nr.145173

# Sprawozdanie z projektu 3 AKwB

## 1. Wczytanie sekwencji z pliku:

Program otwiera plik o nazwie podawanej przez użytkownika. Pobierana jest nazwa sekwencji i tworzony jest nowy element klasy. W klasie przechowywany jest wektor przechowujący sekwencję, wektor przechowujący wartości poszczególnych nukleotydów, wektor przechowujący miejsce wystąpienia poszczególnych nukleotydów w sekwencji jak również zmienna do zapamiętania nazwy wczytanej sekwencji. Odczytana pierwsza linia pliku to nazwa sekwencji, która jest zapamiętywana dla elementu klasy. Następnie program zaczyna odczyt sekwencji znak po znaku. Odczytane nukleotydy są przekazywane do wektora przechowującego sekwencje. W momencie przekazania nukleotydu do wektora, przekazywana jest również jego pozycja w sekwencji poprzez podanie wartości inkrementatora do odpowiedniego wektora. Wartość inkrementatora jest zwiększana w momencie odczytu nowego nukleotydu. Gdy program natrafi na znak '>' przerywa odczyt. Skonstruowany obiekt klasy przekazywany jest do wektora klasy, w którym przechowywane są obiekty. Następuje wczytanie nowej linii i utworzenie nowego obiektu klasy. Cały proces trwa do momentu natrafienia przez program znaku ';'.

W momencie jego wystąpienia, zamykany jest plik fast. Program przechodzi do odczytu pliku qual. W przypadku przygotowanych sekwencji ich wystąpienia w plikach fasta i qual są takie same. Dzięki temu przy odczycie 1 sekwencji z pliku qual wiadomo, że dana sekwencja w wektorze klasy ma miejsce vector[0]. Następuje pobranie pierwszej linii pliku tekstowego a następnie odczyt znak po znaku wartości nukleotydów. Wartości są odczytywane i przekazywane do wektora przechowującego wartości nukleotydów dla odpowiedniej sekwencji. Odczyt i przekazanie trwają tak długo, dopóki program nie natrafi na 0 które znajduje się na końcu każdej sekwencji jako sygnalizator do zaprzestania odczytu. W momencie wystąpienia 0 przerywana jest pętla wpisująca oraz zwiększana jest wartość inkrementatora, co pozwala na wczytanie kolejnych wartości do następnego obiektu klasy (następnej sekwencji). W momencie natrafienia w trakcie odczytu na symbol ';' program zamyka plik oraz kończy odczyt.

#### 2. Modyfikacja sekwencji:

Modyfikowanie sekwencji rozpoczyna się od podania przez użytkownika wartości wiarygodności. Wartość ta przekazywana jest do funkcji. Modyfikacja złożona jest z dwóch pętli for. Pierwsza pętla odpowiada za pobranie obiektu klasy. Druga natomiast za przeszukanie wektora wartości dla odpowiedniego obiektu. Jeśli wartość wiarygodności jakiegoś nukleotydu jest mniejsza od wartości podanej przez użytkownika program usuwa tą wartość z wektora. Oprócz usunięcia wartości wiarygodności nukleotydu z wektora następuje usunięcie nukleotydu z wektora sekwencji jak również usunięcie jego pozycji z wektora przechowującego te informacje. Po znalezieniu i

usunięciu nukleotydu o wartości wiarygodności mniejszej niż ta podana pętla przeszukująca rozpoczyna się od nowa. Powtarzanie trwa tak długo aż w wektorze wartości zostaną tylko wystąpienia większe od wartości podanej przez użytkownika. Po zakończeniu pętli przeszukującej następuje przejście do następnej sekwencji i jej przeszukanie.

#### 3. Tworzenie wierzchołków

Tworzenie wierzchołków rozpoczyna się od podania przez użytkownika wartości jakiej długości mają być tworzone podciągi. Wartość musi znajdować się w przedziale od 4 do 9. Wartość przekazywana jest do funkcji. Tworzenie wierzchołków złożone jest z 3 funkcji for. Pierwsza podobnie jak w przypadku modyfikacji odpowiada za wybranie obiektu klasy co pozwala na odczytania sekwencji jak również jej długości. W drugiej pętli tworzone są nowe obiekty klasy. Długość trwania pętli to wielkość sekwencji nukleotydowej pomniejszona o wartość długości podciągu podaną przez użytkownika. Do każdego obiektu przy wykorzystaniu trzeciej funkcji for wpisywana jest sekwencja o długości podanej przez użytkownika. Jak również do nowo powstałego obiektu przekazywana jest informacja, z której sekwencji pochodzi dany podciąg, numer pierwszego nukleotydu podciągu (numery podawane są po modyfikacji sekwencji oryginalnej), obiektowi nadawany jest również numer id oraz podana jest nazwa sekwencji oryginalnej, z której pochodzi podciąg. Tak utworzony wierzchołek (obiekt klasy) wpisywany jest do wektora wierzchołków. Następuje zwiększenie inkrementatora id i rozpoczynane jest tworzenie wierzchołka dla następnego nukleotydu sekwencji.

## 4. Tworzenie połączeń w grafie

Tworzenie połączeń pomiędzy wierzchołkami odbywa się poprzez porównanie ze sobą sekwencji podciągów wszystkich wierzchołków. Funkcja porównująca zbudowana jest z 3 funkcji for. Pierwsze dwie odpowiadają za pobranie porównywanych wierzchołków. W drugiej funkcji for dodatkowo znajduje się zmienna do zapamiętania ilości poprawnych wystąpień nukleotydów w sekwencji. Porównywanie wierzchołków odbywa się w momencie gdy nie są to te same wierzchołki (i != j). Jeśli są to dwa różne wierzchołki to następuje porównanie ich sekwencji przy użyciu trzeciej pętli for. W trzeciej pętli for znajduje się warunek sprawdzający czy wystąpienia nukleotydów porównywanych sekwencji są takie same. Jeśli nukleotydy w sekwencji są takie same zwiększana jest wartość zmiennej mającej pamiętać ilość poprawnych wystąpień nukleotydów. Po sprawdzeniu sekwencji obu wierzchołków sprawdzana jest wartość zmiennej opisanej wcześniej. Jeśli jej wartość jest równa długości sekwencji to oznacza, że porównywane sekwencje były takie same. Do wierzchołka pobranego w pierwszej pętli przekazywany jest numer wierzchołka, z którym był porównywany. Informacja ta przekazywana jest do wektora listy sąsiedztwa, który to wektor jest składową klasy wierzchołków. Następuje przejście do nowego wierzchołka, wyzerowanie zmiennej sprawdzającej poprawność wystąpień nukleotydów i sprawdzenie poprawności sekwencji kolejnego wierzchołka.

### 5. Poszukiwanie kliki

Dla poszukiwania kliki tworzony jest obiekt klasy. Do przechowania znalezionych klik użyty został wektor klasy *Cliq*. W klasie przechowywane są takie informacje jak:

- sekwencja nukleotydowa znalezionej kliki,
- elementy kliki (wierzchołki grafu),

- numery podciągów składających się na klike,
- nazwy sekwencji, z których pochodzą elementy kliki,
- id kliki,

Funkcja poszukująca klikę bazuje na informacji, że w grafie łączone ze sobą wierzchołki o takiej samej sekwencji nukleotydowej podciągów i aby spełnić warunek znalezienia kliki, należy znaleźć taki zestaw aby w liście sąsiedztwa wystąpiły wierzchołki/podciągi pochodzące ze wszystkich wczytanych sekwencji sekwencji. W funkcji zadeklarowana jest tablica boolowska sequences[5], której każdym miejscu przypisywana jest wartość. Jak również zmienna boolowska fine o wartości true. W pierwszej pętli wybierany jest wierzchołek dla, którego będzie sprawdzana lista następników. Jak również tworzony jest obiekt klasy. W następnej pętli sprawdzane jest, z której sekwencji pochodzi dany wierzchołek w liście, jak również sprawdzane jest z jakich sekwencji pochodzą wierzchołki obecne w liście następników sprawdzanego wierzchołka. W pętli tej umieszczone jest 5 warunków. Jeśli wystąpił wierzchołek z jednej z badanych sekwencji wtedy na odpowiednim miejscu tablicy sequences wartość false zamieniana jest na wartość true.

Po sprawdzeniu listy następników pętla for sprawdza, czy na którymś z miejsc tablicy sequence[5] nie występuje wartość false. Jeśli na, którymkolwiek miejscu w tablicy występuje wartość false wtedy zmieniana jest wartość zmiennej fine na false. Jeśli natomiast na wszystkich miejscach tablicy była wartość true wtedy spełniony jest warunek, mówiący że w tablicy następników występują elementy ze wszystkich sekwencji. Po spełnieniu tego warunku do obiektu klasy cliquee przekazywane jest:

- sekwencja podciągu,
- wpisywane są elementy kliki (wierzchołki grafu),
- nadawane jest id kliki,

Utworzony obiekt przekazywany jest do wektora klasy cliquee.

Po wykonaniu powyższych operacji do kliki przekazywane są informacje o numerze podciągu jak również nazwie sekwencji, z której pochodzi każdy podciąg należący do kliki. Całość wykonywana jest w 3 pętlach for gdzie dzięki znajomości id. wierzchołka należącego do kliki odnajdywany jest odpowiedni wierzchołek. Po jego znalezieniu do wektorów klasy *cliquee* przekazywana jest nazwa sekwencji jak również numer podciągu, które są zapisane w danym wierzchołku.

#### 6. Złożoność obliczeniowa

Najbardziej złożonymi funkcjami w programie są:

- funkcja tworząca wierzchołki 3 pętle for,
- funkcja tworząca połączenia w grafie 3 pętle for,
- funkcja wyszukująca klike 3 pętle for,

W samej funkcji wyszukującej klike umieszczone jest więcej pętli for, lecz nie są to pętle stricte zagnieżdżone w sobie lecz występujące po sobie. Dlatego też określiłbym je jako potrójne wystąpienie 2 pętli for.

Na tej podstawie szacuję złożoność wymienionych funkcji jako O(n³) każda. Pozostałe funkcje:

- funkcja modyfikująca sekwencje – 2 petle for,

Złożoność obliczeniową całego programu szacuję jako: O(n³)

#### 7. Wyniki

```
Motyw:
Motyw lenght: 16nt
>DOJHLOP01E2OD5
AAACAAGGTCTTTTAATTTTAGATGGGTCAATTTCTAAGGTTTTAGGCATGCTTGCAT
                                                                   TACCCAAA
>DOJHLOP02HHDJI
                   TTTTACATCAATAATTTTTGAGAATTTTAATTTGCTCCAAAATCAACAAGTTAGAA
GTGGC
ATACGACTCTTGATTGGCAAAGGTTTACCACTGGTAATACTCATACAGCTTGGGTG
>DOJHLOP02G02S7
                     TGGACATTCAACAAGTTTTGAAGATGCCAAGCGAAAGGCAATTAGGCTTGGGG
GTCTAATT
TATGACCATATCGCTCAAGGGGATTTGGACGTATGGTGTACTGCA
>DOJHLOP02JGLS0
GATGGCAT
                     TCATCCATATCGGCATATTTTCTGGCAACCTATTAAGAGTCTTGATTAAAATA
TTTTCAGCAAAAAAAGTATCAGTAATCAAAGGTAAATGTGGTCCA
>DOJHLOP01DNKEA
ATAACGTTGGAAAAT
                            TGATGGATTTCATCGGCAAGGCTTCTGAAAGGCACGGGTTTTCGGCT
GTTGGTTTGAAATCAAATATTCAGACATTAACCGTCTGAACTATTTTGGTTTACTTTTTT
TTTTATGG
```

```
Qual.1
 >DOJHLOP01E2OD5
32 31 32 31 31 28 31 28 28 31 28 28 31 28 23 13 128 28 30 24 24 19 3 31 31 28 23 31 29 30 28 27 14 31 28 29 22 22 21 16 7 32 27
27 13 32 28 31 31 28 31 31 27 31 29 32 31 26 32 32 27 29 24 27 26 13 30 25 19 25 19 24 30 25 25 22 11 30 25 25 25 21 9 32 31 27 29 29 28 18 32 30 30 25 29 28 18 31 17 31 28 26 24
24 23 21 12 31 31 27 29 31 31 31 31 29 24 32 17 28 15 29 28 18 0
>DOJHLOP02HHDJI
                                                                      29 28 17 30 32 31 31 31 31 27 30 29 26 22 22 21 16 6 31
31 30 31 77 25 25 22 12 31 27 29 28 17 29 31 32 31 26 25 25 22 13 31 32 27 24 31 30 73 23 31 27 21 29 29 28 16 31 29 32 31 31 32 30 32 31 27 31 24 29 23 31 27 30 27 27 18 30 25 27 26 12 29 31 27 32 28 29 31 26 32 31 27 32 32
31 27 29 28 26 25 32 24 32 32 28 25 26 26 18 25 26 0
 DOJHLOP02G02S7
25 31 28 30 31 26 28 21
                                                                                30 24 30 31 27 31 26 32 29 23 32 30 27 31 24
24 19 4 29 28 22 28 31 29 32 28 21 29 23 24 30 25 28 28 16 30 25 28 23 14 31 27 29 31 26 32 31 27 25 25 21 9
31 31 29 28 22 27 21 31 26 26 31 32 27 30 29 28 31 27 23 23 21 13 20 27 26 18 30 27 22 27 32 32 32 31 30 27 29 31 32
>DOJHLOP02JGLS0
27 30 29 31 27 31 30
                                                                             32 31 31 28 31 27 32 30 32 28 30 31 26 30 30 31
32 25 25 20 7 27 31 26 19 30 27 20 31 26 31 30 30 24 31 26 31 25 28 32 29 31 27 28 32 31 26 25 25 22 10 28 32
25 25 21 9 28 28 30 27 15 15 15 14 12 8 3 31 31 32 28 31 31 28 32 30 25 26 29 29 28 18 31 26 31 24 23 7 32 30 32 23 15
 >DOJHLOP01DNKEA
 32 31 30 27 31 32 31 28 31 27 25 24 20 5 <mark>3</mark>
29 28 26 28 23 24 23 7 27 26 26 11 32 31 28 27 14 18 31 30 25 31 28 30 31 31 30 29 26 30 28 31 27 29 29 29 31 32 30 26
31 11 31 24 24 19 5 30 26 29 28 18 18 29 7 7 6 6 6 5
4 3 2 1 31 29 30 27 0
```

```
odaj nazwe pliku qual do odczytu: qual2
odaj wartosc wiarygodnosci:
odaj dlugosc podciagow w zakresie od 4 do 9:
losc znalezionych klik: 7
(lika nr: 1
ekwencja kliki
lementv kliki:
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 11
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 16
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01C10KC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 17
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATT3O |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 11
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 9
(lika nr: 2
ekwencja kliki
TGTCAA
lementy kliki:
lazwa sekwencji: >D0JHL0P01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 12
Nazwa sekwencii: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencii orvginalnei: 17
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01C1OKC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 18
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATT30 |Numer podciagu z sekwencji orvginalnej: 12
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 10
```

```
lika nr: 3
ekwencja kliki
GTCAAT
lementv kliki:
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 13
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 18
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01C1OKC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 19
lazwa sekwencii: >DOJHLOP01ATT30 |Numer podciagu z sekwencii orvginalnei: 13
azwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 11
lika nr: 4
ekwencia kliki
lementy kliki:
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 15
azwa sekwencji: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 20
azwa sekwencji: >DOJHLOP01C1OKC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 21
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATT30 |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 15
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 13
```

```
(lika nr: 5
Sekwencia kliki
 CAATCT
Elementy kliki:
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 16
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 21
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01C1OKC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 22
Nazwa sekwencii: >D0JHL0P01ATT30 |Numer podciagu z sekwencii orvginalnei: 16
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 14
Klika nr: 6
Sekwencja kliki
CAATCTG
Elementy kliki:
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01CPWLL |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 17
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATP7M |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 22
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01C1OKC |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 23
Nazwa sekwencji: >DOJHLOP01ATT30 |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 17
lazwa sekwencji: >DOJHLOP01B3GME |Numer podciagu z sekwencji oryginalnej: 15
```

```
Motyw:
Motyw lenght: 9nt
>DOTHLOP02HSG8F
GAAAACTTCTCACCCAAGTTTTTAGT
                                 GGGTATCCACCATCAATCATTAAACAAGGTCTTTTA
ATTTTAGATGGGTCAATTTCTAAGGTTTTAGGCATGCTTGCAACCCAAATAACAATATCTG
>DOJHLOP01AD4GJ
AAGCTGTATGAGTATTACCAGTGGTAAACCTTTGCCAATCAAGAGTCGTATTTCTAACTT
GTTGATTTTGGAGCAAAATTTAAAAATTCTACAAAAATTTATTGATGTAA
>DOJHLOP01CNMJ2
AGTTCAATTTTGATCTTGCTTGGTGCCAAATGTTTGGTCTAATTGGACATTCAACAAGTT
TTGAAGACTGCCAAGACGAAAGGCATTAGGCTTGGGGTATGAACCAT
>DOTHLOP01CY96H
ATCGGCATATTTTCTGGCAACCTATTAAGAGTCTTGATTAAAATATTTTCAAGCAAAAAA
AGTATCAGTAATCAAAGGTAAATGTGGTCCATGTTGTTCACATG
>DOJHLOP01AWB72
TATTTGATTTCAAACCAACATCAAAATTGGCCGAAAACCCGTGCCTTTCAGAAGCCTTGCCGATGAAAT
CCATCTTTTCCAACGTTATATTATTTCTTCCCCAACTGAAGTTGGTATGACAATT
```

#### 8. Wnioski

Można zauważyć, że znalezione kliki pokrywają się z motywami obecnymi w sekwencjach. Co było dla mnie ciekawe nie zawsze podanie mniejszej wiarygodności i krótszej sekwencji podciągów skutkowało znalezieniem większej ilości klik.

Program był bardzo ciekawy do napisania. Było to swego rodzaju namacalne wykorzystanie umiejętności pisania kodu do tworzenia programu do obróbki wyniku z sekwencjonowania (nawet jeśli miał to być tylko przykład i swego rodzaju wyzwanie-zabawa). Tak jak poprzednio największy problem sprawiło mi początkowe zrozumienie treści zadania. Lecz w momencie gdy tą treść na spokojnie zrozumiałem i przeanalizowałem to napisanie funkcji nie stanowiło już większego problemu. Ponieważ w większości opierało się to na odpowiednim znalezieniu obiektu/wektora/elementu w wektorze a następnie edycji czy przekazaniu wartości.