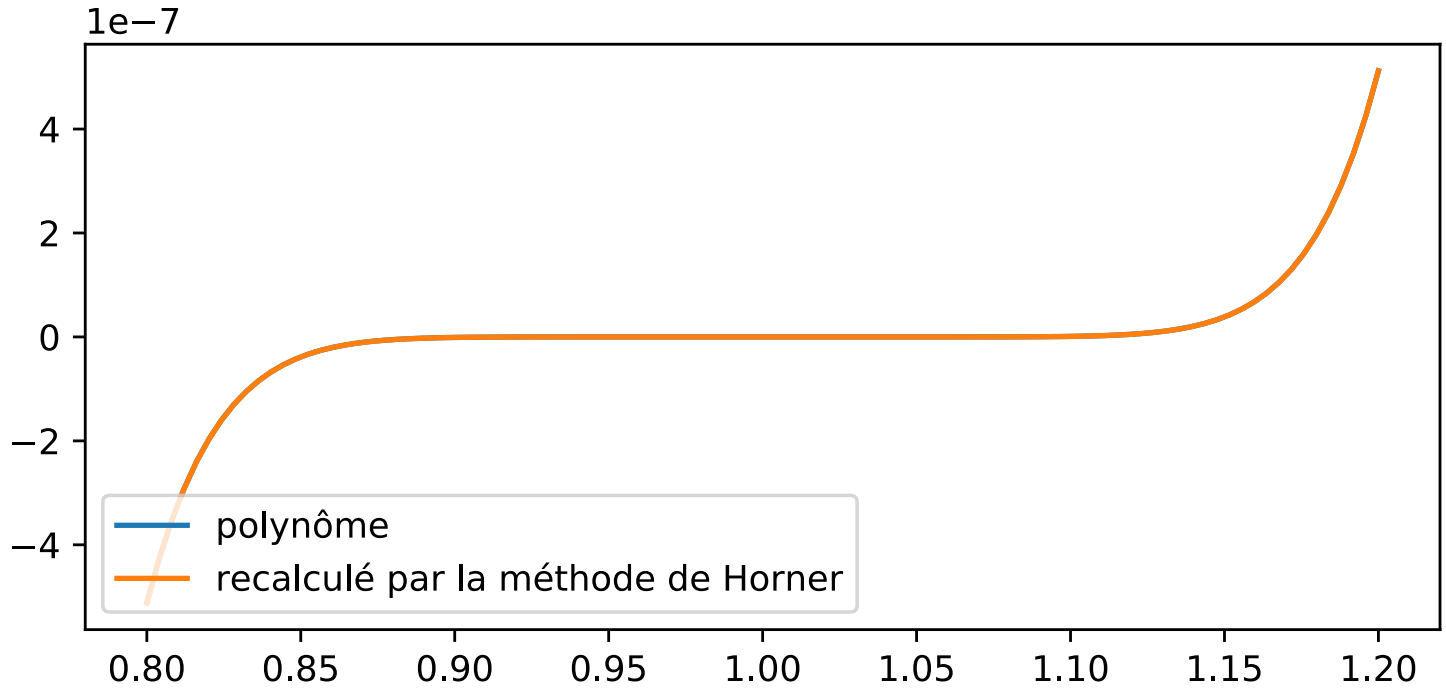
M4-S4 : Conclusion

L'arithmétique à virgule flottante



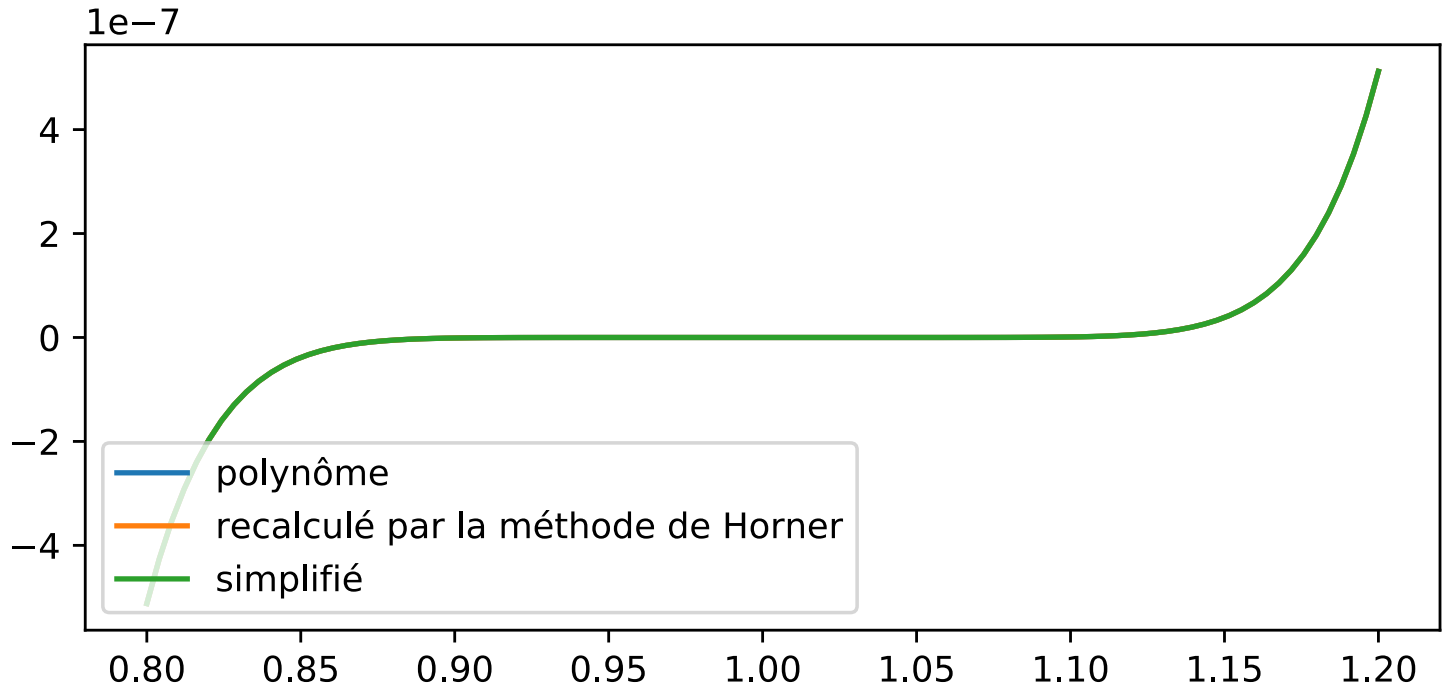

```
1  def polynome(x):
2      return x**9 - 9.*x**8 + 36.*x**7 - 84.*x**6 + 126.*x**5 \
3              - 126.*x**4 + 84.*x**3 - 36.*x**2 + 9.*x - 1.
```

L'arithmétique à virgule flottante



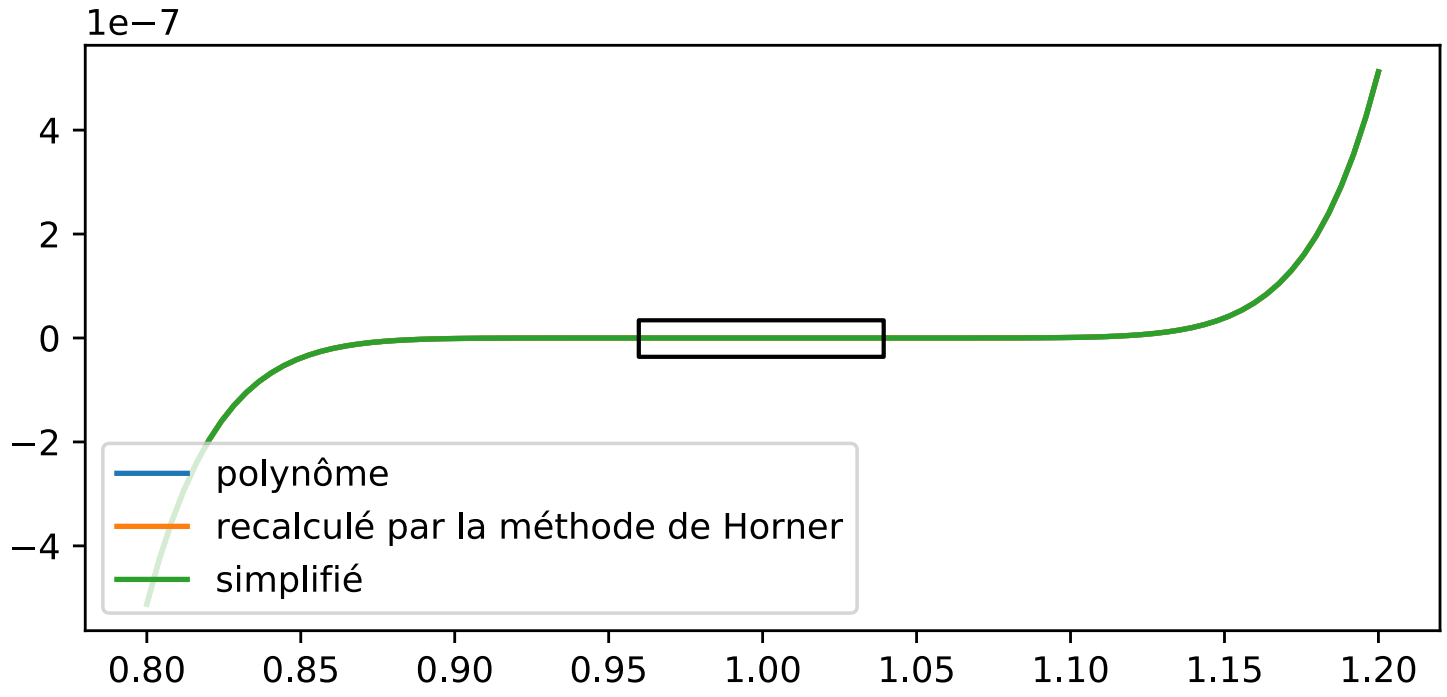

```
1  def horner(x):
2      return x*(x*(x*(x*(x*(x*(x*(x*(x - 9.) + 36.) - 84.) + 126.) \
3              - 126.) + 84.) - 36.) + 9.) - 1.
```

L'arithmétique à virgule flottante

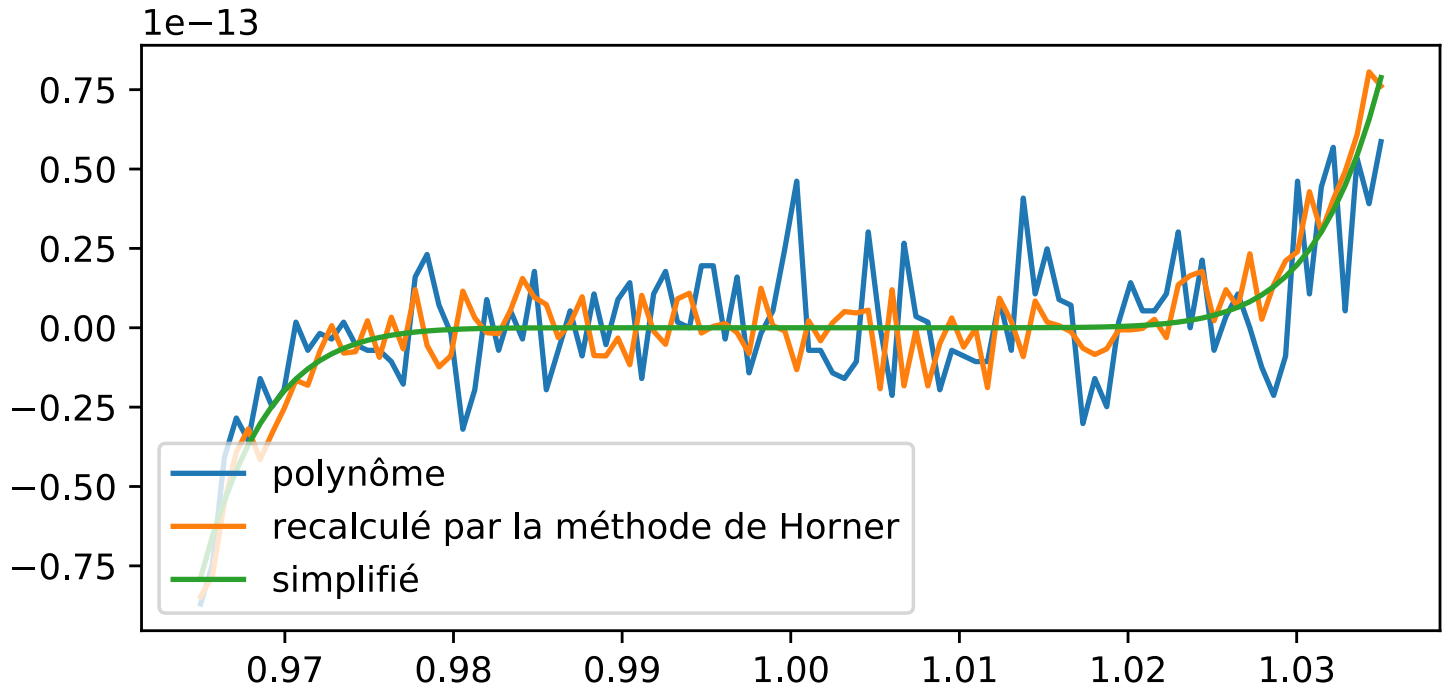



```
1  def simple(x):
2      return (x-1.)**9
3  # trop facile!
```

L'arithmétique à virgule flottante



L'arithmétique à virgule flottante



L'arrondi

- Il y a un arrondi implicite dans chaque opération.
- a+b est en réalité `arrondi`(a+b).
- Mais :

  `arrondi(arrondi(a+b)+c)` $\neq$ `arrondi(a+arrondi(b+c))`.
- L'ordre des opérations est donc important.

Pour un calcul reproductible, il faut préserver l'ordre des opérations ! ! !

Comment l'expliquer à mon compilateur ?

Pour accélérer le calcul, les compilateurs peuvent changer l'ordre des opérations, et donc le résultat.
Pour un calcul reproductible, il y a deux approches :

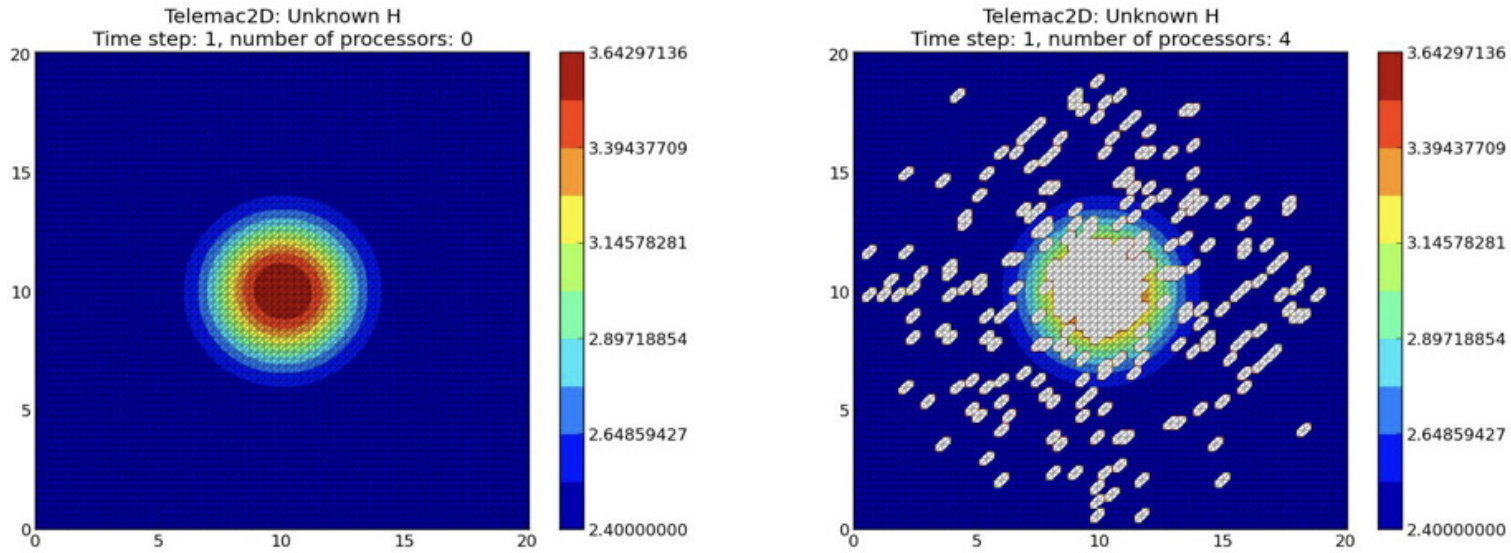
- Insister sur le respect de l'ordre des opérations,
  - si le langage le permet.
  - Exemple : Le module ‘ieee_arithmetic‘ en Fortran 2003
- Rendre la compilation reproductible :
  - Noter la version précise du compilateur
  - Noter toutes les options de compilation

Calcul parallèle

- Objectif : une exécution plus rapide $\rightarrow$ Minimiser la communication entre processeurs $\rightarrow$ Adapter la répartition des données... $\rightarrow$ et donc l'ordre des opérations
- Conséquence : le résultat dépend du nombre de processeurs !

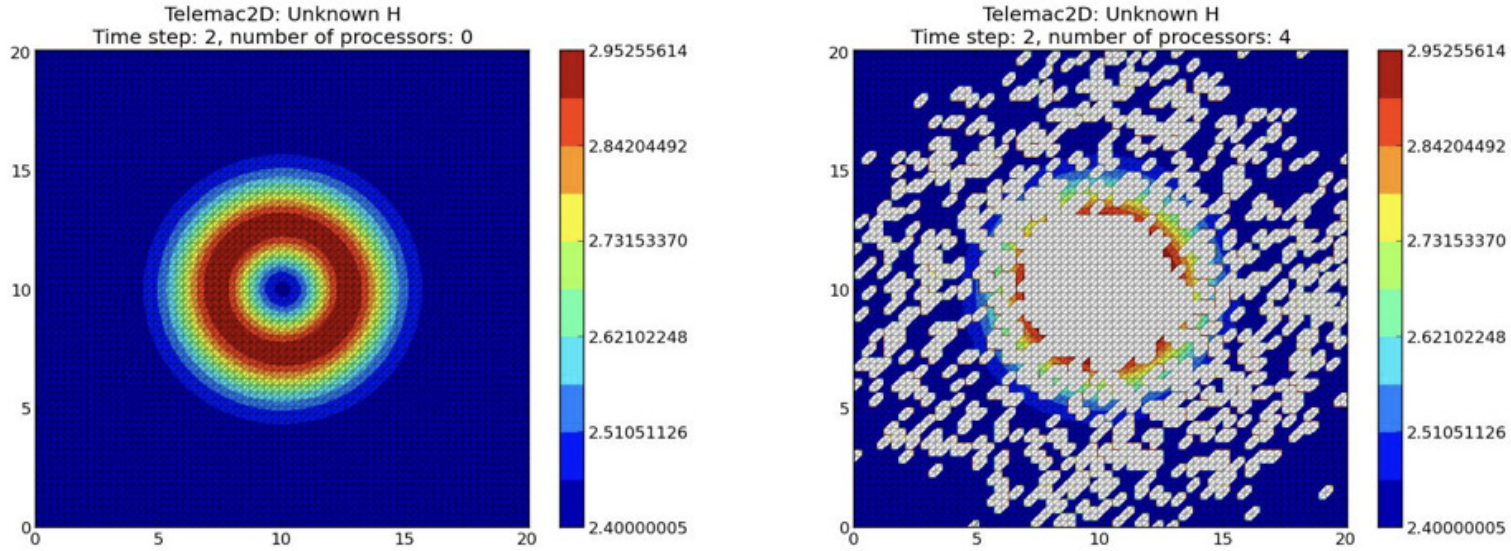
Minimiser cet impact du parallélisme reste un sujet de recherche.

Calcul parallèle : exemple



Source : Thèse de Rafife Nheili, Université de Perpignan, 2016

Calcul parallèle : exemple



Source : Thèse de Rafife Nheili, Université de Perpignan, 2016

Les plateformes de calcul

- Plateforme de calcul : matériel + infrastructure logicielle
- Calcul = plateforme + logiciel + données
- La plateforme définit l'interprétation du logiciel.
- Plateforme et logiciel définissent l'interprétation des données.
- Autres aspects définis par la plateforme :
  - la représentation des entiers (16/32/64 bits)
  - la gestion des erreurs

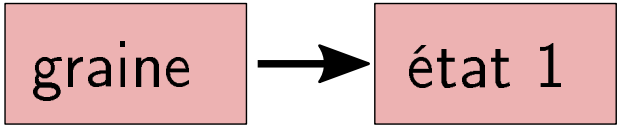
Les nombres aléatoires

- Utilisés pour simuler les processus stochastiques.
- En pratique : nombres pseudo- aléatoires.
- Suite de nombres en apparence aléatoires...
- ... mais générés par un algorithme déterministe.

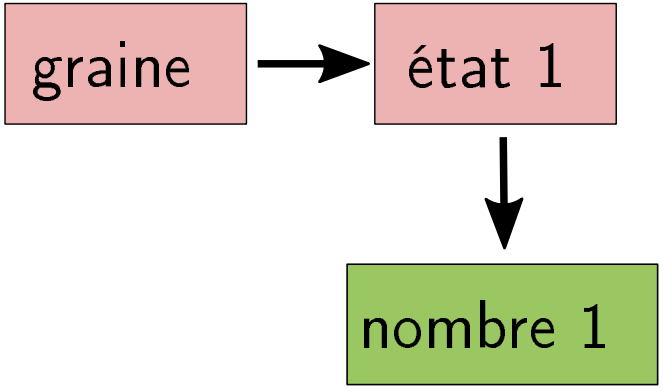
Générateur de nombres pseudo-aléatoires

graine

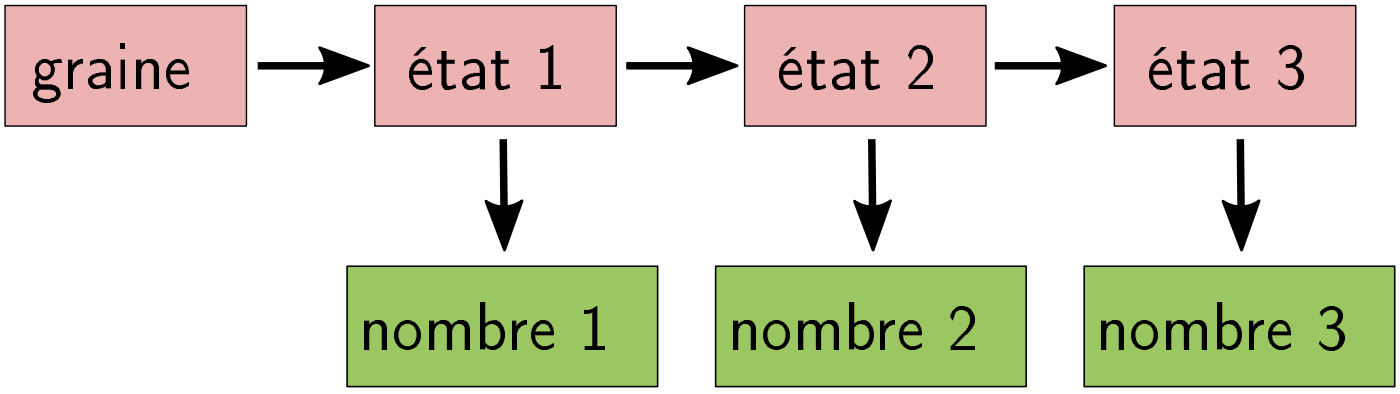
Générateur de nombres pseudo-aléatoires



Générateur de nombres pseudo-aléatoires



Générateur de nombres pseudo-aléatoires



La reproductibilité en théorie

- Principe : même graine + même algorithme $\rightarrow$ même suite
- La graine est souvent choisie comme fonction de l'heure
- Il faut la définir dans le code d'application

La reproductibilité en pratique

- Même graine + même algorithme $\rightarrow$ même suite : pas évident en arithmétique à virgule flottante !
- Une astuce simple pour permettre la vérification : tester quelques valeurs du début de la suite

Exemple : le langage Python

```
1  import random
2
3  random.seed(123)
4  for i in range(5):
5      print(random.random())
```

```
0.0523635988509
0.0871866775226
0.40724176367
0.107700234938
0.901198877952
```

Exemple : le langage Python

```
1  import random
2
3  random.seed(123)
4  assert random.random() == 0.0523635988509443 26
5  assert random.random() == 0.08718667752263232
6  assert random.random() == 0.4072417636703983
```

Les points clés à retenir

- Les résultats d'un calcul dépendent
  - du logiciel
  - des données d'entrée
  - de la plateforme de calcul : matériel, compilateurs...
- L'influence de la plateforme est importante pour l'arithmétique à virgule flottante.
- Notez les paramètres dont peuvent dépendre vos résultats :
  - version du compilateur, options de compilation
  - matériel (type de processeur, GPU...)
  - nombre de processeurs
- En utilisant un générateur de nombres aléatoires, définissez la graine et vérifiez les premiers éléments de la suite.

Où en sommes nous?

M4-S0 : Vers une étude reproductible : la réalité du terrain

M4-S1 : L'enfer des données

M4-S2 : L'enfer du logiciel

M4-S3 : L'enfer du calcul

M4-S4 : Conclusion

Ce qu'il faut retenir de ce MOOC

Un véritable enjeu

- Méthodologie scientifique
- Inspectabilité et réutilisation

Des outils existent

- Documents computationnels et Workflows, Suivi de version et Archives, Environnements logiciels, Intégration continue...
- Ces outils évoluent en permanence
  - Choisissez ceux qui sont les plus adaptés à votre contexte
  - Cherchez un compromis entre modernisme et pérénité

Mettez en pratique, ne vous découragez pas !

- Prenez des notes rigoureusement
- Rendez l'information exploitable et accessible
- Améliorez petit à petit