Science Reproductible avec un grand **R**

Maxime Jaunatre
UMR AMURE | IFREMER
2022/03/17 (updated: 2022-03-04)

Objectif: bonnes pratiques en R

Background : Apprentissage de R pour l'écologie, traitements de données.

R est construit par et pour des statisticiens mais possède une grande communauté qui partage de plus en plus de "bonne pratiques". Plus proche du software engineering.

On ne va pas parler de stats aujourd'hui.

photo de moi sur le terrain

Reproductibilité?

Pouvoir reproduire une analyse, une figure ou des données efficacement!

Principe FAIR:

• Findable

• Interoperable

• Accessible

• Reusable



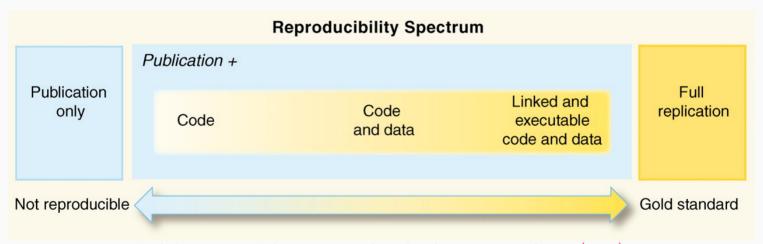


Figure : Peng. "Reproducible Research in Computational Science". In: Science (2011).

Findable 🔍

Un donnée ou une figure non liées au code qui l'a produit n'est pas reproductible.

L'emplacement du code doit être explicite. Le trouver ne doit pas être une aventure.

Cela passe par quelques conseils:

- Noms de scripts explicites.
 (on évite les noms comme test, test2)
- Structure de dossier, Compendium
- Disque réseau et/ou en ligne
- Dossier avec noms de projets (sans espaces et accents!)



• Logiciel de version control (git)

```
list.files()[1:4]
## [1] "CSU RepRo.html" "CSU RepRo.pdf" "CSU RepRo.Rmd" "CSU RepRo.Rproj"
```

Pourquoi utiliser un CVS?

Est-ce que vous avez déjà :

- Fait un changement de code et voulu revenir en arrière ?
- Perdu du code ou une sauvegarde trop ancienne?
- Voulu voir la difference entre 2 versions ?
- Voulu vérifier l'historique d'un script ?
- Voulu travailler sur un script a plusieurs?
- Voulu partager votre code à quelqu'un?
- Voulu tester une nouveauté sans modifier du code déjà utile ?

Si oui, et dans plein de cas, un système de version control aurait pu vous simplifier la vie.

Pourquoi utiliser un CVS?

"FINAL".doc



FINAL.doc!





FINAL_rev.2.doc



FINAL_rev.6.COMMENTS.doc



FINAL_rev.8.comments5. CORRECTIONS. doc







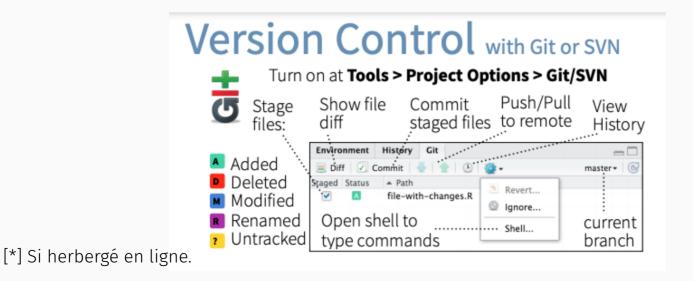


FINAL_rev.18.comments7. corrections9.MORE.30.doc

FINAL_rev.22.comments49. corrections.10.#@\$%WHYDID ICOMETOGRADSCHOOL????.doc

3 commandes à retenir : commit, push, and pull

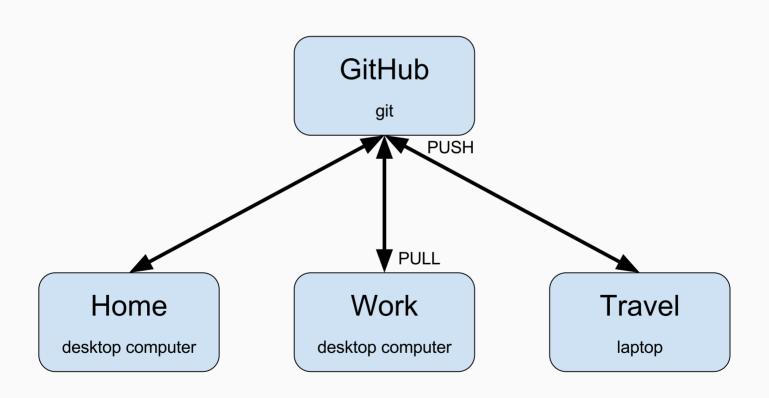
- pull: met a jour le projet local avec la dernière version du projet*
- commit: enregistre une snapshot du code à un certain point temporel. (permet d'associer du texte pour expliquer les modifications)
- push: met en commun les modifications locales avec le projet principal*

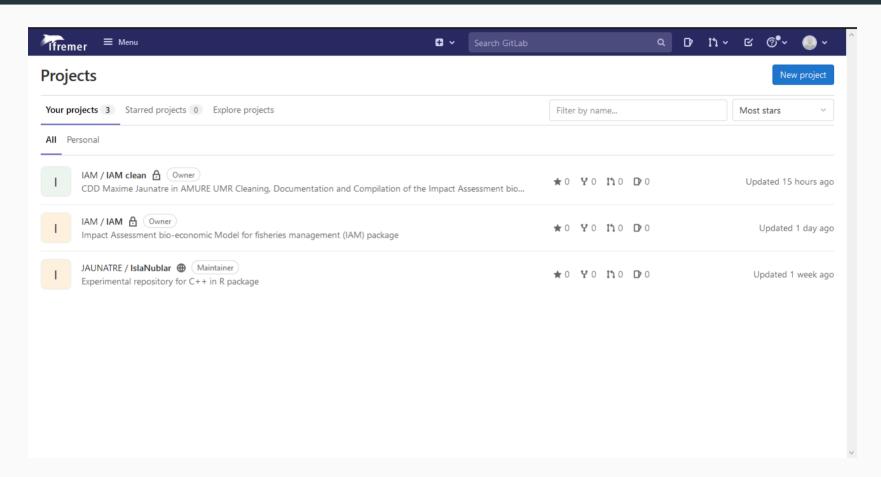


	COMMENT	DATE
Q	CREATED MAIN LOOP & TIMING CONTROL	14 HOURS AGO
φ	ENABLED CONFIG FILE PARSING	9 HOURS AGO
φ	MISC BUGFIXES	5 HOURS AGO
φ	CODE ADDITIONS/EDITS	4 HOURS AGO
Q.	MORE CODE	4 HOURS AGO
ΙÌ	HERE HAVE CODE	4 HOURS AGO
	AAAAAAA	3 HOURS AGO
φ .	ADKFJ5LKDFJ5DKLFJ	3 HOURS AGO
Ι¢	MY HANDS ARE TYPING WORDS	2 HOURS AGO
þ	HAAAAAAAANDS	2 HOURS AGO

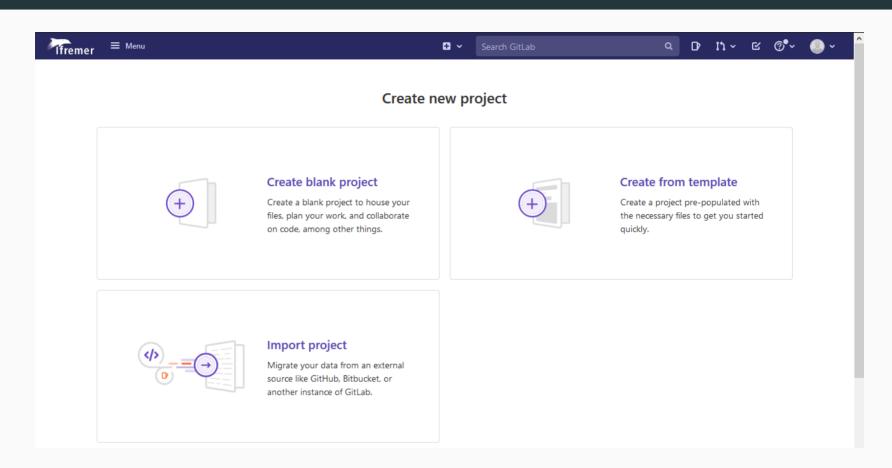
AS A PROJECT DRAGS ON, MY GIT COMMIT MESSAGES GET LESS AND LESS INFORMATIVE.

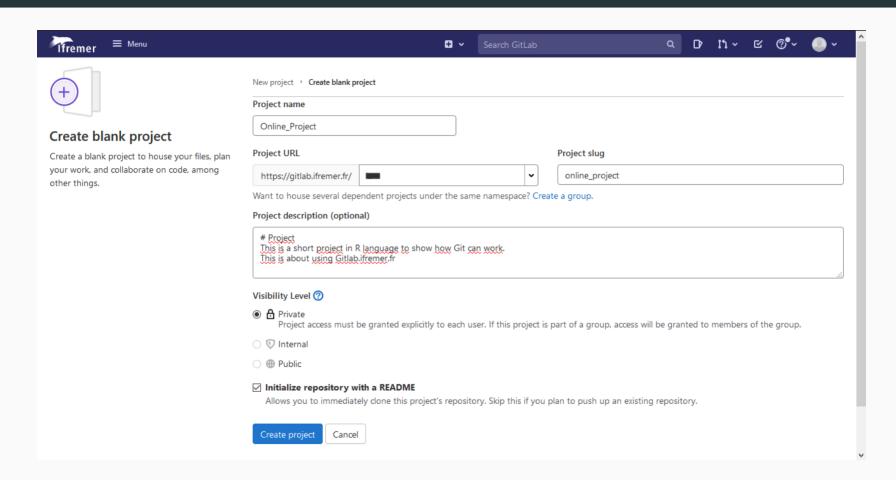
Sauvegarder en ligne?





Connection avec login extranet, possibilité de partager à des membres externes.





Ressources Git

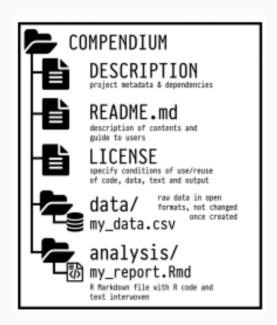
- Tutoriel ThinkR: R and Git
- Advance R 🗐, H. Wickham
- Happy Git and GitHub for the useR
- Git cheatsheet
- Quand ça part en vrille
- Réparer une erreur
- Créer une nouvelle branche avec git et merge des branches

THIS IS GIT. IT TRACKS COLLABORATIVE WORK ON PROJECTS THROUGH A BEAUTIFUL DISTRIBUTED GRAPH THEORY TREE MODEL. COOL. HOU DO WE USE IT? NO IDEA. JUST MEMORIZE THESE SHELL COMMANDS AND TYPE THEM TO SYNC UP. IF YOU GET ERRORS, SAVE YOUR WORK ELSEWHERE, DELETE THE PROJECT, AND DOUNLOAD A FRESH COPY.

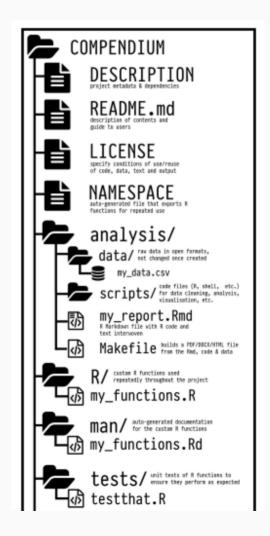
xkcd comics, CC BY-NC 2.5 license

COMPENDIUM 📦

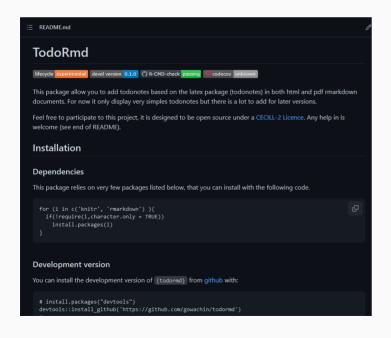
Structurer les dossiers en packages R.



Marwick et al. "Packaging Data Analytical Work Reproducibly Using R (and Friends)". In: *The American Statistician* (2017).



- README : entrée classique de documentation.
- Aide à l'installation et l'utilisation
- Pour ajouter à un projet : usethis :: use_readme_md()



• LICENCE: sans licence, un code est théoriquement inutilisable.

(MIT, GNU GPL, CC)

Dicte les droits d'utilisation, de copie, de modification d'un code.

Loi Numérique n°2016-1321 impose une licence libre pour tout logiciel produit avec des fonds publics.



A nuancer avec les questions de publications, de tutelles etc.

Projet = Package



DESCRIPTION :

```
Package: todormd
Type: Package
Title: Using todonotes in rmarkdown package
Version: 0.1.0
Authors@R: c(
    person('Maxime', 'Jaunatre',
    email = "maxime.jaunatre@yahoo.fr",
    role = c('aut', 'cre'))
Description: Personnal project number x
License: CeCILL-2
Encoding: UTF-8
Imports:
    knitr,
    rmarkdown
RoxygenNote: 7.1.1
Suggests:
    testthat ( ≥ 3.0.0)
```

NEWS.md: Fichier de suivis des mises à jour d'un projet.

Permet d'informer sur un changement majeur ou des nouveautés. Important d'avoir un cycle de version avec :

```
0.1.1 > 0.1.0
```

Why and how maintain a NEWS file for your R package?

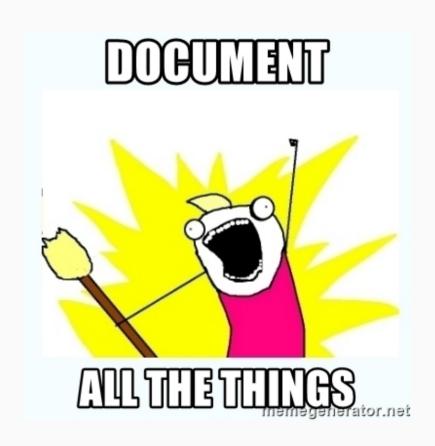
 Pour ajouter une dépendances au projet:

```
devtools::use_package("tidyr")
```

Documentation i

• Rédiger en amont ({Roxygen2})

```
#' half life
   compute half life percentage.
# '
   aparam period period in minute
   Oparam time time elapsed (min)
# '
  areturn percentage.
  @author M. Jaunatre <mail>
# "
  Dexamples
#' half_life(20, 20)
#' half life(20, 40)
# '
half_life ← function(period, time){
 return((1 - 2^(-time/period)) * 100)
```



Documentation i

Forme longue de documentation

- {Rmarkdown} ! Permet de mélanger texte (\mathbf{md} , $\mathbf{LT}_{\mathbf{F}}X$) et code \mathbf{R} .
- Vignettes pour les packages
- Rédaction d'articles -> {rticles}
- Diapos -> {xaringan}
- Livre -> {bookdown}
- Site web -> {pkgdown}



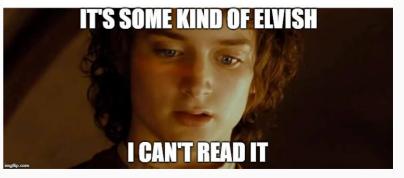
```
CSU RepRo - main - RStudio
 🛂 🗸 😘 💣 🗸 🚍 📑 📥 🧼 Go to file/function 📑 🔻 🔡 🔻 Addins 🔻
  ■ In selection ■ Match case ■ Whole word ■ Regex ✔ Wrap
         .pull-left[
         ## Documentation &#x2139:
          - Rédiger en amont (`{Roxygen2}`)
            `{r. echo = TRUE}
            @param period period in minute
@param time time elapsed (min)
    360 - half_life <- function(period, time){
          return((1 - 2^(-time/period)) * 100)
         .pull-right[
            `{r, out.width="100%"}
           .knitr::include_graphics("CSU_RepRo_files/figure-html/document-all-the-things.jpg")
```

Lisibilité

```
# Title ####
# Author, date, contact etc
# Description
## Depends ####
library(IAM)
# devtools::install github(
  "github.com/gowachin/todormd"
# )
# sources
sources("R/hello world.R")
# functions
foo ← function(){cat("Don't panic !")}
## Datasets ####
read.csv(file = "raw data/sole.csv")
## Edit Dataset ####
## Plots ####
  Export ####
```

- **DRY** (Don't Repeat Yourself)
- KISS (Keep it Simple, Stupid)
 plein de petits fichiers > script infini
- {cleanR}: nettoyer les lignes inutiles.
- {styleR}: reformate le code.

When you trying to look at the code you wrote a month ago



Lisibilité

```
Bad
                                       #
if(T){print(10)}
T ← FALSE
 mean \leftarrow function(x) sum(x)
if (y < 0 & debug)
   message("y is negative")
   stop("error for in y test")
function with many argument ("that", many
function with many argument(x = "that",
  many)
i = 0; y=12
```

```
Nice
if(TRUE){print(10)} # Full logical
testing ← FALSE # name conflict
use sum \leftarrow function(x) sum(x)
if (y < 0 & debug) {
  message("y is negative")
  stop("error for in v test")
} # Braces
function_with many argument(
  x = "that".
  y = many # name args
) # line limit = 80
x \leftarrow 5 \# arrow
i \leftarrow 0
y ←12
```

"Code needs a lot of whitspace. That is how it breathes." Roger Peng

Interopérable 🛭

Un projet ne doit pas dépendre de l'ordinateur qu'il utilise -> Portabilité

Cela signifie l'oublis de ces commandes maudites :

setwd("C:/home/maxime/Documents/Projet magnifique/mouette/analyse/bob/modèle/test/")

```
rm(list = ls()) # → Supprime uniquement les objects "utilisateurs"
                \# \to \text{Ne supprime pas des dépendances chargées.}
                # → Indique une sesssion R ouverte depuis 30 ans
                # → Vide l'environnement des copains qui veulent aider
                # → Participe à la disparition des bébés phoques
```

Si votre script possède ces lignes, **Jenny Bryan viendra bruler** votre ordinateur. 🤚



Solution? Utiliser les Projets Rstudio

A noter l'espace, et l'accent dans ce chemin!

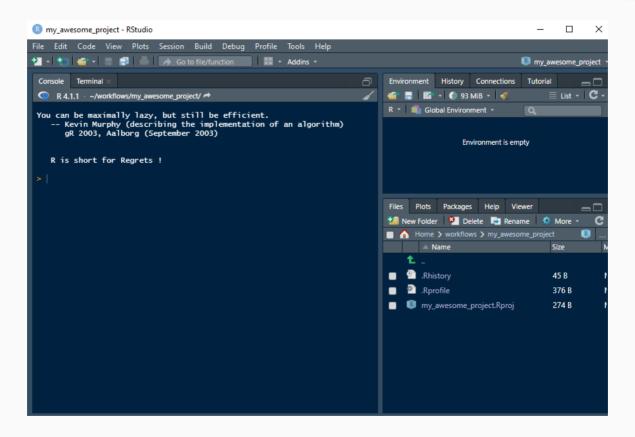
Interopérable 🏿

File \rightarrow New Project \rightarrow New Directory

New Project			
Back	Create New Project		
	Directory name:		
D	my_awesome_project		
	Create project as subdirectory o	f:	
T	~/Documents/workflows		Browse
	Create a git repository		
	Use packrat with this project		
✓ Open in new ses	ssion	Create Project	Cancel

Interopérable 🛭

Dans un project, tout les chemins sont basés sur la racine du projet (où ce situe .Rproj)



Désactiver la sauvegarde automatique!

Tools \rightarrow Global options \rightarrow General \rightarrow un-tick "always save history"

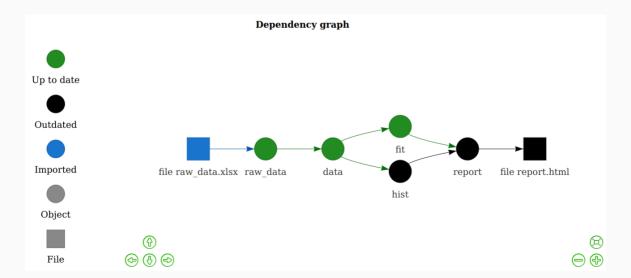
Reusable 🟗

Données

Un script ne doit dépendre que des données présentes dans son projet.

• Eviter les .RData ! Ce format de fichier montre que vos données sont trop complexes et que le script qui les produit n'est pas clair.

Seule exception : les données de type cache : permet de faire tourner les scripts plus facilement. Mais encore une fois des outils existent pour éviter cela comme {drake}, qui permet de refaire tourner que les parties modifiées ou dépendantes d'un script.



Reusable 🕦

Parfois les données sont complexes et non distribuables. Dans ce cas, prévoir le minimum pour montrer que le code marche.

2 1 1

• Avoir un **exemple** simplifié pour chaque script.

Exemple : ici la fonction prend un object en entrée...mais quel format doit-il avoir ?

```
rm_dups ← function(data){
  data ← data[! duplicated(data$x), ]
  data
}
```

```
df \leftarrow data.frame(x = c(0,1,1,0),
y = c(2,1,0,0))
rm_dups(df)
## x y
## 1 0 2
```

Fournir un exemple est un très bon début de documentation.

Exemple = niveau 0 du test!

Reusable 🟗

Test!

Nous testons tous nos codes à la main, et ça marche sur le coup...mais 2 semaines après ?

- Ecrire des tests unitaires qui font tourner le code tout seul.
 - -> Dossier test/
- usethis::use_testthat() charge
 automatiquement {testthat}







Reusable 🟗

Test!

Utiliser {usethis} pour simplifier la vie!

• usethis::use_test("add")

```
tests
— testthat
— test-add.R
— testthat.R
```

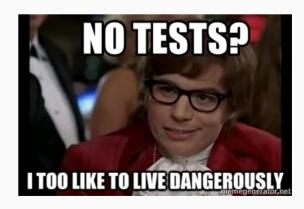
Rédiger des tests n'est jamais agréable mais sauve du temps plus tard.

Retour rapide lors de la modification du code + assurance de rien casser.

```
library(testthat)
add ← function(y,x){
    x+y
}

test_that("add works", {
    expect_equal(add(39, 3), 42)
})
```

Test passed



Trouver de l'aide pour R 🙏

RTFM*

- utiliser les aides help(sum) ou ?sum
- lire les **manuels** de packages ggplot2
- avoir les cheatsheet quelque part!

Stack overflow 3

Issue Github 😯

Communauté francophone de R:

• frrrenchies : list de doc fr

[*] Read The Fucking Manual.

Livres et blogs

- Advance R, Hadley Wickham
- Git et Rstudio, ThinkR
- Project-oriented workflow, Jenny Bryan

Conférences

- Code smells and feels, Jenny Bryan
- Toutes les conférences UseRs

• slack grrr: question, news, jobs...

Merci! Des questions ?



ajouter le lien vers les slides



Gowachin Sowachin



Slides created via the R package xaringan.