

La reproductibilité: de la crise au label de qualité

Konrad HINSEN

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

16 mai 2022

1. Pourquoi tout le monde parle de reproductibilité ?



Article

[Discussion](#)

Lire

[Modifier](#)

[Modifier le code](#)

[Voir l'historique](#)

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 [\[masquer\]](#)

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

nature

Explore content ▾

About the journal ▾

Publish with us ▾

Subscribe

[nature](#) > [news](#) > article

NEWS | 09 December 2021

Half of top cancer studies fail high-profile reproducibility effort

Barriers to reproducing preclinical results included unhelpful author communication, but critics argue that one-time replication attempts don't tell the whole story.



WIKIPEDIA
The Free Encyclopedia

[Main page](#)

[Contents](#)

[Featured content](#)

[Current events](#)

[Random article](#)

[Donate to Wikipedia](#)

[Wikipedia store](#)

Interaction

[Help](#)

[About Wikipedia](#)

[Community portal](#)

[Recent changes](#)

[Contact page](#)

Tools

[What links here](#)

[Related changes](#)

Geoffrey Chang

From Wikipedia, the free encyclopedia

Geoffrey Chang is a professor at the [University of California, San Diego's Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences](#) and Department of Pharmacology, School of Medicine. His laboratory focuses on the [structural biology](#) of [integral membrane proteins](#), particularly exploring [X-ray crystallography](#) techniques for solving the [tertiary structures](#) of membrane proteins that are notoriously resistant to [crystallization](#). The laboratory has specialized in structures of [multidrug resistance transporter proteins](#) in [bacteria](#). In 2001, while a faculty member of [The Scripps Research Institute](#), Chang was awarded a [Beckman Young Investigators Award](#),^[1] designed to support researchers early in their academic careers, for his work on the structural biology of multidrug resistance.^[2] Chang announced a move from Scripps to neighboring UC San Diego in 2012.^[3]

In 2007, Chang and coauthors [retracted](#) five previously published papers describing the structures of three multidrug transporter proteins after another research group published a widely differing structure, which led to the discovery of a critical [bug](#) in the Chang group's custom software tools.^[4] Since that time, however, Chang has published other papers in the field of structural biology,^{[5][6]} and has been awarded a EUREKA grant, "for exceptionally innovative research projects that could have an extraordinarily significant impact on many areas of science," from the National Institutes of Health.^[7]

Characterization of Leptazolines A–D, Polar Oxazolines from the Cyanobacterium *Leptolyngbya* sp., Reveals a Glitch with the “Willoughby–Hoye” Scripts for Calculating NMR Chemical Shifts

Jayanti Bhandari Neupane, Ram P. Neupane,[✉] Yuheng Luo, Wesley Y. Yoshida, Rui Sun,[✉] and Philip G. Williams*[✉]

Department of Chemistry, University of Hawai‘i at Mānoa, 2545 McCarthy Mall, Honolulu, Hawaii 96822, United States

J.B. Neupane *et al.*, *Organic Letters*, 2019

“Published in 2014, this Nature Protocols manuscript provides detailed instructions aimed at enabling those with minimal theoretical knowledge of the subject area to calculate gauge-including atomic orbital (GIAO) NMR chemical shifts and includes Python scripts to streamline the process. It has been cited over 130 times in the last 5 years.”

American Economic Review: Papers & Proceedings 100 (May 2010): 573–578
<http://www.aeaweb.org/articles.php?doi=10.1257/aer.100.2.573>

Growth in a Time of Debt

By CARMEN M. REINHART AND KENNETH S. ROGOFF*

In this paper, we exploit a new multi-country historical dataset on public (government) debt to search for a systemic relationship between high public debt levels, growth and inflation.¹ Our main result is that whereas the link between growth and debt seems relatively weak at “normal” debt levels, median growth rates for countries with public debt over roughly 90 percent of GDP are about one percent lower than otherwise; average (mean) growth rates are several percent lower. Surprisingly, the relationship between public debt and growth is remarkably

especially against the backdrop of graying populations and rising social insurance costs? Are sharply elevated public debts ultimately a manageable policy challenge?

Our approach here is decidedly empirical, taking advantage of a broad new historical dataset on public debt (in particular, central government debt) first presented in Carmen M. Reinhart and Kenneth S. Rogoff (2008, 2009b). Prior to this dataset, it was exceedingly difficult to get more than two or three decades of public debt data even for many rich countries, and

C.M. Reinhart & K.S. Rogoff, *American Economic Review*, 2010

Does high public debt consistently stifle economic growth? A critique of Reinhart and Rogoff

Thomas Herndon, Michael Ash and Robert Pollin*

We replicate Reinhart and Rogoff (2010A and 2010B) and find that selective exclusion of available data, coding errors and inappropriate weighting of summary statistics lead to serious miscalculations that inaccurately represent the relationship between public debt and GDP growth among 20 advanced economies. Over 1946–2009, countries with public debt/GDP ratios above 90% averaged 2.2% real annual GDP growth, not -0.1% as published. The published results for (i) median GDP growth rates for the 1946–2009 period and (ii) mean and median GDP growth figures over 1790–2009 are all distorted by similar methodological errors, although the magnitudes of the distortions are somewhat smaller than with the mean figures for 1946–2009. Contrary to Reinhart and Rogoff's broader contentions, both mean

T. Herndon, M. Ash, R. Pollin, *Cambridge Journal of Economics*, 2014

Objectif : une connaissance *fiable*

RELIABLE KNOWLEDGE

*An Exploration of the Grounds
for Belief in Science*

JOHN ZIMAN



Sources de confiance

Rigueur

- Documentation précise et complète
- Discussion des incertitudes et sources d'erreurs
- Respect des bonnes pratiques du domaine
- ...

Robustesse

- Résultats similaires avec des techniques différentes
- Méthodes éprouvées
- Accords expérience - théorie
- ...

Un résultat non-reproductible suggère...

- ... une description incomplète
- ... une maîtrise insuffisante des techniques
- ... une erreur
- ... une fraude

Ou encore...

- ... une prise insuffisante sur les sujets d'étude (souris, étoiles, ...)

2. Mieux comprendre la reproductibilité

La trinité de la reproductibilité scientifique

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

(Non-)reproductibilité expérimentale

- Bien connue depuis des siècles
- Globalement bien maîtrisée
- Invisible dans les discussions de la crise

(Non-)reproductibilité statistique

- Un phénomène récent
- Contribution majeure à la crise
- Causes principales :
 - des échantillons trop petits
 - le biais de confirmation
 - la complexité des méthodes statistiques
 - l'ordinateur, qui permet l'application de méthodes "boîtes noires"

(Non-)reproductibilité computationnelle

- Un phénomène récent
- Aspect le plus surprenant de la crise
- Problème très fréquent : la reproductibilité reste l'exception
- Causes principales :
 - la complexité des logiciels
 - la non-publication du code source
 - les fausses manip passées inaperçues

Déterministe mais pas reproductible ?

$$2 + 2 = 4$$

- aujourd'hui ...
- comme hier ...
- et sans doute aussi dans un an.

Le calcul est déterministe et reproductible.

Si un logiciel donne des résultats différents,

- c'est le logiciel qui a changé...
- ou les données d'entrée.

Le problème de fond est la complexité des logiciels.

Les enjeux de la reproductibilité computationnelle

- Être sûr de ce qui a été calculé
- Pouvoir vérifier le calcul
- Pouvoir adapter le calcul

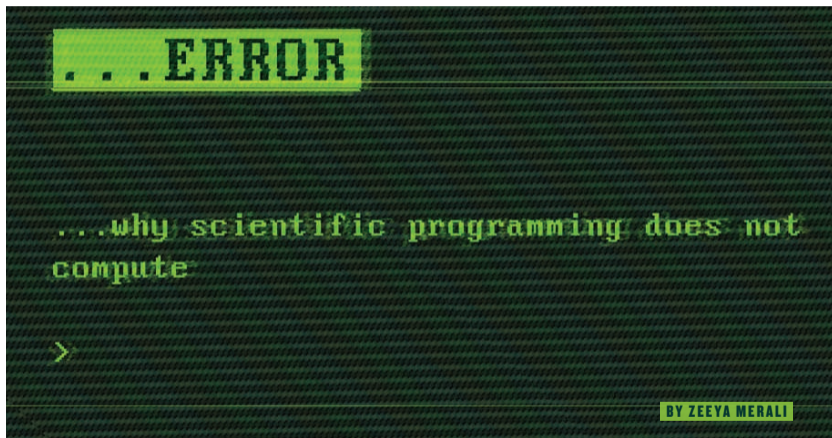
La bonne nouvelle :

- La reproductibilité computationnelle est automatisable.
- Des outils d'automatisation sont disponibles : [Nix](#), [Guix](#)

Reste à faire :

- Appliquer la technique aux logiciels et workflows de la recherche
- Former les ingénieurs et chercheurs

Un calcul reproductible peut être erroné !



Z. Merali, Nature **467**, 775 (2010)

3. Quel rôle pour la reproductibilité ?

L'industrialisation dans la recherche

Automatisation

- Ordinateurs et logiciels
- Instruments robotisés

→ **productivité**, **opacité épistémique**, spécialisation

Productisation

- Méthodes scientifiques → logiciels réutilisables
- Observations → données réutilisables

Relation producteurs – clients

Recherche fondamentale → recherche appliquée → développement industriel

L'industrialisation dans la recherche

Productivité

- la publication comme produit, la citation comme unité de valeur
- bibliométrie

Managérisme

- financement sur projet
- rapports d'activité
- évaluations

Décalage fondamental :

- Production industrielle : *top-down*
- Recherche : *bottom-up*

Comme pour un lave-linge ou une voiture !

- Modes d'emploi
- Cadre légal pour définir les responsabilités
- Autorités de réglementation
- Evaluation par des experts indépendants
- Labels de qualité, marques de certification

Une agence de certification

The image shows a screenshot of the cascada website. At the top, there is a navigation bar with the following links: News, What is a certification?, Why certifying?, How to certify?, Confidentiality, and Log In. The main content area features the cascada logo and the tagline "the first certification agency for scientific code & data". Below this, a paragraph states: "A cascada certification allows researchers to signal the reproducibility nature of their research to their peers". The background of the main content area is a large graphic consisting of a computer monitor displaying a histogram and a code editor window, with an open book and a green ribbon with "RRR" on it floating above it.

~~La science est la philosophie de la nature.~~

~~La science est une usine à connaissance.~~

La science est un bien commun.

1^{er} palier : accès libre aux **produits** de la recherche

- La reproductibilité est un label de qualité

2^{me} palier : participation plus large aux **processus** scientifique

- Le processus doit devenir transparent
- La reproductibilité est une preuve de transparence

- “La crise” a montré les risques créés par l’**industrialisation** de la science
- L’ **informatique** y joue un rôle important, comme le moteur de l’**automatisation**
- Un autre facteur majeur est la chasse à une **productivité** mal cadrée
- La recherche doit mieux gérer la **productisation**
- La **reproductibilité** joue(ra) le rôle de preuve de **qualité** et de **transparence**

The screenshot shows the FUN-MOOC website interface. At the top left is the FUN-MOOC logo. A search bar contains the text 'Recherche de cours'. To the right are buttons for 'INSCRIPTION', 'CONNEXION', 'Aide', and a language dropdown set to 'Français'. Below the navigation bar are tabs for 'Accueil', 'Actualités', 'Cours', 'GRADEO', 'Diplômes', and 'Etablissements'. The main content area has a breadcrumb trail: 'Vous êtes ici: Accueil > Cours > Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente'. Two red tags are present: 'Outils pour la recherche' and 'Numérique et technologie'. The course title is 'Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente' with reference 'Ref. 4706'. It lists 'Effort : 24 heures' and 'Rythme: Auto-rythmé'. A description states: 'Ce Mooc propose des principes méthodologiques pour une science ouverte et transparente. Il aborde de manière pratique la prise de notes, le document computationnel, la réplabilité des analyses.' A video player shows a scene with two people at a computer, with the title 'FUN-MOOC : Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente' overlaid. The video progress is at 00:15 / 01:50. On the right, the 'Inria' logo is shown with social media icons for Facebook, Twitter, LinkedIn, and Email. Below that, the 'Inscription' period is 'Du 10 janvier 2020 au 18 décembre 2022' and the 'Cours' period is 'Du 20 mars 2020 au 22 décembre 2022'. The language is 'Français'. A red button at the bottom right says 'Connectez-vous pour vous inscrire'.

FUN-MOOC

Recherche de cours

INSCRIPTION

CONNEXION

Aide

Français

Accueil Actualités Cours GRADEO Diplômes Etablissements

Vous êtes ici: Accueil > Cours > Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente

Outils pour la recherche Numérique et technologie

Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente

Ref. 4706

Effort : 24 heures Rythme: Auto-rythmé

Ce Mooc propose des principes méthodologiques pour une science ouverte et transparente. Il aborde de manière pratique la prise de notes, le document computationnel, la réplabilité des analyses.

Inria

f t in e

Inscription
Du 10 janvier 2020 au 18 décembre 2022

Cours
Du 20 mars 2020 au 22 décembre 2022

Langues
Français

Connectez-vous pour vous inscrire

france-universite-numerique

FUN-MOOC : Recherche reproductible : principes méthodologiques pour une science transparente

00:15 / 01:50

20/x6o2581