tidysą: efektywne przetwarzanie sekwencji biologicznych w ${\sf R}$ Dokumentacja interfejsów

22 stycznia 2021

Mateusz Bąkała, Dominik Rafacz

promotor: Michał Burdukiewicz

Spis treści

1	Wstęp	4
2	Interfejs R	4
_	2.1 Funkcja alphabet()	4
	2.2 Metoda as.character()	4
	2.3 Metoda as.matrix()	4
	2.4 Funkcja generyczna as.sq()	5
	2.5 Funkcja generyczna bite()	5
	2.6 Funkcja generyczna complement()	6
	2.7 Funkcja generyczna export_sq()	6
	2.8 Funkcja generyczna find_invalid_letters()	7
	2.9 Funkcja generyczna find_motifs()	7
	2.10 Funkcja get_sq_lengths()	8
	2.11 Funkcja get_standard_alphabet()	8
	2.12 Funkcja get_tidysq_options()	8
	2.13 Operator %has%	8
	2.14 Funkcja generyczna import_sq()	9
	2.15 Funkcja is_empty_sq()	10
	2.16 Funkcja is.sq() i pochodne	10
	2.17 Metoda print()	11
	2.18 Funkcja random_sq()	11
	2.19 Funkcja read_fasta()	11
	2.20 Funkcja generyczna remove_ambiguous()	12
	2.21 Funkcja generyczna remove_na()	13
	2.22 Funkcja generyczna reverse()	13
	2.23 Funkcja sq()	13
	2.24 Funkcja generyczna sq_type()	14
	2.25 Funkcja generyczna sq_type<	14
	2.26 Funkcja sqapply()	14
	2.27 Funkcja generyczna substitute_letters()	15
	2.28 Funkcja generyczna translate()	15
	2.29 Funkcja generyczna typify()	16
	2.30 Funkcja write_fasta()	16
	2.31 Operator ==	
		17
	2.02 Western veels	11
3	Interfejs C++	17
		17
	3.2 Abstrakcyjne typy mapujące	18
	3.3 Specjalizacje i implementacje typów mapujących	18
	3.4 Stale	19
	3.5 Klasa Alphabet	21
	3.6 Klasa ProtoSequence	22
	3.7 Klasa ProtoSq	24
	3.8 Klasa Sequence	25
	3.9 Klasa Sq	26
	3.10 Klasa ProtoSequenceInputInterpreter	27
	3.11 Klasy pośredniczące (proxy)	28
	3.12 Klasa util::ResultWrapper	28
	3.13 Klasa ops::OperationVectorToVector	28
	3.14 Klasa ops::OperationSqToSq	29
	3.15 Funkcja sqapply	29
	3.16 Zaimplementowane Operacje	30
	3.17 Funkcje io::sample_fasta, io::read_fasta oraz io::write_fasta	31
	3.18 Funkcja find_motifs	31
	3.19 Funkcje integracji	32
	3.20 Pozostałe funkcje użytkowe	33

4	\mathbf{Inst}	Instrukcja użytkowania			
	4.1	Wykorzystywanie pakietu R	34		
	4.2	Załaczenie biblioteki dynamicznej C++	34		

1 Wstęp

Niniejszy dokument zawiera opis wszystkich publicznych interfejsów udostępnianych przez pakiet. Spełniają one wszystkie wymagania funkcjonalne wyspecyfikowane w dokumentacji biznesowej. W pierwszej podsekcji przedstawiony jest interfejs R, w drugiej interfejs C++

2 Interfejs R

Wszystkie elementy tego interfejsu to funkcje wywoływane z poziomu konsoli R. Wyspecyfikowane są warunki na typy przyjmowanych parametrów oraz typy zwracanych parametrów oraz możliwe sytuacje wyjątkowe. Niewyszczególnione są błędy spowodowane podaniem parametrów o nieodpowiednich typach – zachodzą one z domysłu. Jeśli któraś funkcja odpowiada bezpośrednio danemu wymaganiu funkcjonalnemu, jest to podane w tabeli. Funkcje, dla których zaznaczono, że są metodami, mają określony kontrakt dla pierwszego argumentu jako obiektu klasy są.

Funkcja alphabet()

Zwraca atrybut alphabet podanego obiektu.

Parametry:

• x : [sq] – obiekt, którego atrybut ma zostać wyciągnięty

Wyjście:

[alfabet] – alfabet stanowiący atrybut podanego obiektu

Metoda as.character()

Metody

Zwraca ciąg napisów stanowiący tekstową reprezentację obiektu

- 1) konwertuje każdą Sekwencję do napisu, sklejając bez separatora wszystkie Litery w oryginalnej kolejności; braki danych zastępowane są przez wskazaną literę
 - 2) ekstrahuje wektor Liter z całego obiektu

Parametry wejściowe

- x : [sq lub alfabet] obiekt, który ma ulec konwersji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[wektor napisów] – reprezentacja obiektu w postaci ciągu napisów

Metoda as.matrix()

Metody

```
1. as.matrix.sq(x, ...)
```

1) Zwraca macierz stanowiącą alternatywną reprezentację *Sekwencji*. Ekstrahuje każdą *Literę* do oddzielnej komórki, tworząc oddzielny wiersz dla każdej *Sekwencji*; krótsze sekwencje dopełnia brakami danych (NA).

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt, który ma ulec konwersji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod

Wyjście

[macierz] – reprezentacja obiektu w postaci macierzy

Funkcja generyczna as.sq()

Metody

```
1. as.sq.character(x, ...)
2. as.sq.default(x, ...)
```

Zwraca zaimportowany obiekt klasy sq

- 1) konstruuje obiekt przy użyciu funkcji sq()
- 2) importuje obiekt przy użyciu funkcji import_sq()

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt, który ma ulec konwersji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod

Wyjście

[sq lub tibble] - zaimportowany obiekt

Funkcja generyczna bite()

Metody

1) Ekstrahuje zdefiniowany podciąg elementów z wszystkich Sekwencji.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt z oryginalnymi Sekwencjami
- indices : [wektor liczb całkowitych] indeksy elementów do wyciągnięcia z Sekwencji bądź przeciwnie do pominięcia przy wyciąganiu
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych
- on_warning : [napis] specyfikacja zachowania w razie wystąpienia wyjątku

Wyjście

 $[\mathtt{sq}]$ – obiekt z Sekwencjamistanowiącymi podciągi elementów oryginalnych Sekwencjiokreślone poprzez wektor indeksów

Możliwe sytuacje wyjątkowe

• podanie indeksu o wartości większej niż długość sekwencji

Odpowiadające wymaganie

Zmiana kolejności ciągu Liter

Metody

1-4) Tworzy komplementarne nici DNA/RNA.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt z oryginalnymi Sekwencjami typu DNA bądź RNA
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – obiekt tego samego Typu, co Sekwencje wejściowe

Odpowiadające wymaganie

Uzyskanie komplementarnych Sekwencji DNA/RNA

Funkcja generyczna export_sq()

Metody

```
1. export_sq.sq_ami_bsc(x, export_format, name = NULL, ...)
2. export_sq.sq_ami_ext(x, export_format, name = NULL, ...)
3. export_sq.sq_dna_bsc(x, export_format, name = NULL, ...)
4. export_sq.sq_dna_ext(x, export_format, name = NULL, ...)
5. export_sq.sq_rna_bsc(x, export_format, name = NULL, ...)
6. export_sq.sq_rna_ext(x, export_format, name = NULL, ...)
```

- 1-2) Eksportuje *Sekwencje* do jednego z następujących formatów: ape::AAbin, Biostrings::AAString, Biostrings::AAStringSet, seqinr::SeqFastaAA.
- 3-4) Eksportuje Sekwencje do jednego z następujących formatów: ape::DNAbin, Biostrings::DNAStringset, seqinr::SeqFastadna.
 - 5-6) Eksportuje Sekwencje do jednego z następujących formatów: Biostrings::RNAString, Biostrings::RNAStringSet.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt z Sekwencjami zakodowanymi w formacie udostępnianym przez Pakiet
- export_format : [napis] specyfikacja docelowego formatu w postaci pakiet::klasa
- name : [wektor napisów] nazwy sekwencji

• ...: [dowolne] - dodatkowe argumenty do metod

Wyjście

[dowolne] – obiekt klasy specyfikowanej poprzez format eksportu

Odpowiadające wymaganie

Eksport obiektów do innych pakietów

Funkcja generyczna find_invalid_letters()

Metody

1) Zwraca listę, której każdy element jest wektorem napisów; każdy element zawiera *Litery* występujące w odpowiadającej *Sekwencji*, a nie wchodzące w skład *Standardowego Alfabetu* docelowego typu.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt z Sekwencjami zakodowanymi w formacie udostępnianym przez Pakiet
- dest_type : [napis] jeden z Typów Standardowych
- ... : [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[lista] – lista wektorów napisów o długości równej wejściowemu obiektowi są

Odpowiadające wymaganie

Wyszukanie Liter niezgodnych z określonym

Funkcja generyczna find_motifs()

Metody

1) Wyszukuje wszystkie wystąpienia podanych Motywów w podanych Sekwencjach.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt Sekwencji
- name : [wektor napisów] nazwy sekwencji
- motifs : [wektor napisów] Motywy do wyszukania
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[tibble] – ramka danych o następujących kolumnach:

• names : [wektor napisów] – nazwa Sekwencji, w której Motyw został odnaleziony

- found : [sq] podsekwencja odpowiadająca znalezionemu Motywowi
- sought : [wektor napisów] znaleziony Motyw
- start : [wektor liczb naturalnych] indeks początku (inkluzywnego) podsekwencji w oryginalnej Sekwencji
- end : [wektor liczb naturalnych] indeks końca (inkluzywnego) podsekwencji w oryginalnej Sekwencji

Odpowiadające wymaganie

Wyszukiwanie Motywów

Funkcja get_sq_lengths()

Zwraca długości Sekwencji.

Parametry wejściowe

• x : [sq] - wektor Sekwencji

Wyjście

[wektor liczb naturalnych] – wektor długości sekwencji

Funkcja get_standard_alphabet()

Zwraca Standardowy Alfabet odpowiadający danemu Typowi.

Parametry wejściowe

• type : [napis] - jeden z Typów Standardowych

Wyjście

[alfabet] - predefiniowany Alfabet dla podanego Typu

Funkcja get_tidysq_options()

Zwraca podzbiór wszystkich globalnych opcji zawierający te pochodzące z Pakietu.

Wyjście

[lista] – nazwana lista opcji pochodzących z Pakietu

Operator %has%

Zwraca wektor logiczny wskazujący, czy Sekwencja zawiera wszystkie Motywy.

Operandy

- x : [sq] obiekt Sekwencji
- y : [wektor napisów] Motywy do wyszukania

Wyjście

[wektor wartości logicznych] – 'prawda', jeśli odpowiadająca Sekwencja zawiera wszystkie podane Motywy, 'fałsz' w przeciwnym wypadku

Odpowiadające wymaganie

Sprawdzanie zawierania Motywów

Metody

```
1. import_sq.AAbbin(object, ...)
2. import_sq.DNAbin(object, ...)
3. import_sq.alignment(object, ...)
4. import_sq.AAString(object, ...)
5. import_sq.DNAString(object, ...)
6. import_sq.RNAString(object, ...)
7. import_sq.BString(object, ...)
8. import_sq.AAStringSet(object, ...)
9. import_sq.DNAStringSet(object, ...)
10. import_sq.RNAStringSet(object, ...)
11. import_sq.BStringSet(object, ...)
12. import_sq.XStringSetList(object, ...)
13. import_sq.SeqFastadAa(object, ...)
14. import_sq.SeqFastadna(object, ...)
15. import_sq.list(object, ..., separate = TRUE)
```

- 1–2) Importuje Sekwencje aminokwasów bądź DNA z obiektu z pakietu ape.
- 3) Importuje Sekwencje niewiadomego Typu z macierzy z pakietu ape.
- 4-7) Importuje pojedynczą Sekwencję odpowiedniego Typu (aminokwasowego, DNA, RNA bądź Nieokreślonego) z obiektu z pakietu Biostrings.
- 8–11) Importuje wektor Sekwencji odpowiedniego Typu (aminokwasowego, DNA, RNA bądź Nieokreślonego) z obiektu z pakietu Biostrings.
 - 12), 15) Dla każdego elementu listy importuje tenże, a następnie zwraca listę zaimportowanych elementów.
 - 13-14) Importuje Sekwencje aminokwasów bądź DNA z obiektu z pakietu seqinr.

Parametry wejściowe

- object : [dowolne] importowany obiekt
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- separate : [wartość logiczna] flaga określająca, czy w przypadku list obiektów wynikowe ramki danych powinny być połączone w jedną

Wyjście

[tibble] - ramka danych o następujących kolumnach:

- name : [wektor napisów] nazwy Sekwencji
- sq : [sq] zaimportowane Sekwencje

Odpowiadające wymaganie

Import obiektów z innych pakietów

Funkcja is_empty_sq()

Sprawdza, które Sekwencje są puste (innymi słowy, mają długość równą 0).

Parametry wejściowe

 \bullet x : [sq] – wektor Sekwencji

Wyjście

[wektor wartości logicznych] – wektor określający, czy dana Sekwencja jest pusta

Funkcja is.sq() i pochodne

```
1. is.sq(x)
2. is.sq_ami_bsc(x)
3. is.sq_ami_ext(x)
4. is.sq_dna_bsc(x)
5. is.sq_dna_ext(x)
6. is.sq_rna_bsc(x)
7. is.sq_rna_ext(x)
8. is.sq_unt(x)
9. is.sq_ami(x)
10. is.sq_ami(x)
11. is.sq_dna(x)
```

- 1) Sprawdza, czy obiekt należy do klasy sq.
- 2-9) Sprawdza, czy obiekt ma wskazany Typ.
- 10–12) Sprawdza, czy obiekt ma wskazany Typ $\mathit{Standardowy}$ z pominięciem rozszerzoności $\mathit{Alfabetu}.$

Parametry wejściowe

 \bullet x : [sq] – sprawdzany obiekt

Wyjście

[wartość logiczna] – wynik sprawdzania

Metoda print()

Metody

1) Wypisuje na konsolę sformatowany obiekt klasy sq.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor wyświetlanych Sekwencji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- max_sequences : [liczba naturalna] maksymalna liczba wyświetlanych Sekwencji
- use_color : [wartość logiczna] flaga określająca, czy używać kolorów przy wypisywaniu Sekwencji
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych
- letters_sep : [napis] ciąg znaków umieszczany pomiędzy kolejnymi literami Sekwencji

Funkcja random_sq()

Generuje Sekwencje zgodnie z podanymi parametrami.

Parametry wejściowe

- n : [liczba naturalna] liczba Sekwencji
- len : [liczba naturalna] długość Sekwencji
- alphabet : [napis lub wektor napisów] nazwa typu Sekwencji bądź wektor dostępnych Liter
- sd : [liczba naturalna] odchylenie standardowe długości Sekwencji
- use_gap : [wartość logiczna] flaga określająca, czy w przypadku *Standardowych Alfabetów* mają być wykorzystywane znaki * oraz –

Wyjście

[sq] – wygenerowane sekwencje

Funkcja read_fasta()

Wczytuje Sekwencje z pliku FASTA wraz z ich nazwami.

Parametry wejściowe

- file_name : [napis] ścieżka do pliku w formacie FASTA
- alphabet : [napis lub wektor napisów] nazwa typu Sekwencji bądź wektor dostępnych Liter
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych
- \bullet safe_mode : [wartość logiczna] flaga określająca, czy Alfabetmoże ulec zmianie w celu zagwarantowania wczytania wszystkich Liter
- on_warning : [napis] specyfikacja zachowania w razie wystąpienia wyjątku
- ignore_case : [wartość logiczna] flaga określająca, czy duże i małe znaki mają być traktowane jako ta sama *Litera*

Wyjście

[tibble] – zaimportowany obiekt w postaci ramki danych z następującymi kolumnami:

- name : [wektor napisów] nazwy Sekwencji
- sq : [sq] wczytane Sekwencji

Odpowiadające wymaganie

Wczytanie pliku FASTA

Funkcja generyczna remove_ambiguous()

Metody

- 1-3) Usuwa Sekwencje zawierające Litery Niejednoznaczne bądź same takie Litery.
- 4-6) Zwraca oryginalny obiekt bez dokonywania zmian.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji o Typie Standardowym
- by_letter : [wartość logiczna] flaga określająca, czy usunięciu ma ulegać pojedyncza *Litera*, czy cała *Sekwencja*
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – obiekt o analogicznym $Typie\ Podstawowym\ bez\ Liter\ Niejednoznacznych$

Odpowiadające wymaganie

Usuniecie Liter z Alfabetu Rozszerzonego

Funkcja generyczna remove_na()

Metody

1) Usuwa Sekwencje zawierające braki danych bądź same takie wartości.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji
- by_letter : [wartość logiczna] flaga określająca, czy usunięciu ma ulegać pojedyncza *Litera*, czy cała *Sekwencja*
- ... : [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – obiekt o tym samym *Typie* bez braków danych

Odpowiadające wymaganie

Usunięcie braków danych

Funkcja generyczna reverse()

Metody

1) Odwraca kolejność elementów (Liter) w Sekwencjach.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – obiekt o tym samym Typie

Odpowiadające wymaganie

Odwrócenie kolejności ciągu Liter

Funkcja sq()

Tworzy Sekwencje z wektora napisów.

Parametry wejściowe

- x : [wektor napisów] reprezentacja Sekwencji biologicznych w postaci napisów
- alphabet : [napis lub wektor napisów] nazwa typu Sekwencji bądź wektor dostępnych Liter
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

- safe_mode : [wartość logiczna] flaga określająca, czy *Alfabet* może ulec zmianie w celu zagwarantowania wczytania wszystkich *Liter*
- on_warning : [napis] specyfikacja zachowania w razie wystąpienia wyjątku
- ignore_case : [wartość logiczna] flaga określająca, czy duże i małe znaki mają być traktowane jako ta sama *Litera*

Wyjście

[sq] – wektor Sekwencji poddanych Pakowaniu

Funkcja generyczna sq_type()

Metody

- 1. $sq_type.sq(x, ...)$
- 1) Zwraca Typ podanego obiektu.

Parametry wejściowe

- $\bullet x : [sq] sprawdzany obiekt$
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod

Wyjście

[napis] – tekstowa reprezentacja *Typu*

Funkcja generyczna sq_type<-

Metody

- 1. 'sq_type <-.sq'(x, value)</pre>
- 1) Przypisuje obiektowi nowy Typ

Parametry wejściowe

- x : [sq] modyfikowany obiekt
- value : [napis] jeden z Typów Standardowych

Wyjście

[sq] – zmodyfikowany argument x metody

Funkcja sqapply()

Aplikuje dowolną funkcję do tekstowej reprezentacji Sekwencji.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji
- fun : [funkcja] aplikowana operacja
- ... : [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- single_string flaga określająca, czy Sekwencja powinna być traktowana jako pojedynczy napis
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[lista] – wyniki wykonania Operacji dla każdej Sekwencji z osobna

Odpowiadające wymaganie

Aplikacja dowolnej funkcji do Sekwencji

Funkcja generyczna substitute_letters()

Metody

1) Zastępuje wszystkie wystąpienia *Liter* określonych w nazwach argumentu **encoding** poprzez odpowiadające im *Litery* w tymże wektorze.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji
- encoding : [wektor napisów] słownik podstawień Liter w miejsce innych Liter
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – sekwencja o zmodyfikowanym, Nietypowym Alfabecie

Odpowiadające wymaganie

Zastąpienie Liter innymi

Funkcja generyczna translate()

Metody

1–2) Odkodowuje Sekwencje aminokwasów na podstawie trzyliterowych kodonów DNA bądź RNA.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt typu DNA/RNA o Standardowym Alfabecie
- table : [liczba naturalna] numer tabeli kodonów używanej przy translacji
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] – Sekwencje aminokwasów bez Liter Niejednoznacznych

Odpowiadające wymaganie

Translacja DNA/RNA do aminokwasów

Funkcja generyczna typify()

Metody

1) Nadaje obiektowi klasy sq wybrany Typ Standardowy.

Parametry wejściowe

- x : [sq] wektor Sekwencji
- dest_type : [napis] jeden z Typów Standardowych
- ...: [dowolne] dodatkowe argumenty do metod
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Wyjście

[sq] - obiekt o docelowym Typie

Funkcja write_fasta()

Zapisuje Sekwencje na dysku w postaci pliku FASTA.

Parametry wejściowe

- x : [sq] obiekt Sekwencji
- name : [wektor napisów] nazwy sekwencji
- file : [napis] ścieżka do pliku, do którego sekwencje mają zostać zapisane
- width : [liczba naturalna] maksymalna szerokość sekwencji wewnątrz pliku
- NA_letter : [napis] Litera reprezentująca brak danych

Odpowiadające wymaganie

Zapis do pliku FASTA

Operator ==

Zwraca wektor logiczny wskazujący, czy odpowiadające sobie Sekwencje są równoważne.

Operandy

- e1 : [sq] obiekt Sekwencji
- e2 : [sq lub wektor napisów] obiekt Sekwencji

Wyjście

[wektor wartości logicznych] – 'prawda', jeśli i-te sekwencje obydwu obiektów są sobie równoważne, w przeciwnym razie 'fałsz'

Metody pakietu vctrs

Oprócz powyższych funkcji i metod zaimplementowane zostały również liczne metody dla podklas sq oraz klasy sq_alphabet dla poniższych funkcji generycznych pochodzących z pakietu vctrs:

- vec_cast() zwraca przekazany obiekt o docelowej klasie
- vec_ptype_abbr() zwraca krótką nazwę *Typu* obiektu
- vec_ptype_full() zwraca pełną nazwę *Typu* obiektu
- vec_ptype2() zwraca wspólny prototyp obydwu obiektów

Ich uwzględnienie umożliwia wykorzystanie sporej części funkcjonalności oferowanych przez vctrs, między innymi funkcję vec_c(), łączącą dowolną liczbę obiektów w sposób lepiej zdefiniowany i bardziej przewidywalny niż dla bazowej funkcji c().

3 Interfejs C++

Elementy tego interfejsu znajdują się w przestrzeni nazw tidysą. W obrębie tej przestrzeni znajdują się przestrzenie:

- util zawiera funkcje i obiekty pomocnicze, niezwiązane bezpośrednio z funkcjonalnością,
- ops zawiera szablony klasowe związane z Operacjami wykonywanymi na Sekwencjach,
- io zawiera klasy i funkcje związane z odczytem i zapisem z dysku,
- constants zawiera definicje stałych obiektów.

W kolejnych podpunktach zaprezentowane są udostępniane interfejsy wraz z podaniem przestrzeni nazw z pominięciem przestrzeni tidysq, która występuje na początku wszystkich nazw.

Podstawowe typy proste

- LenSq Alias na typ całkowitoliczbowy, oznacza długość Sekwencji bądź liczbę Sekwencji.
- ElementPacked Alias na typ o rozmiarze bajta, oznacza spakowaną wartość bitową.
- ElementRaws Alias na typ o rozmiarze bajta, oznacza niespakowaną wartość bitową.
- ElementInts Alias na typ całkowitoliczbowy bez znaku, oznacza niespakowaną wartość bitową.
- ElementStrings Alias na ciąg znaków, oznacza niespakowaną wartość w postaci ciągu znaków.
- ElementStringSimple Alias na znak, oznacza niespakowaną wartość przy Alfabecie Prostym.
- ElementStringMultichar Alias na ciąg znaków, oznacza niespakowaną wartość w postaci ciągu znaków przy Alfabecie Wieloznakowym.
- AlphSize Alias na typ całkowitoliczbowy bez znaku, oznacza Rozmiar Alfabetu.
- LetterValue Alias na typ całkowitoliczbowy bez znaku, onzacza wartość danej *Litery* w *Alfabecie*.
- Letter Alias na ciąg znaków, oznacza Literę.
- SimpleLetter Alias na znak, oznacza Literę Prostą.
- SqType Typ wyliczeniowy, mogący przyjąć wartość odpowiadającą Typowi Alfabetu. Możliwe wartości prezentuje tabela 1

DNA_BSC	Podstawowy Alfabet DNA
DNA_EXT	Rozszerzony Alfabet DNA
RNA_BSC	Podstawowy Alfabet RNA
RNA_EXT	Rozszerzony Alfabet RNA
AMI_BSC	Podstawowy Alfabet Aminokwasowy
RNA_EXT	Rozszerzony Alfabet Aminokwasowy
ATP	$Alfabet\ Nietypowy$
UNT	$Alfabet\ Nieokre\'slony$

Tabela 1: Wartości typu wyliczeniowego SqType oraz odpowiadające im Typy Alfabetu.

Abstrakcyjne typy mapujące

Są to typy, których zadaniem jest zgrupowanie innych typów w celu wykorzystania możliwości metaprogramowania.

Ponieważ główne typy używane w bibliotece są wzorcami klasowymi (jak np. Sequence, Sq), które mogą wspierać wiele różnych backendów jeśli chodzi o przechowywanie danych, wymagają one podania jako parametry typu struktur z odpowiednimi typami członkowskimi. Poniżej opisane są warunki, jakie muszą spełniać typy mapujące, jeśli użytkownik chce zapewnić własne typy. W kolejnej podsekcji opisane są typy dołączone razem z biblioteką.

Dwie klasy są podstawowymi typami mapującymi:

• InternalType – klasa określająca backend wektorowy Sekwencji oraz wektora Sekwencji. Klasa X_IT rozszerzająca tę klasę musi posiadać publiczne typy członkowskie spełniające warunki określone w tabeli 2.

Typ członkowski	Wymaganie dotyczące typu		
SequenceType	Alias na Sequence <x_it>.</x_it>		
SequenceElementType	Alias na ElementPacked		
SequenceContentStorageType	Typ wektorowy obiektów typu SequenceElementType.		
SequenceContentAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na		
	SequenceContentStorageType.		
SequenceContentConstAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na		
	SequenceContentStorageType w stałym kontekście.		
SqType	Alias na Sq <x_it>.</x_it>		
SqContentStorageType	typ wektorowy, którego każdy element odpowiada obiek-		
	towi typu SequenceType.		
SqContentAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na		
	SqContentStorageType.		
SqContentConstAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na		
	SqContentStorageType w stałym kontekście.		

Tabela 2: Typy członkowskie, które musi posiadać klasa X_IT rozszerzająca klasę InternalType, oraz wymagania dotyczące tych typów.

ProtoType – klasa określająca formę przechowywania Niespakowanej Sekwencji oraz wektora Niespakowanych Sekwencji. Klasa Y_PT rozszerzająca tę klasę musi posiadać publiczny typ członkowski ProtoSequenceElementType oznaczający element Niespakowanej Sekwencji.

Do mapowania wykorzystywany jest wzorzec klasowy util::TypeBinder. Posiada on dwa parametry typu: INTERNAL oraz PROTO. Aby móc korzystać z pozostałych obiektów występujących w bibliotece, które posiadają parametry typu INTERNAL oraz PROTO o wartościach odpowiednio X_IT i Y_PT (spełniające wymagania odpowiednio InternalType oraz ProtoType), należy zapewnić specjalizację typu util::TypeBinder<X_IT, Y_PT>. Specjalizacja ta powinna posiadać publiczne typy członkowskie, spełniające warunki określone w tabeli 3

Opróc tego w bibliotece występuje wzorzec klasowy util::UniversalTypeBinder, parametryzowany typami INTERNAL oraz PROTO analogicznie jak util::TypeBinder, a także dodatkowe paramatry logiczne PACKED oraz CONST. Nie wymaga on jednak specjalizacji przy dodawaniu nowego backendu. Posiada on uogólnione definicje typów zaprezentowane w tabeli 4.

Specjalizacje i implementacje typów mapujących

W pakiecie występują gotowe rozszerzenia typów mapujących, obejmujące podstawowe przypadki:

Typ członkowski	Wymaganie dotyczące typu
ProtoSequenceType	Alias na ProtoSequence <x_it, y_pt="">.</x_it,>
ProtoSequenceContentStorageType	typ wektorowy przechowujący Niespakowane Sekwencje
	w formie Y_PT.
ProtoSequenceContentAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na
	ProtoSequenceContentStorageType.
ProtoSequenceContentConstAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na
	ProtoSequenceContentStorageType w stałym kontek-
	ście.
ProtoSqType	Alias na ProtoSq <x_it, y_pt="">.</x_it,>
ProtoSqListConstructorType	typ wektorowy, który może zostać podany jako lista
	inicjalizacyjna w konstruktorze i może być przekazany,
	aby skonstruować obiekt typu backendu ProtoSq <x_it,< td=""></x_it,<>
	Y_PT>.
ProtoSqContentStorageType	typ wektorowy, który jest backendową reprezentacją
	obiektu ProtoSq <x_it, y_pt="">.</x_it,>
ProtoSqContentAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na
	ProtoSqContentStorageType.
ProtoSqContentConstAccessType	Typ zwracany przez użycie operatora [] na
	ProtoSqContentStorageType w stałym kontekście.

Tabela 3: Typy członkowskie, które musi posiadać specjalizacja wzorca klasowego TypeBinder<X_IT, Y_IT>, oraz wymagania dotyczące tych typów.

• InternalType:

- STD_IT backendem są wektory std::vector z biblioteki standardowej. Zalecane do używania w każdym przypadku, w którym nie jest konieczna bezpośrednia interakcja z R.
- RCPP_IT backendem są wrapery wektorowe z biblioteki Rcpp (Rcpp::RawVector, Rcpp::IntegerVector, itd.). Zalecane do używania wyłącznie kiedy to konieczne (np. podczas przekazywania danych bezpośrednio z R bądź do R).

• ProtoType:

- RAWS_IT elementy niespakowanej Sekwencji to wartości bitowe (ElementRaws).
- INTS_IT elementy niespakowanej Sekwencji to nieujemne wartości całkowitoliczbowe (ElementInts).
- STRINGS_IT elementy niespakowanej Sekwencji to napisy (ElementStrings).
- STRING_IT Niespakowana Sekwencja jest przechowywana w postaci ciągu znaków (ElementStringSimple lub ElementStringMultichar).

Stałe

Biblioteka zawiera szereg wartości stałych, związanych głównie z pewnymi pojęciami biologicznymi.

- const short constants::BUFF_SIZE określa rozmiar bufora odczytu z dysku.
- \bullet const
 char constants:: NEW_SEQUENCE_CHAR — znak oznaczający now
ąSekwencję podczas odczytu pliku FASTA.
- \bullet const
 char constants:: NEW_LINE_CHAR — znak końca linii podczas odczytu z pliku
 FASTA.
- const Letter constants::DEFAULT_NA_LETTER domyślna litera do reprezentacji wartości braku danych.
- const bool constants::DEFAULT_IGNORE_CASE domyślna wartość określająca, czy podczas wczytywania Sekwencji z napisów należy igrorować wielkość liter.
- const std::unordered_map<SqType, const std::vector<Letter>> constants::STANDARD_LETTERS słownik mapujący *Typ Standardowy Sekwencji* na wektor odpowiadających *Liter Standardowych*.
- const internal::AmbiguousDict constants::AMBIGUOUS_AMINO_MAP słownik mapujący Litery Niejednoznaczne z Standardowego Rozszerzonego Alfabetu reszt aminokwasowych na Litery.

Typ członkowski	Definicja typu
ProtoOrNotSequenceType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz PROTO
	typ ProtoSequenceType dla PACKED == false
	lub SequenceType w przeciwnym przypadku.
ProtoOrNotSequenceContentStorageType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz
	PROTO typ ProtoSequenceContentStorageType
	m dla PACKED == false $ m lub$
	SequenceContentStorageType w przeciwnym przypadku.
ProtoOrNotSequenceContentAccessType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz
	PROTO typ ProtoSequenceContentAccessType
	dla PACKED == false lub
	SequenceContentAccessType w przeciwnym
	przypadku. Jeśli CONST == true zamiast po-
	wyższych typów wartością jest analogicznie
	ProtoSequenceContentConstAccessType lub
	SequenceContentConstAccessType.
ProtoOrNotSqType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz PROTO
	typ ProtoSqType dla PACKED == false lub
	SqType w przeciwnym przypadku.
ProtoOrNotSqContentStorageType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz PROTO
	typ ProtoSqContentStorageType dla PACKED ==
	false lub SqContentStorageType w przeciwnym
D	przypadku.
ProtoOrNotSqContentAccessType	Odpowiadający parametrom INTERNAL oraz
	PROTO typ ProtoSqContentAccessType dla
	PACKED == false lub SqContentAccessType
	w przeciwnym przypadku. Jeśli CONST == true
	zamiast powyższych typów wartością jest analogicznie ProtoSqContentConstAccessType lub
	1 0
	SqContentConstAccessType.

Tabela 4: Typy członkowskie wzorca klasowego UniversalTypeBinder<INTERNAL, PROTO, PACKED, CONST>.

- const internal::AmbiguousDict constants::AMBIGUOUS_DNA_MAP słownik mapujący Litery Niejed-noznaczne z Standardowego Rozszerzonego Alfabetu DNA na Litery.
- const internal::AmbiguousDict constants::AMBIGUOUS_RNA_MAP słownik mapujący Litery Niejednoznaczne z Standardowego Rozszerzonego Alfabetu RNA na Litery.
- const internal::ComplementTable constants::BSC_COMPLEMENT_TABLE słownik mapujący wartość Litery ze Standardowego Podstawowego Alfanbetu DNA bądź RNA na wartość komplementarną.
- const internal::ComplementTable constants::EXT_COMPLEMENT_TABLE słownik mapujący wartość Litery ze Standardowego Rozszerzonego Alfanbetu DNA bądź RNA na wartość komplementarną.
- const internal::CodonTable constants::CODON_TABLE_1 słownik mapujący wartości licznowe odpowiadające kodonom (trójkom *Liter* z *Podstawowego Alfabetu* DNA) na *Litery* z *Alfabetu* aminokwasowego według biologicznych zasad translacji tabeli nr 1.
- const std::unordered_map<int, const internal::CodonTable> constants::CODON_DIFF_TABLES słow-nik mapujący numer tabeli translacji na tabelę translacji zawierającą różnicę względem tabeli nr 1.
- const std::unordered_map<int, const internal::CodonTable> constants::AMB_CODON_DIFF_TABLES słownik mapujący numer tabeli translacji zawierającej niedoprecyzowane mapowanie na tabelę translacji zawierającą różnicę względem tabeli nr 1.
- constants::WarningLevel typ wyliczeniowy zawierające możliwe poziomy raportowania o sytuacjach wyjątkowych w R.
- const constants::WarningLevel constants::DEFAULT_WARNING_LEVEL domyślny poziom raportowania

• const std::unordered_map<std::string, WarningLevel> WARNING_LEVEL_NAMES - słownik mapujący słowna nazwe poziomu raportowania na poziom raportowania.

Klasa Alphabet

Alphabet – klasa reprezentująca Alfabet, to znaczy mapowanie z wartości liczbowej (indeksu) na znak bądź ciąg znaków (Litere)

Typy członkowskie

• const_iterator – iterator po parach (wartość liczbowa odpowiadająca *Literze*, *Litera*) przechowywanych w *Alfabecie*

Konstruktory

Sygnatury:

```
1. Alphabet(
          const std::vector<Letter> &letters,
          const SqType &type,
          const Letter &NA_letter = constants::DEFAULT_NA_LETTER,
          const bool ignore_case = constants::DEFAULT_IGNORE_CASE)
```

```
3. Alphabet(
          const std::vector<Letter> &letters,
          const Letter &NA_letter = constants::DEFAULT_NA_LETTER,
          const bool ignore_case = constants::DEFAULT_IGNORE_CASE)
```

Tworzy nowy obiekt Alfabetu

- 1) tworzy Alfabet z jawnym podaniem Liter i Typu
- 2) tworzy Alfabet Standardowy z podaniem Typu Standardowego
- 3) tworzy Alfabet, dopasowując najmniejszy Typ Standardowy zawierający wszystkie podane Litery i rozszerzając wektor Liter o pozostałe występujące w dopasowanym Typie; w przeciwnym razie ustawia typ Nieokreślony

Parametry:

- letters wektor liter zawartych w Alfabecie
- type element wyliczeniowej klasy reprezentujący *Typ* obiektu
- NA_letter litera reprezentująca brak danych
- ignore_case flaga określająca, czy duże i małe znaki traktowane są jako ta sama *Litera*

Metody

• LetterValue size() const

Zwraca liczbę Liter w Alfabecie.

• const Letter & operator [] (Letter Value index) const

Zwraca referencję na *Literę* o podanej wartości. W przypadku niewystępowania *Litery* o podanej wartości, zwracana jest referencja na NA_letter.

• const SimpleLetter &get_simple_letter(LetterValue index) const

Zwraca referencję na *Literę Prostą* (jednoznakową) o podanej wartości. W przypadku niewystępowania *Litery Prostej* o podanej wartości, zwracana jest referencja na NA_letter.

• const LetterValue &NA_value() const

Zwraca referencję na wartość (indeks) odpowiadający znakowi brakowi wartości.

• const Letter &NA_letter() const

Zwraca referencję na NA_letter.

• const SqType &type() const

Zwraca referencję na Typ Alfabetu.

• const AlphSize &alphabet_size() const

Zwraca referencję na liczbę bitów używaną do zakodowania jednej *Litery*.

• bool is_simple() const

Informuje, czy dany Alfabet zawiera wyłącznie jednoznakowe Litery.

• bool ignores_case() const

Informuje, czy dany Alfabet traktuje wielkie i małe litery jako tę samą Literę.

const_iterator begin() const const_iterator cbegin() const

Zwraca iterator wskazujący na początek wektora Liter.

const_iterator end() const const_iterator cend() const

Zwraca iterator wskazujący na koniec wektora Liter.

 bool operator == (const Alphabet &other) const bool operator! = (const Alphabet &other) const

Porównuje równość mapowań z wartości (indeksu) na Literę oraz wartości NA_letter.

• LetterValue match_value(const ElementRaws &letter) const LetterValue match_value(const ElementInts &letter) const

Zwraca przekazaną wartość, jeśli zawiera się ona w wektorze dozwolonych indeksów. W przeciwnym wypadku zwraca indeks odpowiadający znakowi brakowi wartości.

• LetterValue match_value(const ElementStringSimple &letter) const

Zwraca wartość (indeks) odpowiadającą przekazanej *Literze Prostej*. Jeśli takowa nie istnieje, zwraca indeks odpowiadający znakowi brakowi wartości.

• LetterValue match_value(const Letter &letter) const

Zwraca wartość (indeks) odpowiadającą przekazanej *Literze*. Jeśli takowa nie istnieje, zwraca indeks odpowiadający znakowi brakowi wartości.

• bool contains(const Letter &letter) const

Sprawdza, czy Alfabet zawiera wskazaną Literę.

Klasa ProtoSequence

ProtoSequence – klasa reprezentująca rozpakowaną postać Sekwencji.

Parametry wzorca

- INTERNAL podklasa typu InternalType,
- PROTO podklasa typu ProtoType.

Typy członkowskie

- ElementType typ pojedynczego elementu Sekwencji,
- ContentStorageType typ wewnętrznego formatu przechowywania danych,

- AccessType typ zwracany w wyniku indeksacji obiektu,
- ConstaccessType typ zwracany w wyniku indeksacji obiektu w stałym kontekście.

Konstruktory

Sygnatury:

- 1. ProtoSequence(const ContentStorageType &content)
- 2. ProtoSequence(const LenSq length)
- 3. ProtoSequence()
- 4. ProtoSequence(const std::initializer_list<ElementType> &list)

Tworzy nowy obiekt Sekwencji niepoddanej Pakowaniu

- 1) tworzy Sekwencję o zawartości wziętej z podanego obiektu
- 2) tworzy Sekwencję o podanej długości bez inicjalizacji zawartości
- 3) tworzy pustą Sekwencję o długości 0
- 4) tworzy Sekwencję, przekazując listę inicjalizującą do konstruktora zawartości

Parametry:

- content wektor Rcpp albo obiekt klasy string zawierający Sekwencję
- length długość wektora przechowującego Spakowaną Sekwencję
- list lista inicjalizująca zawierająca Sekwencję

Metody

```
    AccessType operator[](const LenSq index)
    ConstAccessType operator[](const LenSq index) const
```

Zwraca element znajdujący się w miejscu wektora wskazanym przez indeks.

• LenSq size() const

Zwraca liczbę elementów, inaczej długość Sekwencji.

• const ContentStorageType &content() const

Zwraca referencję na zawartość Sekwencji.

```
• bool operator == (const ProtoSequence <INTERNAL, PROTO > &other) const bool operator! = (const ProtoSequence <INTERNAL, PROTO > &other) const
```

Porównuje równość zawartości.

Tworzy interpreter zawartości przy podanym Alfabecie.

Metody wyspecjalizowane

• Dostępna w sytuacji, kiedy PROTO == STRING_PT:

```
ProtoSequence < INTERNAL, PROTO > & operator += (const Letter & letter)
ProtoSequence < INTERNAL, PROTO > & operator += (const SimpleLetter & letter)
```

Wydłuża zawartość o przekazany element (*Literę* bądź *Literę Prostą*).

Klasa ProtoSq

ProtoSq – klasa reprezentująca wektor obiektów typu ProtoSequence.

Parametry wzorca

- INTERNAL podklasa typu InternalType,
- PROTO podklasa typu ProtoType.

Typy członkowskie

- ElementType typ pojedynczego elementu Sekwencji,
- ContentStorageType typ wewnętrznego formatu przechowywania danych.

Konstruktory

Sygnatury:

- 1. ProtoSq(const ContentStorageType &content, const Alphabet &alphabet)
- 2. ProtoSq(const LenSq length, const Alphabet &alphabet)
- 3. ProtoSq(const ContentStorageType &content, const SqType &type)
- 4. ProtoSq(const LenSq length, const SqType &type)

Tworzy wektor Sekwencji niepoddanych Pakowaniu

- 1) tworzy wektor z jawnym podaniem Sekwencji oraz Alfabetu
- 2) tworzy wektor o zadanej długości z podanym Alfabetem
- 3) tworzy wektor zapełniony podanymi Sekwencjami z Alfabetem odpowiadającym podanemu Typowi
- 4) tworzy wektor o zadanej długości z Alfabetem odpowiadającym podanemu Typowi

Parametry:

- content wektor Sekwencji nie poddanych pakowaniu
- ullet length liczba Sekwencji
- alphabet Alfabet używany przy Pakowaniu Sekwencji
- type Typ Standardowy odpowiadający docelowemu Alfabetowi Standardowemu

Metody

ProtoSequenceProxy < INTERNAL, PROTO > operator[] (const LenSq index)
 ProtoSequenceConstProxy < INTERNAL, PROTO > operator[] (const LenSq index) const

Zwraca proxy z obiektem typu ProtoSequence pod wskazanym indeksem.

• LenSq size() const

Zwraca liczbę Sekwencji.

Alphabet& alphabet() const Alphabet &alphabet() const

Zwraca referencję na Alfabet.

• const SqType &type() const

Zwraca referencję na *Typ*.

• bool operator == (const ProtoSq < INTERNAL , PROTO > & other) const
bool operator! = (const ProtoSq < INTERNAL , PROTO > & other) const

Porównuje równość alfabetu oraz zawieranych obiektów typu ProtoSequence.

• Sq<INTERNAL_OUT > pack() const

Wykonuje *Pakowanie* i zwraca *Spakowany* obiekt typu Sq.

Klasa Sequence

Sequence – klasa reprezentująca Spakowaną Sekwencję.

Parametry wzorca

• INTERNAL - podklasa typu InternalType.

Typy członkowskie

- ElementType typ pojedynczego elementu Sekwencji,
- ContentStorageType typ wewnętrznego formatu przechowywania danych,
- AccessType typ zwracany w wyniku indeksacji obiektu,
- ConstAccessType typ zwracany w wyniku indeksacji obiektu w stałym kontekście,
- iterator typ iteratora po elementach,
- const_iterator typ iteratora po elementach w stałym kontekście.

Konstruktory

Sygnatury:

- 1. Sequence(const ContentStorageType &content, const LenSq original_length)
- 2. Sequence(const LenSq content_length, const LenSq original_length)
- 3. Sequence()

Tworzy nowy obiekt Spakowanej Sekwencji

- 1) tworzy Spakowaną Sekwencję o zawartości wziętej z podanego obiektu
- 2) tworzy Spakowaną Sekwencję o podanej długości bez inicjalizacji zawartości
- 3) tworzy pustą Spakowaną Sekwencję o długości 0

Parametry:

- content wektor Rcpp albo obiekt klasy string zawierający Spakowaną Sekwencję
- content_length długość wektora przechowującego Spakowaną Sekwencję
- original_length ilość elementów (Liter) Spakowanej Sekwencji

Metody

```
• LetterValue operator[](const std::pair<LenSq, AlphSize> &index) const
```

Zwraca wartość odpowiadającą elementowi znajdującemu się na i-tym miejscu Sekwencji, gdzie i jest zdefiniowane przez indeks.

```
AccessType operator()(const LenSq index)
ConstAccessType operator()(const LenSq index) const
```

Zwraca element znajdujący się w miejscu wektora wskazanym przez indeks.

```
• iterator begin(const AlphSize& alph_size)
const_iterator begin(const AlphSize& alph_size) const
const_iterator cbegin(const AlphSize& alph_size) const
```

Zwraca iterator wskazujący na początek wektora zawartości.

```
• iterator end(const AlphSize& alph_size)
const_iterator end(const AlphSize& alph_size) const
const_iterator cend(const AlphSize& alph_size) const
```

Zwraca iterator wskazujący na koniec wektora zawartości.

• LenSq original_length() const

Zwraca długość Sekwencji.

• LenSq size() const

Zwraca liczbę elementów wektora zawartości.

• ContentStorageType content() const

Zwraca zawartość Spakowanej Sekwencji.

```
    bool operator == (const Sequence < INTERNAL > & other) const
    bool operator! = (const Sequence < INTERNAL > & other) const
```

Porównuje równość zawartości.

• void trim(const LenSq packed_length, const Alphabet &alphabet)

Skraca wektor zawartości do długości wyznaczonej przez długość Spakowanej Sekwencji.

Klasa Sq

Sq – klasa reprezentująca wektor obiektów typu Sequence.

Parametry wzorca

• INTERNAL - podklasa typu InternalType.

Typy członkowskie

- ElementType typ pojedynczego elementu Sekwencji,
- ContentStorageType typ wewnętrznego formatu przechowywania danych. kontekście.

Konstruktory

Sygnatury:

- 1. Sq(const ContentStorageType &content, const Alphabet &alphabet)
- 2. Sq(const LenSq length, const Alphabet &alphabet)
- 3. Sq(const LenSq length, const SqType &type)
- 4. Sq(const Alphabet &alphabet)
- 5. Sq(const SqType &type)

Tworzy wektor Spakowanych Sekwencji

- 1) tworzy wektor z jawnym podaniem Spakowanych Sekwencji oraz Alfabetu
- 2) tworzy wektor o zadanej długości z podanym Alfabetem
- 3) tworzy wektor o zadanej długości z Alfabetem odpowiadającym podanemu Typowi
- 4) tworzy pusty wektor z podanym Alfabetem
- 5) tworzy pusty wektor z Alfabetem odpowiadającym podanemu Typowi

Parametry:

- content wektor Spakowanych Sekwencji
- length liczba Sekwencji
- alphabet Alfabet użyty przy Pakowaniu Sekwencji
- type Typ Standardowy odpowiadający docelowemu Alfabetowi Standardowemu

Metody

• SequenceProxy < INTERNAL > operator[](const LenSq index)

Zwraca proxy z obiektem typu Sequence pod wskazanym indeksem.

• LenSq size() const

Zwraca liczbę Sekwencji.

• Alphabet& alphabet()
const Alphabet &alphabet() const

Zwraca referencję na Alfabet.

• const SqType &type() const

Zwraca referencję na *Typ*.

• void push_back(const ElementType &sequence)

Wstawia przekazana Sekwencję na ostatnie miejsce wektora.

```
• bool operator == (const Sq < INTERNAL > & other) const bool operator! = (const Sq < INTERNAL > & other) const
```

Porównuje równość alfabetu oraz zawieranych obiektów typu ProtoSequence.

```
• template < typename INTERNAL_OUT, typename PROTO_OUT > ProtoSq < INTERNAL_OUT, PROTO_OUT > unpack() const
```

Wykonuje Rozpakowanie i zwraca rozpakowany obiekt typu ProtoSq.

```
• template < typename INTERNAL_OUT, typename PROTO_OUT > ProtoSq < INTERNAL_OUT, PROTO_OUT > unpack (const LenSq from, const LenSq to) const
```

Wykonuje Rozpakowanie na wskazanym podciągu Sekwencji i zwraca rozpakowany obiekt typu ProtoSq.

Klasa ProtoSequenceInputInterpreter

ProtoSequenceInputInterpreter – klasa zajmująca się iteracją po elementach niespakowanej Sekwencji, szczególnie istotna w przypadku Alfabetu Wieloznakowego.

Parametry wzorca

- INTERNAL podklasa typu InternalType,
- PROTO podklasa typu ProtoType,
- SIMPLE wartość logiczna, określająca czy *Alfabet*, zgodnie z którym ma być interpretowana *Sekwencja*, jest *Prosty*.

Typy członkowskie

- \bullet ContentStorageType typ wewnętrznego formatu przechowywania danych,
- ElementType typ pojedynczego elementu Sekwencji,
- \bullet ContentConstIterator Type – typ iteratora po elementach w stałym kontekście.

Metody

• LetterValue get_next_value()

Zwraca wartość odpowiadającą indeksowi odczytanej następnej Litery w Alfabecie.

• ElementType get_next_element()

Zwraca następną odczytaną Literę. Jeśli takowa nie występuje w Alfabecie, zwraca NA_letter.

• ElementType get_or_extract_next_element()

Zwraca następną odczytaną Literę. Jeśli takowa nie występuje w Alfabecie, wstawia ją do niego.

• bool reached_end() const

Informuje, czy iterator po zawartości dotarł do jej końca.

LenSq interpreted_letters() const

Zwraca liczbę odczytanych Liter.

Klasy pośredniczące (proxy)

ProtoSequenceProxy, ProtoSequenceConstProxy, SequenceProxy i SequenceConstProxy są to wzorce klasowe zwracane podczas indeksacji obiektów ProtoSq oraz Sq (odpowiednio do nazw). Obiekty z członem *Const* w nazwie powstają podczas indeksacji w kontekście stałym. Każdy obiekt proxy jest pośrednikiem w dostępie do danej sekwencji. Ich istnienie umożliwia wyabstrahowanie interfejsu od backendu.

Obiekty proxy mogą być jawnie bądź niejawnie rzutowane do obiektu Sequence lub ProtoSequence odpowiadającemu rodzajowi obiektów przechowywanemu w indeksowanym obiekcie. Jawne rzutowanie następuje przez wywołanie metody get(). Obiekt wynikowy pozwala uzyskać dostęp do odpowiedniej Sekwencji przez referencję. Jeśli kontekst był stały, referencja ta jest niemodyfikowalna, w niestałym kontekście jest modyfikowalna – typ tej referencji jest określony przez odpowiedni typ util::UniversalTypeBinder<INTERNAL, PROTO, PACKED, CONST>::ProtoOrNotSqContentAccessType.

Obiekty proxy mogą być porównywane, przy czym porównywanie polega na porównaniu elementów, do których dostęp zapewniają.

Klasa util::ResultWrapper

Result
Wrapper – klasa opakowująca rezultat w celu umożliwienia równoczesnego przekazania informacji o błędzie bądź ostrzeżenia.

Parametry wzorca

• RESULT_TYPE – downlny typ.

Konstruktory

Sygnatury:

1. ResultWrapper(ResultType result, const MessageType &message)

Tworzy nowy obiekt opakowujący rezultat Operacji oraz potencjalne ostrzeżenie o błędzie

1) tworzy ResultWrapper z jawnym podaniem rezultatu oraz treści ostrzeżenia

Parametry:

- result wynik działania Operacji
- message ostrzeżenie bądź jego brak rzucone w trakcie działania Operacji

Metody

• ResultType result() const

Zwraca wartość rezultatu wykonanej Operacji.

• bool has_message() const

Informuje, czy *Operacja* zwróciła informację o błędzie.

• std::string message_text() const

Wyciąga wartość tekstową pola message, zawierającą treść informacji o błędzie.

Klasa ops::OperationVectorToVector

ops::OperationVectorToVector jest abstrakcyjnym funktorem, reprezentującym *Operację*, przekształcającą jeden wektor w inny wektor, element po elemencie. Jest ona głównie wykorzystywana w funkcji sqapply.

Parametry wzorca

- VECTOR_IN typ wektora wejściowego,
- ELEMENT_IN typ elementu wektora wejściowego,
- VECTOR_OUT typ wektora wyjściowego,
- VECTOR_OUT typ elementu wektora wejściowego.

Metody

• virtual bool may_return_early(const VECTOR_IN &vector_in)

Sprawdza, czy wektor wejściowy spełnia warunek wczesnego powrotu danej Operacji.

• virtual VECTOR_OUT return_early(const VECTOR_IN &vector_in)

Zwraca wektor wyjściowy bez wykonywania Operacji element po elemencie.

```
    virtual VECTOR_OUT initialize_vector_out(const VECTOR_IN &vector_in, const LenSq from, const LenSq to) = 0
    virtual VECTOR_OUT initialize_vector_out(const VECTOR_IN &vector_in)
```

Inicjalizuje wektor wyjściowy. Jeśli podane są from i to, wektor jest inicjalizowany tylko dla wartości odpowiadających zakresowi wektora wejściowego od from włącznie do to włącznie.

• virtual ELEMENT_OUT initialize_element_out(const ELEMENT_IN &element_in) = 0

Inicjalizuje element wyjściowy na podstawie elementu wejściowego.

• virtual void operator() (const ELEMENT_IN &element_in, ELEMENT_OUT &element_out) = 0

Wykonuje Operację na elemencie wyjściowym w miejscu, na podstawie elementu wejściowego.

```
• virtual ELEMENT_OUT operator() (const ELEMENT_IN &element_in)
```

Wykonuje Operację na elemencie wejściowym i zwraca element wyjściowy.

Klasa ops::OperationSqToSq

ops::OperationSqToSq jest abstrakcyjnym funktorem, reprezentującym *Operację*, przekształcającą jeden wektor *Sekwencji* w inny wektor *Sekwencji*. Klasa ta rozszerza publicznie klasę ops::OperationVectorToVector<Sq, Sequence, Sq, Sequence> z odpowiednimi parametrami wzorca.

Parametry wzorca

- INTERNAL_IN typ InternalType wektora wejściowego.
- INTERNAL_OUT typ InternalType wektora wyjściowego.

Metody

Klasa dziedziczy po klasie bazowej, zapewniając ponadto domyślne implementacje dla metod.

```
Sq<INTERNAL_OUT> initialize_vector_out(const Sq<INTERNAL_IN> &sq_in, LenSq from, LenSq to)
Sequence<INTERNAL_OUT> initialize_element_out(const Sequence<INTERNAL_IN> &sequence_in)
```

• virtual Alphabet map_alphabet(const Alphabet &alphabet_in) const

Mapuje Alfabet obiektu wejściowego na Alfabet obiektu wyjściowego.

Funkcja sqapply

Jest to kluczowa funkcja z punktu widzenia funkcjonalności pakietu. Służy ona aplikowaniu Operacji do wektorów.

Są one parametryzowane przez parametry wzorca analogiczne do parametrów ops::OperationVectorToVector.

```
1. VECTOR_OUT sqapply(const VECTOR_IN &vector_in, ops::OperationVectorToVector < VECTOR_IN, ELEMENT_IN, VECTOR_OUT, ELEMENT_OUT > &operation)
```

```
2. VECTOR_OUT sqapply(const VECTOR_IN &vector_in, ops::OperationVectorToVector < VECTOR_IN, ELEMENT_IN, VECTOR_OUT, ELEMENT_OUT > &&operation)
```

- 1), 2) Funkcja aplikuje *Operację* do każdego elementu wektora wejściowego.
- 3), 4) Funkcja aplikuje *Operację* do każdego elementu wektora wejściowego od from włacznie do to wyłącznie.

Zaimplementowane Operacje

W bibliotece po klasach ops::OperationVectorToVector oraz ops::OperationSqToSq dziedziczy szereg Operacji, odpowiadającej poszczególnym funkcjonalnościom pakietu. Są one tutaj zaprezentowane pokrótce – szczegóły ich działania opisane są przy odpowiadających funkcjach na poziomie R. Ponadto dla każdej z tych klas istnieją odpowiadające im funkcje o analogicznych nazwach (dla Operacji OperationXxxxYyyyZzzz funkcja nazywa się xxxx_yyyy_zzzz), które na wejściu przyjmują odpowiedni wektor i aplikują do niego odpowiednią Operację. Funkcje te mają też przeciążone wersje, gdzie na wejściu przyjmowany jest tylko pojedynczy element i pojedynczy element jest zwracany.

- OperationApplyRFunction analogia dla sqapply na poziomie R.
- OperationComplement analogia dla complement na poziomie R.
- $\bullet \ {\tt OperationFindInvalidLetters} {\tt analogia} \ dla \ {\tt find_invalid_letters} \ na \ poziomie \ {\tt R}. \\$
- OperationHas analogia dla %has% na poziomie R.
- OperationRandomSq analogia dla random_sq na poziomie R.
- OperationRemoveAmbiguous analogia dla remove_ambiguous na poziomie R.
- OperationRemoveNA analogia dla remove_NA na poziomie R.
- OperationReverse analogia dla reverse na poziomie R.
- OperationSubstituteLetters analogia dla substitute_letters na poziomie R.
- OperationTranslate analogia dla translate na poziomie R.
- OperationTypify analogia dla typify na poziomie R.

Kilka z funkcji nie posiada bezpośrednich odpowiedników na poziomie R. W poniższym fragmencie są opisane bardziej szczegółowo:

- 1. OperationBite oraz OperationSkip pierwsza z tych funkcji działa tak jak bite na poziomie R, z różnicą co do indeksowania. Do tej funkcji można przekazać wektor wyłącznie nieujemnych indeksów. Indeksacja jest też przesunięta o 1 w dół względem R wynika to z faktu, że w C++ występuje indeksacja od 0 w przeciwieństwie do R. Jeżeli użytkownik chce skorzystać z funkcjonalności negatywnej indeksacji jak w R, należy użyć OperationSkip z podaniem odpowiednich indeksów z odwróconym znakiem i pomniejszonych o 1.
- 2. OperationPack oraz OperationUnpack te *Operacje* są odpowiedzialne za bitowe *Pakowanie* oraz *Rozpakowywanie* i nie są dostępne bezpośrednio z poziomu R. Są jednak wywoływane pośrednio np. podczas konstruowania wektora *Sekwencji* (sq) czy podczas wyświetlania go na ekran (print.sq).
- 3. OperationRemoveOnCondition Operacja ta jest uogólnieniem działania remove_ambiguous oraz remove_NA. Wektor obiektów sq, na którym jest ona wykonywana, jest pozbawiony albo elementów w Sekwencjach spełniających określony warunek (bycie wartością NA przy remove_NA bądź bycie Literą Wieloznaczną przy remove_ambiguous) albo Sekwencje posiadające co najmniej jeden element spełniający ten warunek są zupełnie usuwane.

Funkcje io::sample_fasta, io::read_fasta oraz io::write_fasta

Funkcja io::sample_fasta służy do odczytania Alfabetu Sekwencji z danego pliku i zwraca Alfabet.

Funkcja io::read_fasta odczytuje Sekwencje z podanego pliku oraz zwraca obiekt internal::NamedSqibble<INTERNAL>z danymi Sekwencjami oraz ich nazwami.

Funkcja io::write_fasta zapisuje podane Sekwencje do pliku wraz z podanymi nazwami pod podaną ścieżką.

Funkcje io::read_fasta oraz io::write_fasta wymagają podania parametru typu INTERNAL będącego klasą spełniającą wymogi InternalType, która odpowiada parametrowi INTERNAL zapisywanego bądź odczytywanego obiektu Sq.

Parametry:

- file_name pełna ścieżka do pliku wejściowego z Sekwencjami w formacie FASTA badź wyjściowego.
- sample_size rozmiar próbkowania, liczba pierwszych znaków z pliku, na podstawie którego ma być zgadnięty Alfabet.
- NA_letter Litera reprezentująca brak danych.
- ignore_case wartość logiczna, określająca czy wielkość liter ma znaczenie.

const unsigned int &width)

- alphabet Alfabet Sekwencji z odczytywanego pliku.
- sq wektor zapisywanych Sekwencji.
- names wektor nazw zapisywanych Sekwencji.
- width maksymalna liczba znaków w linii wyjściowego pliku.

Działanie funkcji jest analogiczne do funkcji read_fasta i write_fasta w interfejsie R, przy czym na poziomie C++ funkcja read_fasta wymaga jawnego podania *Alfabetu*, co może wymagać ręcznego wywołania funkcji sample_fasta.

Funkcja find_motifs

find_motifs jest funkcją odpowiadającą funkcji o tej samej nazwie z Wysokopoziomowego API. Wymaga podania parametru typu INTERNAL będącego klasą spełniającą wymogi InternalType, która odpowiada parametrowi INTERNAL przekazywanego obiektu Sq oraz zwracanych motywów.

Parametry:

- sq wektor przeszukiwanych Sekwencji.
- names wektor nazw przeszukiwanych Sekwencji.
- motifs wektor poszukiwanych Motywów.

Funkcja zwraca znalezione motywy razem ze szczegółowymi informacjami o ich lokalizacji wewnątrz wejściowych Sekwencji.

Funkcje integracji

Poniższe funkcje służą do opakowywania i rozpakowywania obiektów opisywanych w tym dokumencie i zaimplementowanych w bibliotece w odpowiednie typy z biblioteki Rcpp, aby umożliwić przekazywanie tych obiektów pomiędzy R a C++.

Importowanie z R:

const bool &ignore_case = constants::DEFAULT_IGNORE_CASE)

- 1) Importuje Alfabet.
- 2) Importuje obiekt Sq.
- 3) Importuje obiekt *ProtoSq* z określonym ProtoType.

Eksportowanie do R:

```
    Rcpp::StringVector export_to_R(const Alphabet &alphabet)
    Rcpp::List export_to_R(const Sq<RCPP_IT> &sq))
    template < typename INTERNAL, typename PROTO > typename ProtoSq < INTERNAL, PROTO > :: ContentStorageType export_to_R(const ProtoSq < INTERNAL, PROTO > &proto_sq))
    Rcpp::DataFrame export_to_R(const internal::NamedSqibble < RCPP_IT > &sqibble))
    Rcpp::DataFrame export_to_R(const internal::MotifFrame < RCPP_IT > &found_motifs)
```

1–5) Eksportuje odpowiednie obiekty C++ z biblioteki do odpowiednich typów Rcpp, które mogą być przekazane do Wysokopoziomowego API.

Parametry:

- sq obiekt klasy sq posiadający poprawny atrybut alphabet
- proto obiekt typu odpowiedniego do skonstruowania ProtoSq
- letters wektor *Liter* posiadający atrybut type będący poprawną nazwą *Typu Alfabetu*
- NA_letter Litera reprezentująca brak danych
- ignore_case wartość logiczna określająca, czy różnice w rozmiarze Liter powinny być ignorowane

Konwersje R-owych wektorów:

3. LenSq convert_sample_size(const Rcpp::NumericVector &sample_size)

- 1) Importuje wektor napisów.
- 2) Importuje pojedynczą wartość, ekstrahując element wektora znajdujący się na wskazanej przez indeks pozycji, domyślnie zerowej (pierwszej w terminach R-owych).
 - 3) Wyciąga pierwszą wartość wektora oraz zamienia ewentualną wartość Inf na R_XLEN_T_MAX.

Parametry:

- vector wektor R-owy do zaimportowania
- index indeks wyciąganego elementu
- sample_size wektor długości 1 z rozmiarem próbki (potencjalnie o wartości Inf)

Konwersje C++-owych wektorów:

```
1. Rcpp::StringVector convert_string_vector(const std::vector<std::string> &vector)
```

1) Importuje wektor napisów.

Parametry:

• vector – C++-owy wektor napisów

Pozostałe funkcje użytkowe

Obsługa ostrzeżeń:

```
    void handle_warning_message(const std::string &message, const constants::WarningLevel &warning_level)
    void handle_warning_message(const std::string &message, const std::string &warning_level)
```

1-2) Obsługuje ostrzeżenie w konsoli R, wyświetlając podany komunikat na podanym poziomie.

Parametry:

- message wiadomość dla użytkownika z informacją o sytuacji wyjątkowej
- warning_level poziom ostrzeżenia w formie wartości typu wyliczeniowego albo nazwy poziomu

Odczytywanie alfabetu Sekwencji:

```
1. template < typename INTERNAL >
Alphabet obtain_alphabet(
    const typename TypeBinder < INTERNAL , STRING_PT > :: ProtoSqListConstructorType &x ,
    const LenSq sample_size ,
    const Letter &NA_letter = constants:: DEFAULT_NA_LETTER ,
    const bool ignore_case = constants:: DEFAULT_IGNORE_CASE)
```

1) Uzyskuje rzeczywisty Alfabet na podstawie przekazanych Niespakowanych Sekwencji.

Parametry:

- x lista niespakowanych Sekwencji
- sample_size liczba pierwszych znaków Sekwencji, na podstawie których ma być określony Alfabet
- NA_letter *Litera* reprezentująca brak danych
- ignore_case wartość logiczna określająca, czy różnice w rozmiarze *Liter* mają być ignorowane

Konwersje mapa-wektor:

```
1. template < typename T >
std::vector <T > convert_set_to_vector(const std::set <T > &set)
```

- 1) Konwertuje podany zbiór na wektor o kolejności zgodnej z kolejnością iteratora po zbiorze.
- 2) Konwertuje mapę (wartość liczbowa odpowiadająca *Literze*, *Litera*) na wektor *Liter* zgodny z kolejnością wartości liczbowych.

Parametry:

- set zbiór dowolnych elementów
- value_to_letter mapa par (wartość liczbowa odpowiadająca Literze, Litera)

4 Instrukcja użytkowania

W poniższej sekcji przedstawiono podstawowe sposoby korzystania z Systemu.

Wykorzystywanie pakietu R

Aby korzystać z pakietu, należy wprowadzić do konsoli nazwę funkcji poprzedzoną nazwą pakietu i operatorem zakresu '::', np.:

```
tidysq::sq(c("ATGATAGCTAGTG", "ATCGATAGC", "CCCTAGTGA")) -> sequences
tidysq::reverse(sequences)
tidysq::bite(sequences, 2:4)
```

Alternatywą jest załącząnie przestrzeni nazw pakietu do ścieżki przeszukiwań za pomocą jednorazowego wywołania polecenia 'library':

```
library(tidysq)
sq(c("ATGATAGCTAGTG", "ATCGATAGC", "CCCTAGTGA")) -> sequences
reverse(sequences)
bite(sequences, 2:4)
```

Wprowadzenie w podstawowe funkcjonalności pakietu dla nowych użytkowników można znaleźć w winietce pod adresem: http://biogenies.info/tidysq/articles/quick-start.html. Można też uzyskać do niej dostęp z poziomu środowiska RStudio wywołując polecenie

```
vignette("quick-start", "tidysq")
```

Pomoc na temat używania pakietu, struktury obiektów oraz szczegółową dokumentację funkcji można znaleźć wywołując w konsoli '?topic', gdzie 'topic' oznacza temat, na jaki chce się uzyskać pomoc.

Załączenie biblioteki dynamicznej C++

Aby załączyć bibliotekę we własnym pakiecie, należy wykonać następujące kroki:

- 1. Dołączyć bibliotekę i pakiet Rcpp. Najprostszy sposób to zainstalowanie pakietu usethis oraz wywołanie usethis::use_rcpp() i postępowanie zgodnie z krokami podanymi w konsoli. Szczegółowe informacje na temat dołączania Rcpp można znaleźć pod linkiem: http://dirk.eddelbuettel.com/code/rcpp/Rcpp-package.pdf.
- 2. Dodać tidysq do sekcji Imports oraz LinkingTo w pliku DESCRIPTION.
- 3. W przypadku korzystania z pakietu roxygen2, należy w dokumentacji dodać rejestrację biblioteki dynamicznej przy rejestracji biblioteki Rcpp:

```
#' @useDynLib tidysq, .registration = TRUE
```

W przypadku niekorzystania z pakietu roxygen2, należy dodać następującą linię w pliku NAMESPACE: useDynLib(tidysq, .registration = TRUE)

Aby skorzystać z biblioteki w danym pliku źródłowym, należy w nim dodać kod:

```
// [[Rcpp::depends(tidysq)]]
#include <tidysq.h>
```

Od tego miejsca w pliku źródłowym można korzystać z przestrzeni nazw tidysą i funkcji i obiektów w niej dostępnych.