Guideline for Common Computational Skills (GCCS2019)

- 熟练掌握科研相关的技能是顺利开展科研工作之必须,本文描述 Gao Group 研究生同学在读期间需掌握的计算方面应用技能(skills)
- 相关技能被归组为 track,每个 track 又包括 Basic 和 Advanced 两个级别。
 - 除特别说明外, 2014年之后入学的同学应
 - ◆ 在 Qualify 之前掌握全部 track Basic level 的技能
 - ◆ 并在毕业前掌握 Track 1、2 中至少一个的 Advanced level 技能
- 掌握程度划分为 了解→熟悉→精通 三个层次
 - 了解:知其然,可在 senior colleagues 的指导下,在科研中应用相关技术
 - 熟悉:知其所以然,可独立在科研中应用相关技术
 - 精通:知其所以"不然",可根据实际科研需求,自主对相关技术进行拓展和进一步开发

Track 1: Statistical Modeling

- Basic:
 - 结合 R/Bioconductor,熟悉基础统计学¹及常用统计数据处理技巧²;结合 Python 软件包,熟悉常用机器学习模型的应用³。
 - ◆ 了解 R 和 Python 在命令行下的基本调试方法 (R: debug; Python: ipdb 或 iPython 的 run -d)
 - ◆ 了解 Python 常用软件包: sklearn, NumPy, SciPy, pandas
 - ◆ 了解基础作图软件包: ggplot/Matplotlib 及其有用的扩展包 ggfortify/GGally

² 如 apply 系列 函数实际应用,data.table、bigmemory 快速读取,reshape2 的变形,plyr 的分组处理

^{1 《}统计建模与 R 软件》1~7 章

³ 如 SVM, random forest, decision tree, ridge regression, lasso, elastic net, logistic, glm, knn, kmeans, boosting, bagging, ensemble learning

- 了解基本统计检验方法:分布参数检验 (t 检验, F 检验等),方差分析, 非参数检验, Pearson 相关性检验等
- 了解常用的应用多元分析方法: Clustering/Classification/PCA⁴/SVD
- 熟悉 t-SNE 及类似降维可视化方法的基本思想和应用
- Advanced:
 - 精通常用软件包:
 - ◆ 数据处理: NumPy, SciPy, pandas
 - ◆ 深度学习: Tensorflow/Keras/Torch/PyTorch
 - ◆ 经典统计/机器学习: sklearn
 - ◆ 了解 Octave/Matlab/SciLab
 - 熟悉多元统计分析模型、方法与理论,如
 - ◆ 回归分析:多元 Logistic 回归分析、非线性回归分析、非参数回归
 - ◆ 主成分分析、关联性规则、因子分析、Survey Data Analysis
 - 熟悉主流统计学习模型,以及其在生物学中的应用及潜在应用
 - ◆ 以 SVM5为代表的 kernel learning
 - ◆ 以 CNN/RNN/AutoEncoder/VAE 等为代表的 deep learning
 - 强化学习与 deep learning 的结合
 - 以 GAN 为代表的 generative model
 - ◆ 了解以 HMM, Conditional Random Field 为代表的随机过程模型,以 Bayesian network 为代表的 Probabilistic Graphical model
 - 并从 Monocle⁶或类似软件入手,了解在缺乏时间尺度数据的条件下,伪时间序列的基本构建思想和后续分析方法

Track 2: Big Data

- Basic:
 - 熟悉 Linux shell 重要命令和软件,包括

⁵ libSVM(http://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm/)

^{4 《}统计建模与 R 软件》8~9 章

⁶ http://cole-trapnell-lab.github.io/monocle-release/

- bash, cat, cut, tr, grep, awk, sed, tar
- ◆ screen 基本操作
- ssh, wget, scp, rsync, lftp
- time, date, top, ps, df, du
- ◆ 熟悉 emacs/vim 命令行下 (没有鼠标) 的使用。
- ◆ 集群作业调度系统 Slurm 的使用
- 熟悉常用代码管理平台,包括:
 - ◆ 版本控制软件 Git 及相应 Github 平台的使用
 - ◆ 工作流程管理和复现框架 conda + snakemake
 - ◆ 至少一种<mark>自动报告格式</mark> (能够随输入数据不同而生成内容不同、但格式一样的分析报告文档): Jupyter Notebook, R Markdown
 - ◆ 跨平台软件管理系统 conda 及其 channel bioconda
- 了解常用的脚本语言及其生物学扩展库,并熟悉其中一种:
 Python(BioPython)、Perl(BioPerl)
 - ◆ 了解如何编写<mark>网络爬虫</mark>(至少要有 HTTP Request 和基于 Javascript 的 Ajax 两种)批量获取网站信息
- 熟悉 SQL-based DBMS: MySQL 或 SQLite

• Advanced:

- 熟悉 Linux 系统的维护,可以独立在 x86 个人电脑或服务器上从头安装 Centos 或者 Ubuntu,了解计算机、集群、云平台的原理和结构,能利用 原理解决简单的计算机故障
- 熟悉以 MongoDB, neo4i, HBase 为代表的 NoSQL DBMS⁷
- 了解一种编译型语言: Java/C++/C, 要求能够在命令行下对编译后的二进制可执行程序设断点动态调试
- 熟悉一种 Web server-side scripting language: PHP/JSP
- 熟悉常用的网页前端语言: HTML/CSS/Javascript
- 熟悉常用的 Web server: Apache, Tomcat 或者 node.js

⁷ http://bioinformatics.oxfordjournals.org/content/29/24/3107.full, also read http://www.infoq.com/news/2014/01/genomics-big-data-revolution

Track 3: Writing

Basic:

- 熟悉 markdown 的使用
- 熟悉文献管理软件: Mendeley/Endnote/Zotero
- 借助北大毕业论文/qualify/中期报告模板,熟悉至少一种基本的论文编写环境: Word / TeX,要求能够实现以下功能:
 - ◆ 图/表引用随文档变化而自动更新
 - ◆ 文献引用管理系统,文献的正确表示和排版 (Word: Mendeley/EndNote/Zotero; TeX: BibTex)
 - ◆ 数学公式的正确插入和排版 (Word: 数学对象; TeX: \$\$, equation, align, matrix 等重要环境)
 - ◆ 修订和审阅 (Word: 修订和审阅; TeX: changes 包)
 - ◆ 使用样式来格式化文本内容,而不是手动修改文本格式 (Word: 样式; TeX: section 等环境的自定义格式)