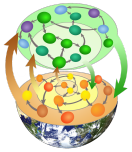


Séance 4: Les outils pour la reproductibilité

BIO 500 - Méthodes en écologie computationnelle

Dominique Gravel & Steve Vissault
Laboratoire d'écologie intégrative

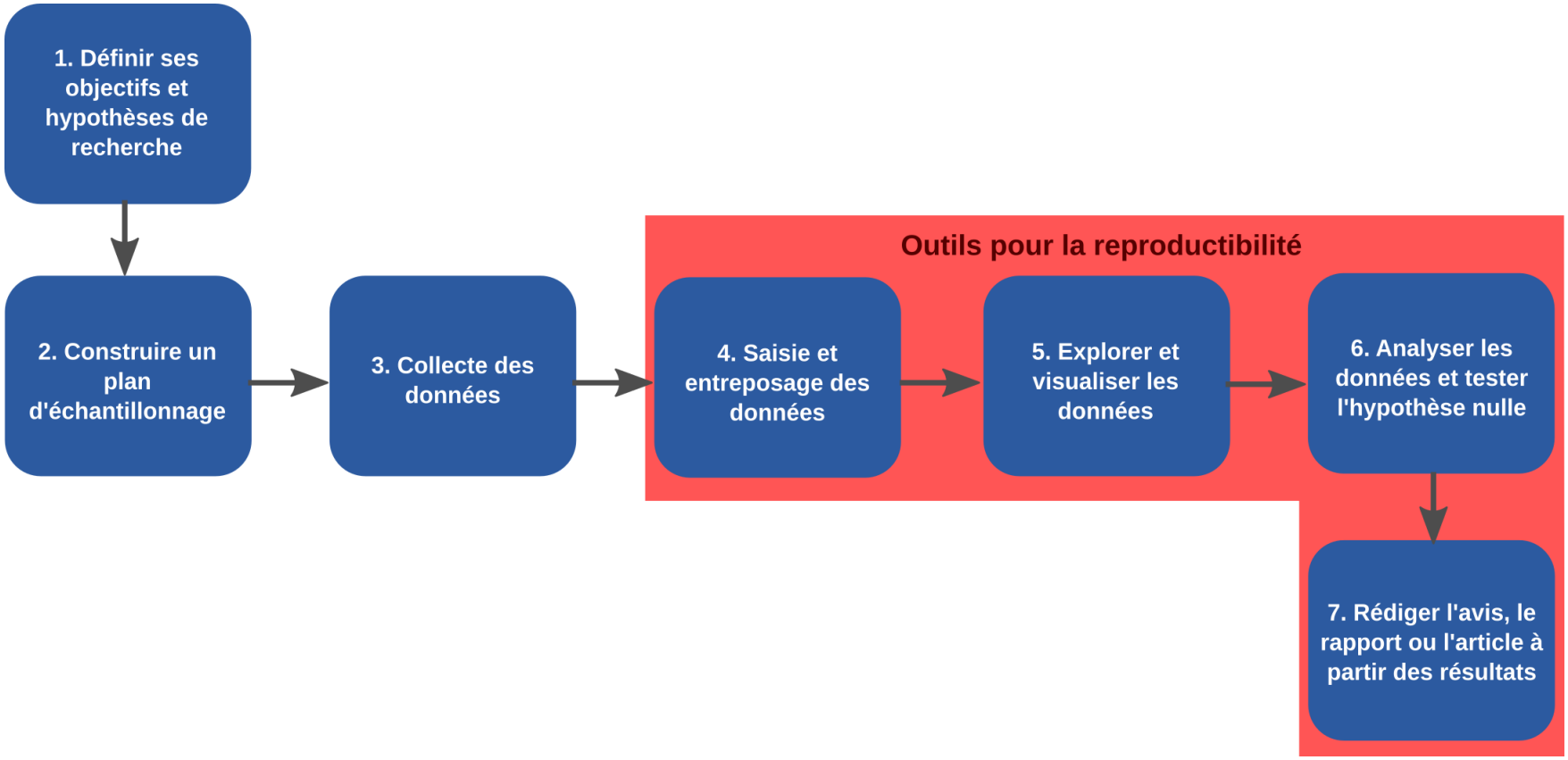
CC BY NC SA

Séance 5

- ✓ Ces diapositives sont disponibles en **version web** et en **PDF**.
- ✓ L'ensemble du matériel de cours est disponible sur la page du portail **moodle**.

Les outils pour la reproductibilité

Les étapes du travail d'un biologiste



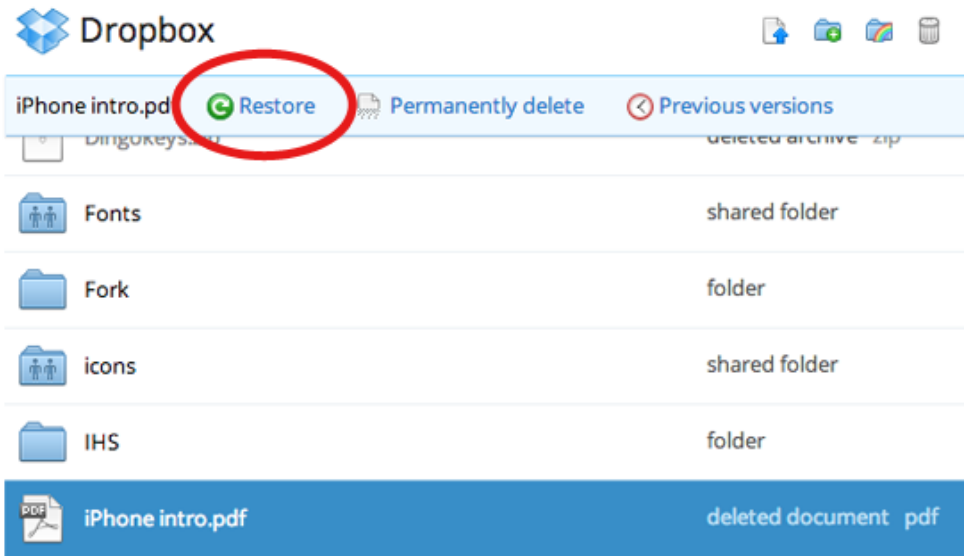
Une situation courante

```
MonTravailSession/
  |___ data/
       |___ data_01122018.csv
       |___ data_011022018.csv
  |___ rapportVeg_jean_v1_01012018.docx
  |___ rapportVeg_juliette_v1_01012018.docx
  |___ rapportVeg_rémi_v1_04012018.docx
  |___ rapportVeg_rémi_v2_10012018.docx
  |___ rapportFinal_20012018.docx
```

Ses difficultées techniques:

- ✓ Multi-utilisateurs
- ✓ Garder une trace de l'historique de modifications **d'un ensemble de fichiers**
- ✓ Revenir aux versions précédentes
- ✓ Comparer des versions d'un fichier

Systèmes de contrôle éxistants



Systèmes de contrôle éxistants

Git: Un système de controle de version pour programmeur

Qu'est ce que Git?

C'est un système qui permet de suivre l'ajout et les modifications pour un ensemble de fichier. **C'est le cahier de lab du programmeur.**

- ✓ Logiciel libre soutenu par une large communautée (12 millions d'utilisateurs dans le monde)
- ✓ Par défault, Git est installé sur les systèmes d'exploitation Linux et Mac.
- ✓ Il peut être installé sur Windows: **https://git-scm.com/download/win**

Qu'est ce que Git?

Il présente l'avantage d'être extrement versatile mais le désavantage de fonctionner seulement avec les fichiers plein texte.

Question: Qu'est ce qu'un fichier plein texte?

Initialisation d'un dépôt Git

Git suit les modifications à l'intérieur d'un dossier que l'on appelle dépôt (`repository`). Pour initialiser le suivi d'un répertoire (initialiser un dépôt), il vous suffit d'utiliser la commande `git init`.

```
mkdir ~/Documents/travail_BIO500 # Créer un répertoire de travail dans le répertoire Documents.
cd  ~/Documents/travail_BIO500 # Se déplacer vers ce répertoire
git init # Initialiser le suivi de version de ce dossier.
ls -a # Lister tous le contenu du répertoire de travail.
```

Le dossier `.git` permet de garder une trace de l'ensemble des opérations que vous allez faire dans ce répertoire.

Exercice 1 - Initialiser le répertoire de travail avec git

À l'aide de votre terminal:

1. Créer un dossier (`mkdir`)
2. Créer un fichier (`touch`)
3. Initialiser votre dépot `git` (`git init`)
4. Vérifier que le dossier caché (`.git`) se trouve dans votre nouveau répertoire

Git en 3 étapes

On modifie le ou les fichiers, on ajoute la modification à Git puis on met un commentaire sur la modification apportée.

En 3 étapes:

1. Modification d'un ou plusieurs fichiers sources (e.g. Ajout d'un paragraphe)
2. `git add monFichier1.txt monFichier2.txt`
3. `git commit -m "mon commentaire"`

On répète ces étapes à plusieurs reprises au cours de l'écriture d'un document et/ou de l'avancé d'un projet.

Question: Qu'est ce qu'un bon commentaire?

Git status

Votre meilleur ami, `git status`, permet de prendre connaissance de l'état de notre dépôt Git.

```
Sur la branche master

Validation initiale

Fichiers non suivis:
  (utilisez "git add <fichier>..." pour inclure dans ce qui
  sera validé)


        monFichier1.txt

aucune modification ajoutée à la validation mais des
fichiers non suivis sont présents (utilisez "git add" pour
les suivre).
```

Exercice 2 - Effectuer votre premier `commit`

1. Déplacer vous dans votre répertoire de travail
2. Ajouter un fichier intituler `travail_BIO500.txt` et remplisser le de faux texte
3. Effectuer un `git status`

1. Ajouter ce fichier à votre dépot git (`git add`)
2. Effectuer un `git status`
3. Décrire la modification que vous venez d'apporter (`git commit`)

À chaque `git status`, prenez le temps de regarder la sortie (message)

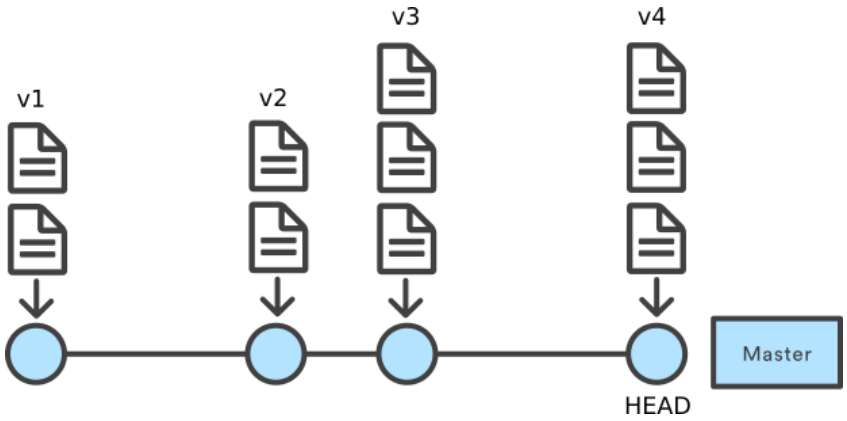
Exercice: Effectuer votre premier `commit`

1. Modifier le fichier `travail_BIO500.txt`
2. Ajouter la modification à votre dépot git (`git add`)
3. Effectuer un `git status`

À chaque `git status`, prenez le temps de regarder la sortie (message).

1. Modifier à nouveau le fichier `travail_BIO500.txt`
2. Effectuer un `git diff` ou `git diff NomDuFichier`

Quelques notions de base



- ✓ Une branche (`master` par défault): c'est un série de commentaires (`commit`)
- ✓ Le dernier commentaire (`commit`) est ce que l'on appelle la tête de la brance (`HEAD`), elle contient la version la plus à jour des fichiers.
- ✓ À chaque commentaire d'édition (`commit`) est attaché une version des fichiers.

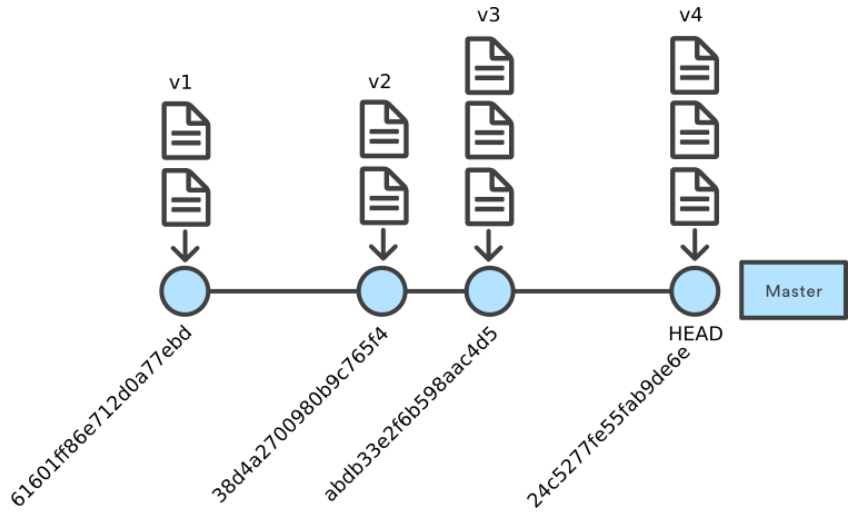
Le journal de Git

```
cd Documents/Git/BIO500 # Ceci est mon chemin d'accès
git log
```

```
commit 38d4a2700980b9c765f4abdb33e2f6b598aac4d5
Author: Steve Vissault <s.vissault@yahoo.fr>
Date:   Wed Feb 28 20:38:05 2018 -0500

    Modifs sur plan de match

commit 61601ff86e712d0a77ebd24c5277fe55fab9de6e
Author: Steve Vissault <s.vissault@yahoo.fr>
Date:   Wed Feb 28 20:33:20 2018 -0500

    Modifications au cours3 (retrait slides), ajout reponses
```

Le journal de Git

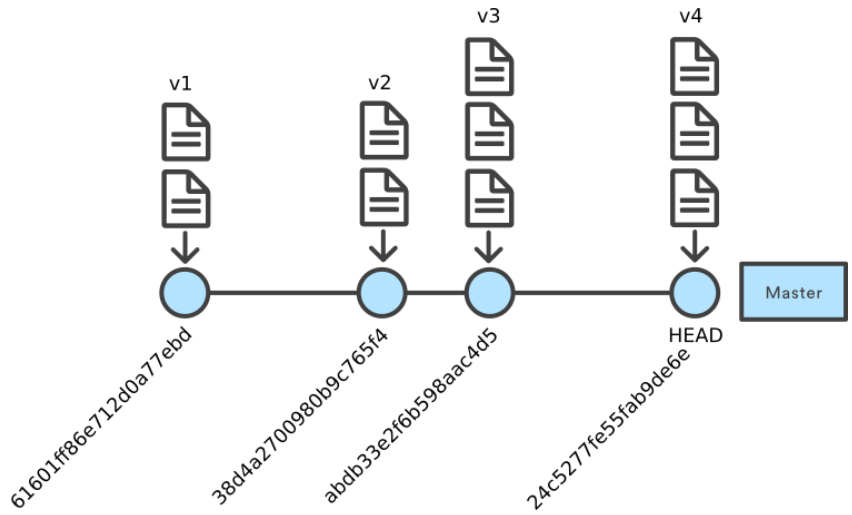
```
commit 38d4a2700980b9c765f4abdb33e2f6b598aac4d5
Author: Steve Vissault <s.vissault@yahoo.fr>
Date:   Wed Feb 28 20:38:05 2018 -0500

    Modifs sur plan de match

commit 61601ff86e712d0a77ebd24c5277fe55fab9de6e
Author: Steve Vissault <s.vissault@yahoo.fr>
Date:   Wed Feb 28 20:33:20 2018 -0500

    Modifications au cours3 (retrait slides)
```



Se déplacer sur la branche `master`

```
git checkout 4abdb33e2f6b598aac4d5
```

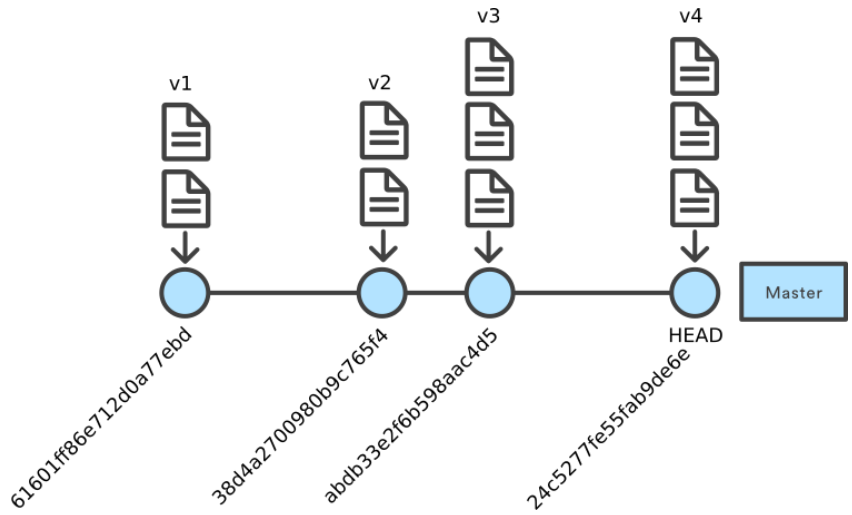
Permet de se déplacer vers un `commit` précis.



Se déplacer sur la branche `master`

```
git checkout master
```

Permet de se déplacer vers le `commit` le plus récent.



Exercice 3 - Se déplacer à travers l'historique

En reprenant votre dépot de travail `git` (Exercice 2), parcourez votre historique (`git log`) et remontez à votre premier commentaire (`commit`).

Les serveurs Git distants

Les serveurs Git distants

Jusqu'à présent nous avons travaillé localement sur votre ordinateur. Il est cependant possible de synchroniser votre travail sur un serveur Git (dépots distants). Ce procédé présente deux avantages indéniables:

1. Sauvegarder votre travail (Back-up)
2. Permettre à un collègue de travailler avec vous sur votre dêpot.

Les serveurs Git distants

Il éxiste plusieurs d'entreprise offrant des services gratuits pour héberger votre dépôt:

- ✓ **Gitlab**: Serveur hébergeable dans votre infrastructure.
- ✓ **Bitbucket**: Gratuit avec dépot privé illimité.
- ✓ **Github**: Gratuit avec nombre de dépôt privé limité.

Nous travaillerons avec GitHub, la plateforme la plus populaire, une vitrine pour dévoiler vos compétences de programmeur.

Exercice 4: Ouvrez un compte sur Github

1. Rendez-vous à l'adresse: **https://github.com/**
2. Ouvrez un compte / Inscrivez-vous
3. Créez un nouveau dépot sur GitHub intitulé: `monTravail_BIO500`

Envoyer votre dépôt local sur le serveur Github

```
git remote add origin https://adresseVersVotreDepot.git
git remote -v
```

Votre dépot local vient de se transformer en dépôt distant. Cependant, rien n'a encore été envoyé sur le serveur encore.

Envoyer votre dépôt local sur le serveur Github

On va maintenant envoyé les fichiers et l'historique de modifications de ces derniers sur le serveur.

```
git push origin master
# Le serveur va vous demander de vous authentifier avec vos accès GitHub
```

`origin` est le serveur distant (toujours par défault) `master` est la branche sur laquelle vous placez vos fichiers

Récupérer des modifications apporté par un collègue

Imaginez maintenant que l'un de vos collègues apporte des modifications à votre code ou travail et qu'il publie ses modifications (s'il dispose des droits) sur votre dépôt.

```
git pull origin master
# Le serveur va vous demander de vous authentifier avec vos accès GitHub
```

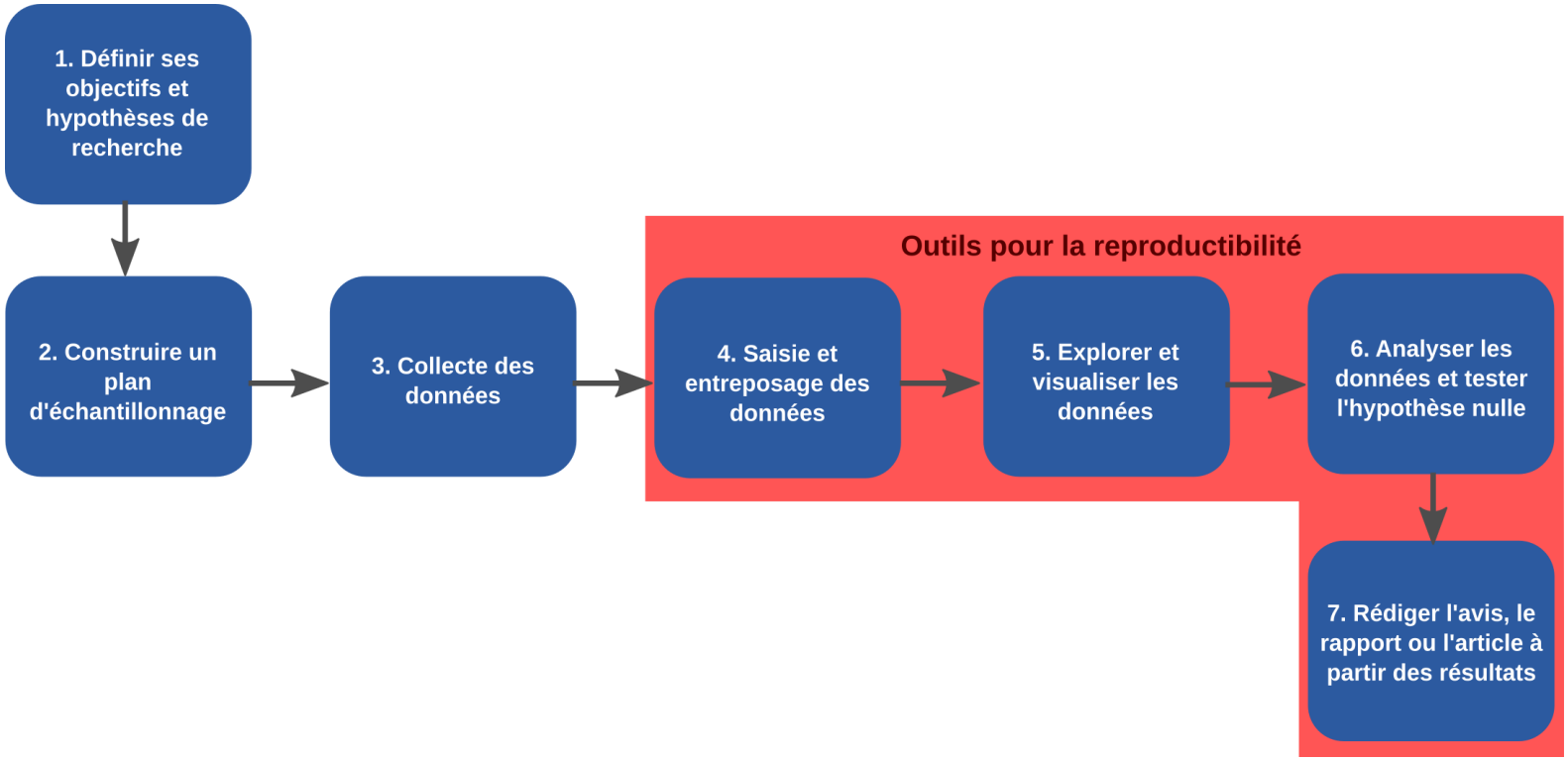
Cloner un dépôt distant

Il est possible à tout moment de récupérer un dépôt distant pour le téléverser sur son ordinateur.

```
cd Documents
git clone https://github.com/EcoNumUdS/BIO500.git
```

Le makefile

Les étapes du travail d'un biologiste



Qu'est-ce que le makefile ?

Définition: le makefile est un fichier qui contient un ensemble de directives qui sont exécutées par l'ordinateur. Les instructions et leurs dépendances sont spécifiées dans le makefile.

À quoi il sert ?

Le makefile est un logiciel permettant d'exécuter une série d'instructions, lorsqu'elles sont nécessaires. Les dépendances sont vérifiées et seulement les instructions qui requierent une mise à jour sont exécutées.

Nous utiliserons le makefile pour assurer la reproductibilité de la démarche entreprise dans le cours. L'ensemble des instructions nécessaires à la production du rapport, de la création de la base de données à la compilation du document écrit, seront contenues dans le makefile.

Objectifs de la leçon

- ✓ Reconnaitre les parties importantes d'un makefile, les règles, les cibles, les dépendances et les actions
- ✓ Écrire un makefile simple
- ✓ Exécuter un makefile à partir du terminal
- ✓ Préparer le makefile pour le projet de session

Anatomie du makefile

```
<target>: <dependencies...>
  <commands>
```

`target`

La cible est habituellement le nom d'un fichier généré par la commande.

dependencies...

Une dépendance (également appelée) est un fichier qui est utilisé pour créer un autre fichier appelée cible (`"target"`).

La peut contenir plusieurs dépendances.

Il est néanmoins possible d'avoir un fichier cible qui ne requiert pas de dépendances.

commands

La commande est l'action à réaliser. Dans notre cas, nous utiliserons une commande pour exécuter un script R comme :

```
Rscript script.R
```

Nous verrons plus tard dans la session le langage de mise en forme LaTeX. Dans ce cas, la commande serait:

```
pdflatex manuscrit.tex
```

Un exemple

```
# Troisième étape, on produit une figure à partir du modèle
# et des données
figure.pdf: model.Rdata data.txt
  Rscript script3.R

# Seconde étape, on fait un modèle statistique à partir
# de ces données
model.Rdata: data.txt
  Rscript script2.R

# Première étape, on génère des données
data.txt :
  Rscript script1.R
```

Ce fichier s'appelle makefile (sans extension) et il est exécuté en inscrivant simplement la commande `make nomDeLaCible`.

Étape par étape

`Rscript` est un programme permettant d'exécuter du code R sans passer par la console R. On peut utiliser le terminal pour appeler le programme `Rscript` et lui donner comme argument un script R: `Rscript script1.R`

Les commandes sont espacées par une ou 8 espaces. Assurez vous que votre tabulation corresponds bien à 8 espaces.

Ensemble, la cible, les dépendances et les actions constituent une règle. Cet exemple a donc 3 règles.

Comment créer un premier makefile

- ✓ Ouvrez un nouveau document au moyen de atom
- ✓ Copiez les commandes de l'exemple
- ✓ Sauvergardez le fichier, avec pour nom makefile
- ✓ Assurez vous de trouvez les 3 scripts dans le dépôt git

Script 1

```
set.seed(1)
X <- runif(25, 0, 100)
Y <- rnorm(25, mean = X*2 + 10, sd = 25)
write.table(cbind(X,Y), file = "data.txt")
```

Script 2

```
data <- read.table("~/Bureau/exemple/data.txt", header = T)
model <- lm(data$Y ~ data$X)
save(model, file = "~/Bureau/exemple/model.Rdata")
```

Script 3

```
data <- read.table("~/Bureau/exemple/data.txt", header = T)
load("~/Bureau/exemple/model.Rdata")

pdf("resultat.pdf", 7 5)
plot(data$X, data$Y, xlab = "X", ylab = "Y")
abline(model)
dev.off()
```

Exécuter un makefile

Il n'est pas nécessaire de nommer le makefile . On peut toujours spécifier un autre nom et l'exécuter ainsi :

```
make -f MonMakefile
```

Les dépendances

- ✓ Exécutez le makefile une première fois.
- ✓ Ensuite, modifiez une valeur dans le fichier data.txt.
- ✓ Exécutez le makefile à nouveau pour voir ce qui se produit.

Le makefile comme outil de reproductiblité

La rédaction du makefile nous force à spécifier les différentes étapes de notre démarche, à identifier les entrées et les sorties de différentes instructions à l'ordinateur. De cette façon, le makefile permet de documenter rigoureusement la démarche réalisée.

Il s'agit aussi d'un aide-mémoire qui permet de se rappeler des étapes.

Exercice

Conceptualisez les différentes étapes de la démarche du travail de session jusqu'à présent.

Identifiez les entrées, les sorties et les actions.

Les messages de make

Il est possible de forcer make à réaliser certaines actions. Par exemple, si on exécute à nouveau make

```
make
```

On obtient le message :

```
make : 'data.txt' is up to date
```

Les messages de make

On peut forcer une étape, par exemple le calcul du modèle, ainsi :

```
make model.Rdata
```

Dans ce cas-ci, on obtient le message :

```
make: Nothing to be done for 'script2.R'
```

Les messages de make

signifie que le makefile a une règle dont la cible est le nom du fichier et qu'il est à jour

indique que le fichier existe, mais que soit

- ✓ il n'y a pas de règle pour ce fichier
- ✓ il y a une règle, mais aucune action à réaliser

Nettoyage du dépôt en fin de script

Il arrive que certains scripts génèrent des fichiers temporaires qui ne doivent pas être conservés inutilement.

Dans l'exemple précédent, on pourrait vouloir éliminer le modèle, qui n'est finalement utilisé que pour réaliser la figure. On peut ainsi inscrire à la fin du makefile :

```
clean :
  rm -f model.Rdata
```

`rm -f model.Rdata` va éliminer à la toute fin l'objet R contenant le modèle intitulé `model.Rdata`. Notez ici qu'il n'y a pas de dépendance, ce qui indique que cette opération sera systématiquement exécutée.

Dépendances

L'ordre de présentation des dépendances est arbitraire. Elles ne seront pas nécessairement vérifiées dans l'ordre présenté.

Un truc est de schématiser les dépendances (des noeuds) et les actions (des flèches)

Autres ressources disponibles en ligne :

https://swcarpentry.github.io/make-novice/02-makefiles/

https://gist.github.com/isaacs/62a2d1825d04437c6f08

http://gl.developpez.com/tutoriel/outil/makefile/

http://icps.u-strasbg.fr/people/loechner/public_html/enseignement/GL/make.pdf

Travail pour la semaine

Consignes

- ✓ Identifiez clairement vos questions de recherche
- ✓ Planifiez les requêtes à réaliser pour traiter les données
- ✓ Incluez les requêtes dans le makefile

Lectures

Sandve et al. 2013. Ten Simple Rules for Reproducible Computational Research. PLoS Computational Biology. 9: e1003285

Silberzahn et Uhlman. 2015. Many hands make tight work. Nature 526 : 189-191.

Barba. 2016. The hard road to reproducibility. Science 354: 142.