"Reproducible Research" mit Emacs' Org mode und R

Bernd Weiß

http://berndweiss.net bernd.weiss@uni-koeln.de

2012-07-06

Outline

Vorbemerkungen

Einleitung

Problem

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Vorbemerkungen

Einleitung
Problem
Emacs
Org mode
Babel: Active code in Org mode

Babel und R
Einführung
Tangling und weaving
Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Vorbemerkungen

- ► Bin fortgeschrittener Anfänger was Org angeht
- ▶ Vielen Dank an Carsten Dominik (von 2003 bis 2011 Hauptentwickler), Eric Schulte und Dan Davison (haben die "Babel-Funktionen" in Org Mode entwickelt)
- Alle Materialien (inkl. engl. Fassung der Folien) dieser Präsentation finden sich auf github: https://github.com/berndweiss/ps2012-07-KRUG_org_r.

Vorbemerkunger

Einleitung

Problen

Ora mode

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und F

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Vorbemerkunger

Einleitung

Problem

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Problem

- Das Verfassen eines empirischen (Forschungs-)Artikels
 - ▶ ist selten ein linearer Prozess.
 - ist außerdem mit dem Problem verbunden, dass die wissenschaftliche Gemeinschaft meinen Ausführungen vertrauen können muss. Doch wie schaffe ich dieses Vertrauen?
- Wir benötigen zum Verfassen eines Artikels also ein Tool, das
 - "dynamische Elemente" enthält. Wenn sich die Datengrundlage ändert, sorgen diese "dynamischen Elemente" dafür, dass etwa alle Tabellen oder Abbildungen erneuert werden.
 - vollständigen Zugang zum Analysecode ermöglicht und damit auch Replikationen (i.e. "reproducible research").

Literate programming und reproducible research

Literate programming (LP) Enhances traditional software development by embedding code in explanatory essays and encourages treating the act of development as one of communication with future maintainers.

Reproducible research (RR) Embeds executable code in research reports and publications, with the aim of allowing readers to re-run the analyses described.

(Source: Schulte et al. 2012: 3)

Existing tools

			Δ ΤΕΧ	HTML	
Tool	LP	RR	Export	Export	Language
Javadoc	partial	no	no	yes	Java
POD	partial	no	no	yes	Perl
Haskell	partial	no	yes	yes	Haskell
noweb	yes	no	yes	yes	any
cweb	yes	no	yes	yes	C/C++
Sweave	partial	yes	yes	yes	R
SASweave	partial	yes	yes	yes	R/SAS
Statweave	partial	yes	yes	yes	any
Scribble	yes	yes	yes	yes	scheme
Knitr	partial	yes	yes	yes	R
dexy	yes	yes	yes	yes	any
Org-mode	yes	yes	yes	yes	any

(Source: Schulte et al. 2012: 6, modified and updated)



Vorbemerkunger

Einleitung

Problei

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

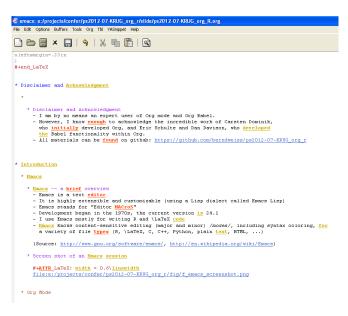
R und andere Sprachen (Python)

Emacs – ein kurzer Überblick

- Emacs ist a Texteditor
- Erweiterbar und an eigene Bedürfnisse anpassbar durch Emacs Lisp
- Emacs steht für "Editor MACroS"
- ► Entwicklung begann bereits in den 1970er Jahren, die aktuelle Version ist 24.1
- ▶ Ich nutze Emacs vor allem für R und LaTEX
- ► Emacs kennt sg. "content-sensitive" editing (major and minor) *modes* (u.a. für R, LaTEX, C, C++, Python, plain text, HTML, ...)

(Source: http://www.gnu.org/software/emacs/, http://en.wikipedia.org/wiki/Emacs)

Screen shot einer Emacs session



Vorbemerkunger

Einleitung

Problem

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Org mode

- Org ist ein "Emacs (major) mode for notes, planning, and authoring"
- ► Org files sind plain-text files
- ▶ Ich nutze Org für
 - technische Dokumentationen (Export nach PDF via pdfLaTeX or HTML) oder zur Erstellung von Folien
 - Organisation meines beruflichen und privaten Lebens (Verabredungen, Todo-Listen etc.)
 - ► Für meine persönliche Wissensdatenbank
 - **>** ...
- Mehr unter: http://www.orgmode.org (tutorials, videos, ...)

Ein Org-Beispiel (source file)

```
#+TITLE: Hello World!
2 #+AUTHOR: Martin Mosquito
3 #+DATE: <2012-07-06 Fr>
  \thispagestyle{empty}
6
  * Headline
7
    Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed
9
    diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna
    aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et
    justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no
    sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit.
    A list:
15
    - Item 1
    - Item 2
  ** Subsection
20
     Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr,
21
     sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore
     magna aliquyam erat, sed diam
24
     \begin{equation}
25
     26
     \end{equation}
27
                                             ◆□ ▶ ◆□ ▶ ◆ □ ▶ ◆ □ ◆ ♀ ○ ○
```

Ein Org-Beispiel (exported to PDF)

Hello World!

Martin Mosquito

2012-07-06

Contents

1

Headli	ine															1
1.1 St	ibsection															1

1 Headline

Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit.

A list:

- Item 1
- Item 2

1.1 Subsection

Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \epsilon$$
 (1)

Vorbemerkunger

Einleitung

Problem Emacs Org mod

Babel: Active code in Org mode

Babel und R
Einführung
Tangling und weaving
Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

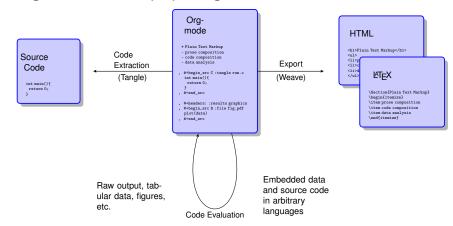
Babel: Active code in Org mode

Babel is about letting many different languages work together. Programming languages live in blocks inside natural language Org-mode documents. A piece of data may pass from a table to a Python code block, then maybe move on to an R code block, and finally end up embedded as a value in the middle of a paragraph or possibly pass through a gnuplot code block and end up as a plot embedded in the document.

(Source:

http://orgmode.org/worg/org-contrib/babel/intro.html)

Using code with(in) Org mode



Source: Schulte et al. (2012)

Vorbemerkunger

Einleitung

Problei

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung
Tangling und weaving
Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Vorbemerkunger

Einleitung

Probler

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R Einführung

Tangling und weaving Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Syntax eines Org-Code-Blocks

R code blocks I (exports code and results)

R code block This is a short sentence. This is another sentence. And, finally, here comes some R code: #+BEGIN_SRC R set.seed(1) x1 <- rnorm(100) mean(x1) x1.sd <- sd(x1) #+END_SRC #+RESULTS: : [1] 0.1088874

Evaluated and exported R code block

This is a short sentence. This is another sentence. And, finally, here comes some R code:

```
set.seed(1)
x1 <- rnorm(100)
mean(x1)
x1.sd <- sd(x1)
```

R code blocks II (exports only results)

R code block

```
This is a short sentence. Hey, there is another sentence. And, finally, here comes some R code:

#+BEGIN_SRC R :results output :exports results set.seed(1)
x1 <- rnorm(100)
mean(x1)
x1.sd <- sd(x1)
#+END_SRC

#+RESULTS:
: [1] 0.1088874
```

Evaluated and exported R code block

This is a short sentence. Hey, there is another sentence. And, finally, here comes some R code:

```
[1] 0.1088874
```



R inline code blocks (source)

```
Der Mittelwert von x ist src_R[:exports results :results raw]{round(mean(x1), 3)} und der SD beträgt src_R[:exports results :results raw]{round(x1.sd, 3)}. Vektor =x1= and =x1.sd= wurden auf der vorherigen Folie in einem separaten Code-Block definiert.
```

R inline code blocks (evaluated)

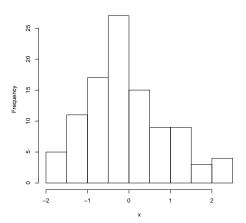
Der Mittelwert von x ist [1] 0.109 und der SD beträgt [1] 0.898. Vektor x1 and x1.sd wurden auf der vorherigen Folie in einem separaten Code-Block definiert.

Base graphics plot (source)

```
1:
    #+headers: :exports both
2:
    #+headers: :results graphics
3:
    #+headers: :file img.pdf
4: #+begin_src R
5: x < - rnorm(100)
6: hist(x)
7:
    #+end src
8:
9:
    #+RESULTS:
10: [[file:img.pdf]]
```

Base graphics plot (evaluated)

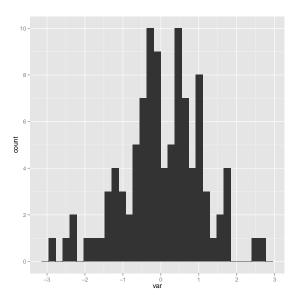
```
1 x <- rnorm(100)
2 hist(x, main = "")</pre>
```



ggplot2 plot (Org source)

```
#+headers: :exports results
2:
    #+headers: :results graphics
    #+headers: :file f_ggplot2_ex.pdf
3:
4:
    #+begin_src R
5: library(ggplot2)
6: x \leftarrow data.frame(var = rnorm(100))
    ggplot(aes(x = var), data = x)
7:
8:
           + geom_histogram()
9:
    #+end src
10:
11: #+RESULTS:
12: [[file:f_ggplot2_ex.pdf]]
```

ggplot2 plot (evaluated)



Vorbemerkungen

Einleitung

Probler

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführun

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Tangling and weaving code

- ► Weaving refers to the exportation of a mixed code/prose document to a format that can be read by a human (HTML, LaTeX, Ascii, ...).
- Tangling means to extract only the code to a separate file

(Source: Schulte et al. 2012: 12)

Beispiel für "code tangling"

```
#+BEGIN_SRC R :tangle ../src/example_tangled.R
## Comment: Assign value 1 to variable x
x <- 1
#+END_SRC</pre>
```

Beispiel (Fortsetzung): Tangled R code

Hier ist der Inhalt der Datei ../src/example_tangled.R

```
../src/example_tangled.R
## [[file:e:/projects/confer/ps2012-07-KRUG_org_r/slide/ps2012-0
## Comment: Assign value 1 to variable x
x < -1
## Example-of-code-tangling:2 ends here
```

Vorbemerkunger

Einleitung

Problem

Emacs

Org mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung
Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

Siehe hierfür pub/d_example.org and pub/d_example.pdf.

Vorbemerkunger

Einleitung Probler

Emaga

Ora mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

Chaining (source)

```
Define variable =y= in a Python code block:
2 #+name: chainexamp
#+begin_src python :results value :session *python*
  y = 10**4
5
6 #+end_src
8 #+RESULTS: chainexamp
  : 10000
10
  Then pass variable =y= to an R code block:
12
  #+BEGIN_SRC R :var x=chainexamp :session *R2*
13
14 print(x)
15 print(x*2)
16 #+END_SRC
18 #+ R.F.S.U.T.S :
19 : [1] 10000
20 : [1] 20000
```

Chaining (evaluated)

Define variable y in a Python code block:

```
y = 10**4
y = y
```

10000

Then pass variable y to an R code block:

```
print(x)
print(x*2)

[1] 10000
[1] 20000
```

Vorbemerkungen

Einleitung

FIODIEI

Ora mode

Babel: Active code in Org mode

Babel und R

Einführung

Tangling und weaving

Ein kurzes vollständiges Org-Beispiel

R und andere Sprachen (Python)

- Schulte, Eric, Dan Davison, Thomas Dye, und Carsten Dominik. 2012. A Multi-Language Computing Environment for Literate Programming and Reproducible Research. Journal of Statistical Software 46: 1–24.
- http://orgmode.org/worg/org-contrib/babel/how-touse-Org-Babel-for-R.html