

La reproductibilité du calcul: Pourquoi? Comment?

Konrad Hinsen

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

SMAI 2025
5 juin 2025

Alice et Bob se rencontrent lors d'un colloque



MOOC “Reproducible Research II: Practices and tools for managing computations and data”

Le défi

J'ai calculé la distance entre le ligand et le site actif de notre protéine préférée à l'équilibre. **C'est 0,9 nm.**



J'ai calculé la même distance, mais **je trouve 1,1 nm.**

Euhhh... Alors... je regarde ton code, et tu regardes le mien. On se revoit demain?



D'accord.

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.
methodological choice

Ashley G. Smart

A.G. Smart, Physics Today, 2018

Je n'ai pas réussi à compiler ton code. Regarde ce message d'erreur !



Euhhh... chez moi ça marche. Tu es sous Debian 12 ? Moi, je suis encore sous Debian 9.



Mais j'ai réussi à faire tourner ton code. Sauf que **chez moi ça donne 0,8 nm.**

J'utilise libode en version 3.4. La doc dit qu'il faut compiler avec gcc 10 ou plus. Tu dois avoir un gcc plus ancien.



Euhhh... Alors... J'installe une machine virtuelle avec Debian 12, et toi avec Debian 9. On se revoit dans une semaine ?

D'accord.



Une semaine plus tard

Sous Debian 9, j'ai réussi à faire tourner ton code. **Ça donne en effet 1,1 nm.** Mais je ne comprends pas pourquoi! **Ton code est illisible.**



Sous Debian 12, **ton code donne 0.85 nm chez moi.** C'est mieux qu'avant, mais ce n'est pas 0,9 nm comme chez toi. Ni 1,1 nm comme avec mon calcul à moi. Je ne comprends pas pourquoi!

Une semaine plus tard

Sous Debian 9, j'ai réussi à faire tourner ton code. **Ça donne en effet 1,1 nm.** Mais je ne comprends pas pourquoi! **Ton code est illisible.**



Sous Debian 12, **ton code donne 0.85 nm chez moi.** C'est mieux qu'avant, mais ce n'est pas 0,9 nm comme chez toi. Ni 1,1 nm comme avec mon calcul à moi. Je ne comprends pas pourquoi!

Comment avancer?

La trinité de la reproductibilité

Reproductibilité **expérimentale**

- Refaire une expérience d'après la description publiée
- Obtenir des résultats suffisamment proches
- Objectif : contrôle qualité

Reproductibilité **statistique**

Reproductibilité **computationnelle**

La trinité de la reproductibilité

Reproductibilité **expérimentale**

Reproductibilité **statistique**

- Refaire une étude avec un autre échantillon ou une autre technique
- Inférer des conclusions suffisamment proches
- Objectif : explorer la signification statistique

Reproductibilité **computationnelle**

La trinité de la reproductibilité

Reproductibilité **expérimentale**

Reproductibilité **statistique**

Reproductibilité **computationnelle**

- Refaire un calcul à l'identique
- Obtenir des résultats identiques
- Objectif : valider la documentation complète du calcul

Reproductibilité :

- refaire un calcul à l'identique
- obtenir un résultat identique (au bit près)

Reproductibilité :

- refaire un calcul à l'identique
- obtenir un résultat identique (au bit près)

Répliquabilité :

- faire un calcul supposé équivalent
- obtenir un résultat équivalent (assez proche)

Reproductibilité :

- refaire un calcul à l'identique
- obtenir un résultat identique (au bit près)

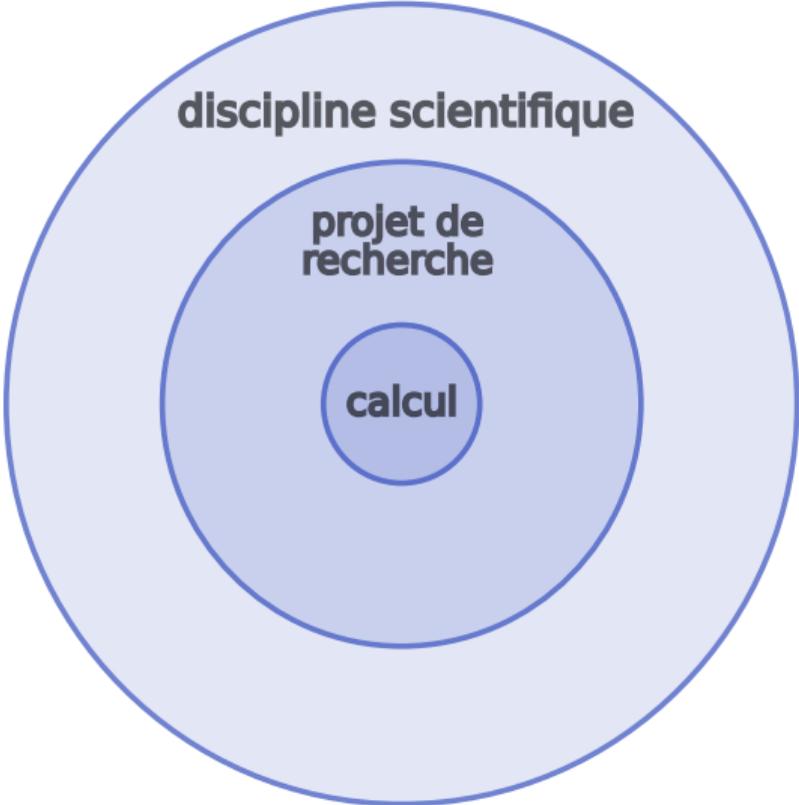
Répliquabilité :

- faire un calcul supposé équivalent
- obtenir un résultat équivalent (assez proche)

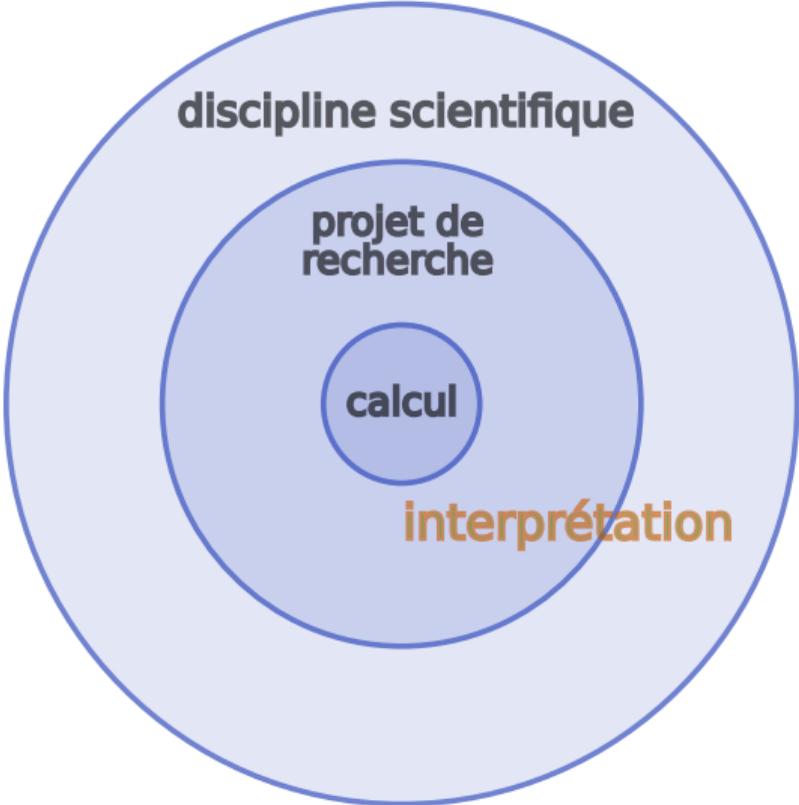
Chez Alice et Bob :

- Alice *peut reproduire* le résultat de Bob : $1,1nm$
- Bob *ne peut pas reproduire* le résultat d'Alice : $0,85nm \neq 0,9nm$
- Ni Alice ni Bob *ne peut répliquer* le résultat de l'autre : $0,9nm \neq 1,1nm$

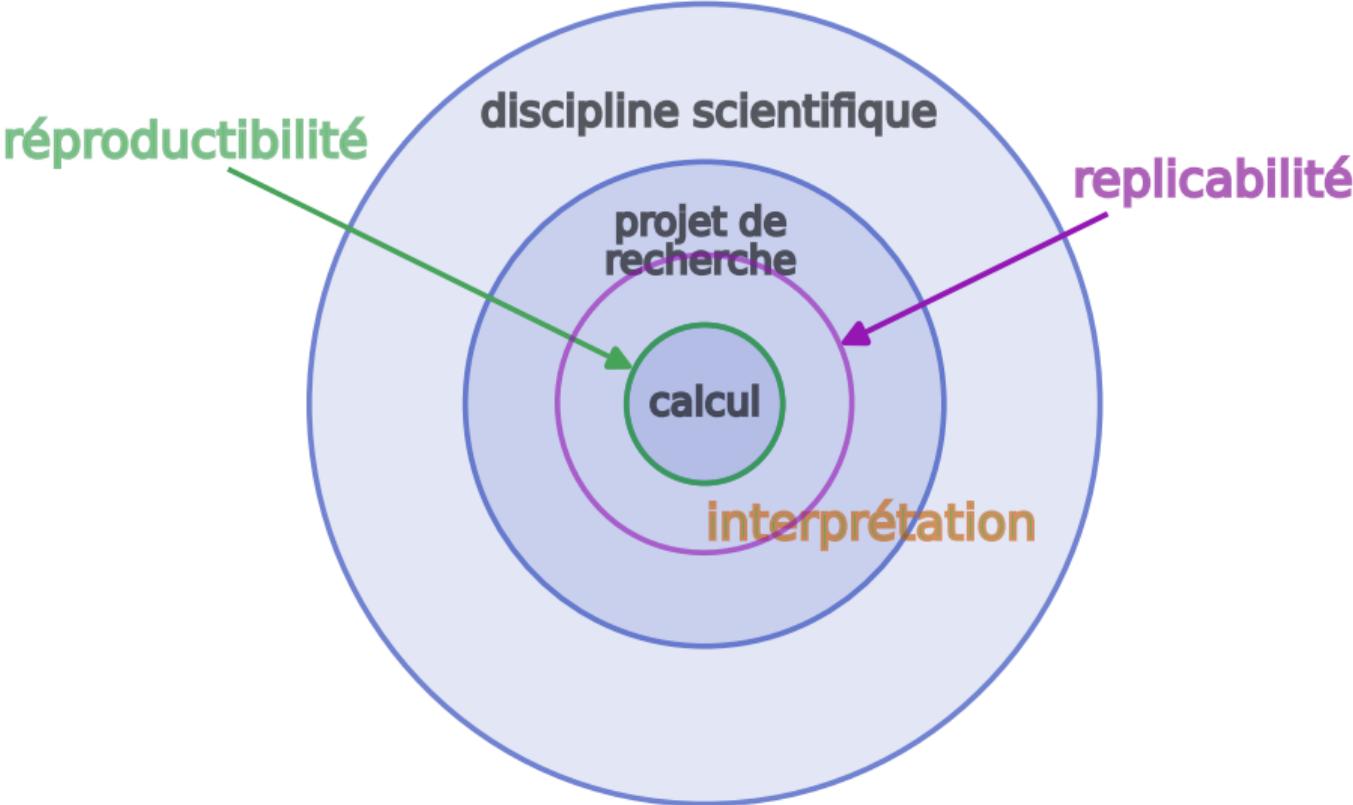
Le contexte scientifique du calcul



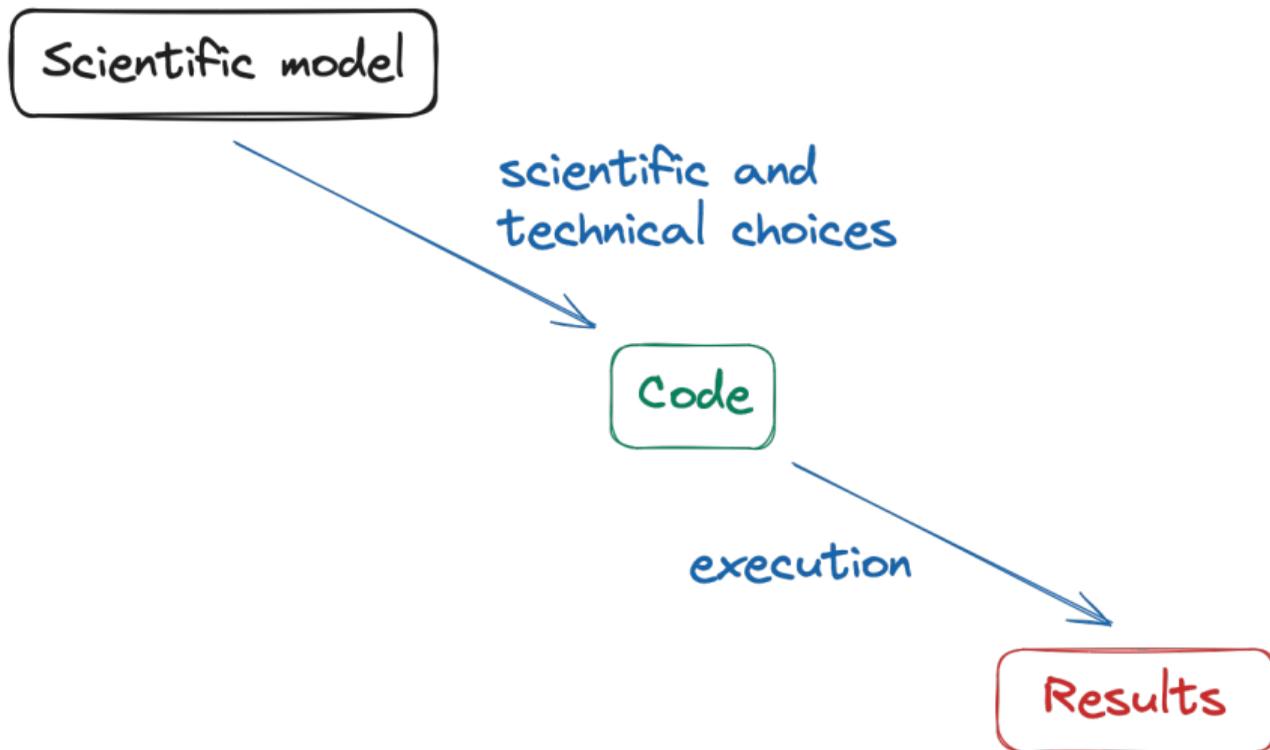
Le contexte scientifique du calcul



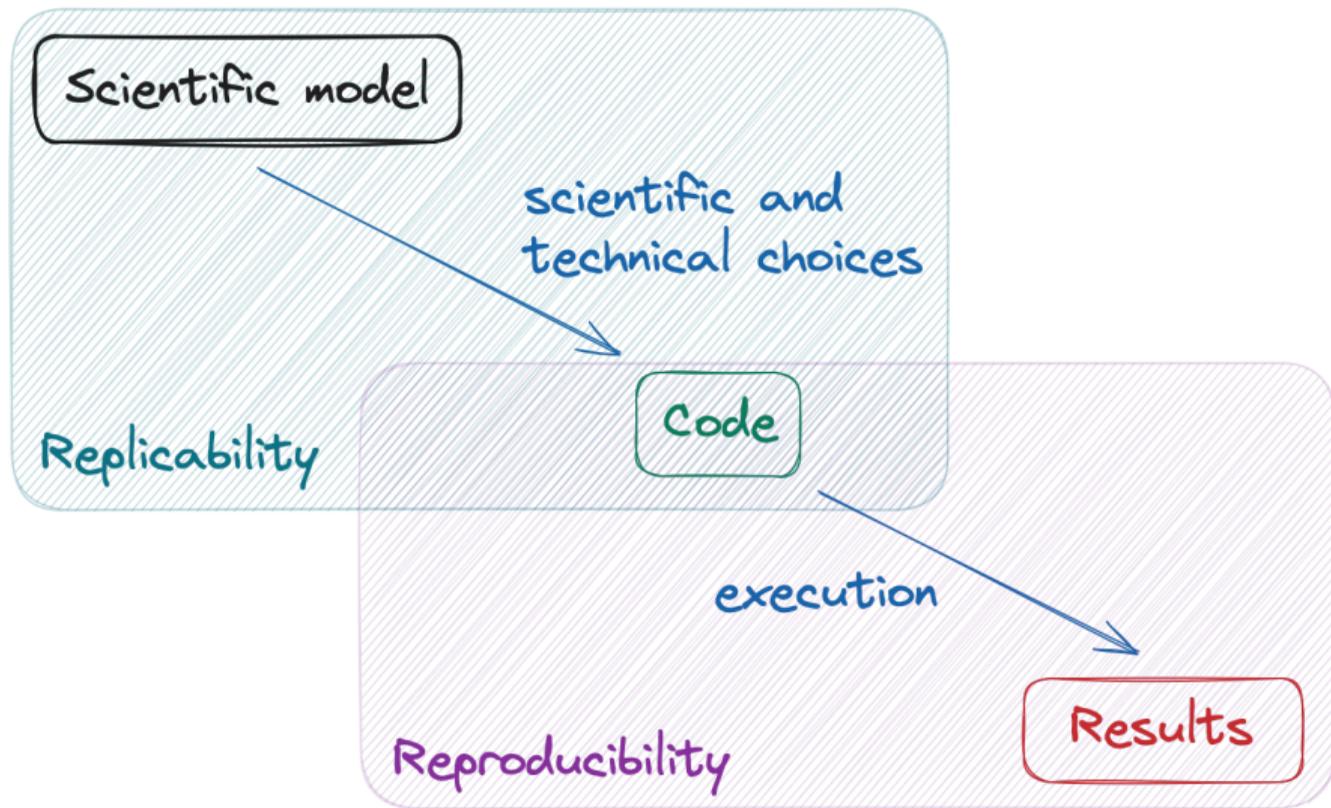
Le contexte scientifique du calcul



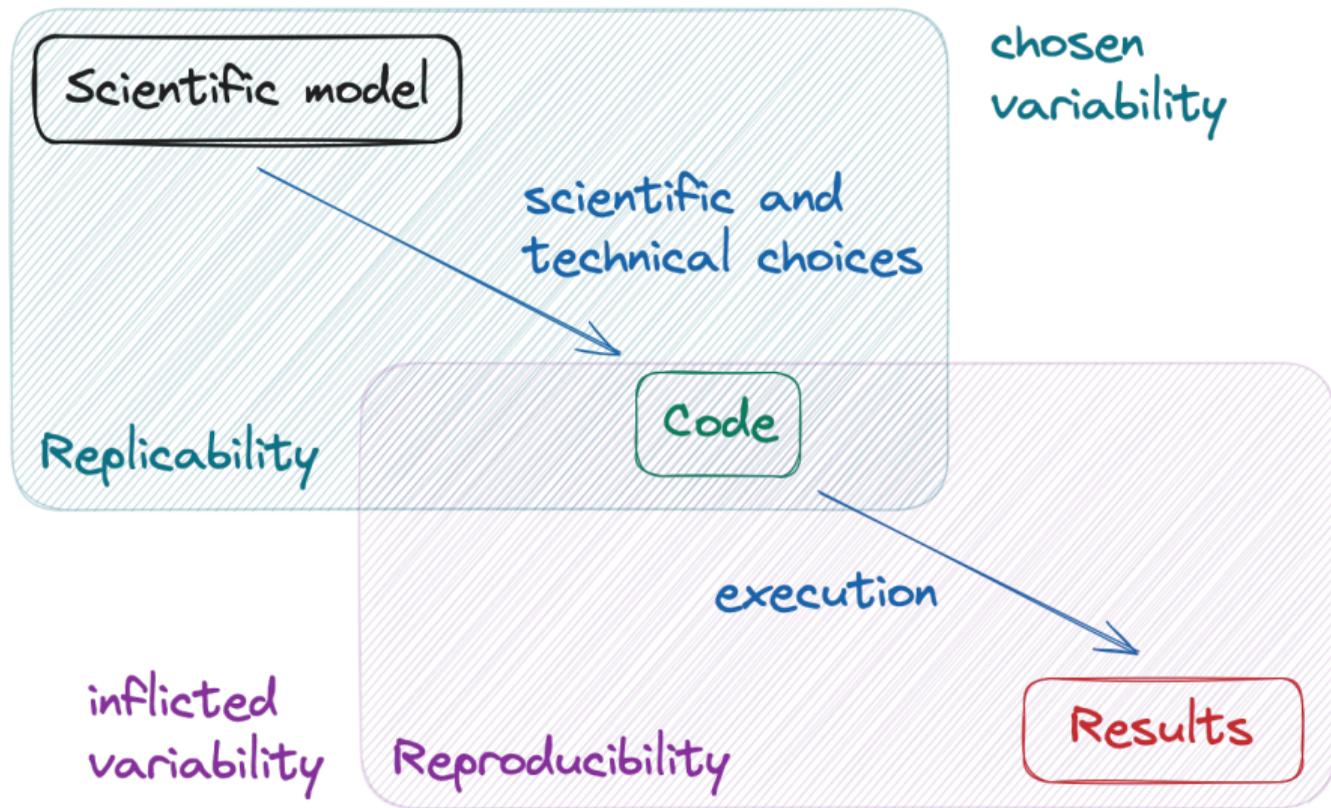
Modèle → code → résultats



Modèle → code → résultats



Modèle → code → résultats



Input

```
100111100001001100110101101100
001010011101010111110001001101
010111101100011110111011110001
001100001110111000100100000111
110101100111001110100000100110
110111100111000011111101101111
111001001011110001100110000101
011100001000010001011110000010
110101110011101111001010100111
111000101110011001101101001001
011001010100101011000001001100
11010011100101111100001011101
01111011111000111011110101101
000001110110011001010101011100
100010110001100000111001100010
000000111011100100100101010111
000010000001100001000010110110
101111101111000111100101110101
100101010100001001110100010001
011110011010100101111011110101
100011000110110001011101100110
110100000100000011011000001101
100000011100100111101101011011
010110010001000101110111001010
```



Output

```
000000111011001010000100111011
110000110111011101111110101010
000110010101111100101110110100
001110110011010110000101011010
111101111100000100010111010111
111010001000010010111100111001
111001100101000111101000011100
101111110000011011011011110001
100100110111101111000101010100
111110011010111011010011011100
111011100011110101011111000100
010111011010100100011110100011
00111100000111110001011100111
101101100000100011100111110011
001101000010011000110011000011
101011110111101010000011010001
010111100101010010011100011011
001010101100101000001010000110
100000101001110011010000011100
0011100110001111111111000001100
100100010100000110001011010000
010110010111101001000010100010
101011110001001001010010111000
01100010000001000000011100111
```

Computer by Creative Stall | from the Noun Project

Équivalent ou pas ?

01101000010000011000110111001000 01101000010000011010100111101000

Équivalent ou pas ?

01101000010000011000110111001000
1749126600

01101000010000011010100111101000
1749133800

Équivalent ou pas ?

01101000010000011000110111001000
1749126600
3.6561285e24

01101000010000011010100111101000
1749133800
3.6582038e24

Équivalent ou pas ?

01101000010000011000110111001000	01101000010000011010100111101000
1749126600	1749133800
3.6561285e24	3.6582038e24
2025-06-05T14 :30 :00.000000+02 :00	2025-06-05T16 :30 :00.000000+02 :00

Équivalent ou pas ?

01101000010000011000110111001000	01101000010000011010100111101000
1749126600	1749133800
3.6561285e24	3.6582038e24
2025-06-05T14 :30 :00.000000+02 :00	2025-06-05T16 :30 :00.000000+02 :00

Identité

Équivalence

test formel

jugement d'expert

automatisable

manuel

Comment s'y prendre ?

Reproductibilité

Préserver l'ensemble du système formel du calcul

Comment s'y prendre ?

Reproductibilité

Préserver l'ensemble du système formel du calcul

Répliquabilité

Documenter toutes les étapes pour un lecteur humain

Comment s'y prendre ?

Reproductibilité

Préserver l'ensemble du système formel du calcul

Répliquabilité

Documenter toutes les étapes pour un lecteur humain

Reproductibilité **et** répliquabilité

- Préserver et documenter tous les éléments de toutes les étapes
- Références croisées entre le code et la documentation

La trinité des données numériques reproductibles

Données observationnelles

- Enregistrer avec des métadonnées de provenance
- Archiver dans un dépôt (Zenodo, ...)
- Identifiant unique et stable pour chaque jeu de données

Choix humains : code source, paramètres, ...

Résultats de calcul

La trinité des données numériques reproductibles

Données observationnelles

Choix humains : code source, paramètres, ...

- Utiliser un gestionnaire de versions
- Archiver sur Software Heritage
- Identifiants intrinsèques (SWHID, ...)

Résultats de calcul

La trinité des données numériques reproductibles

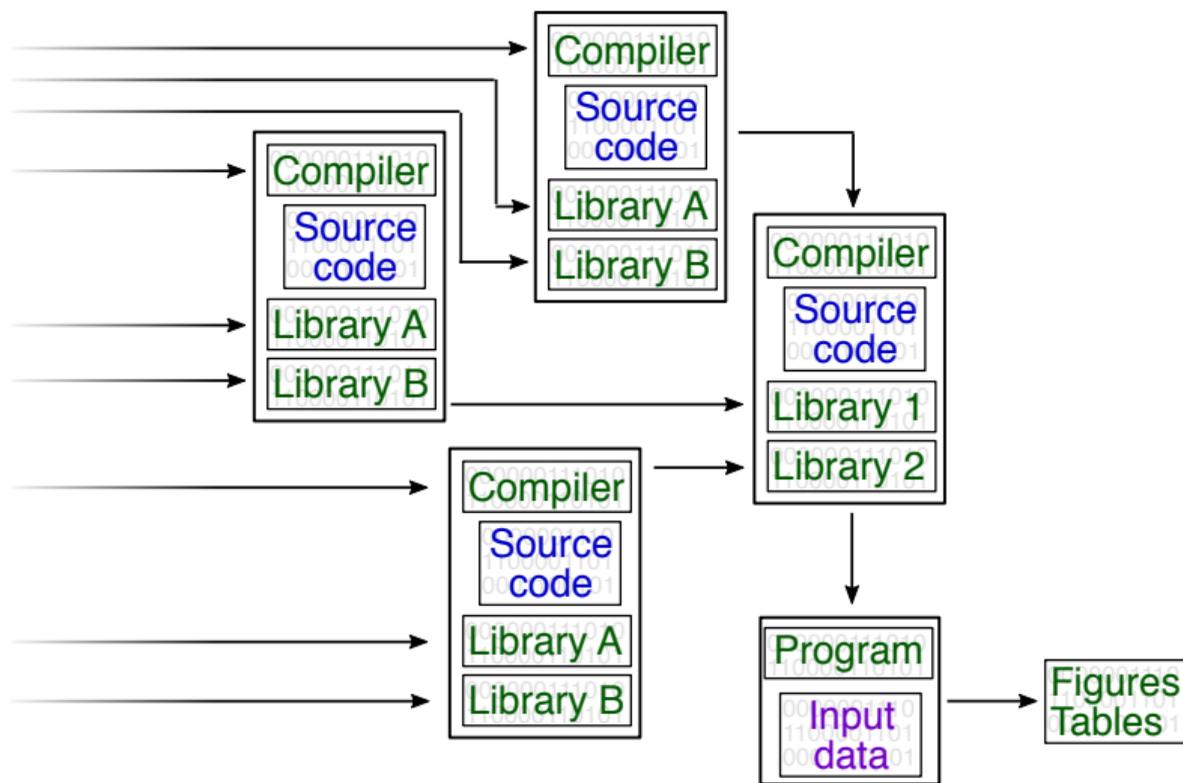
Données observationnelles

Choix humains : code source, paramètres, ...

Résultats de calcul

- *S'assurer de la reproductibilité des entrées*
- Enregistrer avec les identifiants des entrées et un identifiant du matériel utilisé

La trinité des données numériques reproductibles



L'infrastructure du calcul aujourd'hui

Défauts principaux

- Identifiants instables : noms de fichier, URLs, ...
- Identifiants imprécis : numéros de version
- Archivage et récupération manuels et difficiles
- Traçage incomplet de la provenance des résultats de calcul
- Pas de références croisées entre code et documentation

L'infrastructure du calcul aujourd'hui

Défauts principaux

- Identifiants instables : noms de fichier, URLs, ...
- Identifiants imprécis : numéros de version
- Archivage et récupération manuels et difficiles
- Traçage incomplet de la provenance des résultats de calcul
- Pas de références croisées entre code et documentation

"Just use Docker", "Just use conda"

- Outils de *déploiement*
- Aucun traçage de la provenance
- ... donc pas de répliquabilité

L'infrastructure du calcul aujourd'hui

Défauts principaux

- Identifiants instables : noms de fichier, URLs, ...
- Identifiants imprécis : numéros de version
- Archivage et récupération manuels et difficiles
- Traçage incomplet de la provenance des résultats de calcul
- Pas de références croisées entre code et documentation

“Just use Docker”, “Just use conda”

“Just use Jupyter notebooks”

- Mélange de code source avec des résultats de calcul
- Pas de traçage de la provenance
- Gère uniquement la couche superficielle du calcul

Plus de déterminisme au niveau du matériel !

Plus de déterminisme au niveau du matériel !

Deux possibilités :

- **Rétablir le déterminisme** par une couche logicielle
- Adopter les stratégies de la **reproductibilité expérimentale**

- Reproductibilité et répliquabilité sont au service d'une recherche de consensus scientifique
- La reproductibilité est au service de la répliquabilité
- La reproductibilité peut être assurée par l'infrastructure
- Le calcul parallèle est un cas à part