



Master of Science HES-SO in Engineering Av. de Provence 6 CH-1007 Lausanne

Master of Science HES-SO in Engineering

Orientation: Information and Communication Technologies (ICT)

[Thesis Title]

Déruaz Vincent

Under the direction of: Prof. Carlos Andrés Pena CI4CB at HEIG-VD

External expert:
[Title] [FirstName] [LastName]
Company/Lab

Sometimes a scream is better than a thesis.

— Manfred Eigen

To my parents...

Acknowledgements

Cette thèse as àtà réalisé dans le cadre du projet Inphinity à l'HEIG-VD.

Elle fait suite à la thèse de master [TODO: TITLE] réalisée par [TODO: prenom+nom DIOGO].

Abstract

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Key words:

Résumé

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Mots clés:

Contents

Ac	know	vledgements	i
Ab	strac	et (English/Français)	iii
Lis	t of f	figures	ix
Lis	t of t	tables	xi
1	Intro	oduction	1
2	Etat	s de l'art	3
	2.1	introduction	3
	2.2	Automatisation	3
	2.3	Configuration	3
	2.4	Parallélisation	3
		2.4.1 Simple	3
		2.4.2 Avancée	3
	2.5	Optimisations	3
	2.6	Hmmer	3
	2.7	conclusion	3
3	Base	es de Docker	5
	3.1	Introduction	6
		3.1.1 Utilisations	6
		3.1.2 Compatibilité inter-OS	6
		3.1.3 Miracle or illusion	6
	2.2		
	3.2	Pré-requis	6
		3.2.1 Connaissance	6
		3.2.2 Installations	6
		3.2.3 Téléchargements	6
	3.3	Fonctionnement	6
		3.3.1 Docker	6
		3.3.2 Docker-compose	6
		3.3.3 Docker Swarm	6
	3.4	Exemples	6
		3.4.1 simple pull, build et run	6
		3.4.2 Serveur Web	6
		3.4.3 Biopython	6
		3.4.4 Parallélisation	6
	3.5	Conclusion	6
	3.3		
		3.5.1 Docker	6
		3.5.2 Alternatives	6
4	Para	allelisation python3	7
	4.1	Code de base	7
	4.2	Utilisation	7
5	Envi	ironnement et application	9

Contents

	5.1 Images Docker 5.1.1 Hmmer 5.1.2 Database 5.1.3 Core 5.2 Docker Compose 5.3 «Inphinity»	9 9 9 9 9
6	Déploiement 6.1 Obtention des sources 6.2 •	
7		13 13 13
8	8.2 Dockers	15 15 15 15
9	Améliorations9.1 Parallèlisation9.2 Machines Amazone9.3 Spark	17
10	Conclusion	19
11	Tables, Figures and Other Features11.1 Tables11.2 Figures11.3 Other features	
12	Another chapter	23
Α	An appendix	25

List of Figures

11.1 A floating figure	21
11.2 Example subcaption	22

List of Tables

11.1 A floating table		21
-----------------------	--	----

1 | Introduction

Ce travail a été réalisé dans le cadre du projet INPHINITY [TODO: pour qui ?]. Avec l'émergence de bactéries résistantes aux antibiotiques devenant une problématique mondiale qui menace les progrès de la médecine moderne, une alternative prometteuse pour lutter contre des bactéries multi-résistantes consiste à utiliser leurs prédateurs naturels, des bactériophages, virus mangeurs de bactéries. Ces bactériophages, innofensif pour l'homme, sont extrêmement spécifiques, ne reconnaissant qu'un type bien précis de bactéries. Ceci présente l'avantage de ne pas détériorer la flore bactérienne humaine mais pose, par contre, une limitation pour leur développement rapide. En effet, pour chaque type de bactérie il faut trouver le bactériophage correspondant. Face à la nécessité d'examiner systématiquement une multitude d'interactions possibles, le développement rapide des bactériophages comme alternative aux antibiotiques ne pourra se faire qu'avec l'aide d'un modèle permettant de prédire les interactions entre bactériophages et bactéries. Ceci permettra notamment de réduire le nombre de validations expérimentales nécessaires à l'identification du bactériophage approprié et contribuera à l'essor de cette voie thérapeutique.

Ce travail se place également dans la continuité d'une précédente thèse de master dont l'objectif était de prouver la pertinence d'une méthode d'analyse par *machine learning*. En effet, il s'agit d'une méthode permettant [TODO 1: compléter].

Dans la présente thèse, il est question de mettre en place plusieurs aspects permettant l'enrichissement du processus d'analyse de la thèse [TODO 2: these name of diogo].

Afin de réaliser ces objectifs, une première phase du travail a consisté à réaliser des états de l'art pour les différents domaines utilisés (cf.chapitre 2-Etats de l'art).

Plusieurs phases distinctes de travail ont été nécessaires durant ce travail.

Premièrement, il a fallu reprendre la thèse [TODO: ref these diogo] et comprendre ce qu'il y a été fait. Les informations concernant la thèse de Mr.Leite Diogo nécessaires à la compréhension de ce travail ont été abordées dans l'introduction, pour davantage d'informations veuillez consulter la thèse en question.

Deuxièmement, une fois les objectifs de thèse fixés, il a été important de réaliser un état de l'art des différentes technologies et aspects techniques susceptibles d'êtres utilisés dans la présente thèse, voir chapitre chapitre 2-Etats de l'art .

Troisièmement, c'est uniquement après ces deux premières phases que le développement a pu commencer, voir chapitre 4-Parallelisation python3 et chapitre chapitre 5-Environnement et application. Durant cette phase un certain nombre d'aspect on été développé: Notamment, l'utilisation de python 3 afin de remplacer l'utilisation de python2, moins efficace.

De plus, on souhaite être capable d'automatiser le lancement de "l'application" et par la même occasion rendre le déploiement facile et unifier quelque soit la machine hôte, pour autant qu'elle utilise le système d'exploitation Linux. Ensuite, on souhaite pouvoir lancer l'analyse pour différentes configurations, créées à l'avance. Un autre objectif important était de remplacer l'utilisation d'une API en ligne par une utilisation de sa version locale cf.chapitre 6-Déploiement.

Chapter 1. Introduction

Finalement, le temps de travail étant limité, il faut penser aux utilisations futures de ce qui a été développé. Ceci passe notamment par l'utilisation de l'application réalisée dans ce travail de manière simple voir chapitre chapitre 7-Simplification d'usage, mais aussi par les améliorations possibles à cette thèse, voir chapitre chapitre 9-Améliorations. C'est pous cela qu'un environement de developpement et d'execution Docker à été produit dans ce travail, qui pourra êtres utile au autres membre du projet.

Il faut aussi préciser que certains résultats et métriques ont été réalisés et sont regroupés dans le chapitre 8-Résultats et Benchmarks.

TODO: Information concernant la volonté de réaliser un Docker for Bio-Informatique

2 | Etats de l'art

2.1 introduction

Dans ce chapitre nous aborderons les différentes pistes envisagées afin de remplir les objectifs fixés dans cette thèse, comme listé dans l'introduction (chapitre 1-Introduction).

Avant toutes choses il à fallu se mettre au niveau et comprendre la thèse [TODO cf name diogo thesis].

2.2 Automatisation

En terme d'automatisation, une pratique bien courante chez les developpeur s'agit à utiliser des script bash afin de pouvoir executer une certain nombre de commande et de code succecivement. Bien que cette méthode présente l'avantage d'etres simple, il suffit d'une console UNIX et d'un editeur de texte, elle présente un défault majeur. En effet, le developpeur du script contrôle quel commande et code sont executé et peut également definir des paramètres pour ceux-ci, mais il ne peu pas contrôlé l'environnement d'execution.

Une façcon de faire, en pleine essort depuis quelque temps, est l'utilisation de la platforme Docker. Il s'agit d'un logiciel de containerisation. C'est-à-dire la création de brique d'application qui mise en communes permette de réaliser un application global. De plus, le développement d'une telle solution, permet un partage facilité grâce à un déploiement facilité et autonome. Pour d'avantages d'explication sur le sujet je vous renvoi au chapitre chapitre 3-Bases de Docker.

Vous l'aurez bien compris, le choix qui à été fait est celui de l'utilisation de Docker.

2.3 Configuration

- 2.4 Parallélisation
- **2.4.1** Simple
- 2.4.2 Avancée
- 2.5 Optimisations
- 2.6 Hmmer
- 2.7 conclusion

3 | Bases de Docker

\mathbf{a}	4	т, 1,	
`~	.1	Introducti	Λn
J	. т	muducu	UH

- 3.1.1 Utilisations
- 3.1.2 Compatibilité inter-OS
- 3.1.3 Miracle or illusion
- 3.2 Pré-requis
- 3.2.1 Connaissance
- 3.2.2 Installations
- 3.2.3 Téléchargements

3.3 Fonctionnement

- 3.3.1 Docker
- 3.3.2 Docker-compose
- 3.3.3 Docker Swarm
- 3.4 Exemples
- 3.4.1 simple pull, build et run
- 3.4.2 Serveur Web
- 3.4.3 Biopython
- 3.4.4 Parallélisation

3.5 Conclusion

- 3.5.1 Docker
- 3.5.2 Alternatives

4 | Parallelisation python3

- 4.1 Code de base
- 4.2 Utilisation

5 | Environnement et application

- 5.1 Images Docker
- 5.1.1 Hmmer
- 5.1.2 Database
- 5.1.3 Core
- **5.2** Docker Compose
- 5.3 «Inphinity»

6 | **Déploiement**

- 6.1 Obtention des sources
- 6.2 •

7 | Simplification d'usage

- 7.1 Commandes et alias
- 7.2 Scripts

8 | Résultats et Benchmarks

- 8.1 Parallèlisation
- 8.2 Dockers
- 8.3 Phases

9 | Améliorations

- 9.1 Parallèlisation
- 9.2 Machines Amazone
- 9.3 Spark

10 | Conclusion

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

11 | Tables, Figures and Other Features

This chapter shows example of picture and also serves to populate the different lists: list of figures, list of tables, bibliography, and glossary.

11.1 Tables

This section contains examples of tables.

name	weight	food
mouse	10 g	cheese
cat	1 kg	mice
dog	10 kg	cats
t-rex	10 Mg	dogs

Table 11.1 – A floating table.

11.2 Figures

This section contains examples of figures.

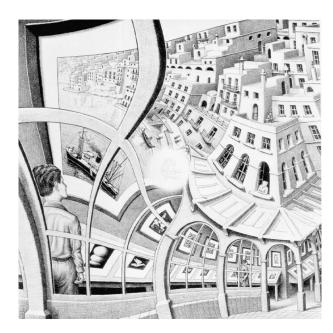


Figure 11.1 – A floating figure (the lithograph *Galleria di stampe*, of M. Escher, got from http://www.mcescher.com/).

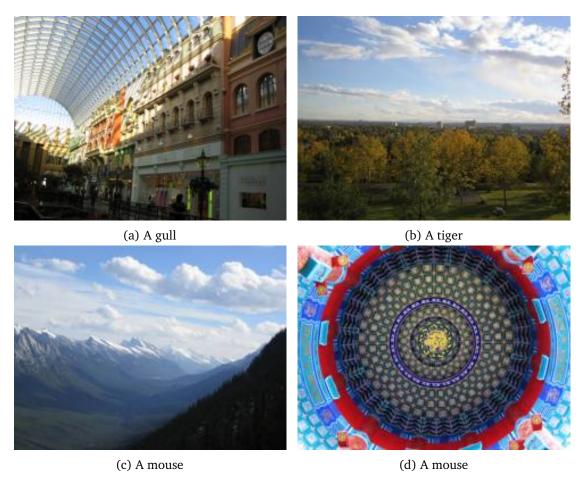


Figure 11.2 – Example subcaption

11.3 Other features

Term (glossaries): NoSQL

Acronym (glossaries): Structured Query Language (SQL)

Citation (biblatex): [chandola2009anomaly]

12 | Another chapter

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. In hac habitasse platea dictumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.

Fusce mauris. Vestibulum luctus nibh at lectus. Sed bibendum, nulla a faucibus semper, leo velit ultricies tellus, ac venenatis arcu wisi vel nisl. Vestibulum diam. Aliquam pellentesque, augue quis sagittis posuere, turpis lacus congue quam, in hendrerit risus eros eget felis. Maecenas eget erat in sapien mattis porttitor. Vestibulum porttitor. Nulla facilisi. Sed a turpis eu lacus commodo facilisis. Morbi fringilla, wisi in dignissim interdum, justo lectus sagittis dui, et vehicula libero dui cursus dui. Mauris tempor ligula sed lacus. Duis cursus enim ut augue. Cras ac magna. Cras nulla. Nulla egestas. Curabitur a leo. Quisque egestas wisi eget nunc. Nam feugiat lacus vel est. Curabitur consectetuer.

Suspendisse vel felis. Ut lorem lorem, interdum eu, tincidunt sit amet, laoreet vitae, arcu. Aenean faucibus pede eu ante. Praesent enim elit, rutrum at, molestie non, nonummy vel, nisl. Ut lectus eros, malesuada sit amet, fermentum eu, sodales cursus, magna. Donec eu purus. Quisque vehicula, urna sed ultricies auctor, pede lorem egestas dui, et convallis elit erat sed nulla. Donec luctus. Curabitur et nunc. Aliquam dolor odio, commodo pretium, ultricies non, pharetra in, velit. Integer arcu est, nonummy in, fermentum faucibus, egestas vel, odio.

Sed commodo posuere pede. Mauris ut est. Ut quis purus. Sed ac odio. Sed vehicula hendrerit sem. Duis non odio. Morbi ut dui. Sed accumsan risus eget odio. In hac habitasse platea dictumst. Pellentesque non elit. Fusce sed justo eu urna porta tincidunt. Mauris felis odio, sollicitudin sed, volutpat a, ornare ac, erat. Morbi quis dolor. Donec pellentesque, erat ac sagittis semper, nunc dui lobortis purus, quis congue purus metus ultricies tellus. Proin et quam. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos hymenaeos. Praesent sapien turpis, fermentum vel, eleifend faucibus, vehicula eu, lacus.

Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Donec odio elit, dictum in, hendrerit sit amet, egestas sed, leo. Praesent feugiat sapien aliquet odio. Integer vitae justo. Aliquam vestibulum fringilla lorem. Sed neque lectus, consectetuer at, consectetuer sed, eleifend ac, lectus. Nulla facilisi. Pellentesque eget lectus. Proin eu metus. Sed porttitor. In hac habitasse platea dictumst. Suspendisse eu lectus. Ut mi mi, lacinia sit amet, placerat et, mollis vitae, dui. Sed ante tellus, tristique ut, iaculis eu, malesuada ac, dui. Mauris nibh leo, facilisis non, adipiscing quis, ultrices a, dui.

Morbi luctus, wisi viverra faucibus pretium, nibh est placerat odio, nec commodo wisi enim eget quam. Quisque libero justo, consectetuer a, feugiat vitae, porttitor eu, libero. Suspendisse sed mauris vitae elit sollicitudin malesuada. Maecenas ultricies eros sit amet ante. Ut venenatis velit. Maecenas sed mi eget dui varius euismod. Phasellus aliquet volutpat odio. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia Curae; Pellentesque sit amet pede ac sem eleifend consectetuer. Nullam elementum, urna vel imperdiet sodales, elit ipsum pharetra ligula, ac pretium ante justo a nulla. Curabitur tristique arcu eu metus. Vestibulum lectus. Proin mauris. Proin eu nunc eu urna hendrerit faucibus. Aliquam auctor, pede consequat laoreet varius, eros tellus scelerisque quam, pellentesque hendrerit ipsum dolor sed augue. Nulla nec lacus.

Suspendisse vitae elit. Aliquam arcu neque, ornare in, ullamcorper quis, commodo eu, libero. Fusce sagittis erat at erat tristique mollis. Maecenas sapien libero, molestie et, lobortis in, sodales eget, dui. Morbi ultrices rutrum lorem. Nam elementum ullamcorper leo. Morbi dui. Aliquam sagittis. Nunc placerat. Pellentesque tristique sodales est. Maecenas imperdiet lacinia velit. Cras non urna. Morbi eros pede, suscipit ac, varius vel, egestas non, eros. Praesent malesuada, diam id pretium elementum, eros sem dictum tortor, vel consectetuer odio sem sed wisi.

Sed feugiat. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Ut pellentesque augue sed urna. Vestibulum diam eros, fringilla et, consectetuer eu, nonummy id, sapien. Nullam at lectus. In sagittis ultrices mauris. Curabitur malesuada erat sit amet massa. Fusce blandit. Aliquam erat volutpat. Aliquam euismod. Aenean vel lectus. Nunc imperdiet justo nec dolor.

Etiam euismod. Fusce facilisis lacinia dui. Suspendisse potenti. In mi erat, cursus id, nonummy sed, ullamcorper eget, sapien. Praesent pretium, magna in eleifend egestas, pede pede pretium lorem, quis consectetuer tortor sapien facilisis magna. Mauris quis magna varius nulla scelerisque imperdiet. Aliquam non quam. Aliquam porttitor quam a lacus. Praesent vel arcu ut tortor cursus volutpat. In vitae pede quis diam bibendum placerat. Fusce elementum convallis neque. Sed dolor orci, scelerisque ac, dapibus nec, ultricies ut, mi. Duis nec dui quis leo sagittis commodo.

A | An appendix

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.