



2020-2021学年上学期研究生课程

生物信息与计算生物学

夏梦雷

mlxia@tust.edu.cn

2020-11-02



开篇

开篇： 请开始你的小计算？



开篇

从初中开始，我们就开始学习一元二次方程，
请问在你生活或者科研中，你是否用过？



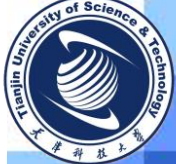
开篇

小明的出生日期是1994年6月25日，请问到今天为止，
他活了多少天？



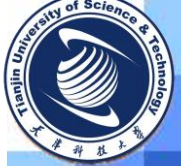
开篇

请以最快的方式获得生物工程学院
所有教授和副教授的名字？

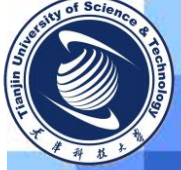


开篇

- **Nature**杂志是我们的顶级期刊，请问从**2020/01/01**起，一共发表了多少篇论文，请你以最快速度的下载全部数据？
- 天津科技大学生物工程学院/食品学院去年一共发表了多少篇论文，请您以最快速度下载下来？
- 你所在的课题组自建立以来一共发表了多少篇论文，请您以最快速度下载下来？



- 新冠病毒的全基因序列是什么？ 你如何开发快速检测方法？
如何设计治疗药物？
- 请分析一个新冠病毒的核心蛋白？



$$ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$$

$$ax^2 + bx + c = 0$$

```
syms a b c x d;  
t=a*x^3+b*x^2+c*x+d;  
Rexplicit = solve(t,x,'MaxDegree',3)
```

Rexplicit =

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 - \frac{b}{3a} - \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \\ \frac{\sigma_2}{2\sigma_1} - \frac{b}{3a} - \frac{\sigma_1}{2} - \frac{\sqrt{3} \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \sigma_1 \right) i}{2} \\ \frac{\sigma_2}{2\sigma_1} - \frac{b}{3a} - \frac{\sigma_1}{2} + \frac{\sqrt{3} \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \sigma_1 \right) i}{2} \end{pmatrix}$$

where

$$\sigma_1 = \left(\sqrt{\left(\frac{d}{2a} + \frac{b^3}{27a^3} - \frac{bc}{6a^2} \right)^2 + \sigma_2^3} - \frac{b^3}{27a^3} - \frac{d}{2a} + \frac{bc}{6a^2} \right)^{1/3}$$

$$\sigma_2 = \frac{c}{3a} - \frac{b^2}{9a^2}$$

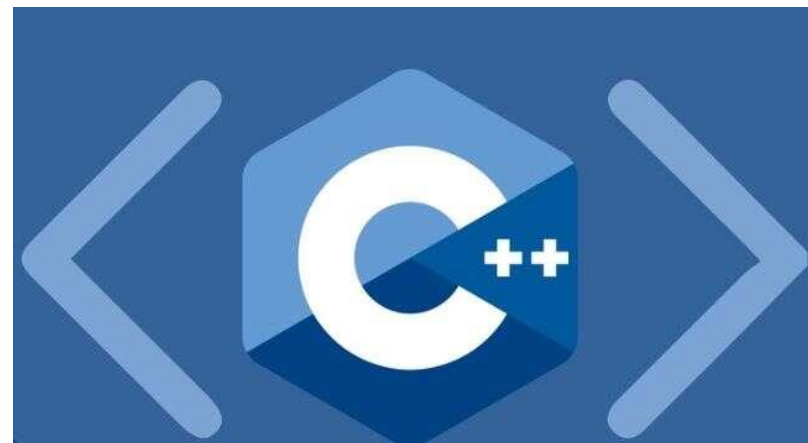


科学计算的三大马车

Matlab
Programming Language

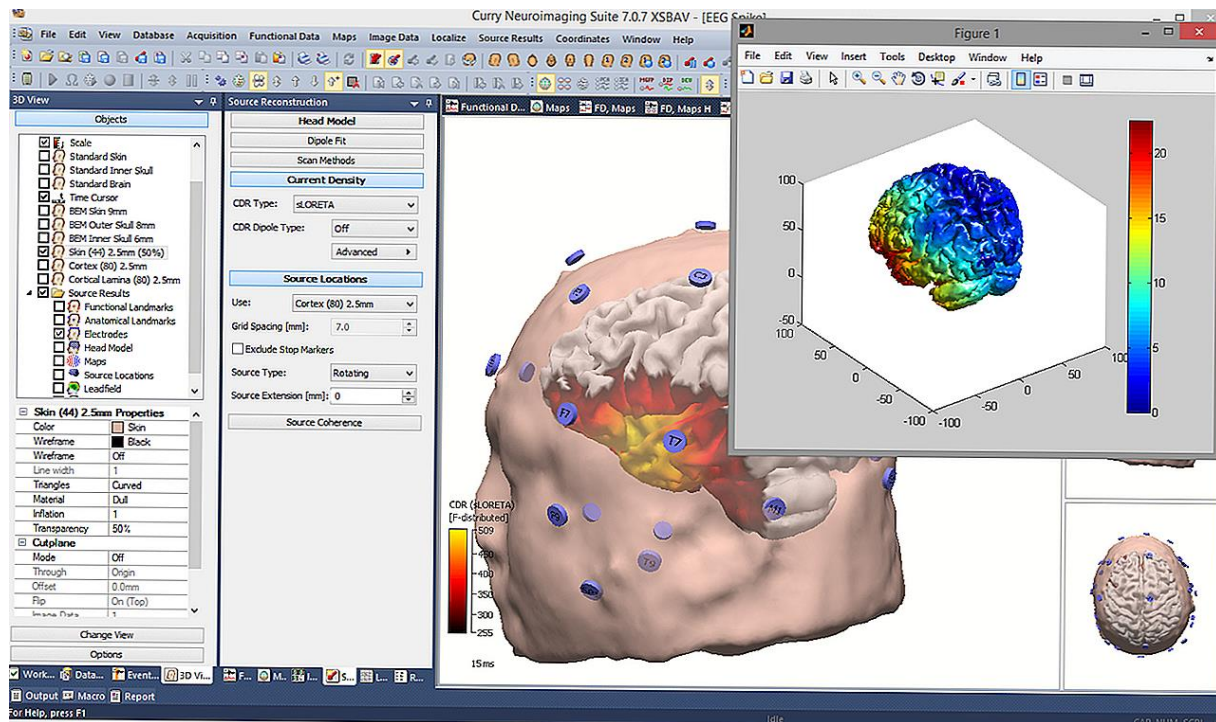
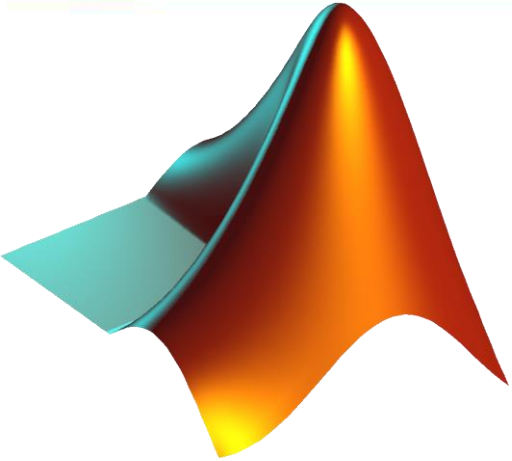


Maple™



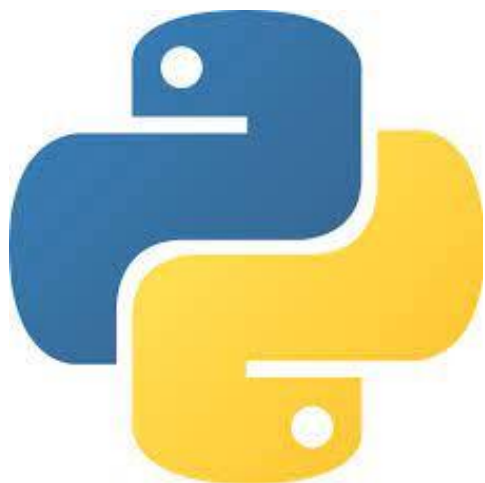


What is matlab





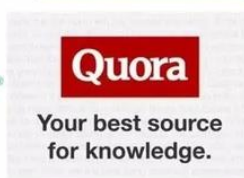
科学计算的三大马车



他们都在用Python……

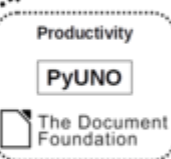
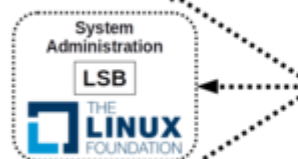


Google



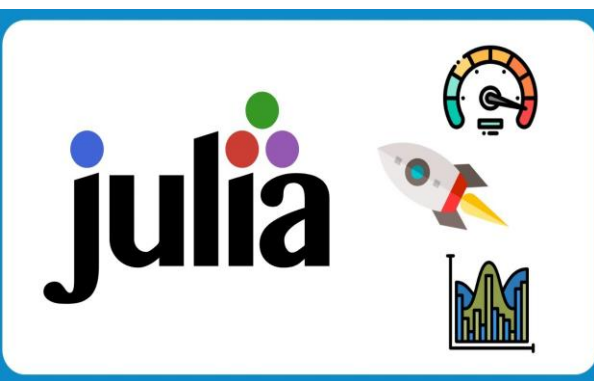
豆瓣 douban

Python 拥抱 C/C++ 的南理工





科学计算的三大马车



Soss.jl

Chad Scherrer
relationalAI

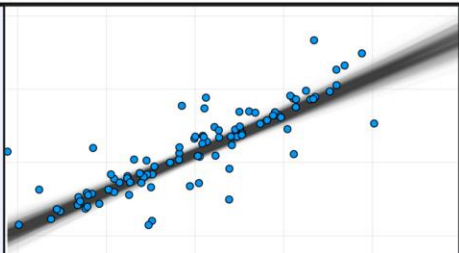
```

$$\begin{aligned}\alpha &\sim \text{Normal}(0, 1) \\ \beta &\sim \text{Normal}(0, 1) \\ \sigma &\sim \text{Normal}_+(0, 1) \\ \hat{y}_j &= \alpha + \beta x_j \\ y_j &\sim \text{Normal}(\hat{y}_j, \sigma)\end{aligned}$$

```

```
m = @model x begin
  α ~ Normal()
  β ~ Normal()
  σ ~ HalfNormal()
  yhat = α .+ β .* x
  n = length(x)
  y ~ For(n) do j
    Normal(yhat[j], σ)
  end
end
```

```
julia> post = dynamicHMC(m(x=truth.x), (y=truth.y,)) |> particles
(σ = 2.02 ± 0.15, β = 2.99 ± 0.19, α = 0.788 ± 0.2)
```



```
julia> symlogpdf(m).evalf(3)
```

$$\begin{aligned}& -0.5\alpha^2 - 0.5\beta^2 - \sigma^2 - \log(\sigma)n \\ & - 0.919n - 3.68 - \frac{0.5 \sum_{j=1}^n (y_{j1} - \hat{y}_{j1})^2}{\sigma^2}\end{aligned}$$

Python 之父对 Rust、Go、Julia 和 TypeScript 的看法

Q&A with Guido van Rossum



Python 之父 Guido 在最近一次新采访中分享了他对其它编程语言的看法，其中有些很有趣：

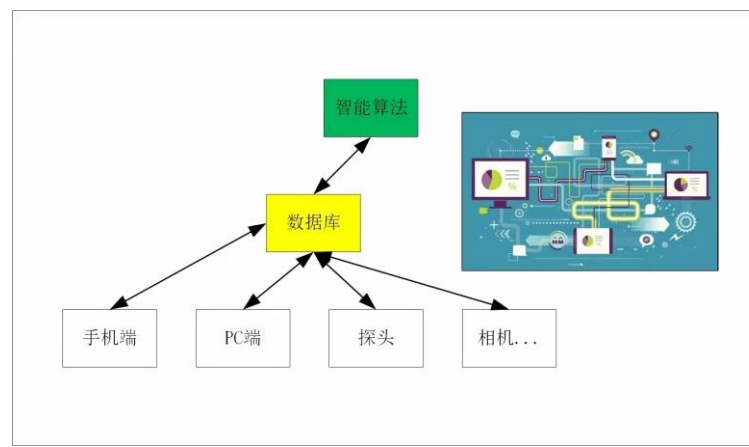
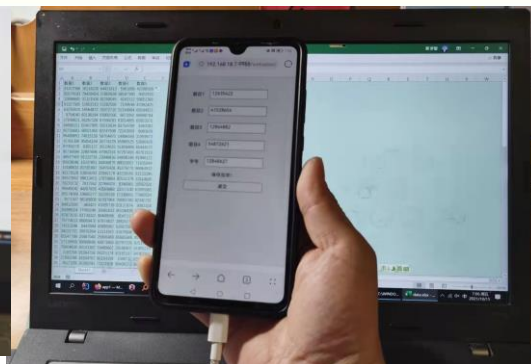
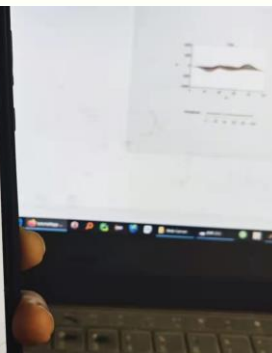
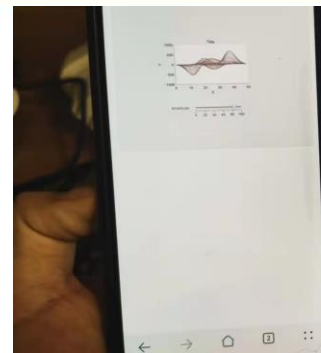
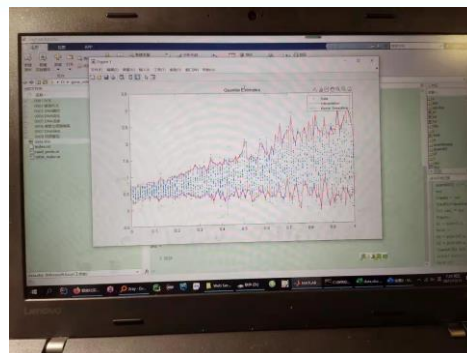
- Rust 在一个特定的领域真正改进了 C++，它使绕过编译器的检查变得更加困难。当然，它以一种近乎完美的方式解决了内存分配问题。
- 在所有的新语言中，Go 可能是最像 Python 的——或者至少是在通用的新语言中。
- Julia 有太多的细节看起来与 Python 非常相似。Julia 会在某个小众的地方是优越的，因为它的编译器为你优化了代码，而 Python 可能永远不会这样。
- TypeScript 做了一些 Python 仍在等待解决的事情。我们正在向 TypeScript 学习。听起来 TypeScript 也在向 Python 学习，就像 JavaScript 在一些领域向 Python 学习一样。



科学计算的三大马车

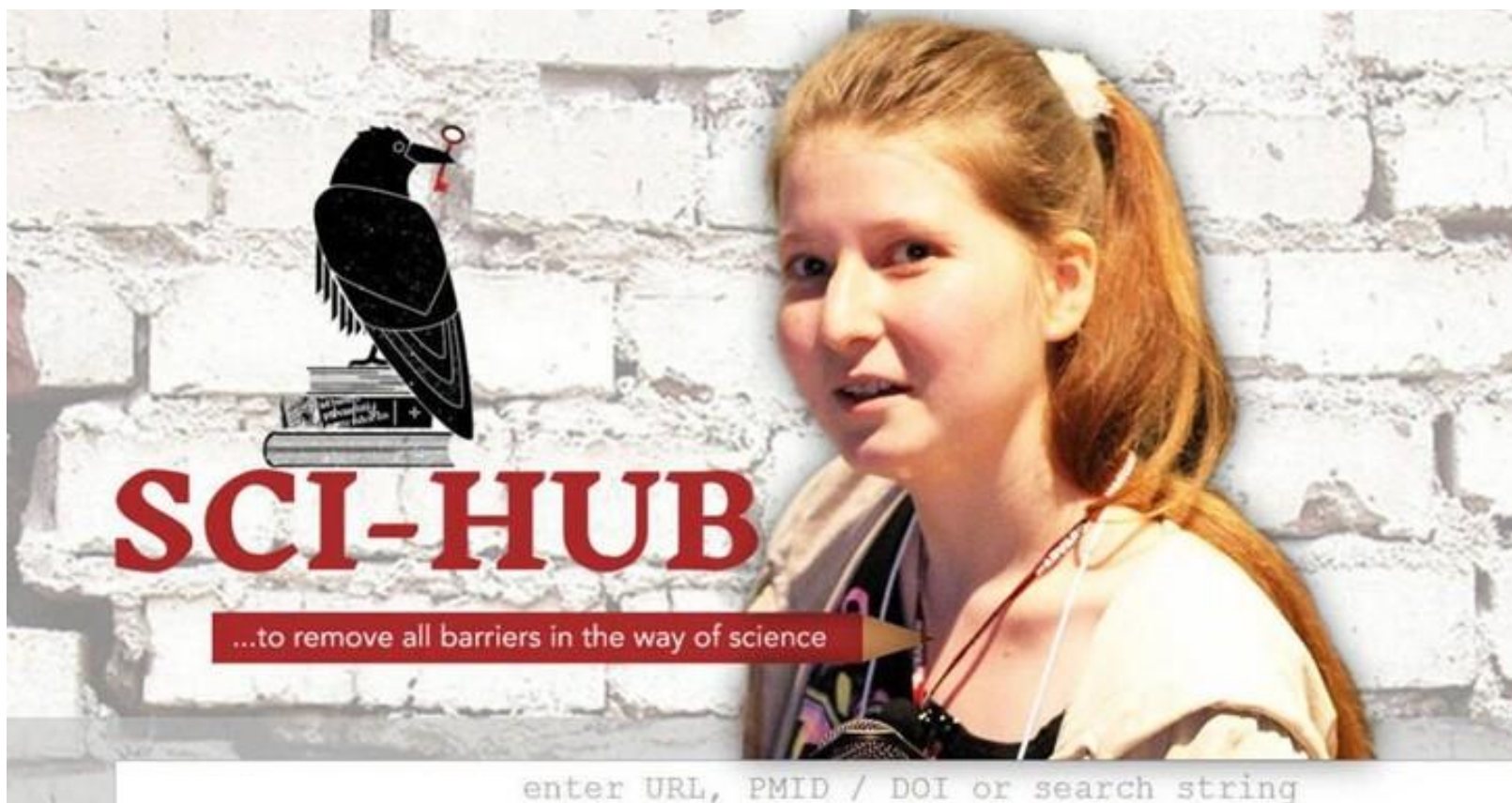
Matlab
Programming Language







正式编程





下载所有文献