# 现代科研指北

## 目录

1 前言 7

2	现代	代科研		9			
	2.1	科学哲	<b>学</b> 沿	革	9		
	2.2	科学知	口识的	五个	层次	_	14
	2.3	知识体	(系的	时间	构建		15
3	科码	开现状	概览	٠	17		
	3.1	问题为	早向	Ī	17		
	3.2	专业性	上与结	合性	的矛	盾	19
	3.3	研究生	教育	的困	境	23	}
	3.4	毕业延	其期问	题	24	Ļ	
	3.5	博士的	就业	上问题		27	
	3.6	可重复	性危	机	28	3	

4 思维工具篇 37

4.1	科学思维	37	
4.2	模型思维	37	
4.3	统计思维	43	
4.4	最优化思维	43	}
4.5	估算法	43	
实验	₹ 45		
5.1	实验设计原	则	45
5.2	定性实验	51	
5.3	定量实验	51	
5.4	思想实验	51	
数据	医处理	53	
	<b>圣处理</b> 多重比较		
6.1		53	
6.1 6.2	多重比较	53 58	
6.1 6.2 6.3	多重比较 多重检验 贝叶斯统计	53 58	,
6.1 6.2 6.3 6.4	多重比较 多重检验 贝叶斯统计	53 58 68 70	,
6.1 6.2 6.3 6.4 6.5	多重比较 多重检验 贝叶斯统计 线性模型	53 58 68 70	}
6.1 6.2 6.3 6.4 6.5 6.6	多重比较 多重检验 贝叶斯统计 线性模型 模型 70	53 58 68 70	3
6.1 6.2 6.3 6.4 6.5 6.6 6.7	多重比较 多重检验 贝叶斯统计 线型 模型 70 可视化	53 58 68 70	}
6.1 6.2 6.3 6.4 6.5 6.6 6.7	多重比较多更性模型性性型型性型型的变形型的变形型的变形型的变形型的变形形式的变形形式的变形形式的变形形式的变	53 58 68 70 71 71	}
6.1 6.2 6.3 6.4 6.5 6.6 6.7 6.8 6.9	多多贝线模可重并比较验统型 化样计算 1000000000000000000000000000000000000	53 58 68 70 71 71 71	

7	文献 73		
	7.1 文献管理	73	
	7.2 信息收集	75	
	7.3 文献引用	76	
	7.4 文本挖掘	77	
	7.5 荟萃分析	77	
8	学术生活 "	79	
	8.1 项目管理	79	
	8.2 学术出版	79	
	8.3 学术会议	81	
	8.4 审稿 82		
	8.5 学术合作	82	
	8.6 讲课 83		
	8.7 课题组管理	85	
	8.8 学术评价	87	
	8.9 学术道德/作	<b>企理</b>	87
	8.10案例 87		
9	就业 89		
	9.1 简历 89		

9.2 邮件 89

9.3	面试	89	
9.4	工资	90	
9.5	高效反馈	7	90
	1-71		

9.6 领导力 91

9.7 职业规划 91

9.8 职业 91

### 附录:现代科研兵刃谱 93

文本编辑 93

文献管理 94

数据处理与绘图 95

数据同步 96

实验室管理 96

幻灯片制作 97

学术交流 97

数据分享 98

代码管理 98

## 1

## 前言

才疏学浅,不知何为真,仅通少错之法,故不敢言南,仅指北。或曰:现代科研挖坑/跳坑指南

### 现代科研

#### 2.1 科学哲学沿革

做科研一般都不讨论哲学,太多形而上的东西,说也说不清道也 道不明还无法证伪。但懂一点科学哲学还是很有必要的,不然很容 易研究着研究着就会觉得自己做的东西是垃圾,是谋生的工具,虽 然从某个角度看也没错,但科学哲学无疑是应对这种心态最好的老 鸭汤。

#### 2.1.1 古希腊

哲学是爱智慧这个梗就不多说了,扯古希腊也显得俗套,反正有了古希腊人才有了理性跟逻辑的提法。古希腊前面的历史可理解成经验性知识的发展,知识多了就要有规律总结出来,逻辑和理性可看作用来生成规律的知识。其实哲学就是认识世界的知识,泰勒斯有一套,毕达哥拉斯有一套,赫拉克里特有一套……大家能自圆其说就来一套,对不对另说,不服就辩论,赢了就是真理,输了就是谬误。如果说逻辑与理性出自于这些街头巷尾的辩论我一点也不会奇怪,因为两套理论对比,总得有两方都认可的法则才有结果,理性或许就是这种普遍性知识的产物。

不过辩论有诡辩这一说的,苏格拉底看不下去了就说你们这些人都觉得自己对,但有可能是不对的,反正我自知我无知(这句是我认可最有智慧含量的句子,还有一句:天下没有免费的午餐)。老苏不怎么关注解释万物,有点回归个人或社会的意思。到了柏拉图直接就理想国了,世界形物均为理型的影子。再到了亚里士多德就不怎么废话了,直接取消理型世界的存在,认为万物有因,这个因就是所有问题的因,寻找到最终因,真理就明了了。这货还不知道这个看法后来发展成第一推动问题,宗教界觉得只有全能的主有这能

耐,就把亚里士多德的理论吸引到宗教哲学里去了。

同时,我们现在所提到的科学源于日本,可理解为分类的知识,而最早对人类知识体系分类的就是亚里士多德。他还很神奇的将自己的目的论揉到这个分类里去了,所以这个体系很完整,能解释的东西很多,所以后来几百年大家就都用了这个体系。其实这时候科学知识更适合分到亚里士多德所谓的自然哲学这个科目里,这个科目特指自然现象的规律及探索方法。这里需要注明的是数学更多是工具,数学化不一定就代表科学,另一个需要注意的是逻辑学,这货的三段论十分精彩,以至于要不是后来哥德尔横空出世,任谁也动不了根基。

#### 2.1.2 中世纪

中世纪黑暗吗?如果看天气应该跟现在差不多,但这个黑暗的印 象大致源于天主教对知识的垄断,而知识也反过来服务宗教,而宗 教理性在一定程度上促进了我们对世界的认识,所以盲目对立宗教 跟科学没必要,很多前期知识都是不少富有宗教热情的理性人士总 结的。只不过知识很多种,科学在那年代连个独立的名字都没有,所 以你看,牛顿写本书叫《自然哲学的数学原理》,跟现代意义上的 科学没啥关系, 所以你管他信仰什么呢。这个时候, 科学知识跟形 而上学还是分不开, 很多知识有严谨的数学形式但你无法证实, 很 多天文学知识就这德行, 你去看看托勒密体系, 圆环套圆环的也能 解释现象, 那哥白尼的日心说为什么就流行了呢? 因为是真理? 因 为结构简单?还是因为他用了别人看不懂的语言写出来的?或者说 反对者死绝了新理论就流行了? 总之, 没有实证的理论的流行不会 是你想的那么简单, 但一般来说, 人们都喜欢简单且解释面广的理 论, 宗教也这样, 毕竟美的东西都是上帝赐予的。在科学这个提法 之前,用一套知识来解释世界是各代学者所向往的,才不管验证什 么的,理性重于事实。

#### 2.1.3 1500 年以后

时间点不太好找,但历史的发展是伴随知识的增长的。大航海时代为人类的知识提供了一个海量来源,文艺复兴带来了人性的解放,宗教改革让生活走出了政教合一,总之,经验开始比逻辑更为人接受。最开始是欧洲大陆的理性说与英国的经验论的争执,争论核心在知识的构建是从理性出发还是从经验出发,这两种观点打架几百年,到了19世纪末大家都不争了。因为实证主义一统江湖认为从经验中提取逻辑,然后再证实就OK了。这时候科学哲学才独立出来,

而观察式的经验也开始让位于实验式的事实, 人们不满足于被动接 受知识, 开始主动去寻找真相。

#### 2.1.4 逻辑实证主义

当人自己把握了主动权,原有的常识知识就要被逻辑重新检验, 而无法检验的就划到形而上学这一类里留给做宗教神学的人去讨论。 换言之, 从柏拉图开始的将现实世界与理想世界的区分被打破了, 原来的哲学家都醉心于构建理想世界而不关心现实生活, 而逻辑实 证主义则要求通过生活的事实来寻找真相。换句话,经验事实及逻 辑推理被结合用在真理的探索上了。而经验事实的崛起则伴随着归 纳法的崛起, 事实成为知识的唯一来源, 科学开始渗入并改造哲学 方法论、这一转变真正让科学有了真理探寻的光环、一举扫清神秘 主义与宗教束缚,直到今天还在深刻的影响着每一个科研工作者。

#### 2.1.5 否证主义

但不久大家发现不对头, 因为归纳法不如演绎法严格, 得到的结 论有局限性,不够严谨。这时候波普就说了,演绎法靠谱! 大家都 提假说,然后验证它,出现反例就把假说否了,不能否证就不科学, 这就是证伪。一时间大家都接受了,神马佛洛依德,历史唯物主义 都因为自治但不能证伪给踹出科学圈了。

不久又有人感觉不对了,一方面演绎法很难产生新知识,另一方 面貌似假说是无穷无尽了。证实比较费事,证伪容易但很多理论就 垮了。为了调和这个矛盾,否证主义给出的答案是演绎法虽不能产 生新知识,但假说的产生不是无缘无故的,而知识的进步应该通过 大胆猜想的确证与谨慎猜想的否证来完成,一个推翻的理论必然联 系着新理论的提出,这时不断发展的,而科学的任务就是处理讲步 问题而非回答真理问题。形而上学也并不完全被排斥了,因为假说 的提出有时就是没有事实证据的。进一步讲,波普尔将世界分成世 界 1, 也就是物理世界, 世界 2, 也就是精神世界, 然后又分了个世 界 3, 也就是客观知识世界。这种三分法其实是将柏拉图的理型世界 进化了,同时也留下了世界2的个人空间。每个世界都在进化,这 就是科学发展的轨迹。一口吃不成胖子,我们就去试错吧!猜想与 批判这一否证主义的核心思想也是当下科研中比较闪光与巧妙的实 验设计动机来源。

#### 2.1.6 历史主义

前面那些理论的提出者大都数理化出身,推理证明构建系统很在行,但没案例不成啊,得解释得了现象啊。其中一些人翻了翻了史书,发现很多发现不是通过证伪得到认可的,也不是建立在大量归纳的基础上,而是具有"历史性"。也就是逻辑不怎么灵光,然后他们就说咱以史为鉴吧! 拉卡托斯就搞出了个硬核软核的理论,大意说一个理论是有生命力的,硬核部分无须质疑,有保护带,一时半会死不了。需要缝缝补补的是外围软核,什么时候硬核也不行了,就退出历史舞台了。这个解释保全了科学理论体系,也就是堵了民科的路,要知道民科最喜欢证伪,一个错误就否了整体,现在拉卡托斯说不成,得慢慢来,有历史的。

不久又有人感觉不对了,我怎么知道现在的硬核到底对不对? 拉卡托斯这时就呵呵了,交给历史评价吧! 库恩在这个背景下提出了范式,他本身有较强的历史功底,手头案例多,所以有了科学共同体这个说法。大意就是一个时代的真理主流说了算,这伙人挂了而接任的更多采取了另一种解释现象更多的理论,那这个理论就上位了,就革命完成了。前面那个时期比较压抑就叫前科学,后面上位了就是常规科学。之后又有新现象解释不了了就有了危机,这时候新理论又出现了,再搞一次革命就 OK 了。范式是来区别前科学与常规科学的,范式通常是一套当前时代科学共同体所使用的理论体系,而这个理论体系要比之前的更能解释更多的问题也更严格。这理论比拉卡托斯那一套通俗易懂,那年代搞政治的一看有革命二字纷纷表示深有体会,大力推广之,所以范式着实火了好一段时间。

库恩的范式革命是格式塔式的转换,历史上一共也没发生几次,真正有益的是他对范式定义时要求要有自称科学的学科要有自己的理论体系与假设且对现实世界产生作用,这个理论自身并不要求科学家的态度是客观的,但范式自身要是客观的。这时候,大家都不愿搭理真理性这茬了,因为都清楚对错问题是历史性的。同时范式也把形而上学彻底请回到科学体系中了并认为对科学的发展是有益的,要知道波普尔虽然不拒斥形而上学但本质还是批判形而上学的。所以历史主义的强调使得真理相对化。

#### 2.1.7 无政府主义

事实上你沿着这个思路走下去发现貌似科学发展跟三国演义差不 多,不在于对不对而在于认可的多不多,有没有跟你闹革命的。当 然因为实证主义的余威,理性与逻辑在科学研究中是绕不开的。这 时候来了个更霸气的费耶阿本德,一拍桌子,科学跟别的知识没啥 区别,不能特殊对待。后来流传到世上的就是那句 anything goes, 很多人认为这货终结了科学哲学的发展。从 20 世纪初到六七十年代 这个学科就完蛋了, 这就是科学哲学的学科危机。

#### 2.1.8 实用主义

逻辑委实打不过历史,原来那些搞科学哲学研究的还没死就没饭 碗了, 生存是硬道理。他们发挥了科学共同体的作用, 把费耶阿本 德斥为异类、后现代。但他说的话又绕不过去,这时候蒯茵跳出来 说科学哲学还要发展,不能 anything goes,科学不科学总得有个标 准。美国人想来想去想到了有用两个字,然后大家纷纷鼓掌。理性, 历史都打不过生存这个命题。有用是硬道理,有用解释一切,然后 就没有然后了。

#### 2.1.9 其他

除此之外,由于逻辑讲求语义明确而严格,但要是日常交流用一 堆符号估计谁也受不了, 所以科学哲学也在语义学方面继续发展。 英国人的经验论也促进了新实验主义与主观贝叶斯学派的发展,慢 慢地科学哲学也开始接受一些非实在论的观点, 而科学实在论是穿 插在上述命题中的。

科学哲学从实证主义发展到今天,被各种新命题与发现折腾的够 呛,从里面提一个片段就可以看到很多,科学是什么?它跟哲学啥 关系?又对哲学发展有什么样的影响?总之,我们没有停下探索真 理的脚步,答案在哪里也毫无头绪,只要不满足于现状,知识就存 在进步的可能,同时须知人生苦短,自知无知是很重要的。

就科研本身而言,最开始属于观察现象然后总结规律的经验方式, 后来慢慢形成学科体系与知识框架来设计实验预测解释事实, 现在 其实更多是逻辑与经验的混合来解决科学问题。也就是说、学科知 识是基础, 但问题总出在前沿也就是知识覆盖不到或部分覆盖的地 方,经验论与唯理论的斗争时常出现,单纯看经验或者说观察与实 验会推动问题的解决,但有时候也推不动:很多规律不一定经得起 检验,还有很多规律需要的限定条件太多进而导致应用上矫枉过正, 还有些学科提出规律本身产生的反馈会导致规律失效...

#### 2.2 科学知识的五个层次

#### 2.2.1 背景组

高中毕业水平。不论你学的文还是理,知识一般侧重原理或事实本身,或者说学到的是通识,例如地球是圆的、力学有三大定律、元素周期表是按什么排的...这类知识其实就算老师不教,你看看《十万个为什么》什么的也大概能知道。

一般而言,科普主要面向知识背景是高中组的,因为绝大多数人不进行科研,就算进行科研其很多科学背景知识也是高中的,因为你大学可能学了某个学科,但另外的学科最理想也是停留在高中阶段。但这部分知识基本不用科普,或者说包含在更广泛的知识普及中就好了,需要思考推理的部分不多,主要是了解事实,形成背景概念。

#### 2.2.2 已知的已知组

大学毕业水平。主要指专业知识,例如 pm2.5 是怎么回事? 行星间距离如何测量?端粒长度跟寿命关系...这个是社会大多数人科学背景知识的上限,也是职业化的下限。如果继续深究,基本就是做这一行的才了解,需要经验。目前这个层次的科学知识几乎可以被维基百科覆盖。如果你本科是理工学科,那么拿到学士学位就表明你已经掌握了这部分内容。这部分知识一般有自己的学科框架跟体系,但学科间壁垒明显,如果知识是构建在经验上的那么很有可能被机器超越而失业。

#### 2.2.3 已知的未知组

这部分的知识是从已知走向未知,知识都是比较前沿的,很可能被后续结果推翻掉。所以这部分内容是需要不断研究的,但就研究思想层次看,其实即使一线科研工作者自己可能都比较迷糊,大部分人是站在前人基础上往前推进,前人的研究结论容易保存,但思想可能早就消散了。这阶段的知识因为开始走向应用所以学科间开始互通。科研人员的知识水平基本是这个层次的,知道前沿在哪里但还在探索。统计学也是这个阶段常用手段,但需要使用者理解方法本质,人工智能可作为研究方法但无法职业替代,因为探索性的思路还得人来启发。

#### 2.2.4 未知的已知组

这个类别文章侧重于整合已有知识进行创新得到的新知识,基本 上只有经验很丰富的人才能站到一定高度上理解一个学科。此时谈 思想谈逻辑之外要整合学科历史, 把发展沿革搞清楚。学科间知识 高度互通,只有有洞见的科研人员才能掌握,统计学或人工智能在 这个层次知识的失灵,只能摸着石头过河。

#### 2.2.5 未知的未知组

这个组就是天花板了,或者走向科幻了。不过我觉得哪怕是科幻 也是要读的、因为你可以体会其中思考的乐趣、当然知识背景设定 就不要管了。这个组需要你能构建出一个逻辑自治且符合现实的知 识理论体系,其实就是形而上的东西了。我不认为现实世界中可以 找出这样的人,但小说中是可以虚构出来的。

#### 2.3 知识体系的时间构建

除了基于已知未知这种简单的面向科研划分方法,个人知识还需 要一个时间与逻辑上的构建、这样可以自洽于其他非科研知识、毕 竟科研是有噪音边界的, 但知识却不一定有。

《四库全书》采用了经史子集的划分方法,内在逻辑是把经典的 普世价值、过往的经验事实、学科知识与个人文集进行了区分、这 样我们可以很容易找到知识的可靠性与归属。个人知识也可以分为 形而上的观点理论与形而下的事实经验来区分, 日常所见都是事实, 前人所见则为历史, 幻想与虚构的故事也是未来的存在, 所以一个 基础的形而下知识体系要有个人经验与历史,侧重对事实的准确描 述,而关于未来则可单独开列,因为这类事实并不存在但不妨碍有 思考的乐趣。至于形而上的东西、没必要确立经典、要按照逻辑自 洽的原则去整理,包括有证据有逻辑的强理论;有逻辑无证据或弱 证据的观点及个人经验; 如果仅有证据没有观点, 可移到形而下部 分; 仅有逻辑的理论是很危险的, 若是科幻小说还值得看, 否则不 要随意吸收、因为这部分有可能指导改变世界、但尚属于探索、如 果你不打算从政或成为企业家,可参考,但如果打算,就要考验个 人决策能力了。科学探索恰恰可能也在这个地方,所以得学会用从 观察与实验中提炼知识的能力、至于是否改变世界、那是你的自由。

简单说就是你可以创建一个笔记系统来整合你的知识: 形而下的 基础数据与案例库、历史沿革及信息检索方法与形而上的理论观点

库,区分强理论与弱理论并学会总结理论。要学会把新信息整合到 这个知识体系中去并持续整合,形成完整独立的知识库,这样就不 容易被新思想所迷惑,总能找到位置。

## 科研现状概览

#### 3.1 问题为导向

现代科研隶属于现代政治经济系统,满足社会的需求是其存在的 基础,至于是否满足个人兴趣爱好与远大理想,可认为是副产品。当 然,这是从社会层面说,具体到个人千差万别。

首先,我们要了解现代社会运行的基本模式,其中陌生人大尺度 分工协作是现代社会最突出的特色。社会,简单说就是一群人而不 是一个人生存的行为与知识模式集合。相比宗族或家庭为单位的原 始聚居,古代与近代社会的发展不断突破着人们行为与知识范围的 地理与血缘限制。

在原始聚居条件下,人们终生活动范围有限,语言隔阂等也限制了信息交流,好的生存模式很难传递到下一代或更远的地方,短暂的寿命基本都用在维持生存繁衍上了。当然,对原始部落的研究发现生活在其中的人并不比焦虑的现代人的快乐感受更少,但生活的自由度其实很有限(从另一方面讲,如果完全意识不到当今生活自由度可以改变其实也是一种内在幸福感,拥有更大自由度的人并不能完全体会到)。这种狩猎采集的原始聚居其实并不太需要共同的社会行为规则,但后来人们驯化了农作物与牲畜(其实很难讲谁驯化了谁,作物与牲畜也可能通过驯化更好的传播了基因),进而从流动走向了定居。

定居后的社会出现了更细致的分工,例如一个村落需要祭祀、防卫、生产、医疗等部门维持生存结构,这种分工有着自己的生命力,一旦产生会让整体受益,同时也会让这种结构加强。同样的,这种分工模式并不惟一,但如果两个定居的社会共同体产生利益矛盾,最后剩下来的总是一种更有利群体生存的模式,这个模式下的规则并无道德可言,或者说这就是社会道德的起源。这同时也是一个路径

依赖的过程,总会带有一些副产品,很多时候我们就是通过副产品来回溯过去。如同对进化过程的研究一致,使用幸存者就是最好的或最合理的逻辑是不恰当的,我们需要通过回溯来发现一些制度历史上的合理性与偶然性,逻辑自洽并不代表历史真相,这点对科研认识也是很重要的。然而,这个阶段的社会政治经济体制依然很大程度被自然条件所控制,多数规则要么偏向农业社会,要么偏向海洋经济,人类的视野逐渐开阔,但基于血缘与地域的多样化依然可以保留,直到更追求效率的技术与体制规则进一步交互作用,孕育出近代工业社会。

近代工业社会将分工与效率推向了极致,影响的范围从多个国家推广到了全球。伴随而来的就是一套基本抛弃血缘关系与多样性的陌生人交流法则,地理限制被信息技术与交通技术打破,所有国家都会遵循同样的工业标准,语言也尽可能一致,法律也会去遵循共通的法则。科学研究在这个过程中起了很重要的作用,而工业化也不断向科研提出需求,此时科学研究从精英们的兴趣爱好变成了巨大的财富来源,每一次技术革新都服务了社会,而几乎所有的社会经济体都会拿出资金支持科研。务实一点的国家或企业会对工程学优先发展,而对自然科学的支持则颇有情怀意味,毕竟一旦经济下滑,最先拿不到钱的都是基础科研等见效慢的学科。这种社会整体的功利主义自产生之时就展示了巨大的生命力,甚至不断影响了社会中个体的决策行为。

时至今日, 现代社会基本延续了工业社会对分工与效率的追求, 但维持文化多样性与个体-社会相互关系的思考不断涌现。现代社会 塑造了个体认知,个体认知却反过来反思现代社会的诸多问题例如 民族主义的崛起、环境保护、气候变化、社会隔离与歧视、机会公 平、人口老龄化、战争暴力、谣言传播、经济危机、金融危机、人 工智能等。这些问题的根源有相当比例是社会政治经济体制的构建 过程出现了漏洞,而今的科技发展把一些问题放大了,或者说这个 系统需要打补丁了。毋庸置疑, 科研对于现实问题的解决是一个靠 谱的选择,其他选择例如宗教、回归原始生活更多的是一种消极的 保守策略,选择那些方法并不会真的解决问题。这样如果给科研立 块大牌坊,我想最好的题词就是从方法论层面解决社会问题。换言 之,科研总是面向问题解决问题的一个社会分工,是一个职业,既不 神圣也不低俗,从事这个职业的人总在用科学方法论解决实际问题, 有时候也是揭示问题或为问题找一个解释。这个需求是根源,也就 是说如果你科研自认为做的不错但跟现实脱节,那么即使留在象牙 塔, 也会面临自我认同与社会认同不协调的困境, 需要你有额外的

资源平衡。一般来说,热点基础学科里悖论会比较多,热点应用学 科则是看实际问题。

放到经济视角下,这个职业也是有温饱小康问题的,也是一个利 益集团,需要人代表到国会或人大去抢财政的分配,还要跟不同学 科去抢所有的科研分配,充满了复杂的博弈过程,原来是陌生人之 间,以后可能会发展到人跟机器或规则之间。这个职业有光环,但 退却光环都是一个个为生计奔波劳碌的现代人, 当然, 不同人有着 不同的生计标准。

#### 3.2 专业性与综合性的矛盾

IT 领域有一种职业叫做全栈工程师,指那种运用多领域知识完成 产品的工作类型。最近发生的一些事让我越来越觉得科研领域也需 要类似的概念, 姑且就叫全栈科学家吧。

国内研究生培养的一个短板就是综合性不强,或者说科研民工, 走出自己专业就不太敢想了, 国外的研究生则对不懂的部分也有自 信,最终能攒出一个结果,而这个结果可能要同时用到电子工程、 材料、分析化学、机械及数据分析等多个方面的技术,即使没学过, 他们也会通过学校找到合作的人。反观国内, 研究生选课都很保守, 不是自己以后研究领域的东西不选或直接让导师选, 国外也会这样, 但真遇到需要跨学科解决的问题从导师到学生都会想办法而不是觉 得这东西不是我的领域就不研究了。打比方我设计一个算法,效果 不错,但问题是别人不会用,那么就应该把算法打包成函数甚至设 计一个简易图形界面让明白用途但不想理解算法的人用。但这个过 程就不能靠分工了,得有人全流程都明白并进行整合,这种综合性 有点类似工程师思维, 甲方是同行, 你得让同行解决实际问题而不 是看你炫技术。基础学科肯定是有发展空间的, 但目前基础学科要 解决的问题已经都很像工程问题了, 所以这类综合能力的问题化聚 焦是实验学科研究生很重要的竞争力, 痴迷于单一技术而看不到要 实际解决的科学问题培养的只能是专家而不是科学家。

很多人觉得大学负责通识教育与精英教育, 研究生要更多关注技 能培训成为所谓专家, 我觉得这可能是科研民工思想的源头。现状 可能却是通识教育与精英教育从来都不如技能培训有吸引力, 虽然 可能潜力更高,这导致培养出的专家视野总是有局限性,需要在团 队里合理配置才会提高解决问题的效率。例如想成为生物医药领域 pi 的研究生博后要在 10 年内搞出 8 篇一作才有戏, 而 H 指数预测 性很差, 业界可拿这个数据到学术圈挖人。越来越长时间的专家培

养是不可避免的趋势。

不过专家在团队里并不总是起正面效用,分工促进效率在面对可分解为具体步骤的行业或学科是好使的,但面对真实问题例如实验研究,实验者与数据处理者是不能脱节的。这里团队中指望两拨人放下成见平等交谈是很不现实的,因为占据理论高度的数据处理者或者说统计学家总会觉得做实验的是啥都不懂的。不过你不可能不湿鞋就过河,不了解实验具体操作就在那边对实验设计指指点点只会让实验者与统计学家的隔阂越来越大。所以我觉得解决实际问题需要培养全栈科学家,就是那种从采样到样品分析再到数据分析都有概念的科学家,即使以后实验可以外包也必须要进行所谓脏活的训练,数据科学家需要洗数据,全栈科学家可能连样品都要亲自采集,纸上谈兵绝对不行,养出一堆赵括天天跟你扯术语用的对不对完全就是浪费资源,全部开掉完全不影响进度,他们只是想通过凸显自己的专业性来找面子,根本就不打算解决问题。

现在的科研民工要有意识地训练自己成为全栈科学家,就算以后不做科研了,对实际问题解决的全流程理解也会让你很容易转行并与其他领域的人交流。更重要的是,这是所谓团队领导力的重要能力基础,几乎所有行业都对管理层培养有着基层轮岗的要求,公务员、医生、厨师、工程师还有律师等行业精英的训练过程都有着严格的全流程培训要求,搞空降或许会带来创新,但不了解步骤的空降几乎都是灾难。所以科研人员可以依赖专业人员,但心里要有问题解决的路线图与原理层的认识。不要过分依赖专家,他们都是为自己发声,只有你自己为你的项目负责,被专家牵着鼻子走对全栈科学家是一种耻辱,保证兼听则明就可以了。

专业的人喜欢谈差异与术语,解决问题的人更关注问题背后的共性。而统计学家也不要拿起实验设计不够随机与混杂因素工具变量啥的一堆术语去居高临下教育别人,这些问题要是都解决了一个 t 检验不就天下太平了,还需要统计学家做什么。扎根实际问题然后抽象出可测量的统计量,然后在模型中进行控制或考察,让结果具有可比性与重复性才是更重要的。我觉得统计学家不能固步自封,新技术一直在出现,新理念也一直在出现,自己不懂就去打击是很幼稚的行为。

虽然很多人批评文章数量不代表学科热度,但我觉得起码每篇论文都在解决一个科学问题,所以这里的比较就统一用文章数量。为了进一步简化评价,我们这里就用 pubmed 数据库作为例子,也就是说探索的是生物医药领域内不同研究领域的发展状况。方法也极为简单,就是关键词搜索。下面这个过程大家可以自行验证,其实

用 web of science 更合理,但考虑到需要有对应权限我就不展示了, 可自行探索。

首先先分析下具体的人。我自己追踪的学科内紧密相关研究一年 发文量不超过 100, 也就是一个周一两篇的样子。这个知识更新频率 应该是比较符合科研人员个体信息处理能力的。如果你关注的领域 非常热,发文量很高,那么大概率你也会自主把文献查新的量通过 关键词叠加来缩小到一周一两篇, 一季度甚至一年出现一小领域综 述的状态。而且这个量我觉得对大多数科研人员还是超载了,很多 研究人员的课题非常精细,一年内同行发文量个位数,全世界也就 几个课题组在做,那么此时应适当眼界放宽些,否则你的研究会被 视野限制住。

当一个关键词年同行发文数量超过一百时, 围绕这个关键词的全 国性年会就会召开,也可能会拥有自己的专业期刊与学会,小型国 际会议也可以组建了,例如纳米毒理学或持久性有机污染物。这个 状态下的学科要么快速发展, 要么快速衰退, 全球相关课题组数量 不会超过三位数,这类学科一年内如果频繁登上 CNS,那么很可能 进入指数增长期,但如果一年内一篇都没有,那消退也很快。如果 低于这个量, 那么关键词对应研究组可能还从属于某个大学科, 属 于大课题下的边缘课题,绝大多数退学的博士生都是挂在这类几乎 看不到发展希望的项目上了。顺带一提,国内的杰青级评选的候选 人至少要在国内是这个量级领域下的数一数二的人物,这样的领域 整体看大概 1000 个左右。

当年同行发文量超过两千时,千人级国际性会议就能开,开的不 错,行业内会出现多份期刊来吸纳不同层次的论文。而且我观察超 过一千后的研究领域很少有萎缩的,但这是第一个停滞点,很多领 域的规模上限就是两千。从人才角度看,国内在这个量级上数一数 二的人物都是院士级的。这样的关键词例如纳米银、生物医药里的 深度学习,这个量级如果能保持增长,那绝对会是学科热点,估计对 应从业人员超过一万了,这类学科基本都有产业化的课题做支撑了。

年同行发文量在两千到一万的学科是非常多的,这是通常意义上 的的科研 IP 例如代谢组学、精准医疗。这类研究你应该能从公众报 道到听到了,全球有四位数的课题组,基本每所综合类大学都有至 少一个人在从事相关研究。国家重点实验室基本都是在这个量级上 构建的,企业也会有研发团队,且这个量级的实际需求已经有行业 级支撑。

超过一万的关键词都可以称得上前沿或热点学科并且已经有能力 渗透到其他学科了,例如纳米颗粒、基因组学、分析化学、睡眠、衰 老等。每天科技新闻都会有相关报道,是 CNS 的常客。相关创业公司会受到科技类风投的重点关注。然而这里会遇到第二个停滞点,实际上这个量级的研究已经是此消彼长的发文量了,相互之间会有学科级资源分配问题,在国家层面会出政策来扶植这个量级学科的成长,当然如果财政有限,拿来支持的资源必然是其他学科抽的。这个级别是可能萎缩的,例如同位素研究在上世纪六七十年代曾经超过一万,但现在稳定在四五千的体量,这就是撞了停滞点了。

然而,还有一些顶级 IP。生物医药科研里的顶级 IP 是细胞,最近三年年发文量稳定在不到 27 万的样子。然后是癌症,这个关键词最近三年基本稳定在 17 万。研究血液的在 15 年达到顶峰,发文量 14 万。脑类相关研究在 17 年见顶,不到 8 万的发文量。另一种热点疾病的是心脑血管疾病,在 16 年达到顶峰,大概不到 7 万的年发文量。有两点体会:

- 顶级 IP 一般要发文量超过 5 万, 但似乎不会超过 30 万
- 很多顶级 IP 在 14 年之后停止了增长,或者稳定,或者干脆下降

这些顶级 IP 而且几乎每一个都有一堆下属子学科,子学科的国际会议都能达到几千人级别。这些关键词几乎都配备国家实验室或研究所,数量每个国家也就十几个。这类学科已经不是渗透其他学科发展了,更多是引导性发展,这个领域出现的方法学进步会直接超越其他领域,也能吸引到很多超精英,带动整体进步。诺奖应该就是这个量级关键词上的进步的后果。

不过顶级 IP 在 14 年后的相对停滞是个值得关注的现象,我怀疑单一关键词存在一个体系上的发文上限,可能是经费、可能是人口、可能是整体教育水平、可能是技术限制、可能是资源相对竞争、也可能是难度。总之,数据就在那里,值得思考的东西很多。

这里我简单分个级(按幽游白书的分级方法):

- S 级年同行发文量超过 5 万的关键词领域, 疑似有停滞点
- A 级年同行发文量 1 万到 5 万的关键词领域,有停滞点
- B 级年同行发文量 2 千到 1 万的关键词领域,有停滞点
- C 级年同行发文量 100 到 2 千的关键词领域
- D级及以下年同行发文量 100 以下的关键词领域

这个应该就是科研人员的天梯系统了,研究在 D 级,关注到 C 级的研究动态,参与 B 级领域的会议,蹭 A 级的热点,然后远远看下 S 级开心就好。通过这种简单但可能不靠谱的分析,科研人员应该可以实现一个对自己的清楚定位,然后合理规划自己的视野,防止见树木不见森林,也防止迷失在过大的森林里。现在教学与技术

手段已经足够发达了, 培养一个全栈科学家可能并不比培养一个专 家更困难。上世纪科研界花费了大量精力去构建术语体系与专业学 科的墙,这个世纪我们该尝试打破这些意义不大的墙去解决一些复 杂而现实的问题了。

#### 3.3 研究生教育的困境

2018年国内研究生入学考试报名人数刷了新高,达到200多万, 而这里面应届占一半多一些,报录比在缓慢降低。有一个很有意思 的现象,报考研究生的人数并不是一直上升的,事实上,2007年、 2013 年都出现过报考高峰然后下一年回落的情况,回落可能跟当时 经济形势上行有关, 当社会岗位需求旺盛时, 二三年的学位投资就 可能是一笔很高的机会成本。但2016年起,研究生入学考试报名人 数重新上升,这侧面体现了毕业生对就业的担忧。而且往届生与应 届生报录人数同时增长,说明毕业生普遍认为学位比工作更有价值, 或者说本科就业形势不佳。

我们再看看高考,中国高考报名人数在 07-09 这三年都突破了千 万,此后人数稳定在九百四五十万的样子,录取则是在 2016 年达到 巅峰的 705 万。对比高考录取人数与研究生录取人数就会发现高校 中本科生规模已经见顶, 但研究生规模持续增长, 录取难度整体下 降可能也是吸引考生报名的重要因素。

可以预计如果研究生持续扩招(推测 2020 年见顶), 搞考研培训、 出国培训、期刊校稿还有高校教职将出现最后的快速发展窗口、之 后将进入稳定或衰落期。然而,这之前我们体会更明显的则会是更 多关于研究生团体的讨论与新闻调查, 我们的研究生教育发展可能 还跟不上研究生团体扩大的速度,中间的差距是一头典型灰犀牛, 潜伏巨大系统性危机。

从学生角度看,眼下的研究生报考热潮跟经济压力有关而跟科研 兴趣没啥关系, 所以很有可能出现学生自认打工仔的情况而在混日 子等就业的情况, 高校或研究所的心理辅导如果跟不上会出不少极 端问题。从导师角度看,上个10年的高校扩张吸收了大量新导师, 而持续增加的劳动力所需要的管理经验基本都比较欠缺、毕竟他们 读研时周围没那么多学生, 研究生无指导或指导过激情况会不断出 现。我们会在近几年看到一系列因为研究生极端事件而采取的改进, 但能否做到预防,就看高校研究所的领导团队是否有意识了。

研究生身份更像是一个容器,容器里面的是22-30岁的年轻人, 都有着明确的导师学生关系,这个容器越大,微弱的声音就更可能 汇聚成大的声响。这个群体的心理健康连同与之紧密相关的导师的 心理健康都非常重要,这里面研究生群体是弱势群体,很多研究生 对情绪调整可以说毫无头绪,这是成长的烦恼,但高校的象牙塔属 性与导师制并不保证健康成长。社会里公司可以靠成熟持久的制度 职场教做人,导师学生关系却永远只会是二到八年的临时身份,显 然后者出问题概率更高。导师靠自觉来解决问题也并不容易,可以 借鉴的经验基本就是个人成长经历,这玩意多半是个邻居孩子的故 事,励志还行,并不能捕捉体会到当下研究生的真实感受。资源、机 会、奖惩、社会整体就业压力都面临公平效率间的平衡管理,偏巧 这玩意在日益侧重研究的高校研究所里是不教的。师生交流不畅会 成为今后研究生教育问题重要来源。

读研的虽然是人口少数,但这部分人口掌握了相当的网络话语权。显而易见,未来几年我们社会里最有时间在网上发言的大学生研究生群体会持续走高,我们应该会看到更多对这个群体的讨论与新闻。事实上,千禧一代在制造话题上从来都是行家,他们伴随互联网技术崛起而成长,他们普遍教育程度的走高对整个社会,特别是舆论引导会产生巨大影响。如果你去回顾下这些年社会新闻的焦点,基本都能找到千禧一代的身影。他们在中国人口基数中比例很高,裹挟了上一个婴儿潮作为父母,可以说对很多经济形态例如网红经济、知识付费、新零售、消费升级、租房市场等提供了消费需求。他们的消费与网络话语权决定了新兴市场会听取他们的态度而不是大多数人的态度,而新闻媒体从来都是求新的。现代社会本质上就是知识精英的社会,因为现代社会的大厦只能通过各类专门知识来管理,单纯资本或人口不解决问题。

这是一个浪潮,浪潮的下一端是人口结构的变化,千禧一代可能 是世界范围内最后的婴儿潮。眼下发生在非洲东南亚的那一拨可能 有人口红利,但没有互联网同步发展的技术红利,如果不出现类似 互联网的普惠技术,很多发展中国家事实上或者说政治上不存在多 大的发展空间。所有问题都可能是时代问题,这几年有,下几年就 没了,但身处时代之中的人往往是最容易看不到问题的。

#### 3.4 毕业延期问题

根据最近 20 年研究生招生情况可以看出,研究生人数比例研究 所跟高校比例大概在 1:3,硕士的扩招力度是远高于博士的,但两者 都在扩,20 年前一共 6 万多,现在仅博士每年录取就有 7 万多,硕 士则扩张了 10 倍有余,达到每年六七十万的录取人数。从研究生毕 业状况看,伴随扩招,每年招生人数与毕业人数有相当的差距,但 比较吊诡的是博士招生在增长而毕业人数却趋稳了,这基本暗示延 期,特别是博士延期的常态化。从在读人数上看,研究生这个临时 身份群体在不断扩大,这造成了前文所述的研究生导师矛盾的激化, 除了扩招影响,另一个自然就是前面提到的延期问题。

从教育部公布的数据推算,基本上博士延期概率超过50%,硕士 延期概率是个位数,也就是说"没有延期毕业的硕士,没有按期毕业 的博士"这句话没毛病,而且延期超过50%的时间已经超过10年 了。同时另一个现象也值得关注,那就是女性研究生的延期概率是 普遍低于平均水平的, 那么对应的男性研究生延期概率会更加惨不 忍睹。

如果我们用在校生去除当年毕业生,会得到一个预估的毕业年限, 结果显示博士需要6年多毕业而硕士也需要3年多毕业,硕士那个 考虑到延期概率不高还可以接受,博士那个就有点反人类了,而且 从近几年情况看这个毕业年限还在增加。其实答案很简单,就是扩 招导致的人口在高校或研究机构的滞留,那么如何去除这个影响呢? 考虑到博士硕士其实应该是2-4年内毕业,我们只要用当年录取的 人数去对比 2-4 年后毕业的人数就可以了。考虑到博士毕业率应该 低于硕士且硕士毕业率不应该超过100%,应该是3年毕业的数据 比较可信,这里我们会发现3年毕业率要远高于延期概率,这又是 怎么回事?

这里就没数据支持了,但我想大多数研究生都听过硕博连读这个 概念,其实如果三年毕业为真,那么硕博加起来应该是6年,而硕 博连读应该是5年,如果博士延期是常态化的,那么我想这里面很 大一部分比例是硕博连读。估计再过几年, 考博的比率可能会更低 而硕博 6 年将成为默认的学习年限。有打算硕士毕业出国读博的可 以考虑下了,年限上其实吃亏不多而且国外会有老板没钱了逼着早 点毕业的情况。

刚才说了研究生毕业的供给端,下面看看需求端也就是教职的变 化。国内教职因为 99 年开始的扩招导致在 21 世纪的第一个 5 年大 量的扩展教职,这样的后果就是有一个5年的教职年龄高峰,这个 高峰占据了大量的教职。从数据上看,目前这个高峰年龄段在 51-55 岁,都算是当打之年,如果退休年龄没有明显推迟的话,那么在 10-15 年后应该可以看到一个因为退休高峰导致的教职空缺期。那么 10 到 15 年后谁博士毕业呢? 大概是现在读中学的孩子。其实考虑 硕博 6 年加本科 4 年,每个高校都有义务在学生刚接触高等教育或 研究时给他们领先当前技术 10 年的教材与方法, 否则学生 10 年前

选了小灵通网络优化专业、博士毕业基本就只有转行了。

这里再看下性别问题,数据显示女性教职前期扩张的要更厉害,平均年龄也更低,大概要 20 年左右才能迎来退休高峰的教职空缺,如果校方固定当前男女比,那么其实对有更低概率延期的女性并没有什么优势。

教职中教授的年龄分布状况也很有意思,结果显示教授平均年龄会大一点,当前教授主流是51-55岁,反推下基本是刚改革开放后上的大学,经历应该挺丰富的。我们再看下副教授的情况。可以看出副教授整体要比教授年轻10岁,大概90年前后上大学,46-50岁这个年龄段人数基本稳定,说明升教授基本就是前一个年龄段,从年龄分布上看35-45岁人多,不同代际间竞争会激烈些。

前面着重强调年龄分布可能带来的教职空缺,另一种空缺就是所谓扩张期或窗口期,我们不考虑退休,从年龄分布上看这一部分的人数似乎比较稳定。每年的教职数一直在提高,而是似乎斜率比较稳定。但是女性的教职数增长的回归斜率只有总数的 1/3,也就是说每增长 3 个教职才会有一个是女性的,这说明教职市场存在一定的性别歧视。但这个问题不好直接下结论,因为辛普森悖论也是同样的语境。同时,教授与副教授教职增长的斜率低于总体,暗示了教职里存在的层级结构。总之,目前还算是一个稳定的窗口期,教职数不断增长,属于利好;但成长空间不算大,别忘了博士毕业生可是年年增长,所以以后熬年限是肯定不行的,31-35 岁的副教授人数逐年下降,不是升迁(概率低)就是收紧了要求转而直接从海外引进人才,诸君努力吧。

我们都知道研究生学历在贬值,那么究竟贬到什么状况了呢?我 计算了同年毕业的博士与硕士人数比例,很明显,硕士的贬值效果 更强,博士相比之下反而在升值,女博士升值更高。当然,大前提 是五十步笑百步,你懂的。基本的情况就是1个博士大概对应10个 硕士,显然硕士作为一个学位扩的有点太猛了。后面的分析就不考 虑硕士找教职了,基本没戏。

新增教职数这些年基本稳定在 2 万这个水平,博士毕业生大概超过 5 万,也就是说教职市场在今后可预期的时间里撑死也就能解决一半博士的就业,另外有一半肯定会转行。考虑到博士学位对硕士学位是升值的,估计非教职市场上应该挺容易就业的,当然看你干不干了。新教职里女性比例是低于人口比例的,但这二十年却一直在增长,同样在增长的则是博士毕业生中女性的比例,伴随这个趋势,教职里对女性的歧视似乎是要好于社会其他行业的。

#### 3.5 博士的就业问题

2015年全国博士毕业生5.4万人,而去年大概到了6万人,按照 很多人的说法,读到博士就应该去做学术,但我对这个问题做了一 个费米估计,结果比较有意思,列出来供各位打算做学术的博士参 考。

如果成为院士(中国科学院/中国工程院)算学术巅峰的话,那 么院士的选拔可以看作到达顶峰的路径。选拔方法是什么呢? 两年 一次,一次总共大概 150 人,工程科学对半分,平均一年 75 人。

我们假定若干年后每年还是 75 人, 因为两院院士总规模这么些 年并未有很大规模的变化,就算加上文科一级教授也就是 100 这个 数量级。

那么若干年后竞争这个数的人选平均看大概都是同年级的博士同 学。目前每年全国土鳖博士毕业生6万多人,算上海归,同一年龄 组大概 7 万人应该比较合理。

那么你看到了, 你需要在同年级博士毕业生里成为千分之一左右 的精英才算有希望成为院士级别的学者。这个似乎有点丧气,可能 院士这个比较难搞,那么准院士的杰青呢?全国每年选拔 200 人为 杰青,那么成功概率乐观估计是千分之三,杰青其实也很难了,我 们再放宽到优青。全国每年选拔 400 人为优青,那么乐观估计成功 几率大概是千分之五。即使我们大胆认为博士有一半不从事科研工 作,几率翻倍成为优青也要是百里挑一。

也许你会说优青杰青比较遥远,那么教授或者正高不算遥远了吧, 毕竟每个博士背后都有一个博导。那么全国博导能有多少呢、乐观 估计 6 万, 年龄分布从 35 岁到 65 岁, 如果是均匀分布的话且保证 65 岁退休, 那么每年能产生出 2 千正高岗位, 除以当年大约 7 万的 博士人数,这个比例不到百分之三。就算我把那些做学术但不培养 博士的岗位算上,这个比例也不会超过5%。硕士毕业生15年大概 50 万,说明副高大概最多也就这个数,每年也就 1-2 万岗位,也就 是说大概 20% 的博士最终能走到副高, 其实这个比例也不算高, 不 过可以作为大多数人可以预想的目标。

你可能会说做学术要有一定理想,不能这么功利,说这话的有相 当比例站着说话不腰疼。如果你已经走到教授研究员这个档次自然 可以跟人谈理想,但坦白说现在的博导平均拿到学位都是 20 年前 的事了,那个时候博士一年毕业7千多人,而现在博士毕业生数目 翻了 10 倍,换句话在目前的晋升条件下你成为教授的概率大概是 50%,如果有一半不做学术,几乎可以肯定就是教授了。10年前一 年博士毕业人数大概是现在的一半多,这意味着其晋升教授可能性也有十分之一,尚算合理。但 10 年后如果博士年毕业生达到 10 万,那么其成为教授将跟现在成为优青差不多难度,代际不平衡是十分严重的。不了解基础状况就把人往坑里带的后果挺严重的,自上而下,金字塔顶端人数就那么多,一味扩大底端几乎意味着大量博士要陷入无尽的博后循环之中去拉伸等级。

所以其实我挺理解很多劝博士毕业转行的看法的,那怕你手握博士学位,目前在国内想走到教授也是个 p<0.05 的事,大概 20 个人里有一个。考虑到一般博士同学同院系大概也就是 20 个人,如果学术水平不在前面,基本可以重新考虑下人生规划了,因为此时你选择科研就真的需要兴趣激发了,不然身边的落差会折磨你几十年。而且上面的估计有个严重的问题,那就是大量使用了均匀分布,但真实的情况却是极不均匀分布,你的师承关系跟毕业院校都会把这个分布搞得更加极端,而且后发者优势在科研里面非常常见,但前面的坑都满了你怎么让后发者上?

同时要注意,国内博士毕业生人数还在不断上升,一方面说明教职还是有空间的,另一方面则暗示了今后博士毕业生生存环境将会更加恶劣,竞争会更加激烈。同时,目前教职数目会逐渐趋稳,如果你没赶上新学科新方向的窗口期大爆发,基本就是始终要接纳这个竞争强度了,只会更强不会更弱。而且有些研究方向必然因为学科发展走向没落,没必要跟一伙老气横秋的人抱团取暖,该转方向就转,反正大家都没基础。

读博转行可能也是个好事,早点把青春奉献到知识洼地去才更能实现自己的价值,相比学术界科研,业界科研可能是一个很好的选择,毕竟能磕下博士学位,搞点别的也应该没啥问题。这个问题我们会在第八章详细讨论。

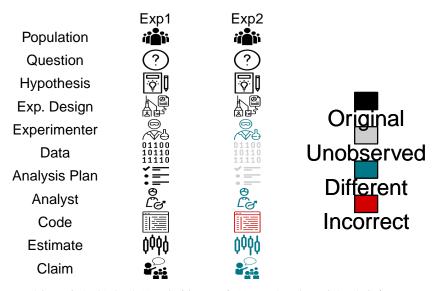
同时,如果选择了科研道路也要知道上面的概率,当不成分子也可以先做分母,心态上说服自己静下心来做科研就 OK 了,乐在其中则何乐不为?切不可惶惶不可终日,空费时光。

#### 3.6 可重复性危机

实验结果的可重复性研究不是个新鲜概念,上个世纪就开始有讨论了,最早是心理学,现在已经蔓延到多个学科。但可重复性研究的流程其实比想象的要复杂,完整的可重复性研究包含多个步骤,例如人群可重复性、科学问题是否一致、假设是否一致、实验设计是否一致、实验人员是否一致、数据分析流程是否一致、代码是否可

公开、推断的合理性与结论是否一致。新闻里常说的可重复性不好 主要是最后一项结论的差异, 但整体流程的任何一个环节都可能出 问题。

```
library(scifigure)
exps <- init_experiments(2)</pre>
exps[c("analysis_plan", "data"), 2] <- "unobserved"</pre>
exps[c("experimenter", "analyst", "estimate", "claim"), 2] <- "different"</pre>
exps["code", 2] <- "incorrect"</pre>
hide_stages = NULL
sci_figure(exps)
```



可重复性危机是当前科研领域里最大的问题,这里我们从空假设 显著性检验 (NHST) 这一核心开始聊一下。NHST 更常见的形式是 p 值, 也就是在空假设成立的条件下某事件发生的概率。p 值有多流 行呢? 根据 Jeff Leek 的估计,如果把 p 值当成一篇文献,那么其被 引次数已经超过300万次了,当之无愧的史上被引次数之王,甩第 二名一个数量级。原因其实很简单, p 值已经渗透到几乎所有学科 的研究中了,特别是实验学科。可想而知,如果产生 p 值的 NHST 出了问题其影响力有多大。

如果一个假设对另一个假设来说很稀少, NHST 会在很低的条件 概率下拒绝掉,然后那些稀少的事情在 NHST 里就成了无法被检验 的事情。这个例子最早是 Cohen 提出用来说明人们在使用 NHST 时的问题。空假设是某人是美国人, 备择假设是非美国人。我们知 道某人是国会议员的概率是百万分之二, 空假设里很难发生, 备 择假设里无法发生。空假设我们拒绝了某人是美国人,那么根据

NHST,他不是美国人。但问题是议员一定要是美国人,在此类问题里,NHST 永远无法认定稀有事件,也就是功效永远不足,并会给出错误答案。稀有事件总会发生,NHST 总会把此类事件当成显著,即使不那么稀有,例如小概率事件如果发生了,我们就可以拒绝了。本质上是多数人在使用 p 值时搞混了条件概率,拿上面美国国会议员的例子来说,我们的假设 H0 在面对张三这个数据 D 时给出了拒绝 p(H0|D)=0,这个决定是构建在假设 H0 成立时出现 D 的概率太低(即 p(D|H0) 之上,也就是说 NHST 下,我们默认下面的概率是成立的:

$$p(D|H_0) = p(H_0|D)$$

如果你修过任何基础的统计学课程都会知道这两个概率之间差了一 个贝叶斯公式。通过使用贝叶斯定理,在新数据出现后原有概率是 要被更新而不是直接拒绝掉的。p 值给的是前者, 要想知道随机生成 的概率,需要知道空假设是真的的概率。通俗点说就是 NHST 属于 革命派,不认可就打倒你; 贝叶斯属于改良派,用新的证据更新原 有理论。这个悖论的本质就是把假设下的事实与事实下的假设搞混 导致的, 这是 NHST 的一个致命问题。然而致命问题可不止这一个。 过去的 100 年, 测量方法的精度是在不断提高的, 而精度其实又 会影响研究结果,很不幸,也是通过 NHST 来进行的。其实 NHST 在实验物理学里用的还是好好的,例如我去检测一个物理量,只有 数据出现在其理论预测下数值四五个标准差以外才会对理论产生实 质作用。此时,测量精度越高,由于测量误差导致的对原有理论的 冲击就会越少,因为物理学的预测性要比化学生物等学科要好不少 且此时 NHST 检测的原有理论是比较真实的。但在其他学科、特 别是心理学跟医学的控制实验里,在实验开始前你几乎就可以确定 空假设是不成立的,要不然你也没必要分组,此时你去搞 NHST, 几乎一定可以找到差异,此时测量精度如果不断上升,那么你会识 别到一系列差异, 但这些差异的效果是无法体现在 p 值里的, p 值 可能非常小, 但效应却属于明显但很微弱, 这样的结果也许可以发 表,但对实际问题的解决几乎没有贡献。更极端的情况是如果你加 大了样本量来提高统计功效,你总是能发现差异的,也就是你的空 假设里原有学科理论为真也是会被方法学进步给推翻的。总结下就 是 Meehl 在 60 年代就提出的悖论: 方法学的进步与增大样本数对 于相对硬(理论根基深厚)的学科证伪是正面的,但对相对软(理 论比较模糊)的学科则是弱化。方法学悖论的根基其实是应用学科 与基础学科的矛盾,基础学科用 NHST 检验观察事实中的理论,但 应用学科用 NHST 来检验的是实验设计预测下的事实,此时实验设

计的那个假设与 NHST 的空假设并不对应,而 NHST 先天弱化空 假设的问题就凸显了。

事实上, p 值正在成为测量投资与努力而不是事实的标准, 给定 差异,我们总能找到足够的样本来发现这个差异(这也就是常说的 功效分析)。也就是说,NHST 有时候功效不足测不到差异,有时候 又一定会能测出差异,但科学事实并不会因为你使用了 NHST 而发 生变化,特别是有意义的变化。而作为标准的 p 值其实在被样本数 决定同时又综合了测定效果强度与不确定性, 这样的一个标准其实 有点多余, 你完全可以用描述性统计与置信区间来分别表示效果强 度与不确定性。p 值也并不能增加新知识, 考虑一个多元线性模型, 我们只能在多元模型里得到参数,也就是有限检验,不能发现未知 参数,但科学就是寻找未知;变量间的关系在数值改变后如何考察, 正负关系如何预测,预测性也就无法实现。那么此时还有必要使用 NHST 吗?

20 世纪的技术有了意义深远的进步,但更现实的问题是,科研里 低垂果实已经没有了, 学科从分立走向交叉, 服务社会职能的出现 要求科学家回答的不再是科学问题而是现实问题,或者说,科学地 回答现实问题。但现实问题非常复杂,科学家要想排除影响,大都 采用控制实验与随机化来验证观察研究中的事实。注意,这里的事 实不再是理论假设,而是一个现象,如果本来就观察到了差异,用 NHST 根本就不会让我们知道更多的事实,我们可以用无数独立手 段证明这个事实的存在然后整合进学科知识体系, 但并不能产生更 多的思考, 理论的预测效能在 NHST 里实际是体现不出来的。而预 测效果不显著在 NHST 里还不能说明效果不存在,到这里 NHST 基本就成了鸡肋。p 值还被少数人认为结果的可重复性, 但重复性是 统计功效的函数, 跟 p 值无关, p 值不能传达真实与否的信息。统 计功效很重要, 跟样本数关系大当样本数增大时, 空检验总会被拒 绝,因此当空假设为感兴趣的理论时,样本数与准确性会提高理论 强度,但空假设不存在时,样本数与准确性提高只会弱化理论。此 外, p 值控制只考虑假阳性而不是假阴性, 所以对假阴性有要求的 实验也要慎重使用 p 值。

那么我们的控制实验里对无关因素的平衡与随机如何呢?显然, 平衡掉不随机的部分需要你事先知道这部分是什么,很遗憾,目前 科研特别是基于观察的研究并不能事先知道,有时候就是想发现这 些不知道自己不知道的东西。这种情况下基于 p 值或空假设的假设 检验其实是不应该用的, 打个比方, 你发现观测数据中 A 基因与甲 疾病相关,但究竟是不是 A 基因引发甲疾病还是需要用控制变量来 验证的,很有可能 A 基因与甲疾病同样被 B 基因调控,但你根本就没测 B 基因,所以研究本身就是不完整的。

那么通过组学技术知道的不知道的我一起去测不就完整了吗? 也 不是, 当你测量数量增加时, 假设检验的个数也增加了, 此时你的 p 值阈值如果是 0.05, 那么 10000 个测量变量中会有 500 个即使随 机测定都会出现差异的基因。去年有人建议把 p 值阈值设到 0.005, 但 p 值这个问题, 重要的不是把 0.05 降到 0.005, 通用阈值这个想 法太偷懒, 应该让研究人员充分理解 p 值实际意义与使用方法, 毕 竟在有些研究领域控制错误发现率后阈值实际比 0.005低得多,改 变阈值只是把需要核实的数量减少了,虽然这也有一定意义。举个 例子, 10000 个基因中有一个是真实的, 你测定后按照 0.05 发现了 501 个,按照 0.005 发现了 51 个,也就是说需要验证的数量减少了。 但真实研究中, 你会遇到 0.05 发现了 501 个但 0.005 只发现了 50 个的情况,真实差异由于效应量或造成的差异量不够大而被你的决 策方法给漏掉了。甚至也会出现 0.05 发现了 480 个而 0.005 只发现 了 48 个的情况。也就是说, 当你观察的问题效应不大时, p 值有可 能不管怎么调整都无法发现。这个锅不在 p 值, 在于你要研究的效 应效应太低而你用了不恰当的研究方法与假设来检验这个现象。这 类效应大小问题就是 type M 型错误,只要你假设检验很多,这个问 题就很难规避。

同时, 当你进行条件控制时, 其实又掉到了高维诅咒的坑里。打 比方我做了一组实验, 最后发现某种药在 A 条件 B 参数面对 C 人 群中 D 年龄分组里是有效的。那么问题来了,假设 ABCD 全是互 斥的二元变量,那么我这个结果实际上是做了 $2^4 = 16$ 次对比得到 了一次显著性结果。然而,如果我们采用 p 值,那么 16 次随机假 设检验里出现一次 p 值小于 0.05 的概率是  $1-(1-0.05)^{16}=0.56$ , 也就是说这个结果在完全随机状态下也有一半可能发生。那么这个 结论是否可靠呢? 其实跟 p 值没关系, 最终是跟样本量挂钩, 如果 你的满足条件的目标样本很大,那这个结果很可能就是对的。相反, 如果这个结果是来自于小样本,虽然根据多元模型是显著的,但具 体到这个条件下其实就几个样本,此时结果就不能算靠谱。探索性 数据分析通常会面对这个无穷假设困境, 当你不断引入协变量后, 维度的增加导致样本实际是稀疏欠拟合的,最后看到现象可能就是 假象。发现的价值在这里也不依赖 p 值,依赖效果大小与参数,进 一步依赖样本量。不过条件控制中也要考虑因果关系,否则单纯增 加特征值可能并不好提高模型的性能。高维诅咒实际还连着多重比 较的坑, 多次比较后 p 值是可以校正后继续用的, 不过这里套的坑 是无穷假设,也就是说当你比较的次数多时,有效应也看不出来了, 这就要求对数据本身的结构有深入了解。当前在错误率控制上也有 很多校正方法, 当然也是对 p 值的校正, 所以批评声从来也没断过。

现在只能相信强结论,也就是说无论你用哪种统计方法去进行检 验,这个现象都是客观存在的,不会因为决策方法的变化而出现结 论差异。不过这个提法现在看还是太理想了,因为强结论真的很强 或显而易见,属于科研里低垂的果实,前人都摘的差不多了。如果 一个现象足够强, p 值一定会发现, 贝叶斯方法也一定会发现, 此时 不存在效应大小问题。但更多的事实或规律是埋藏在当前认为的随 机或噪音之中的, 我们的分析水平也就刚刚好能把疑似信号与噪音 进行区分,而这个区分是否靠谱则完全成了迷,统计学在这里帮不 上忙,技术进步倒成了关键。我看到一些研究寄希望于数据挖掘技 术解决学科内现象发现问题,这里我只能说对于显而易见但被忽视 的现象是有帮助的,但对于高噪音数据,降低测量噪音对结论的帮 助要远大于遴选能发现差异统计方法的努力。数据迷信会让你看到 伪规律, 而测量技术进步才会真的发现价值规律。

NHST 的另一个问题在于其本身表示不了效应的方向。p 值经常 是双边概率取中间那一部分, 所以当你看到一个很小的 p 值时, 你 并不知道这个效应的方向是更大还是更小, 此时你还是需要去看效 应值。在这个情况下,如果报导 p 值不报道效应,那么就好比我告 诉你明天要变天但又不告诉你变成什么一样毫无意义。在多数实验 设计中,变化几乎是一定存在的,例如我敲掉了某个基因去验证功 能,基因的变化与功能肯定有区别,大都来源于观察实验,更有意义 的是影响大小,这个大小更多需要专业判断而不是简单的 p 值。如 果理科学生学了半天最后就知道用 p 值来判断结论, 那么这个学位 不给也罢。这类搞不清楚效应方向的问题是 type S 型错误,验证性 实验特别需要注意。

NHST 还有个问题在于 p 值的选择性报道或者说发表歧视,研究 人员通常会尝试大量的实验条件组合但发表的论文里只有那些有显 著性的结果,这导致了科研文献不科学反应研究现状。这不一定意味 着结果是错的,如果这个实验条件具有广泛的数据支持而不是仅仅 来自于模型推断的选择性报道,那么我们只能说推理上不严谨。不 过,从这里我们可以看出,依赖 p 值来判断结果是存在问题的,而 不使用 p 值, 很多研究结果实际是无法简单报道的。然而, 大量选 择性报道可能出现一个副作用,论文的讨论很多是依赖引文,如果 引文结果不靠谱,那么后续研究只有同样采用了选择性报道才能继 续跟进发表,最后形成一种确认偏误,这情况比想象的要常见。甚

至在系统综述过程中,对确认偏误的忽略可能通过结论影响决策者,那就成了一种自我实现。应对 p 值的选择性报道的方法就是公开实验完整的记录或探索性数据分析的流程,这样后来者的验证会更有针对性。而且,进行综述的科学家可以通过数据的二次分析与整合来凸显那些本来由于样本量不够而忽略的现象。

另外一种隐性 p 值选择性报道是通过模型选择来实现的,不同的统计模型会产生不同的假设检验结果,研究人员通常只会报道那些有阳性结果的统计模型。这个非常难识别,因为统计模型通常比较复杂且研究人员有可能是先上船后买票,也就是先发现这个模型结果有利然后根据模型组织文章。这里面会牵扯到探索性数据分析与论证的差异,如果研究人员把新模型当成了文章亮点,那读者是完全看不出来这里面的不恰当行为的。此时还是要依赖数据公开,如果大家都能下载到数据,标准化后然后同时跑多个模型,只有共存结果才有可能可靠。不过,这里面的问题在于多个模型的假设是不一样的,只有符合数据本身统计特征的模型才能被加入到评价体系里。

关于 NHST 虽然问题一大把,但系统去看,p 值也有着自己的生命力,我想更多人关心的是如果我不用 NHST ,拿什么证明我的结果可靠?如果没得选,这剂毒药还是得吃啊。答案其实上面都大概提到了,你如果坚持使用 p 值,那么就也请同时报告参数估计与置信区间,虽然这个方法也被人喷过。如果你打算完全开一条新路,那就去学贝叶斯统计,贝叶斯统计有自己成套的处理体系,简单说就是先假设参数分布,然后用数据更新分布,后验分布计算出来就同时有点估计跟方差估计,同时多重比较问题也不存在,但随机错误无法避免,此时参数估计方差大也能体现,后续研究可以使用这次的后验数据作为下次先验数据,这样你可以实现完全的 N + 1 模式科研,其验证与预测性也很大程度依赖采样与模拟技术,之前贝叶斯方法不能流行很重要的一个原因就在于计算比较贵,现在就便宜很多了。

NHST 其实是科研可重复性危机的核心,但科学家的人性也不可忽视。科学本身是构建在错误校正过程上的,但科学家评价却是人性化的,良好的评价很多时候成了科学家追求的标的。不论是对影响因子的追求还是学术明星的打造,非科学的评价与评优其实影响到了科研结果的报道。科学家正在作为一个团体来维护自己的利益与社会地位,其副作用就是对失败的低容忍度,年龄限制与成果限制使得探索必须要符合效率原则,很多年轻人在年富力强的时候做了大量排列组合而非探索性的工作来确保个人的生存无虞,这样造

成的损失目前我们无法衡量。随之伴生的学术不规范、不端与造假 则是层出不穷,很多人开始利用一些规则上的漏洞来实现非科研目 的,例如审稿流程与评优。科学家的形象要由团体的文化来体现,阳 光底下没有新鲜事,除了开放获取的研究成果,研究整体流程也应 该实现透明化,这样可以很大程度防止暗箱操作。

所谓流程透明, 指的是从基金申请到修改到进度报告到结题报告 到文章的投稿接受与后续跟进研究及评优都要有公开的记录可以查 询,文书都要经过版本控制方便返溯,所有研究人员都要实名负责 对应的项目。学术团体接受公众舆论监督与同行监督,日常学术交 流也要有公开的记录与反馈机制, 所有的记录不直接对外公开但接 受实名查询并留存查询记录。这样透明化的流程可以保证学术团体 除了发表论文之外还有其他的结果展示途径,进而避免实验结果的 选择性汇报与资源的过度集中。打破自我包装与人脉对科研的束缚, 让结果更直白地展示给所有人。此外,关于可重复性, nature 就近 年来的科研可重复性危机采访了五组科学家、分别从认知、NHST、 FDR、数据共享与范式转化的角度进行了论述,值得一读。在医疗 领域也有了一些有意思的讨论, 例如认为基于人群的归纳式诊断会 被个性化精准医疗所替代,此时可重复性里内含的平均律就会被彻 底颠覆,分子水平的因果逻辑可能成为未来的主要知识探索方向。 预印本、开放获取与审稿、科研社交媒体及数据共享等新趋势也孕 育着新的问题解决方法。

这次的危机能不能解决?什么时候解决?现在谁也不知道,但了 解问题是解决问题的第一步,而路还很长。

# 思维工具篇

# 4.1 科学思维

#### 4.1.1 规律的失效

科学靠谱很大程度是规律性进行的保障,规律保证了可预测性,但其实很多规律恰恰说明在很多地方没有规律。

- 4.1.2 哈森奇效应
- 4.1.3 观察研究的敌人-反馈

# 4.2 模型思维

模型思维是一种一对多的思维方法,从相似的事实中提炼出逻辑规律,用规律来指导认知世界,这种思维的优势在于逻辑或者说理性起决策主导参考作用。当一个模型出错时,我们可以运用其他模型来研究某个事实,因为所有的模型都存在简化,所以知道模型越多越有利于理解世界里发生的事。模型都有自己的准确度与适用范围,一般而言,高准确度的模型适用范围比较精确且会形式化为公式,而低准确度模型类似万金油,无所不包但含义模糊。模型化思考是首先抽离出变量,然后确定变量间关系,最后运用逻辑推理来进行思考的过程。模型终点可能是循环的、平衡的、随机的与不确定的,要用概率角度而不是决定论去看结果。

模型主要有两种,一种是基于公式的,另一种则是基于单元的仿真模型,前者需要你清楚的了解模型机理,后者则需要假定单元的活动空间与行为方式,然后通过模型运转来了解整体变化。

#### 4.2.1 可编程

可编程是计算机科学的核心概念,当一件事可编程时,我们就可以设计出相对的硬件与软件来自动化这个过程。对于科研人员,硬件方面一般较少涉及,软件编程却是日趋日常化。因此,我们有必要了解编程语言的一些基本概念与思想。

程序是编程的结果,一般包含一条或一组执行运算的指令,这里运算并不仅仅指数学运算,也包括所有可通过电子电路完成的运算。要实现一次运算,我们至少需要输入值、运算与输出值。运算至少要能实现数值运算、顺序执行、条件执行与循环。因此,如果你打算进行编程,你就需要通过计算机语言让计算机知道输入输出与运算过程。

计算机语言不同于日常交流的自然语言(虽然可以处理自然语言),其核心特质在于描述上的准确性。不论操作符、数据类型还是函数定义,不同的计算机语言都有自己的规范来确保人要求的抽象化与机器能听懂人的要求之间达到平衡。底层语言例如汇编语言机器非常容易懂,但人不容易将需求转化为汇编语言。高级语言需要编译成底层语言来执行,不过人相对容易将需求进行编程。这个编译过程会损失效率,所以一般学习的语言越容易,效率与准确性往往会受影响。

科研里一般用程序来处理数据,所以科研编程的语言选择往往是实现效率、处理方法与编程难度的平衡。一般来说,数据处理方法源于统计学知识,编程难度取决于学科现实问题的抽象模型而实现效率属于纯计算机科学问题,科研人员可根据自己知识背景进行选择。对于非计算机科学专业的科研人员,建议关注学科内主流编程语言,否则后期会有很多交流上的困难,或者一步到位实现程序的应用化、让用户在少量编程知识的背景下就可以应用。

学习编程语言一般首先要掌握变量类型、赋值、表达式语法、保留词、注释等基本概念,然后就是大量的交互式案例训练来熟悉用法。编程语言一般会自带 REPL (Read-Eval-Print Loop; 读取-执行-打印循环)程序,在这个程序下会识别该编程语言的语法与操作符,互动地输入输出数据与结果。在编写程序代码时,最基础的要求是搞清楚编程语言的优先级,例如括号 > 指数 > 乘除法 > 加减法,一般执行顺序是从左到右。

另一种使用编程语言的方式是通过独立程序实现特定功能来完成的,运行程序可以直接得到输出,人机互动是在应用层上的。REPL方式其实比较符合数据分析的需求,后一种方式则反映了软件工程,涉及了程序的设计、构架与封装。目前科研应用中侧重交互式数据

分析而业界则更看重程序编写与功能实现、前者存在试错且探索为 主,后者则更侧重目标。这个区别专业程序员或软件工程师经常体 会不到, 觉得用 REPL 的科研数据分析是初学者, 不能算编程。但 其实科研数据分析的核心就是计算与需求的互动, REPL 只是其中 一种,将需求从 REPL 过度成程序也是很重要。

也就是说,交互式与独立程序之间往往还有一个中间态,可以是 脚本,也可以是自定义函数。一段代码一般是以输入为始,以输出为 终,中间有函数来处理数据。在固定模式的数据处理中,一个函数 的输出往往可以是另一个函数的输入,将输入输出代码按顺序、条 件、循环排好就可以产生一个新的组合函数。事实上很多高级语言 就在逻辑上抽象出一些常用函数来方便程序员直接调用。

同时,为了实现具体的功能,函数的输入除了数据外还有一些参 数,有些是经验值,有些则可能要来自于功能本身定义。在输出上, 有些函数的输出可以返回数值,有的可能就是打印到屏幕上就结束 了,根据实际需求来。此外,多数语言的函数内部变量是只在内部 可生产或可调用的,内部没有就可能从当前环境里找,最好不要设 计这样的程序。函数或脚本对数据分析最大的意义在于减少重复工 作与理清分析思路,对于软件工程则属于搭建工程部件,无论如何 都是件功在当代利在千秋的事。

如果程序设计有问题,编程语言也会有对应 debug 的过程,大多 数情况下是编程者的需求与机器的执行不对应导致,可以从这里入 手思考修改代码。常见的错误包括但不限于语法错误、语义错误与 例外。

下面重点讨论下编程思维中一些常见现象与术语,侧重理解并最 好通过联系来强化理解。

- 条件分支:函数中出现需要对数据子分类进行不同运算时的设计, 不同子分类用不同条件语句进行逻辑判断,例如数值求绝对值要 先判断正负。
- 循环: 同样的操作要对不同的可索引或满足特定条件的数据进行 运算,这种情况要设计循环结构,例如按数据行/列求值。有些循 环循环数是知道的, 有些则要对数据运行结果进行判断, 满足特 定条件时可跳出或继续循环。
- 递归: 比较特殊的条件与循环结构, 当数据不满足某条件时就执 行函数本身直到满足条件,例如求解斐波那契数列之和就可以设 计递归结构循环执行本身直到数据可计算的起点。递归的效率一 般不高,但递归结构有助于简化思考问题的步骤。

- 正则表达式:正则表达式是字符串处理时常用的模式识别工具, 灵活使用正则表达式与条件分支可以有效处理真实数据中的混杂, 强烈推荐学习掌握。
- 数据结构:通常不同数据按照实际需求会有不同的格式,不同格式的数据处理方式会不一样,一般函数都会先验证数据结构,如果不能处理则返回错误。
- 数据表:常见的数据处理格式,一般不同行表示不同样品,不同列表示不同样品属性且数据类型一致,数据值可以是数值、字符或逻辑值但不能是数据表。由于数据处理算法大都基于数据表开发,这类格式数据比较容易找到现成的算法函数/库/扩展包来进行处理。
- 字典:很多程序语言支持字典,字典是一种对应关系,字典中的 元素是键值-数值对,通过键值索引数值,也可以反查。数据表中 搜索元素是按照数值索引顺序索引的,字典则可以用哈希表快速 索引。字典可以在编程中用来构建基于输入的数据库,方便进一 步查询。
- 列表: 列表属于数据表与字典的泛化,列表元素可以是数据表或 列表,因此列表的数据结构不是平行的而是具备层级,有的元素 可以进一步展开。列表常用来表示一组关联概念且可以数值索引, 例如在回归分析的返回值中,就会包括拟合值、回归系数、残差 等数据表或数值。
- 类型:通常列表可被定义成一种新通用类型,算法可基于这个类型进行开发或泛化,例如当你调用画图程序时,其程序会首先判断你输入数据的类型,如果有对应方法则直接调用,没有则用通用方法或返回错误。有些语言中列表是不能直接操作的,这样设计就是为了防止类型不兼容而强制定义格式。

其他一些概念例如并行运算、云计算、单元测试、集成测试、GPU加速、功能模块化、环境容器化、接口调用、功能移植、数据库检索、前端设计、数据加密、移动端兼容等都很有了解的必要,但这是建立在牢靠的基础上的。一个简单的判断标准就是根据你的需求你会觉得存在某种设计,然后一搜索发现果然有这样的领域,从需求出发回到需求中去是编程思维的要诀,不要在屠龙之术上花费太多时间。

• 参考资料

#### 4.2.2 个体整体模型

个体行为在群体中有两种形态, 一种是同群效应, 也就是被群体 同化,细分也有两种,一种是直接服从整体,另一种是在周围环境 压力达到自己设定时被同化,例如起立鼓掌模型;另一种则是物以 类聚,也就是只跟自己相似的人聚集,如果被群体排斥就离开,例 如谢林模型,这里微观的动机不同于宏观的表现。这两种状态宏观 上都会造成隔离,但形成原因差异很大,一个是人乡随俗,另一个 是回归舒适区。存在引导群体行为的策略,入乡随俗的可以加强引 导而回归舒适区的可以强调区别,传销的人两种方法是交替使用的。

当人聚到一起后,整体就会有自己的属性,系统的表现取决于环 境、个体间关系与系统组织结构,与个体属性关系就不大了。单一 行为的聚合模型可以考虑中心极限定理; 单一规则的聚合模型可以 考虑细胞自动机,此时已经有系统高层次动态了;个体的偏好聚合 后就会出现系统高层次矛盾,例如博弈论、投票、群体非理性等。

个体行为都是有自己决策过程的,决策模型分为多准则决策与概 率决策,前者可以定性分析,也可以打分定量分析,可以使用空间 量表可视化多维选择。概率决策是构建在事件及其后续事件发生可 能性基础上的、赋值后根据决策树反推不同选择下的期望结果。基 于概率决策树可以对信息定价,推算在有无信息下的期望差就是信 息的价值。

人的思维过程跟物理世界运行规则是不一样的, 有严格按规则办 事的,有看心情办事的行为模式,还有理性行动者。后者会不断按 目标函数寻优, 经济学里的理性人假设就是如此, 但存在边际效用 递减的情况,理性不意味自私,跟个人目标或价值认同符合,有时 则需要考虑群体最优。行为模式的人会有风险厌恶、对未来不如现 在看重的双曲贴现、思维惯性拒绝改变与容易受眼前事件影响等不 符合理性的行为。按规则办事的人可以靠规则来预测,例如博弈论 里的分析与随机选择,决策越简单越容易执行。真实世界的人三种 思维模式都存在,不同场合不同组合。很多时候基于规则会经验可 能是最符合现状的,既不会绝对理性,也不会过于随意,大概取个 中间值。

规则模型里比较常见的是分类模型与线性模型。分类模型就是把 相似的东西归到一类里去,分类越能捕捉群体里的差异,模型就会 越符合现实,其实就是组内方差最小化与组间方差最大化的体现。 线性模型则是通过构建拟合两个变量的线性关系来进行预测,通常 优于专家表现。线性模型中, R 方可以用来描述模型解释度, 系数 正负可以告诉你效应方向, 系数的量级可以表现系数的重要程度,

系数的 p 值可以告诉你出错的概率。现实数据可以拆分成不同线性 阶段,这样非线性就可以线性考察。重要系数的筛选属于循证研究, 首先构建模型,然后收集数据,然后确定重要变量,然后改变变量 来看影响,进而找出影响大的变量。线性模型也存在局限,例如不 能识别因果,对于反馈作用无法预测,例如早先设计 ABS 系统是因 为车距过近容易出事故,但有了 ABS 后实际车距反而缩小了,因为 人们把 ABS 的影响反馈到行为里去了。

除了线性模型外,非线性模型可以看成线性模型的组合,这样就 会存在临界点,不过要区分指数模型,内在动因不同,临界点前后量 化属性会发生变化。SIS 模型 (易感者感染易感者)、SIR 模型 (感 染者终身免疫)、SIRS 模型 (治愈后暂时免疫)。扩散模型中两人接 触后发生传染的概率等于传染率乘人群中患者比率与人群中健康人 比例,再乘以人群中接触率。扩散过程不存在临界点,但会存在概 率快速上升的阶段。SIS 模型中存在治愈患者,治愈后不会患病,这 样接触率感染率的乘积与治愈率进行比较就是基本传染数。当基本 传染数大于 1,疾病会流行,小于 1,疾病无法流行,基本传染数决 定是否是流行病。免疫过程会降低基本传染数,麻疹为15,疫苗比 例超过 14/15 时才不会流行。当疫苗免疫率不够临界值时,不打疫 苗风险很高,超过后就可以不打了。在传染病模型中,临界点就是 基本传染数。临界点的测量可以通过多样性指数或熵来比较,多样 性指数就是不同类型概率平方和的倒数,越高多样性越高。熵则是 概率与概率对数的乘积和的负数(信息可加和并考虑概率),越高越 混乱,需要信息越多。

解决实际问题也存在模型,例如爬坡法,启发式还有重组法,爬坡就是寻优,改变参数看那个方向好就继续,视角越宽越不容易局部最优。启发式可理解为随机猜想,利用经验或部分信息进行快速决策,例如试错或排除等方法。重组法就是集思广益,使用群体智慧。多样性对于创新是很重要的,团队组建需要注意。

事情的发展可以用马尔可夫模型来模拟,当状态有限且发生概率恒定时,事情就会进行状态改变直到收敛。概率转移矩阵就可以计算最终平衡时比例,因为是动态平衡,经常反线性直觉。这个过程跟初始状态无关,跟过程也无关,通过随机性达到平衡,但如果转移矩阵改变了,就可能不收敛了。另一个事物发展模型是李雅普诺夫函数,它存在一个最大值或最小值,在没达到时会不断逼近,平衡时会停止波动,可根据构建的模型来估计逼近所需要的周期并优化。行为没有外部性会最终平衡,考虑外部性会复杂或随机,这个模型依赖路径与初始条件来达成平衡,平衡点固定不随机。

文化差异也存在模型, 文化是使群体生活与个人生活能进行的事 物,国家文化差异客观存在,个体通过与他人协调与自己行为磨合 形成, 文化交汇会促进相似但不是一致。一致性会形成路径依赖与 偏好加强, 最后形成临界点。事物的发生靠技能也靠随机性, 技能 接近看的是运气。

- 4.2.3 仿真模型
- 4.3 统计思维
- 4.3.1 统计量
- 4.3.2 回归
- 4.3.3 概率
- 4.3.4 方差
- 4.3.5 因果推断
- 4.4 最优化思维
- 4.4.1 梯度下降
- EM 算法 https://www.nature.com/articles/nbt1406
- 4.4.2 动态规划
- 动态规划 https://www.nature.com/articles/nbt0704-909
- 4.5 估算法
- 4.5.1 费米估计

http://www.mathsisfun.com/numbers/estimation.html http://teachersinstitute.yale.edu/nationalcurriculum/ units/2008/5/08.05.06.x.html

# 实验

### 5.1 实验设计原则

试验设计一般是面向高年级本科生与研究生开的课程,但讲的都比较抽象。什么随机化、均匀性什么的道理都明白,但真到科研里面基本还是要依赖查表与软件分析。也正是因为如此很多人都是照葫芦画瓢来做,软件告诉哪个好就用哪个,在这种情况下软件实际充当了水晶球,你信就是了。

《Statistics for experimenters》的第一章是值得所有试验学科人读一下的,因为 George Box 在第一章里没有扯什么随机化、均匀性,而是聊了下认识论。开篇第一句就是"知识就是力量",解决问题实际就是一个认识模型演进的过程。具体来说是一个归纳-演绎不断往复的过程,数据起了中介作用。例如下面这个认识过程:

- (模型) 每天都一样
- (演绎) 今天车会停在原位
- (数据) 车不在
- (归纳) 有人偷车
- (模型) 车丢了
- (演绎) 车不在原位
- (数据) 车又回来了
- (归纳) 有人偷了车还回来了

不得不说我还是头一回发现认知过程可以这样描述的,具体到试验,这个过程就成了(模型)想法->(演绎)实验设计->(数据)结果分析->(归纳)结论或新想法。这大概是试验设计能上升到的最高理论高度了。

好了,不扯了,这本书非常适合读,但并不适合练。因为作者虽 然用了很多很直观的解释方法让读者明白原理,但并未涉及软件层 面。当然,提供代码也是最近才开始在技术书籍中流行的,这本书描绘了一个清晰的试验设计与分析框架,而我下面说的是结合 R 的一些从问题视角的实战。

现实生活中需要试验设计的场景一般都是多因素多水平寻优问题,翻译成人话就是 y=f(x) 中, y 代表了你期望最优的东西, x 代表了会对 y 产生影响的自变量,如果你的问题可以抽象成 y=f(x),那就可以通过构建模型来解决。试验设计主要关心的是方差分析这个视角,简单说就是 y 的变异可以拆分成不同 x 之间的独立变异或交互作用的线性组合。通过方差分析可以找到对 y 影响最大的 x 或 所有 x 的影响方式,了解了影响方式,寻优什么的就比较简单了。

一般而言,想找出多因素的最优组合,第一步是要确定哪些因素重要而哪些因素不重要,这是 PB 设计的应用场景。在不考虑交互作用的前提下,通过 PB 设计的表头进行两水平试验,然后进行方差分析并可视化就可以筛选出重要因素了。PB 设计的试验次数一定是 4 的倍数,而且最大适合因子数会比试验次数少 1。打个比方,我打算找出 9 个因素中哪个影响目标最大,那么我的试验次数至少选 12,下面是个演示,这里我们使用 FrF2 包:

#### suppressMessages(library(FrF2))

pb(12, nfactors = 9)

```
A B C D E F G H J
##
## 1 1 -1 -1 1 1 -1 1 -1
## 2 -1 1 1 -1 1 1 1 -1 -1
    1 1 -1 1 1 1 -1 -1 -1
## 4 -1 -1 -1 1 -1 1 -1 1
## 5 -1 -1 1 -1 1 1 -1 1 1
## 6
    1 -1 1 1 -1 1 1 1 -1
## 7 -1 1 1 1 -1 -1 1 -1
    1 1 -1 -1 -1 1 -1 1 1
## 9 -1 1 -1 1 1 -1 1 1
## 10 1 1 1 -1 -1 1 1 -1 1
## 11 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1 -1
## 12 1 -1 1 1 1 -1 -1 1
## class=design, type= pb
```

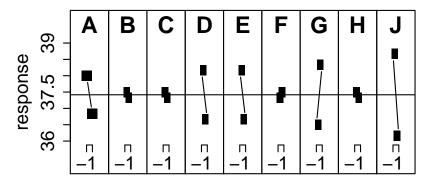
这里面 1 与-1 分别代表两个水平, 当然试验设计牵扯到分辨率问题, 可以理解为对该试验设计的评价, 分辨率高, 能区分的影响就更细致, 可以用 FrF2 包中的 GR 函数来计算。需要注意的是, FrF2

包也可以用 FrF2 函数来进行两水平试验设计,这里是分辨率高时 是可以考察交互作用的。

那么当你收集了数据,该如何分析呢? FrF2 包实际继承了 DoE.base 包的 S3 对象类型, 你只需要用 add.response 增加你的 试验结果到设计出的 S3 对象上, 然后就可以用方差分析或线性回 归进行分析了。结果同样可以用 MEPlot 函数来进行可视化。当然, 也可以用 halfnormal 函数来评价因子影响。

```
plan.annotated <- pb(12, nfactors = 9)</pre>
response <- c(35, 36, 38, 39, 37, 36, 39, 37, 41, 32, 42, 37)
plan.resp <- add.response(plan.annotated, response)</pre>
MEPlot(plan.resp, abbrev = 5, cex.xax = 1.6, cex.main = 2)
```

# Main effects plot for response



```
summary(lm(plan.resp))
## Number of observations used: 12
## Formula:
## response ~ A + B + C + D + E + F + G + H + J
##
## Call:
## lm.default(formula = fo, data = model.frame(fo, data = formula))
##
## Residuals:
                   3
                                                             10
                                                                         12
##
                                                                   11
## -1.167 -2.000 2.000 -1.167 -2.000 -2.000 1.167 1.167 2.000 -1.167 2.000 1.167
##
## Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
```

```
## A1
              -0.58333
                          1.15770 -0.504 0.664376
## B1
              -0.08333
                          1.15770 -0.072 0.949167
                         1.15770 -0.072 0.949167
## C1
              -0.08333
                         1.15770 -0.648 0.583530
## D1
              -0.75000
              -0.75000
## E1
                         1.15770 -0.648 0.583530
## F1
               0.08333
                          1.15770 0.072 0.949167
## G1
               0.91667
                         1.15770 0.792 0.511473
                          1.15770 -0.072 0.949167
## H1
              -0.08333
## J1
              -1.25000
                          1.15770 -1.080 0.393165
## ---
## Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 4.01 on 2 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.5924, Adjusted R-squared: -1.242
## F-statistic: 0.323 on 9 and 2 DF, p-value: 0.9052
```

在这里 PB 设计实际上是一种预选法,如果结果显示某些变量影响显著,那么事实上就可以针对这些变量进行进一步的精细筛选,其余的变量可以直接固定为一个水平进行进一步设计。PB 法在工业届用的比较多,但你应该想到了,如果只是进行变量选择,为啥不用随机森林或 lasso? 其实都可以,但这些方法不是设计而更多是数据分析通用方法,设计上除了最重要的随机性也是要考虑各因子贡献或者说重复数尽量平衡些的,否则会过分偏重某个因子,或者干脆配对或组成区组。像这样不做预设去设计对各个因子都公平,如果有预设或现实条件不允许,也可以裂区设计。

当选出重要因素时,下一步常见是正交试验或响应面分析,用来优选参数。正交表这玩意我在书中没找到,文献里用得多的也是亚洲人,老外统一用析因试验来进行考察。其实正交表的设计原理就是用尽量少的步骤遍历掉因子空间,这样进行一定次数试验就可以发现最优组合。R 中的实现基本都在 DoE. base 包里,这个包内置了一堆可以直接调用的正交表,可以根据需求进行查询。例如我有6个因素,水平数分别是2,3,3,2,2,6,然后我只打算做不超过54次试验,这时可以直接调用 show.oas 函数进行查询,给出的正交表随意选一个就可以继续。

```
show.oas(nruns = c(0, 54), nlevels = c(2, 3, 3, 2, 2, 6), showmetrics = TRUE)

## no suitable resolution IV or more array found

## 5 orthogonal arrays found
```

```
##
                name nruns lineage GR GRind regular SCones
                                                             AЗ
                                                                   Α4
                                                                        A5
                                                                             A6
                                                                                     Α7
## 78 L36.2.13.3.2.6.1
                        36
                                  3.00 3.00
                                              FALSE
                                                         6 45.3 158.4 426 1010 1753.2 230
## 81 L36.2.10.3.8.6.1
                                  3.18 3.18
                                              FALSE
                                                        0 130.3 737.2 3063 11096 31380.8 6882
                        36
## 83 L36.2.9.3.4.6.2
                                  3.00 3.00
                                                        17 82.3 338.2 1025 2828 5507.5 778
                        36
                                              FALSE
## 87 L36.2.3.3.9.6.1
                                  3.18 3.00
                                                        12 73.8 300.2 912 2404 4354.2 579
                        36
                                              FALSE
## 88 L36.2.3.3.2.6.3
                        36
                                  3.00 3.00
                                              FALSE
                                                        37 35.6 73.1 120
                                                                             125
                                                                                   63.5
                                                                                           1
```

这里我们选分辨率略高的 L36.2.10.3.8.6.1, 从名字上看, 这是一个 36 次试验表,可以包含 10 个两水平, 8 个三水平与 1 个六水平因子,这也是唯一一个分辨率高于 3,可以排除交互作用的设计方法。这里我反复提到分辨率,实际上就是一种考察试验设计合理性的指标,分辨率 3 一般指只能区分没有交互作用的各因子贡献差异,高于 3 就可以区分一定的因子交互作用,可以用 GR 去计算一个广义分辨率并用 oa.design 来进一步优化这个设计,因为其实符合正交表只是众多选择的一个子集,不过根据优化方法的不同,优化时间也不太一样。

oa.design(L36.2.10.3.8.6.1, nlevels = c(2, 3, 3, 2, 2, 6), columns = "min34")

```
##
     ABCDEF
## 1 1 3 1 1 1 3
## 2 1 1 2 1 1 5
## 3 1 2 1 2 1 6
## 4 1 3 2 2 1 2
## 5 1 2 2 2 2 2
## 6 2 2 1 2 2 3
## 7 2 2 3 1 2 6
## 8 1 1 1 2 2 6
## 9 2 3 3 2 1 6
## 10 2 3 2 2 2 5
## 11 2 3 3 1 2 3
## 12 1 1 2 2 2 3
## 13 1 1 1 1 1 1
## 14 2 2 3 1 1 2
## 15 2 3 1 1 2 2
## 16 1 1 3 2 1 4
## 17 2 2 1 2 1 5
## 18 1 2 2 1 1 3
## 19 1 2 1 1 2 4
```

```
## 20 2 1 3 2 2 1
## 21 2 1 2 1 2 4
## 22 1 3 3 1 1 5
## 23 2 1 1 2 1 2
## 24 2 1 2 1 1 6
## 25 2 2 2 1 2 1
## 26 1 3 1 2 2 1
## 27 2 2 2 2 1 4
## 28 1 2 3 1 1 1
## 29 1 3 2 1 2 6
## 30 1 2 3 2 2 5
## 31 2 1 1 1 2 5
## 32 2 3 1 1 1 4
## 33 1 1 3 1 2 2
## 34 2 1 3 2 1 3
## 35 2 3 2 2 1 1
## 36 1 3 3 2 2 4
## class=design, type= oa
```

使用这个函数你就不用费力去套正交表了,直接可以用输出的设计方案,记得要说明你的分辨率优化方案。如果你坚持套正交表,一定要理解如何去套,因为正交表的排列是很讲究的,特别是你要考虑交互作用的影响。如果一个表最多 14 个因子而你就设计了 14 个因子,那么分辨率不会超过 3。正交设计的分析与前面 PB 设计是一致的,都是沿用添加响应,然后方差分析或线性分析随意来就是了,DoE. base 包为 design 这个对象类型设置了 1m 与 aov 方法。在进行数据分析时,有时会遇到方差分析与线性回归的区别问题,打比方你用线性回归来做分析,会有审稿人问你 lack of fit 检验有没有做。这个检验实质上也是个 F 检验,用来衡量线性模型之外残差里分组变异与纯误差变异的比值,如果分组变异还是比较大,那么线性假设可能就不合理。

不过,目前试验设计结果分析更精细的会用响应面分析。顾名思义,响应面有点梯度下降迭代寻优的意思,而且如果是曲面通常考虑了二阶甚至更高阶的交互作用。在R中的实现是通过rsm包来进行的,这个包也是囊括了设计与分析两个部分,设计部分也有常见的Box-Wilson Central Composite Designs 与Box-Behnken designs,分析部分自然还是基于 1m的。同样,对于CCD设计,也提供了ccd.pick来选择好的设计,这里好自然意味着一些表征设

计均衡的统计量。因为 rsm 包小品文写的很清楚了, 我就略过演示 了。如果你面临多响应同步优化问题,那么 desirability 包考虑 一下有没有,这个包其实是定义了一个多响应的联合满意度作为目 标统计量,然后用响应面分析进行寻优、对于组学研究是有启发的。 另外说个小八卦,狭义正交表也就是田口设计其实最初是两响应优 化,只不过另一个响应是无法控制的噪音,田口搞了个信噪比来解 决问题,熟悉了这套统计量构建策略,你也应该能做到根据实际情 况构建指标体系。

其实试验设计分析是可以用所有符合 y = f(x) 的模型来操作的, 说白了就是参数寻优。但试验设计更独特的点就在设计上,更广义 地讲, A/B 测试等纯计算试验也可以套用试验设计原理, 这里要区 分清楚设计与分析,设计不合理,分析会很头痛。如果再扩展些,观 察研究的试验设计相比控制实验更关注配对或策略抽样。总之试验 设计并不是什么水晶球,其原则从来都很清楚,只是后来流派出的 太多,术语也越来越晦涩。然后你就会在网上看到哪个软件能做哪 个分析的讨论了,其实这情况在工科可能更严重些,例如混料配比 的三角坐标系设计就完全是另一套,不过万变不离其宗,说白了还 是个响应面分析。

- 5.2 定性实验
- 5.3 定量实验
- 5.3.1 基线

祖母的身高缩水、罗马俱乐部与基线不明、营养改善现状

#### 5.3.2 指标化

现代人的物质与能量需求核算单人一年十平概念下需要多少生存 成本用巨无霸指数换算

汉堡王老干妈与指标

# 5.4 思想实验

• 人是否在仿真中

# 数据处理

数据处理是科研中很重要的一环,同样的数据不同的人处理会得 到不同的结论。事实只有一个,但解释可以有很多,数据处理方式 本身就会对解释产生影响。这里重点讨论几个常见的数据处理问题。

## 6.1 多重比较

方差分析解决的是分类变量对响应变量的影响问题,通常是用分类变量所解释的变异比上分类变量以外的变异去进行 F 检验。换句话讲,如果分类变量可以解释大部分响应变量的变异,我们就说这种分类变量对响应变量的解释有意义。例如下面这组数据:

1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3, 3

总变异为 10, 如果我们分组为按照相同的数放到一起, 那么组内变异就是 0, 组间变异为 10, 这时我们就说这种分组有效的解释了响应变量, F 值趋向正无穷。如果我们完全随机分组, 组内与组间的变异差不多, 那么这种分类方法并不解释响应变量, 反映到 F 值上就是 1。

但是仅仅知道是否受影响是不够的,如同上面的例子,我们知道 的仅仅是存在一种分类方法可以解释响应的全部变化,其内部也是 均匀的,但不同分类水平间的差异我们并不知道,这就是多重比较 的起源。实际生活中如果差异很明显往往统计学工具不用出场,所 以你应该预想到多重比较或仅仅是均值比较适用的场景往往差异我 们不能直观感受,需要统计学工具来帮忙。

同时要注意,如果我们对两组数据做置信度 0.05 的 t 检验,我们遇到假阳性的概率为 5%。但如果面对多组数据例如 3 组,进行两两比较的话就有

choose(3,2)

也就是3组对比,那么我们遇到假阳性的概率就为

$$1 - (1 - 0.05)^3$$

,也就是 14.3%, 远高于 0.05 的置信度。组越多, 两两对比就越多, 整体上假阳性的概率就越来越大, 到最后就是两组数据去对比, 无论如何你都会检验出差异。

那么多重比较如何应对这个问题呢?有两种思路,一种思路是我依旧采取两两对比,进行 t 检验,但 p 值的选取方法要修改,例如 Bonferroni 方法中就把 p 的阈值调整为进行多重比较的次数乘以计算得到的 p 值。如果我们关心的因素为 2,那么计算得到的 p 值都要乘 2 来跟 0.05 或 0.01 的边界置信度进行比较;另一种思路则是修改两两比较所用的统计量,给出一个更保守的分布,那么得到 p 值就会更大。不论怎样,我们这样做都是为了降低假阳性,但同时功效不可避免的降低了。

我们设计一个实验考察一个因素对响应变量的影响,结论无过于有影响,没影响。多重比较的前提是有影响,给出的答案是对影响的估计:影响有多大。那我们重复这个实验所要考虑的问题就是能否重现影响,影响的方向与大小是否与文献报道一致。

就方向而样,虽然我们都不承认0假设(要不然还做什么实验),但当我们默认设定为双尾检验时,假阳性就被默认发生在两个方向上了,这样的多重比较必然导致在其中一个方向上的错误率被夸大了。

就影响大小而言,如果我们每次重复都选择效应最强的那一组, 重复越多,预设的偏态就越重,换言之,我们的零假设因为重复实 验的选择偏好而发生了改变。

这是多重比较里常见的错误类型:

- type I 假阳性
  - per-comparison error rate (PCER) 进行多次对比得到的假阳 性的概率
  - familywise error rate (FWER) 将多组比较看作一个大组,这时造成的错误率
  - false discovery rate (FDR) 控制假阳性与总拒绝率的比例
  - 一般而言 PCER FDR FWER FWER 更容易不拒绝空假设,更保守
- type II 假阴性
- type III 有差异方向错误

#### 多重比较的方法类型

- Single-step procedures 单步法只考虑对 H0 的影响,不考虑其他 影响
- Stepwise procedures 逐步法考虑其他假设检验对单一检验的影响
  - Step-down procedures 排序后先对比第一个,有差异对比下一 个, 当出现无差异时停止对比
  - Step-up procedures 排序后对比,有差异时停止对比,之后均 认为有差异
- 两两比较不同组之间进行均值比较,最常见
- 对比除了考虑不同组间均值比较,还考虑均值间线性组合的新均 值的差异性, F 检验有时是因为对比而不是两两比较产生的显著 性

#### 6.1.1 单步法等方差

Tukey's HSD(两两比较)

- 基于 t 范围分布
- 等方差同数目,如果数目不同则使用 Tukey-Kranmer 方法
- 两两比较最佳,数目相同功效弱于下降法

Bonferroni(两两比较)

- 切割 , 如果进行了 c 次推断, 整个错误率为 c
- 通用方法,应用在任一个推断
- 方法简单,但十分保守
- 只对比部分的话可自定义 c 值
- 适用于指定对比数情况,此时功效高于 Tukey

DST(两两比较)

• 对 Boneferroni 方法的改进, 功效更高

GT2 test(两两比较)

• 功效高于 Dunn-Sidak 方法

Gabriel(两两比较)

- 分组数目相同等同于 GT2, 不同时功效高, 但不保证
- 易于可视化

Scheffe test(两两比较)

• 两两比较中功效最弱

Tukey's HSD(对比)

• 涉及 2~3 个均值时功效最高

Bonferroni(对比)

• 指定对比数

DST(对比)

指定对比数,功效高于 Bonferroni
 Scheffe test(对比)

• 保证 , 两两比较功效最高

#### 6.1.2 单步法异方差 (对比与两两比较)

 $GH\ procedure$ 

• 不保证整体错误率,有时会超过,保守但功效高

C

• 保证整体错误率

T3

• 保证整体错误率

 ${\bf Brown\text{-}For sythe\text{-}Scheffe}$ 

• 功效最高

#### 6.1.3 单步法空白对比

Dunnett

- 用于对比 controls 的变化
- 其他组对比不考虑

Hsu's MCB

- 对比均值与其他最好(自定义,可最大,亦可最小)
- 目的寻找比其他好的而不是不同的
- 对比次数最少,功效强,但低于 Dunnett

#### 6.1.4 Stepdown procedures

- 基于 Tukey 法
- 先比较最大最小, q 值取分组数
- 比较最大第二小, q 取分组数-1
- 继续直到出现无差异停止
- 当不需要置信区间且样本数相同时使用
- 不推荐 SNK 与 Duncan, 推荐 REGWF 或 REGWQ 方法

SNK

• 不保证

Duncan

• 不保证

Ryan-Einot-Gabriel-Welsch-Fisher(REGWF)

• F 检验加强版,保证

Ryan-Einot-Gabriel-Welsch-Q(REGWQ)

• q 值法加强版, 保证

#### 6.1.5 step-up procedures

- Welsch
- Hochberg
- Dunnett and Tamhane

#### 6.1.6 多重比较简略选择指南

总体控制错误率

- 两两比较用 Tukey 法
- 对比用 Scheffe test
- 指定对比数考虑 Gabriel > GT2 > DST > Bonferroni
- 跟 control 比较用 Dunnett
- 方差不相等用 GH, C, T3 等方法

错误率

• 保证 用 Tukey Scheffe Dunnett

• 不保证用其他的

探索与确认

- 事前分析确定对比数用 Gabriel GT2 或 Scheffe
- 事后确定对比用 Tukey 或各种 stepwise 方法

#### 6.1.7 参考资料

- Rafter, J.A., Abell, M.L., Braselton, J.P., 2002. Multiple comparison methods for means. Siam Review 44, 259–278.
- http://cos.name/cn/topic/142002
- 多重比较问题 https://www.nature.com/articles/nbt1209-1135
- Bretz, F., Hothorn, T., Westfall, P., 2010. Multiple Comparisons Using R. CRC Press. Gabriel, K.R., 1978. A Simple Method of Multiple Comparisons of Means. J. Am. Stat. Assoc. 73, 724. https://doi.org/10.2307/2286265
- Gelman, A., Hill, J., Yajima, M., 2009. Why we (usually) don't have to worry about multiple comparisons. ArXiv09072478 Stat.
- Plotting of multiple comparisons? [WWW Document], n.d.
   URL http://stackoverflow.com/questions/2286085/plotting-of-multiple-comparisons (accessed 11.9.13).
- Rafter, J.A., Abell, M.L., Braselton, J.P., 2002. Multiple comparison methods for means. Siam Rev. 44, 259–278. Stoline, M.R., Ury, H.K., 1979. Tables of the Studentized Maximum Modulus Distribution and an Application to Multiple Comparisons among Means. Technometrics 21, 87. https://doi.org/10.2307/1268584
- 多重比较谬误

# 6.2 多重检验

各种组学分析技术的进展导致了我们在收集数据时更侧重数据信息的保存,然而我们收集的数据最终也会根据我们的想探索的问题来寻找答案,甚至有时候我们在实验设计分组时就打算考察某一个变量而为了获取更多的相关信息而采用了组学技术。这点是尤其要强调的,科研人员一定是面向科学问题解决科学问题,而不要为了应用新技术而应用新技术。当然,现实的情况是新技术特别是组学技术的发展为我们提供了大量的可同时测定的生物学指标(例如基

因表达水平、蛋白表达水平、代谢产物表达水平)数据、大到我们 事先也不知道会有什么模式会出现,这样就需要数据挖掘,特别是 统计学知识来帮助我们发现新知。然而、组学技术产生的这类高通 量数据是具有一些特质的、数据里确实会有我们关心分组的差异表 达,但同时也有大量测量值对于我们设定的分组不敏感,然而当我 们去对比组间差异时就会被这些数据干扰。

举例而言,我对两组样品(暴露组跟对照组)中每一个样品测定 了 10000 个指标, 每组有 10 个样品, 那么如果我想知道差异有多大 就需要对比 10000 次, 具体说就是 10000 次双样本 t 检验。那么如 果我对 t 检验的置信水平设置在 0.05, 也就是 5% 假阳性, 做完这 10000 次检验, 我会期望看到 500 个假阳性, 而这 500 个有显著差 异的指标其实对分组不敏感也可以随机生成。假如真实测到了600 个有显著差异的指标,那么如何区分其中哪些是对分组敏感?哪些 又仅仅只是随机的呢? 随机的会不会只有 500 个整呢?

这就是多重检验问题, 做经典科研实验时往往会忽略, 深层次的 原因是经典的科研实验往往是理论或经验主导需要进行检验的假说。 例如,我测定血液中白血球的数目就可以知道你是不是处于炎症中, 其背后是医学知识的支撑。然而,再组学或其他高通量实验中,研究 实际是数据导向的, 也就是不管有用没用反正我测了一堆指标, 然 后就去对比差异,然后就是上面的问题了,我们可能分不清楚哪些 是真的相关, 哪些又是随机出现的。

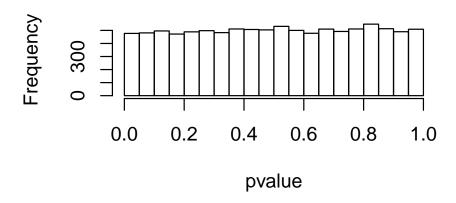
当然这个问题出现也不是一天两天了, 再多重比较问题上就已经 被提出过,只不过在多重比较里对比数因为排列组合比较多而在多 重检验里纯粹就是因为同时进行的假设检验数目多。那么其实从统 计角度解决的方法也基本来源于此。

#### 6.2.1 整体错误率 (Family-wise error rate) 控制

对于单次比较, 当我们看到显著差异的 p 值脑子里想的是空假设 为真时发生的概率、当我们置信水平设定在 0.95 (I 型错误率 0.05) 而 p 值低于对应的阈值, 那么我们应该拒绝空假设。但对比次数 多了从概率上就会出现已经被拒绝的假设实际是错误的而你不知道 是哪一个。整体错误率控制的思路就是我不管单次比较了, 我只对 你这所有的对比次数的总错误率进行控制。还是上面的例子,对于 10000 次假设检验我只能接受 1 个错误,整体犯错概率为 0.0001, 那么对于单次比较,其 I 型错误率也得设定在这个水平上去进行假 设检验,结果整体上错误率是控制住了,但对于单次比较就显得十 分严格了。下面用一个仿真实验来说明:

```
# 随机数的 10000 次比较
set.seed(42)
pvalue <- NULL
for (i in 1:10000) {
    a <- rnorm(10)
    b <- rnorm(10)
    c <- t.test(a, b)
    pvalue[i] <- c$p.value
}
# 看下 p 值分布
hist(pvalue)
```

# Histogram of pvalue



```
# 小于 0.05 的个数
sum(pvalue < 0.05)

## [1] 477

# 小于 0.0001 的个数
sum(pvalue < 1e-04)

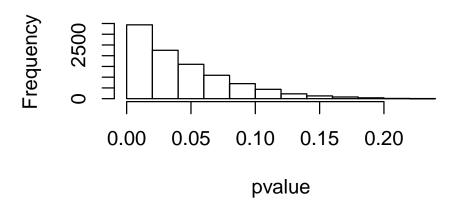
## [1] 0

这样我们会看到进行了整体的控制之后,确实是找不到有差异的
了,但假如里面本来就有有差异的呢?
```

```
set.seed(42)
pvalue <- NULL
for (i in 1:10000) {
    a <- rnorm(10, 1)</pre>
```

```
b < -a + 1
    c <- t.test(a, b)</pre>
    pvalue[i] <- c$p.value</pre>
}
# 看下 p 值分布
hist(pvalue)
```

# Histogram of pvalue



```
# 小于 0.05 的个数
sum(pvalue < 0.05)</pre>
## [1] 6559
# 小于 0.0001 的个数
sum(pvalue < 1e-04)</pre>
## [1] 45
```

上面我们模拟了 10000 次有真实差异的假设检验,结果按照单次 检验 0.05 的阈值能发现约 7000 有差异, 而使用 0.0001 却只能发现 不到 100 次有显著差异。那么问题很明显,或许控制整体错误率可 以让我们远离假阳性,但假阴性也就是 II 型错误率就大幅提高了, 最后的结果可能是什么差异也看不到。

下面我们尝试一个更实际的模拟,混合有差异跟无差异的检验:

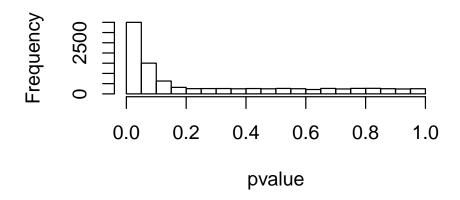
```
set.seed(42)
pvalue <- NULL
for (i in 1:5000) {
    a <- rnorm(10, 1)
   b < -a + 1
```

```
c <- t.test(a, b)
   pvalue[i] <- c$p.value
}

for (i in 1:5000) {
    a <- rnorm(10, 1)
    b <- rnorm(10, 1)
    c <- t.test(a, b)
   pvalue[i + 5000] <- c$p.value
}

# 看下 p 值分布
hist(pvalue)</pre>
```

# Histogram of pvalue



```
# 小于 0.05 的个数
sum(pvalue < 0.05)
## [1] 3499
# 小于 0.0001 的个数
sum(pvalue < 1e-04)
## [1] 21
```

此时结果就更有意思了,明明应该有 5000 次是有差异的,但阈值 设定在 0.05 只能看到约 3500 次,而 0.0001 只能看到 24 次。

上面的模拟告诉我们,降低假阳性会提高假阴性的比率,而且似乎本来 0.05 的阈值对于真阳性也是偏小的。同时,面对假设检验概率低于 0.05 的那些差异,我们也没有很好的方法区别哪些是真的,哪些是随机的。

其实很多人都知道整体错误率控制是比较严格的, 但也不是完全 没人用, 例如寻找生物标记物做重大疾病诊断时就不太能接受假阳 性而可以接受一定的假阴性, 此时如果标准放宽就会找到一大堆假 信号,到时候标记不准就会对诊断产生负面影响。

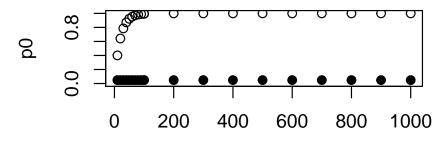
下面介绍下常见的整体错误率控制方法:

Bonferroni 方法

思路很简单,就是控制显著性,例如单次检验假阳性比率  $\alpha$  控制 在 0.05, 那么 n 次检验假阳性比率控制为  $\frac{\alpha}{n}$ 。这样实际是对整体采 用了个体控制的控制思路:

$$P( ) = 1 - P( ) = 1 - (1 - \alpha/n)^n$$

我们来看下  $\alpha = 0.05$  随比较数增加的效果:



n

其实,这样的控制得到的整体错误率是略低于 0.05 的,并且数目 越大,整体错误率越低。这个方法十分保守,有可能什么差异你都 看不到,因为都变成假阴性了。在实际应用中一般不调节 p 值的假 阳性比率而直接调节 p 值,取原始 p 值跟整体检验数目的乘积与 1 的最小值作为调节 p 值,还可以用 0.05 或 0.01 进行判断,不过这 时候控制的整体而不是单一检验了。

当然这只是最原始的 Bonferroni 方法, 后来 Holm 改进了这种一 步法为逐步法, 此时我们需要首先对原始 p 值进行排序, 然后每个 原始 p 值乘上其排序作为调节 p 值。例如三次多重检验的 p 值分别 是 0.01、0.03 与 0.06, 其调节后的 p 值为 0.03, 0.06, 0.06。如果我们控制整体假阳性比率低于 0.05, 那么调解后只有第一个检验可以拒绝空假设。值得注意的是 Holm 的改进是全面优于原始方法的,也就是说当你一定要去用 Bonferroni 方法控制整体错误率, 优先选Holm 的改进版。

Sidak 方法

上面那种方法其实有点非参的意思,其实数学上我们是可以精确的把假阳性比率控制在某个数值的:

$$P( ) = 1 - P( ) = 1 - (1 - \alpha')^n = 0.05$$

求解可得到  $\alpha' = 1 - 0.95^{\frac{1}{n}}$ ,此时我们就可以比较精确的控制整体错误率了,但是,这个方法有个前提就是各个检验必须是独立的,这在生物学实验里几乎不可能,所以这个方法的应用远没有Bonferroni 方法广。

错误发现率 (False Discovery Rate) 控制

刚才的模拟中我们可以看到,控制整体错误率比较严格,假阴性 比率高,那么有没有办法找到假阴性比率低的呢?要知道我们其实 只关心有差异的那部分中那些是真的,哪些是假的,无差异的可以 完全不用考虑。那么我们可以尝试控制错误发现率,也就是在有差 异的那一部分指标中控制错误率低于某一水平。

#### # 所有有差异的

 $R \leftarrow sum(pvalue < 0.05)$ 

# 假阳性

V <- sum(pvalue[5001:10000] < 0.05)

# 错误发现率

Q <- V/R

R

## [1] 3499

V

## [1] 225

Q

## [1] 0.06430409

上面的计算显示虽然我们漏掉了很多阳性结果,但错误发现率并不高。事实上如果我们控制错误率到 0.01,错误发现率会更低:

```
# 所有有差异的
R \leftarrow sum(pvalue < 0.01)
#假阳性
V \leftarrow sum(pvalue[5001:10000] < 0.01)
# 错误发现率
Q \leftarrow V/R
R
## [1] 999
V
## [1] 34
```

## [1] 0.03403403

Q

其实出现这个问题不难理解, 空假设检验里 p 值是均匀分布的而 有差异检验的 p 值是有偏分布且偏向于较小的数值, 所以假阳性控 制的越小,有偏分布占比例就越高,但同时会造成假阴性提高的问

那么错误发现率会不会比整体错误率的控制更好呢? 这里通过两 种常见的控制方法进行说明。

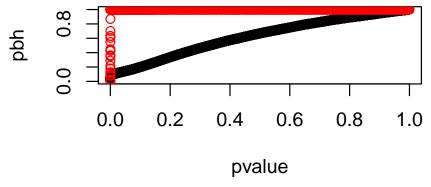
Benjamini-Hochberg 方法

这个方法跟 Holm 方法很像, 也是先排序, 但之后 p 值并不是简 单的乘排序,而是乘检验总数后除排序:

$$p_i \le \frac{i}{m}\alpha$$

举例来说就是假设三次多重检验的 p 值分别是 0.01、0.03 与 0.06, 其调节后的 p 值为 0.03, 0.45, 0.06。那么为什么说这种方法 控制的是错误发现率呢? 我们来看下  $\alpha$  是如何得到的: p 值乘总数 m 得到的是在该 p 值下理论发现数, 而除以其排序实际是该 p 值下 实际发现数,理论发现数基于在这里的分布是均匀分布,也就是空 假设的分布,这两个的比值自然就是错误发现率。下面我用仿真实 验来说明一下:

```
pbh <- p.adjust(pvalue, method = "BH")</pre>
ph <- p.adjust(pvalue, method = "holm")</pre>
plot(pbh ~ pvalue)
points(ph ~ pvalue, col = "red")
```



从上面图我们可以看出,如果控制整体错误率(红色),那么 p 值很容易就到 1 了,过于严格。而如果用 BH 方法控制错误发现率,那么原始 p 值越大,调节后的错误发现率也逐渐递增,这就符合了区分真实差异与随机差异就要假设真实差异更可能出现更小的 p 值这个现象。当然至于这个方法的推演细节,可以去读原始论文。值得注意的是这个错误发现率求的是有差异存在的情况,不然零发现就出现除数为零了。

Storey 方法 (q值)

如果说 BH 方法还算是调节了 p 值, 那么 Storey 提出的方法则直接去估计了错误发现率本身。刚才介绍 BH 算法时我提到总数 m 与 p 值的乘积是基于这里的分布是均匀分布,但实际上按照错误发现率的定义,这里应该出现的是空假设总数。直接使用所有检验数会造成一个问题,那就是对错误发现率的高估,为了保证功效,这里应该去估计空假设的总体比例。这里我们去观察混合分布会发现在 p 值较大的时候基本可以认为这里分布的都是空假设的 p 值, 那么我们可以用:

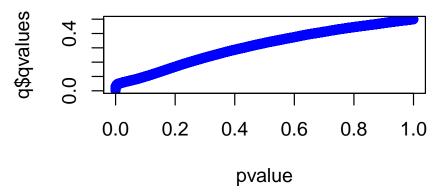
$$\hat{\pi}_0 = \frac{\#\{p_i > \lambda\}}{(1 - \lambda)m}$$

估计这个比例  $\hat{\pi}_0$ ,其中参数  $\lambda$  的跟  $\hat{\pi}_0$  的关系可以用一个三阶方程拟合,然后计算出整体假阳性比例。有了这个比例,我们再去按照 BH 方法计算 p 值,然后两个相乘就会得到 q 值,而 q 值的理论含义就是在某一概率上低于这个概率所有数里假阳性的比重。打个比方,我测到某个指标的 q 值是 0.05,这意味着 q 值低于这个数所有检验中我有 0.05 的可能性得到的是假阳性。。但我们会发现当空假设比重较高时 BH 结果跟 q 值很接近,而比重很低的话 q 值会变得更小,功效会提高,基本也符合我们对错误发现率的预期。

library(qvalue)

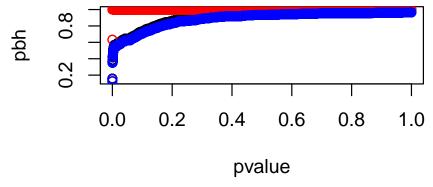
q <- qvalue(pvalue)

## # Q 值 plot(q\$qvalues ~ pvalue, col = "blue")



如上图所示, q 值增大后会最终逼近到 0.5, 而我们的模拟中空假 设的比例就设定就是50%。我们重新模拟一个空假设比例5%的实 验:

```
set.seed(42)
pvalue <- NULL</pre>
for (i in 1:500) {
    a <- rnorm(10, 1)
    b <- a + 1
    c <- t.test(a, b)</pre>
    pvalue[i] <- c$p.value</pre>
}
for (i in 1:9500) {
    a <- rnorm(10, 1)
    b <- rnorm(10, 1)
    c <- t.test(a, b)</pre>
    pvalue[i + 500] <- c$p.value</pre>
}
pbh <- p.adjust(pvalue, method = "BH")</pre>
ph <- p.adjust(pvalue, method = "holm")</pre>
q <- qvalue(pvalue)</pre>
plot(pbh ~ pvalue)
# Holm 方法
points(ph ~ pvalue, col = "red")
# Q 值
points(q$qvalues ~ pvalue, col = "blue")
```



此时我们可以看到两者结果较为接近,q 值理论上更完备,功效也更强,但算法上对  $\hat{\pi}_0$  的估计并不稳定,特别是比例靠近 1 的时候,所以 BH 方法可能还是更容易让人接受的保守错误发现率控制。详细的估计方法还得去啃 Storey 的论文。

#### 6.2.2 小结

多重检验问题是高通量数据里逃不掉的问题,要想找出真正的差异数据就要面对假阳性跟假阴性问题,这是一个不可兼得的过程,看重假阳性就用整体错误率,看重功效就用错误发现率控制。并不是说哪种方法会好一些,更本质的问题在于你对实际问题的了解程度及统计方法的适用范围。例如你选基因芯片时实际也进行了一次选择,改变了整体检验的 p 值分布,而不同的 p 值分布对应的处理方法也不太一样,有兴趣可以读下这篇。有时候你的实验设计本身就会影响数据的统计行为,而这个恰恰是最容易被忽视的

# 6.3 贝叶斯统计

- 概率来自数据,长期表现需要分开讨论
- 我不关心我没有做过的实验,只关心基于当前实验能让我对这个数的估计改变多少
- 置信区间与可信区间 (Confidence interval Credibility intervals) http://stats.stackexchange.com/questions/2272/whats-the-difference-between-a-confidence-interval-and-a-credible-interval

不用 p 值不会有 type 1 跟 type 2 错误, 但是会有 type s 跟 type m 问题, 前者是正负标志, 后者是数量级

p 值对个体研究者有意义但对群体有害,因为群体不知道个体研究的细节与尝试过程,例如找 20 个 x 与 y 关系总能发现有相关的,但只报道这个结果会导致其他人无法重复

- 多重比较里, p 值是根据你比较数而不是理论决定的,这导致你的主观臆断决定了结果
- 置信区间也会受到实验意图的影响
- 无限假设下, p 值阈值可以无限小, 也就是让所有结果都不再显 著
- 设想投硬币跟投票,如果 1000 次有 535 次正面或投给候选人 A, NHST 无法区别,但贝叶斯下前者无偏,后者领先
- 贝叶斯方差分析先假设分布,然后用数据更新分布,后验分布计算出来就同时有点估计跟方差估计,同时多重比较问题也不存在,但随机错误无法避免,此时参数估计方差大也能体现,后续研究可以使用这次的后验数据作为下次先验数据
- 效应估计中 95% HDI 95 高密度区间,空假设为真也会有 5% 次 没有真值
- ROPE 真实等价范围,如果 HDI 不在区间内,那么拒绝,如果 覆盖接受
- 效应估计的另一个方法是比较模型,参数可以来自收敛到更大的 分布,这样可以降低错误,同时有利于空假设而不是拒绝,覆盖 零不意味拒绝,有分布支撑
- 存在模型比较后空模型占优但是参数 HDI 排除了空模型,这个情况由于两个模型的先验概率对结果是敏感的
- 三种重复性:假设模型仿真看结果;后验模型仿真看结果;后验模型仿真后验模型做先验假设看累计效果
- 贝叶斯与频率学派之争

http://andrewgelman.com/2012/07/31/what-is-a-bayesian/

http://andrewgelman.com/2012/02/24/untangling-the-jeffreys-lindley-paradox/

http://andrewgelman.com/2014/01/16/22571/

https://en.wikipedia.org/wiki/Lindley's\_paradox#The\_

lack\_of\_an\_actual\_paradox

https://xianblog.wordpress.com/2014/02/04/posterior-predictive-p-values/

• 《思考,快与慢》中启动效应的问题 https://replicationindex.
wordpress.com/2017/02/02/reconstruction-of-a-train-wreck-how-priming-research-went-of-the-rails

## 6.4 线性模型

- 从 lasso 到岭回归,惩罚项在回归分析中的应用
- 截断回归与缺失值处理
- 线性混合模型
- 线性模型中非考察变量的判定与消除
- 分层模型 https://www.nature.com/articles/nbt.1619
- 线性判别分析与特征发现
- logistic 回归与剂量效应曲线
- 相关性分析与工具变量 https://www.nature.com/articles/nbt0309-255
- 偏最小二乘分析在结构效应关系研究中的应用

## 6.5 模型

- MCMC 方法 https://www.nature.com/articles/nbt1004-1315
- 聚类与主成分分析 https://www.nature.com/articles/nbt0308-303 https://www.nature.com/articles/nbt1205-1499
- 列联表分析与流行病学研究
- 人工神经网络与黑箱计算 http://www.nature.com/doifinder/ 10.1038/nbt1386
- 支持向量机的回归与分类 https://www.nature.com/articles/nbt1206-1565
- 从决策树到随机森林 http://www.nature.com/doifinder/10. 1038/nbt0908-1011
- 经验贝叶斯与近似贝叶斯计算 (ABC) 及贝叶斯网络 https://www.nature.com/articles/nbt0106-51 https://www.nature.com/articles/nbt0806-959 https://www.nature.com/articles/nbt0904-1177
- 时间序列分析
- 结构方程模型

- 6.6 可视化
- 6.7 重采样
- bootstrap 思想
- 6.8 并行计算
- 6.9 集群计算
- 6.10 容器技术

# 文献

### 7.1 文献管理

文献管理方面主要包括文献收集、整理、分析与追踪,目的是获取当前研究趋势。用认知过程阶段可以分成三个:从无到有、从有到精与从精到用,从无到有是指刚进入一个新领域时的状态,绝大多数研究生跟转行的科研人员都要通过这个阶段构建自己的文献知识库;从有到精指维护与整理与追踪新文献;从精到用阶段指文献知识库体系直接参与科研过程形成产出的过程。

### 7.1.1 从无到有

刚开展研究工作的第一步就是背景知识的了解,除非你研究生转行,一般本科阶段的学习应该已经掌握了学科基础,这个是共通的背景知识。基于此你要从教科书上相对确定的知识走向文献资料中相对不那么确定的知识,此时最好的开端是一本英文教材,一方面锻炼英文,另一方面英文教材的更新比国内要快(你大概率可以从图书馆借到,而且多数图书馆都有根据你需求订书的服务,不要浪费)。如果你精力足够,甚至可以联系作者问下是否可以翻译,这样一举多得,不过我没操作过,只是建议。另一个思路是通过 MOOCs来系统学习,国内外很多高校放到网上的课程授课老师都属于接受新思想比较快的人,讲义也比较前沿,系统性比较高。还有一个不太通用的方法是阅读近些年的博士论文,其文献部分一般都是相关信息,不过能不能找到就不好说了。这个阶段一般要两三个月,不要心急,先把基础打好。前面掉的坑越多,后面跳坑就更有经验。

一般而言,一项学术成果要先发表,然后被综述评论,然后进入研究生课程讨论班,然后进入本科生课程讲义,最后才进入学科经典教材的更新。所以你可以倒着去走这个流程,越往后可能越不容

易懂,但循序渐进总比一下读前沿论文被搞晕要好。有了相对前沿的教材或讲义作为知识框架,你的脑子里此时应该比较清楚导师让你做的东西或自己打算做的东西在学科中的定位,解决的是什么科学或工程问题,此时可以进行基于关键词检索的文献收集了。

一个良好的搜索返回的结果应该在 10 篇以内,首先要是综述,然后关键词检索方面建议学点逻辑运算符来过滤掉不相关信息,如果你上一阶段看的书是 5 年前更新的,那就只去关注最近 5 年的综述;如果你做的领域实在太新,那就把关键词信息的同义词跟近义词也加到搜索里;如果你能找到一篇写的特别好的综述或者有高人指点的论文,那是最高效的方法,可遇不可求。这 10 篇论文请按年为单位每 1-2 年选一篇综述去看,一月内读完,要求是精读,也就是论文里提到的研究都加到你的文献库里并阅读细节,同时可参考综述章节对文献库进行分组。一定要做笔记,而且要进行结构化的笔记或思维导图,这个阶段时间可能比较长也比较累,成果是当你去听系里的报告时,你大概能将报告定位到你的笔记框架里。到此文献库就从无到有了。

### 7.1.2 从有到精

有了文献库不代表就不用读了,你要建立一个体系来整理并追踪 最新文献,这一阶段希望你早就了解 RSS 是怎么回事并且使用过 RSS 阅读器。如果没有,邮件订阅也不失为一个良方。这里我要提 示一下,一般文献库管理工具都提供针对单篇文献的笔记功能,不 要用。请自建按研究主题的笔记,把新的有意思的新论文连同你以 后可能引用的语句直接摘到相关主题的笔记里,而且要让你的笔记 可以反链到数据库或通过 doi 可以直接找到原文(推荐后者)。没别 的意思,我希望你的笔记稍加整理就可以作为综述发表,省的你次 次重返工。建议文献追新频率每周一次,固定时间,看到好的文章 就马上消化掉。

#### 7.1.3 从精到用

文献信息的收集与整理不是为了写笔记,是为了需要用的时候瞬间能够用到,例如写一个技术报告,给别人审稿,还有最重要的:写科技论文。科技论文不同于其他文体一个最显著的特点就是参考文献体系的支撑:所有的讨论都要起于前人的发现,参考文献事实上经常是考察作者知识面的关键,对前人工作的遗漏会严重降低文章的系统性与创新性,经常会被审稿人一票否决,哪怕其实你做的跟前人是不一样的。另外的使用就是报告幻灯片跟其他学术交流场景,

如果你能做到在大脑或笔记中快速定位到一个观点或现象然后几句 话说清楚,这个习惯能帮你离开学术界后在其他行业直接展开降维 打击。绝大多数离开学术界的人都不会继续保持了解前沿动态的习 惯而更多依赖过往经验,一个人的经验如何去抗衡一堆参考文献背 后成百上千人的经验? 当然有些东西那些成百上千人也许都不知道, 特别是工程上的。不过这种"学院派"的研究习惯最大的好处就是让 人更谦逊些,知道一山更比一山高,处处重峦叠嶂。那些上来就趾 高气昂且沉醉于自己小圈子的人,不管在学术界还是其他行业,九 成以上是鼠目寸光之辈,请远离这些人。

谈文献管理, 我希望不要掉到工具选择的坑里, 要构建完整的知 识管理体系,哪怕是基于便签的只要能实现头脑知识的更新换代就 可以了,如果能方便写作投稿,那就更好了。切不可舍本逐末,单 纯把文章发表作为目标去优化, 毕竟所有的短期目标都要最终整合 成你学术生涯的一部分,可以抽时间去想想一些简单的问题:

- 我的研究究竟有没有实际意义?
- 我的发现是否有助于学科发展或写入教科书?
- 我现在纠结的事 10 年 20 年后会不会纠结?

以人之渺小, 所有的时间都是浪费, 但你要为自己浪费的时光赋 值。

# 7.2 信息收集

- RSS 古董阅读器
- 科技类 nature / pnas / science
- 健康类 NEJM / JAMA
- 综合期刊 plos one/peerj
- 专业顶级期刊
- 会议论文
- twitter 上 #icanhazpdf 文献求助百度小木虫
- 100% 读题目 20-50% 读摘要 5-10% 看图 1-3% 全文
- 追踪课题组
- 科技文献已经超越了人脑处理信息的能力了
- 论文的通货膨胀
- 以教带学

文献管理软件方面有收费的也有免费的,一般而言可通过咨询自

己所在科研机构的图书馆来获取是否购买了相应的软件。收费软件 我使用过 Endnote、papers 及国产的 Noteexpress,应该说早期它们 之间差异还是明显的,但到今天基本同质化了。

### 7.3 文献引用

文献的收集是为了使用,科研中最主要使用文献的场景就是论文写作,当你想参考别人的研究结论或研究数据时,一般会在相应位置插入参考文献(引文)。然后,在论文的结尾或章节页面结尾要对引用过的参考文献进行列表,方便读者按图索骥。引文与列表要有定位功能,引文要有对应列表展示题录信息,列表要保证读者可以根据期刊、作者等信息可检索到原始文献。现在很多出版商都会提供富文本的论文,里面的参考文献都可以直接链接到原文网页,当然作者不必要实现这个功能,但作者一般要保证自己初稿是符合待投期刊格式的,这些在投稿指南中都会写的很清楚。

如何保证引用符合格式要求是研究人员要注意的,期刊格式要求 其实主要就是限定页面布局与参考文献格式,主流期刊会提供 Word 文档模版与 LaTeX 宏包两种方式,前者很难限定参考文献格式,后 者使用难度很高,都是要配合文献管理软件的对应插件来实现。文 献排版的底层逻辑是在插入文献时在论文里生成一个针对该文献的 锚点,当编译或格式化时,通过锚点查找你文献库(一般是独立的 文件保存,不同文献管理软件不一样,bib 文件相对通用性好些)里 的题录信息,然后按照特定格式要求生成论文里的引文与文末的文 献列表。引文有时是数字,有时是人名与年份,一般都很简短;文 献列表信息量更大些,更方便读者查找源头,格式与排序不同期刊 的要求也差距很大。

其实,每篇文章的题录都可以生成特定值,甚至直接就是原文链接,具象化的产物就是 DOI,你可以通过文章的 DOI 指纹与在线数据转换接口快速得到更丰富的信息。现代科研里,文献列表的信息越来越不如网站链接便利,可以设想未来的期刊应该主要是网页版,且引文可以通过超链接互通,这样的学术交流效果应该是最好的。不过,眼下我们还是要遵照期刊要求投稿,不过现在期刊对于格式的要求已经因为自动化排版流程而越来越少,科研工作者可以把精力更多放在内容生产上而非手工整理格式,效率低且错误率高。

# 7.4 文本挖掘

- 7.4.1 关键词
- 7.4.2 作者
- 7.4.3 时空分布

### 7.4.4 影响力

- 科学家的奖励信号 http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0142537
- 提前发表可以提高影响因子 http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0053374
- 题目越短引用越多 http://rsos.royalsocietypublishing. org/content/2/8/150266

# 7.5 荟萃分析

# 学术生活

# 8.1 项目管理

- 8.1.1 香肠战术与拖延症
- 不断切分到具体可执行
- 执行时不思考整体,关注当下
- 转移注意力可放松, 但要设计成杨白劳模式
- 向后工作法 1、写新闻稿 2、写 FAQ 3、写用户文档 4、写代码

### 8.1.2 时间管理

- 开立多个项目,保证时间都浪费在有意义的事上
- 进度控制
- 紧急重要四象限
- 与未来自己博弈
- 8.1.3 笔记管理
- 8.2 学术出版
- 8.2.1 期刊论文
- 合作者人数与版本控制
- 先画图后写作
  - 可视化陷阱

- 模块化制图
- 语言简洁可能不利于发表, 但有利于传播
- 公开代码、数据、软件来提高研究的可重复性,被重复有利于提高学术影响力
- 信任合作者
- 马上动笔, 拒绝完美
- 博客文章、软件包在传播上与论文一样重要,甚至更重要
- 论文由方法、数据、结果跟结论组成, 先完成前三个
- 阴性结果也是结果,对其他科研人员也有参考价值,也要考虑发表,哪怕是博客发表
- 预先发表 资料
- 投稿到你设想中读者会读到的地方
- 通过社交网络传播你的发现
- 开放获取??? 基金与影响力传播
- 延长论文的半衰期
- 综述
- 回复审稿人
  - 逐条回复
  - 指明文中修改的位置

#### 8.2.2 会议摘要

### 8.2.3 专著

- 在线出版
- 允许反馈
- leanpub / gitbook / amazon kindle direct publishing / book-down
- 按需求出版纸质版 lulu.com

#### 8.2.5 软件

- 软件就是发表
- JOSS

# 8.3 学术会议

#### 8.3.1 口头报告

- 提前到场交流
- 娱乐而不是教诲
- 写给观众而不是自己
- 用所见即所得方式
- 首页末页有联系方式
- 大字体
- 有链接
- 对比色
- 图片文字比 1000:1
- 解释图片时先说干什么用的,然后解释坐标,然后解释关键现象
- 解释公式时用文字不要用单一符号, 脚标不要太多
- 注意时间 1-2 分钟一张幻灯片
- 报告后写邮件感谢组织者

### 8.3.2 海报报告

- 减少文字描述,使用条目来概括研究
- 从左到右,从上到下的阅读顺序
- 信息图可以加分,但比较费精力
- 使用 betterposter 设计风格: 左侧表示研究细节,中间放关键词加大加粗的结论配上论文 QR 码,右侧放回答问题所需要的图表,制作时间可以极大缩短,用色块来提高识别度
- 使用 butterpoposter 设计风格:上述风格的改进版,引入图形摘要,标题占右上 1/4,右下是图形摘要,左边是模块化的高亮点或细节

#### 8.3.3 电梯报告

• elevator pitch, 一分钟甚至三十秒来报告你的研究或引发兴趣

### 8.3.4 听报告

- 携带名片
- 记笔记或录音, 当天消化, 邮件追踪
- 礼貌交流
- 提问题不要讲自己的故事
- 不要问与学术无关的事

# 8.4 审稿

- 尽快, 否则不做
- 可以进行发表后审稿或公开评论
- 流程是主编确认投稿是否合乎范围,分配给专业副主编,副主编 寻找审稿人
- 如果对方改了也不能达到你认为的标准, 拒绝而不是大修或小修
- 开放审稿会提高同行评议准确率
- 审稿指数

### 8.5 学术合作

#### 8.5.1 数据共享

- 通过学科内流行平台实现
- 一定要有文档解释编号
- 使用开源格式与许可

#### 8.5.2 社交网络

- 记录学科内的重要进展
- 如果个人忙不过来,可以考虑多人合作编辑或找到组织成为作者
- 跟业界联系的渠道
- 提高自己交流与可视化的能力
- 每个人每天都会在互联网上花费时间, 博客是有机融合
- 互联网只关注异常、争论与胜负而不是共识,共识可以交给科普
- 质疑要比实际操作轻松
- 对自己文章要按互联网信息传播速度回复或形成论文发表来回应
- 不回复质疑会影响学术声誉
- 博客行文会影响别人对你的看法
- 构建 / 加入在线学术社团

- 放大影响力
- 构建趋势感
- 线上线下互联
- 多使用图片
- 谨慎介入糊涂账话题
- 均值、中位数等单一数值常在媒体报道跟论文中用来指代群体, 但其实牺牲了很多重要的分布细节讲而产生误导, 甚至让人产生 被平均的感受,而直接展示整体其实并不困难,重要的是作者/研 究者应放开心态, 从引导读者认同自己观点转为让读者自己探索 出结论
- 多媒体 v.s. 文字
- 快速反馈交流
- 跨学科研究中的囚徒困境

### 8.6 讲课

- 教案与视频在线化
- 在问答社区贡献答案 quora stackoverflow reddit 知乎果壳
- slideshare speakerdeck figshare
- mooc 课程尽量短(少于 10 分钟) 脸皮要厚注意产权

### 8.6.1 学生如何学习?

首先搞清楚你自己学科里学习的含义,如何去掌握知识,自己在 学习过程中有益的经验。学生的学习方法有深入学习、策略学习还 有表面学习。了解个体学习的差异如何影响学习效果, 例如前置知 识、动机、学习策略还有对于学习智力能力的信仰。掌握元认知方 法,掌控自己的思考过程。明白教学是承前启后的受多方面影响,要 根据内容与学生调节教学方法,要知道学生对不同教学环境的应对 策略。

#### 8.6.2 如何激励学生?

激励就是让学生渴望或乐意做某事。激励的理论模型: - 期望-价 值理论学生对目标有一个期望并对这个期望有一个价值判断 - 成就 目标导向理论有些人是掌握目标导向,有些是表现目标导向-成 长-固定思维模式有些人认为能力可以不断发展,有些则认为无法变 化-自我表现理论人类三个基本需求:能力认可、归属感及自治激 励方法就是让学生提高激励的体验, 例如预先教一些技术提高完成

度、课前测试、让学生选择主题、分享学习经验、提供正面反馈、考核时比较灵活(6次作业取5次成绩)在教学时要考虑作业与评价方式,学习活动,反馈还有课堂气氛。给予学生主动权,提高存在感与社交活跃度,建立对教学行为评价的持续反馈机制,记住学生的名字... 学习金字塔从下往上:记忆-理解-应用-分析-评价-创造

#### 8.6.3 评价学习

学生学什么与怎么学经常依赖于如何被评价,评价有三种形式:-诊断式:小测试、涂鸦板、头脑风暴、一对一会议、思维导图还有概念测试-形成性:让学生提出最难懂的问题、一分钟论文、小抄、随堂测试(给出比例)、同行评议、反馈、问题集、非正式展示、进展报告-总结性:期中期末最终展示

• 教学目标、教学行为与反馈之间要相互有联系,给出指引,自己 先完成并且对学生作业做出点评

#### 8.6.4 课程设计

- 从教学目标、教学形式和评价三个方面入手考虑课程设计。
- 首先整理课程概念,头脑风暴选出来以后思考概念间的联系,反 复思考概念间的相互关系。课程结束后可以让学生自己去绘制自 己的课程地图。
- 教学目标上从学生角度出发,考虑他们通过课程知道什么、做什么以及有什么样的感受,就是从脑、心、手三个方面去设立,用强动词例如解决、设计、定义、评价而不要用知道、理解等词来设立目标。
- 评价方法参考上面评价章节
- 教学形式上明确学习时间不同于上课时间,提供知识与实践反馈, 采取主动教学等策略
- 布鲁姆分类学

#### 8.6.5 互动学习

- 提高课堂参与度的组织形式,例如分组相互讨论,课程设计可以按照预热-小教程-团体活动-分享来划分时间
- 翻转课堂

#### 8.6.6 教学理念

- 教学档案的一部分,常用来作为简历教学经历的补充。一般一页, 说明三个声明,更多是理念不是行为。整理教学理念常用来整理 自己关于教学的理解,作为教学的行动指南,也可以用到工作申 请上去。
- 首先去思考理念的来源与如何起源,然后可以采用隐喻,例如园丁、教练、瑞士军刀,说明目标-方法-评价-改进。

### 8.7 课题组管理

- slack / hipchat
- 按项目交流
- 定期交流,组会分为个人组会与集体组会,个人组会两周一次,需要交进度报告存档,仅学生与老师讨论。集体组会一周一次,每次一个人讲项目大家讨论,一个人讲文献,然后讨论实验室内部管理问题,最后讨论聚会等科研以外问题,每学期初定下各次组会主持人。
- 人员管理要及时,新成员两轮面试
- 分享文献
- 分享实验室内部规定

#### 8.7.1 科研的创业隐喻

其实科研,特别是理工科科研,很像是创业过程。互动的理解这个过程有助于青年科研人员知道自己究竟在干什么。

- 投资人: 政府或企业
- 公司:项目或课题
- 董事长: 课题组长 (PI)
- 经理: 小老板或子课题负责人
- 项目经理:博士生/硕士生/本科生
- 员工: 无
- idea / 论文: 产品
- 质检员: 张全蛋, 额, 打错了, 是审稿人

• 产品上市: 论文发表

• 产品发布平台: 学术期刊

• 产品未通过内部质检:论文拒稿

• 产品有销量:论文被引用

• 产品成为爆款:论文被大量引用

• 产品被媒体推荐:论文被编辑或综述点评

• 产品滞销:论文无引用

• 产品原料配料表:论文数据共享

• 产品生产流程:数据处理

• 产品被模仿: 论文被重复验证

• 产品补丁: 论文修正

• 产品更新换代:论文跟进发表

• 产品推介会: 学术会议

• 产品退市: 论文撤稿

• 公司融资: 申请基金

• 新三板 / 创业板: 申请青基

• A 股: 申请面上

• 路演: 项目申请书

• 估值: 学术影响力

• 竞争公司: 研究方向

#### 8.7.2 基金申请

- 基金透明度问题 http://journals.plos.org/plosbiology/article?id=10.1371/journal.pbio.1002333
- 阶梯化基金
- 合作者
- 预算
- 评审

# 8.8 学术评价

- 定量化,论文第一影响因子优化问题
- 学术评奖存在身份限制
- 影响力评价 altmetric
- 预印本、开放获取期刊与社交网络互动是当前学术界的新潮流, 不过也可能成为学术圈自恋的新战场, 更高下载量与社交媒体转 发评分有可能成为科研人员继 SCI 论文、影响因子与 h 指数后新 的"优化"指数。

### 8.9 学术道德/伦理

### 8.10 案例

- 科学新闻探索
- 华盛顿邮报根据一项研究成果写了篇科学报道, 然后捅了统计学 家的马蜂窝, Gelman 称之为"beauty", 因为这项研究基本把实 验设计中常见的错误犯了个遍,而作为普利策奖得主的记者完全 没看出来
- 学科是存在鄙视链的, 例如这位物理学家看到皇家化学会发表一 篇烤面包公式的论文后不但马上发明了一个 bullshit 公式,还声 称如果物理学会敢发表这种东西, 自己马上放弃会员
- 巫毒娃娃的 PNAS
- 数学家关于进化的争论
- 公民科学家
- 发表一篇好还是多篇好的讨论

# 就业

# 9.1 简历

- cv v.s. resume
- cv 是完整的, resume 一般 1-2 页, 结果导向
- 常用 ID 简短难重复
- 商用个人用 email 分开
- 线上线下一致

### 9.2 邮件

follow up thank you notes

### 9.3 面试

information interviews look into eye elevator pitch small talk 了解公司运营、财报、新闻 STAR 方法回答问题

- Situation: Set the scene and give the necessary details of your example.
- Task: Describe what your responsibility was in that situation.
- Action: Explain exactly what steps you took to address it.
- Result: Share what outcomes your actions achieved.

### 9.4 工资

涨工资与向上管理

### 9.5 高效反馈

Performance feedback is the on-going process between employee and manager where information is exchanged concerning the performance expected and the performance exhibited.

- Specific rather than general.
- Focused on behavior rather than on the person.
- Given in order to help, not hurt.
- Directed toward behavior which the receiver can do something about.
- Well-timed.
- Limited to the amount of information the receiver can use rather than the amount you would like to give.
- Checked for clarity.
- Followed up on at a later date.
- Giving negative feedback: correcting poor performance

Note poor performance immediately upon observing it. Specify what does not meet expectations. Refer to performance standards. Note the effect of observed performance on work group/organization. Model or restate appropriate performance. Describe negative consequences. Obtain agreement on the problem. Mutually seek solutions. Agree on action plan. Encourage improvement. Set date for check (if appropriate). Don't belabor a point. Move forward after the discussion. Avoid giving correction in public.

• Giving positive feedback: praising good performance

Praise immediately on observing good performance. Be specific about what was good about performance, refer to performance standards. Note how meeting (or exceeding) standards helps work group/organization meet strategic objectives. Encourage maintaining this level of performance.

#### 领导力 9.6

- 9.7 职业规划
- 三到五年一个周期
- 职业 9.8
- 9.8.1 学科鄙视链
- 9.8.2 博后

欧洲 hard money soft money 企业博后

- 9.8.3 常任轨
- 常任轨研究教授
- 常任轨文理学院教授
- 9.8.4 非常任轨
- 研究性教职
- 行政工作
- 9.8.5 非高等教育
- k12 教育
- 9.8.6 政府
- 9.8.7 科学顾问

in house 专利考试 注意细节拼写与写作

### 9.8.8 咨询

解决问题的方案

9.8.9 企业科研/药企 药企与医学院

9.8.10 销售与应用专家及营销 主要在仪器公司工作,为科研需求提供支持。

9.8.11 创业

9.8.12 编辑/出版社

认真严谨但更重要的是对学科前沿的把握

9.8.13 NGO

主要管理基金,产学研结合。

9.8.14 金融

工作压力大,资金流全流程了解

9.8.15 公共卫生

复杂性学科

9.8.16 科学传播

把自己的成果讲给别人

9.8.17 医药交流

把科研进展带给医生 (medical science liaison) 帮助药厂把新药与疗法传播给客户 (medical communication)

9.8.18 数据科学家

附录:现代科研兵刃谱

工欲善其事,必先利其器。今天绝大多数知识都是工具生产出来的,也就是想使用知识,肯定要先学工具,而工具又需要知识铺垫,这就成了一个鸡生蛋蛋生鸡的问题。虽然事后总结都有千般道理,但就我人经验而言,工具与知识是相辅相成缺一不可的,过于关注知识会导致脱离实际而沉迷于工具选择则有很高的迁移成本。这里的忠告就是不要想太多,先迈开步子,遵循梯度下降算法来寻优。也就是说,随便找个工具用起来,用实战来丰富需求,根据需求定向选择最适合自己的工具而不做工具的奴隶,如有必要,自己创造工具。另外,尽量选择那些花费百分之二十的精力可以掌握百分之八十的内容或应用场景的工具。同时系统学习那些使用频率高的工具,其余的只要知道其存在即可,不要捡芝麻丢西瓜。

# 文本编辑

科研用文本编辑工具主要应对排版要求,早期排版系统基本都是通过 TeX 语言来实现的,后来由于个人电脑普及及新兴学科的出现,很多科研人员上手会用的都是可见即可得的文本编辑器。现在期刊投稿一般会支持基于 TeX 的投稿及常见可见即可得文档,这些都是本地编辑。另一个当前流行的可见即可得文本编辑方式是在线协作,例如谷歌文档、石墨文档、腾讯文档等。对于需要协作完成的论文,在线协作文档极大方便了实时交互与版本控制。其实利用基于 Git 的GitHub也可以实现在线协作与修订,不过门槛比较高,但有希望成为一些期刊今后的投稿系统原型。例如 Authorea 就集成了在线协作、支持 markdwon、文献管理、数据分析、托管、版本控制、投稿等一系列功能,有希望成为下一代文本编辑工具,价格并不便宜但好于传统办公软件。数据分析环境容器化与项目化正在成为一种流行趋势。部署数据分析环境是很头疼的事,各类包依赖、软件版本混杂与系统平台大大阻碍了分析效率。目前有两个分支解决方案,一种是通过云计算或集群计算平台来实现在线数据分析,目前

R Cloud 与 RStudio 内测的RStudio Cloud就是代表;另一种则是对软件配置环境进行打包,确保本地部署的一致性,这条路需要容器化技术作为依托,docker 差不多是目前最流行的轻量容器化技术。目前市面上已经有针对 Jupyter notebooks 的Binder,可以直接将一个 Github 仓库打包成 docker 镜像然后一键部署到JupyterHub上,也可以通过stencila本地创作后在线部署。R 社区也有rocker镜像或liftr 包来实现分析环境的快速部署。当然单纯分析脚本是不够的,数据也应该可以打包或链接并方便分享,目前支持此功能的此类产品是CodeOcean,容器叫做胶囊,里面可以打包脚本、数据及生成docker 镜像的配置文件,而且也有期刊支持胶囊与论文的同步发表了,但目前版本控制功能还没有,无论如何研究中的可重复性危机有望基于技术来减弱。

还有些文本编辑器是基于纯文本的,通过文本中的控制语句来实现排版,TeX 就是其中最流行的。Overleaf支持基于 TeX 的在线文档协作,甚至你可以直接用其向特定期刊投稿,同样的工具还有sharelatex。不过,TeX 的控制语句实在太丰富,学习起来比较困难。Pandoc 的出现方便了其他更简单的标记语言对 Tex 的转换,其中最容易上手的是Markdown。不过 Markdown 存在很多版本,其中基础版支持的排版功能非常有限,Pandoc 对其进行的扩展则支持了更丰富的功能方便排版。所以理论上你可以使用 Markdown 来写论文,不过这需要你的编辑器支持一些额外的功能。

总结一下,作为现代科研工具,理想文本编辑器需要至少有以下功能:

- 支持在线协作、评论与修订
- 支持版本控制
- 支持常见文献管理工具
- 支持期刊样式排版
- 容易上手

# 文献管理

现在的文献管理工具一般都支持常见文本编辑工具,也就是可以很方便的插入参考文献。然而,文献管理工具要同时具有收集、整理与分析的功能为佳。当前主流文献管理工具都已经支持浏览器层次的文献收集,也就是直接通过快捷键、脚本或浏览器扩展一键自动提取文章页面中参考文献信息并存入用户指定的文献库。要实现这个功能、多数需要知道文献数据库网页结构、当前很多文献数据

库都推出了自己的文献收集应用,有的直接收购了文献管理软件。

Endnote是比较老牌的文献管理工具,不同于前面所说的网页采 集,其自身就有与常见数据库的搜索接口,国内科研机构图书馆大 都提供培训。与之类似的NoteExpress则属于国产软件、据说对中文 期刊格式支持更好,类似的还有Mendeley、医学文献王、服务 TeX 里 BibTex 的 JabRef 与 Mac OS 下的Papers。这些工具起步较早, 从单机时代就有用户,还有些工具诞生于互联网时代,有着更丰富 的功能。

Zotero 属于互联网精神的产物,特别是前者本身就是基于火狐浏 览器, 其支持的文献格式样式都非常多, 而且也有着丰富的文本分 析扩展应用。Paperpile则属于基于谷歌文档的应用,可以很方便地 管理在谷歌文档中使用到的文献。DOI与crossref的出现则更方便了 文献的搜索定位。可以说基于互联网的团队化文献管理正在成为趋

总结一下, 作为现代科研工具, 理想文献管理软件需要至少有以 下功能:

- 支持常见文本编辑器
- 支持在线文献采集
- 支持文献库协作与共享
- 支持文献信息学探索
- 容易上手

# 数据处理与绘图

数据处理方面很多学科只需要电子表格与基本的统计分析就可以 了,很多在线服务就可以完成。然而,有些学科需要更丰富的功能 例如多元统计分析与假设检验时, 电子表格提供的功能可能就不那 么明显了,有时需要学习使用电子表格的宏扩展来实现。此时,很 多人容易陷入哪个分析一定要用哪个软件做的误区, 其实多数数据 分析软件的算法都差不多, 只不过默认值可能不同, 有些功能则藏 的比较深, 此时请善用搜索引擎。

所见即所得的数据处理与绘图软件有很多, Excel、Origin、 SigmaPlot 与SPSS 是科研中用的比较多的。这些软件都是图形界面 操作且都收费, 其内置很多现成的分析模块应对实际科研问题, 但 这些简化会导致使用者知其然不知其所以然, 在分析方法使用上陷 入误区。

编程分析与绘图则属于基础的工具, R、Python、Matlab 与SAS

都是这类工具的代表,应该说掌握其中任意一个就足够应对科研中需要的数据分析了。不过通常这类工具比较难学,最好是配合数据分析方法的学习同步掌握,而且要通过案例来理解方法,累积经验。如果推荐一个,那么基于 R 的 ggplot2 作图与其背后的 tidyverse 数据分析套装则是很好的起点。如果更进一步,可以用shiny 来制作交互式数据展示界面。

此外,互联网上也有一些在线应用可以很方便地生成特殊图形例如百度脑图可以用来生成流程图或思维导图、Autodraw可以用来画简笔画、plotly可以在线完成绘图等。甚至网上还有直接上传数据后自动猜测你需要进行分析与制图的Charted。这样的工具只要搜索你所需要的分析然后加上"online"作为关键词就可以找到。

总结一下,作为现代科研工具,理想数据分析与绘图软件至少有 以下功能:

- 支持科研用统计分析
- 图片默认输出美观大方支持绘图自定义
- 具备可重复性的宏功能或数据处理脚本
- 容易上手

# 数据同步

科研数据在不涉密情况下一定要备份,实验室要配备专用数据处理电脑,用 NAS 来进行本地备份,工作文件夹原则上在实验室电脑上,通过远程登录软件例如 TeamViewer 或终端来处理数据。如果使用个人电脑,工作文件夹要做好云存储,国内的话iCloud或OneDrive或坚果云就可以,国外可选DropBox或谷歌云端硬盘。文献可以通过坚果云的 Webdev 来同步全文。完成的项目要及时存档,可使用百度网盘。

# 实验室管理

实验室内部管理可使用slack或国内的钉钉,最好区别工作与私人的交流工具。项目管理可以直接用 GitHub 项目功能来做,分为计划、进行中与完成三部分,每次组会进行更新。

### 幻灯片制作

幻灯片制作的工具不仅仅限于微软出品的 PowerPoint (ppt) 或 苹果公司出品的 keynote, 但不可否认的是可见即所得的工具对于 幻灯片的制作是很方便的。基于 Beamer 的幻灯片虽然足够简洁美 观,但也存在一定的制作难度,需要学习 TeX。基于 html5 技术的 幻灯片一般支持 markdown 语法编辑, 样式可用 CSS 模版进行控 制。例如 xaringan 就是基于remark.js 这一网页幻灯片制作工具配 合 Rmarkdown 来制作幻灯片的。不过, 幻灯片制作不要沉迷于模 版选择,只要不出错就够了,太花哨的功能喧宾夺主。不过从互动 角度出发一些挂件例如countdown 来进行倒计时, DirectPoll 进行实 时投票统计,也可以同时开视频或进行语音输入。

同样,谷歌幻灯片可以实现在线制作幻灯片。很多网站可以直接 制作网页版幻灯片,例如基于reveal.js的slides或基于有漂亮切换类 似prez的impress.js的strut。在线制作幻灯片可以让分享变得很容易 并提高了曝光度,很多网站例如slideshare 或 Speaker Deck 也支持 上传本地幻灯片进行分享。

建议日常计划用幻灯片进行总结、图片达到会议级别。 作为现代科研工具,理想幻灯片制作软件至少有以下功能:

- 简洁的编辑制作页面
- 模版简洁可自定义
- 可在线分享

# 学术交流

学术交流是科研生活中可以说最重要的一环,现代科研体系的分 工合作都要通过学术交流来实现。主流趋势包括论文预印本服务器、 开放获取与线上学术交流。

预印本指在通过同行评议发表之前事先将论文手稿托管在公开服 务器的研究工作。预印本服务器可以加速新思想的交流,接受预印 本发表的期刊可以从维基百科上查到。比较知名的预印本服务器包 括偏数学物理计算机科学的arxiv、偏生命科学的biorxiv 与偏化学 的chemrxiv。国内也有中科院的科技论文预发布平台来服务国内科 研人员。很多期刊出版方也在推广自己的预印本服务器来吸引高水 平研究, 所以可酌情选择。

开放获取是另一个趋势,要求研究工作可以公开让大众阅读。目 前很多科研基金都开始有了这方面的要求及预算。但值得注意的是 虽然开放获取期刊可能有更好的阅读数与引用表现,但有很多机构的开放获取期刊属于掠夺性期刊,给钱就发表,对学术评价与学科发展非常不利,可以通过一些网络上的列表来鉴别。要实现开放获取或者说透明科研,f1000research、PeerJ还有Plos都是还不错的先行者,它们在实践一些新理念,不过显然并不便宜。

线上学术交流除了期刊外,实际还要包括学术博客、多媒体展示、学术出版与网络身份。制作学术博客的工具可以直接借助平台例如科学网博客,也可以自己搭建例如使用Wordpress、Blogdown或者Netlify等工具。幻灯片制作也最好使用网页模式方便交流,xaringan、learnr等其他基于 Markdown 语言的幻灯片制作工具可以满足要求。学术出版物则可以通过bookdown或rticles等工具来完成。线上的学术身份识别对于存在大量重名现象的中国科研人员也是很有必要的,ORCID、Researcher ID、Scopus Auther ID、谷歌学术个人主页及国内的百度学术个人主页都是不错的网上学术名片。而在线交流的手段则可通过ResearchGate、Academia、Linkedin及twitter来完成。

审稿也是很重要的学术交流方式,建议使用 Publons 来构建自己的学术审稿记录。当然你可以在博客或微博上评论最新研究,甚至很多网络期刊网站的评论也有很好的思想碰撞,这里最关键的是要搞清楚你所在学科最活跃的网络交流平台,如果没有,自己搭建一个也无妨。

# 数据分享

数据分享是一个很重要现代科研特征,越来越多的科研成果正在 开放自己的原始数据供社区推动学科进步。其中,figshare、Open Science Framework、Dataverse与Zenodo都是这一潮流的引领者。良 好的数据分享不仅包含原始数据,还要包括处理后数据、数据收集 相关信息与处理代码,另外对于共享数据的使用也要尊重数据生产 者。

# 代码管理

后续我们会看到所有学科都会不可逆引入编程,所以代码管理工具也非常重要。Github与Bitbucket都是非常实用的在线代码管理与版本控制平台。而Rmarkdown与Jupyter Notebook等工具背后提倡的文学化编程也是很重要的代码开发工具。此外应考虑为未来自己

做好注释并记录运行环境保证重复性。Docker image等完整的数据 分析环境也可能成为现代科研的主流。代码的编写要能站到巨人肩 上:

Good writers borrow from other authors, great authors steal outright

#### 9.8.19 软件编译流程

C 语言源码编译运行过程是这样的: 先预处理源码, 调入模块, 然后转换成汇编语言文件,汇编语言文件可以被汇编器转为机器码, 然后通过连接器合并为可执行文件、最后加载到内存里运行。因为 C 语言是多数操作系统的基础, 所以多数操作系统也自带对应的 C 编译器。更重要的是, C 语言的库很丰富, 也就是工具函数比较多, 换别的就得自己写。这是很有意思的路径依赖案例,事实上任何语 言都应该可以拿来写操作系统,不过 C 是在开发 Unix 时候设计出 来的,现在流行的开发级操作系统都是 unix/类 unix 操作系统,加 上 C 在内存管理与 CPU 交互上的先天优势, 历史机遇下成为了主 流。

C 的核心地位还体现在很多高级语言的编译器是构建在 C 之上 的,或者是 C++ 之上,多数高级语言都通过限制自由度(例如不让 操作内存、功能模块化等)来实现上手容易与较高的开发效率,但 只要关注程序性能, 肯定回去学 C 或 C++ 的。GNU 的 GCC 编 译器是一个相对通用的编译器合集,可以用来编译包括 C 在内的多 种语言。然而, GCC 也是有历史包袱的, 所有有人就另起炉灶单独 针对 C 或 C++ 重写了效率更高的编译器及其后台,这就是苹果的 LLVM 项目与 clang 编译器。但要注意的是 LLVM 支持的语言不如 GCC 多, 所以如果你还要用到 fortain 或 java 编译器, 那就还是老 老实实用 GCC 吧,或者 cmake 的时候分别指定编译器,只要你不 嫌麻烦。一般而言,效率与性能往往不能兼得。

高级语言的编译过程跟相对底层的 C 或 C++ 是不一样的, Java 就是自己定义了一套运行环境 JVM,编译出的文件也是 JVM 可读 的,这就提高了 Java 的可移植性,降低了跨平台开发的难度,当然 你得保证这些平台上可以运行 JVM。其实很多高级语言是解释型 的, REPL 里可直接运行代码, 但同样会有人为高级语言写编译器 来提高运行性能,这个是按需求来。我个人感觉是用 REPL 的人一 般是应用层的, 关心有没有满足自己需求的函数; 用编译语言的人 一般是开发层的,关心软件工程及性能。然而,高级语言里如果打算 提高运行效率, 也会提供 C 或 C++ 的接口让程序员可以通过外力 来提高自由度。过度的功能封装实际也限制了高级语言的应用场景。

说到效率,自然少不了并行计算,openmp 就是一种并行化方案,可以支撑 C 与 C++。很多 R 包会通过使用 openmp 来底层加速算法,但这样的包一般都需要单独编译。目前 GCC 与 Clang 在编译器层其实都实现了对 openmp 的支持,编译时加上 -fopenmp 就可以。不过 mac os 自带的编译器是没有这个功能的,所以你需要 homebrew 来自己安装这些支持 openmp 的编译器然后在.R/Makevars 里把默认编译器换成新的就可以了。

例如你装了 llvm/Clang, 可以写上:

 $CC = /usr/local/opt/llvm/bin/clang \ CXX = /usr/local/opt/llvm/bin/clang + + CXX11 = /usr/local/opt/llvm/bin/clang + + CXX11 = /usr/local/opt/llvm/bin/clang + + (all control contr$ 

或者 GCC 版 (注意版本要对应):

 $CC = /usr/local/bin/gcc-8 \ CXX = /usr/local/bin/gcc-8 \ CXX11 = /usr/local/bin/gcc-8 \ CX$ 

或者更简单的方法就是不用并行计算,直接在.R/Makevars 里参数留空强制跳过对 openmp 的编译要求:

SHLIB\_OPENMP\_CFLAGS= SHLIB\_OPENMP\_CXXFLAGS= 同样的道理可以用在开发上,如果你编写 R 包涉及了相关并行计算功能,需要在 src 目录下创建 Makevars 文件来帮助用户提前配置编译参数,不过这方面我就没经验了。

### R 包管理

对于 R 包的管理,建议打印相关 Rstudio 出品的小抄作为参考。同时作为 IDE,Rstiduo 提供了包开发的模版,可以使用formatR 与 Rd2roxgen来重新格式化旧代码。用 Git 进行版本控制,同时使用roxygen2来编写开发文档。为了让包更容易使用,可以用 Rmarkdown 来写小品文方便读者上手,另外就是使用testthat来进行代码的单元测试。对于代码的执行效率,可以用Profvis进行可视化而集成在线测试则可以通过travis-ci或appveyor来分别对 R 包进行 Linux 与 Windows 系统下的测试并统计代码覆盖率。可以在 Github 上发布、选择许可证、在 CRAN 上发布,也可以添加演示数据、提供 shiny 应用、写更新日志与 Readme 文档且放上前面所说的测试结果、下载量及覆盖度的各类徽章...你甚至还可以用 hexSticker 给自己软件包做个六边形贴纸当商标。当然,包完成后可通过 pkgdown来制作网站并通过learnr 来制作交互式教程。