

TBD Projekt 2

Zespół 13:

- Filip Misztal
- Wiktor Niemirski
- Stanisław Moska

Cel projektu

Rozbudowano bibliotekę polars-bio o operację k-merów, zliczającą ich częstość w genomach z plików FASTQ. Implementację przeprowadzono w Rust.

Imports

```
In [6]: import os
from kmer_benchmark import performance_test, visualize_performance_result

TEST_FASTQ_PATH = "tests/data/io/fastq/temp.fastq"
SMALL_FASTQ_PATH = "tests/data/io/fastq/example.fastq"
LARGE_FASTQ_PATH = "tests/data/io/fastq/ERR194147.fastq"
OUTPUT_DIR = "benchmark_results"
FASTQC_RS_OUTPUT = "tests/data/io/fastq/output_big.json"
FASTQC_RS_OUTPUT_K3 = "tests/data/io/fastq/output.json"
```

Testy poprawności działania

Dla przykładowej sekwencji GTAGAGCTGT uruchomiono naszą implementację oraz moduł fastqc-rs.

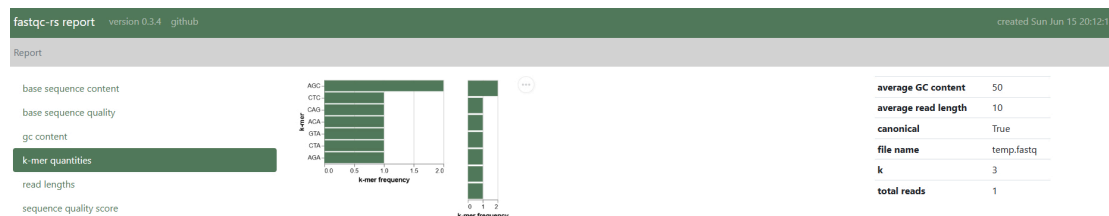
Wyniki naszej implementacji zgadzały się z wynikami analitycznymi, natomiast fastqc-rs dawał rozbieżne wyniki.

Wydaje się, że fastqc-rs inaczej interpretuje dane wejściowe. Dlatego dalsze zostały ograniczone do testów szybkościowych.

```
In [7]: print(get_kmer_results(TEST_FASTQ_PATH, k=3))
```

INFO:polars_bio:Table: temp registered for path: tests/data/io/fastq/temp.fastq
2rows [00:00, 1568.84rows/s]

	kmer	count
0	TAG	1
1	CTG	1
2	GCT	1
3	GTA	1
4	TGT	1
5	AGC	1
6	AGA	1
7	GAG	1



Testy szybkości działania

```
In [9]: print("\nRozpoczynam testy wydajności...")
performance_results = performance_test(
    fastq_paths=[SMALL_FASTQ_PATH, LARGE_FASTQ_PATH],
    k_values=[3,5],
    include_fastqc_rs=True
)
results_path = os.path.join(OUTPUT_DIR, "performance_results.csv")
performance_results.to_csv(results_path, index=False)
print(f"Zapisano wyniki wydajności do {results_path}")

print("\nGeneruję wykresy wydajności...")
visualize_performance_results(
    performance_results,
    save_path=os.path.join(OUTPUT_DIR, "performance")
)
```

INFO:polars_bio:Table: example registered for path: tests/data/io/fastq/example.fastq

Rozpoczynam testy wydajności...

=== Test wydajności ===

Testowanie pliku: example.fastq

k=3

200rows [00:00, 82475.74rows/s]

0.718682050704956

k=5

200rows [00:00, 129373.97rows/s]

INFO:polars_bio:Table: err194147 registered for path: tests/data/io/fastq/ERR194147.fastq

0.714360237121582

Testowanie pliku: ERR194147.fastq

k=3

8240796rows [00:16, 503538.97rows/s]

22.681674003601074

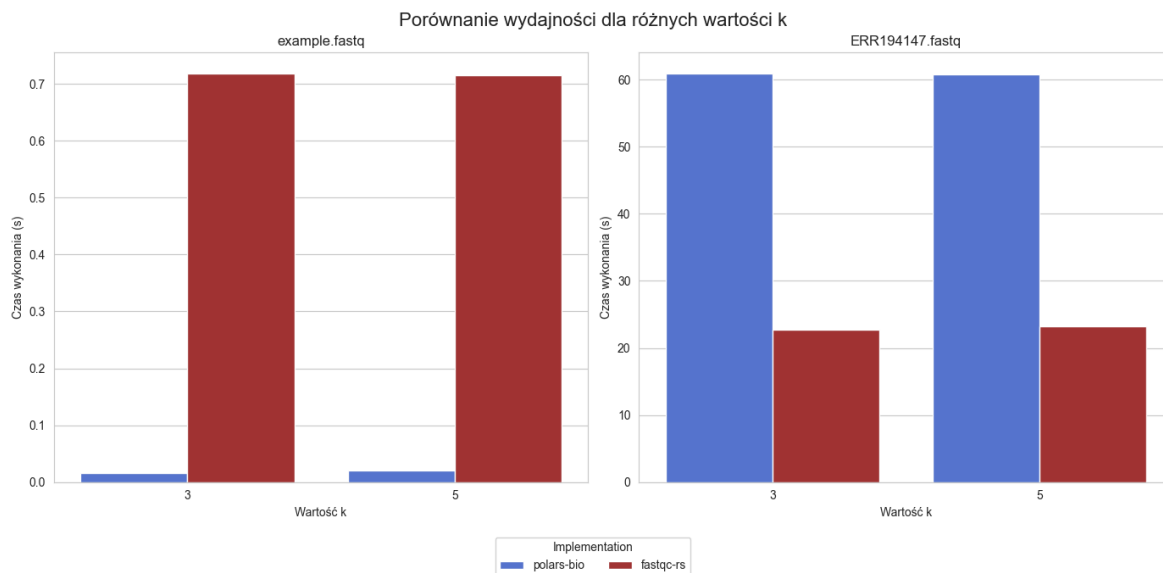
k=5

8240796rows [00:16, 502680.76rows/s]

23.172255992889404

Zapisano wyniki wydajności do benchmark_results/performance_results.csv

Generuję wykresy wydajności...



Podsumowanie

Zaimplementowana operacja k-merów poprawnie działa dla analitycznie wyznaczonych przykładów. Zauważono pewne rozbieżności w działaniu narzędzia fastqc_rs, co może wynikać z innego kodowania merów (postać kanoniczna?). Sprawdzono zaimplementowaną metodę na dwóch przykładowych zbiorach. Dla małego zbioru nasza implementacja uzyskiwała szybszy czas inferencji niż moduł fastqc_rs, natomiast dla dużych plików FASTQ (~2Gb), pakiet fastqc_rs był szybszy od naszej implementacji. Przeprowadzone testy zostały zaprezentowane na wykresach powyżej.