RNAemo

Especificación de Diseño de Software

Franco Gaspar Riberi

2 de julio de 2012

Índice

1. Introducción

1.1. Propósito

El propósito de este documento es la especificación de diseño de software correspondiente a la primera versión del producto ***RNAemo***.

La confección de este documento se contextualiza dentro del desarrollo de la tesis de grado de la carrera Licenciatura en Ciencias de la Computación de la UNRC, ***RNAemo***, a cargo de Franco Gaspar Riberi, con la dirección de la Lic. Laura Tardivo (UNRC) y las colaboracines de Daniel Gutson, el Lic. Guillermo Biset y el Dr. Roberto Daniel Rabinovich (**FuDePAN**).

El documento esta dirigido a las personas involucradas en el desarrollo de la tesis como así también a todos los colaboradores de **FuDePAN** que eventualmente podrían participar en las etapas de desarrollo y mantenimiento del software.

1.2. Descripción general del documento

En la sección 2 se mencionan los objetivos, la metodología adoptada y las dependencias del diseño.

En la sección 3 se exhibe la arquitectura general del sistema con sus principales componentes e interacciones.

En la sección 4 se presenta el diseño de alto nivel del sistema, sus interfaces y paquetes principales.

En la sección 5 se observa el diseño de bajo nivel del sistema, esto involucra las clases concretas y sus relaciones para cada paquete.

2. Consideraciones de diseño

2.1. Objetivos

Se pretende lograr un diseño del sistema que cumpla con los principios fundamentales del diseño orientado a objetos, comúnmente conocidos por el acrónimo **"SOLID"** [1].

En particular, se pretenden respetar los principios **SRP** (*Single Responsability Principle*), **OCP** (*Open-Closed Principle*) y **DIP** (*Dependency Inversion Principle*) debido a su importancia para obtener un sistema fácilmente extensible y configurable con el fin de satisfacer las necesidades de los usuarios.

2.2. Metodología

La metodología empleada para realizar el análisis y descripción del diseño se denomina *"Diseño dirigido por responsabilidades"*[2].

Esta técnica se enfoca en *qué* acciones (responsabilidades) deben ser cubiertas por el sistema y que objetos serán los responsables de llevarlas a cabo. *Cómo* se realizara cada acción, queda en un segunda plano.

2.3. Herramientas y convenciones

Se utiliza UML[3] como lenguaje de modelado, ArgoUML[4] como herramienta para la confección de diagramas, y Dia[5] para la edición de diagramas de propósito general. Además se adopta la convención de nombrar a las interfaces anteponiendo una letra *"I"* al nombre de la clase concreta que la implementa.
Por ejemplo, interface: *"IPersona"* → clase concreta: *"Persona"*.

3. Arquitectura del sistema

La arquitectura del sistema y la interacción entre los diversos componentes que la conforman se exhiben en la figura 1. A continuación se describe brevemente cada uno de los módulos que comprenden el sistema.

- **MasterOfPuppets:** corresponde al componente principal en términos de ejecución del sistema. Comprenderá la inicialización e invocación de los demás componentes. Representa el módulo encargado de contabilizar y generar las tablas y gráficos que se esperan como salida de este software. Tomara como entrada las secuencias de $_{mi}$RNA desde un archivo en formato FASTA.

- **Generador:** representa el módulo encargado de la generación de secuencias humanizadas. Dada una secuencia original, genera la secuencia humanizada de la misma. Dicho módulo es externo a este desarrollo, y para ello se empleará el software *GeneDesign*[1].

- **Matcher:** representa el componente encargado de realizar el matching por complemento y el cálculo de score entre secuencias de RNA$_m$ y small-RNA$_s$.

[1]Descarga de: http://www.xmarks.com/site/slam.bs.jhmi.edu/gd/

- **RNAmData:** representa el componente que provee al sistema las cadenas de RNAm correspondientes para su uso. Corresponderá a una interfaz permitiendo hacer trasparente el uso de diversas fuentes de mensajeros.
- **FastaParse:** representa la base de datos de RNA_m a través de un archivo en formato FASTA.
- **BlastProxy:** corresponde a un módulo externo el cual permite el alineamiento de secuencias mediante BLAST. Básicamente, compara una secuencia con una gran cantidad de secuencias administradas en una base de datos.
- **FileFasta:** corresponde a la base de datos de secuencias de small-RNA_s a través de un archivo en formato FASTA. (particularmente ${}_{mi}$RNA).
- **fideo:** corresponde a una librería parcialmente ya implementada. Representa el componente que provee al sistema la funcionalidad de *"folding"*. Se deberá agregar la implementación de UNAFold y MFold.
- **Validator:** representa el módulo encargado de realizar el control de calidad del sistema. Es el componente encargado de decidir, si una secuencia se encuentra en el marco de lectura correcto o no.
- **StatisticalControl:** representa el componente encargado de realizar controles estadísticos sobre las sequencias entrantes.
- **Outputs:** refiere a los archivos con formato CSV que serán obtenidos como resultado del presente producto.

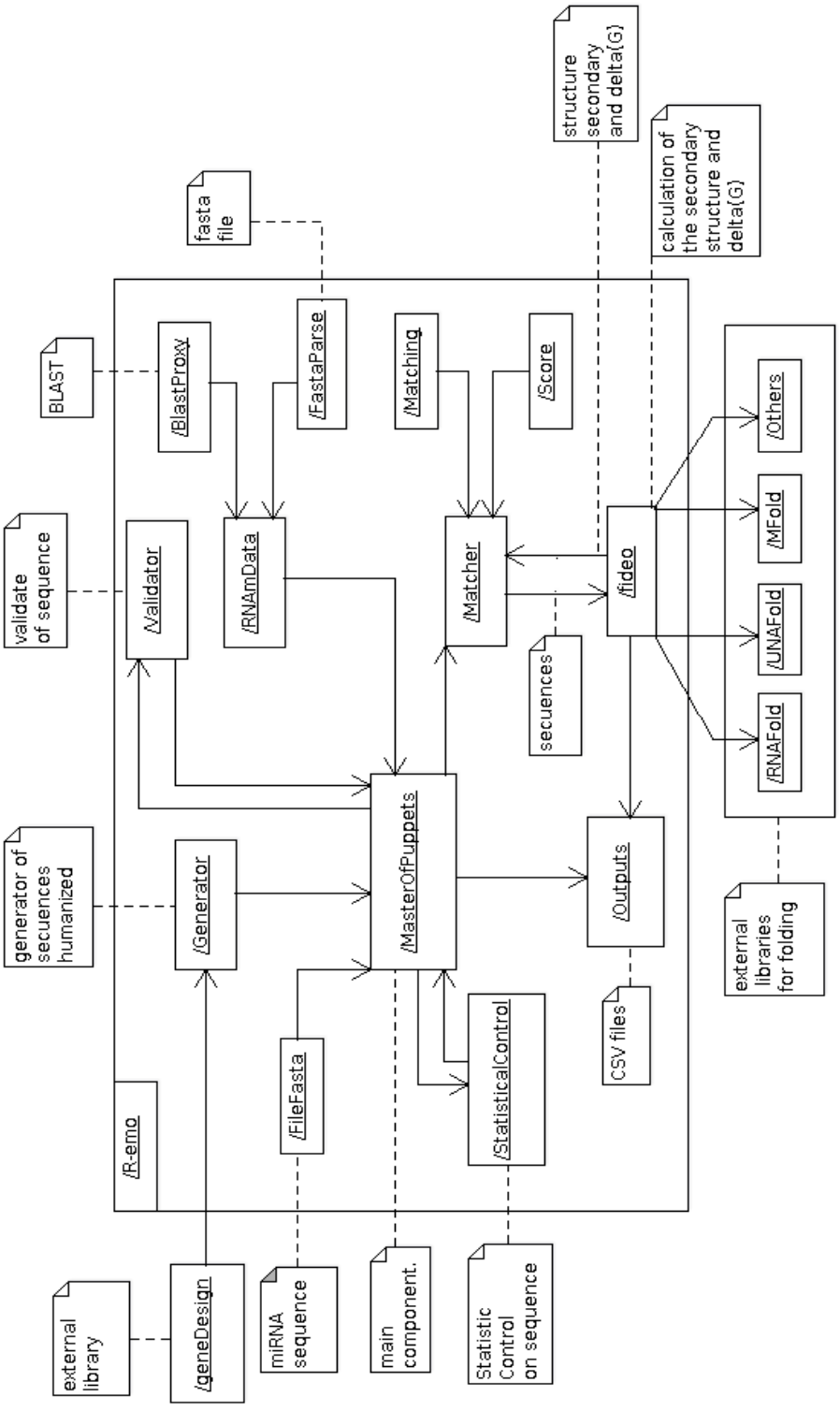


Figura 1: UML - Arquitectura del Sistema

4. Diseño de alto nivel

4.1. Interfaces - Responsabilidades - Colaboradores

En esta sección se presentan las principales interfaces que intervienen en el sistema, sus respectivas responsabilidades y colaboradores. En la figura 2 se exhibe el diagrama de interfaces correspondiente.

Finalmente, en la figura 3 se presenta el diagrama de secuencia correspondiente a la comunicación entre las principales entidades del sistema.

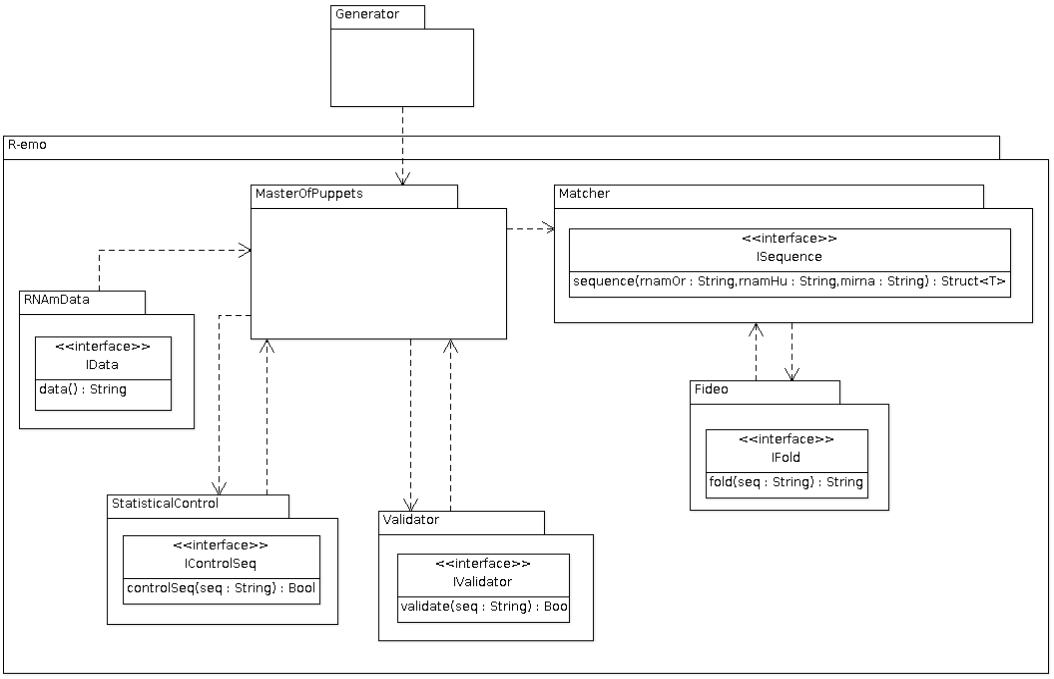


Figura 2: UML - Interfaces

4.1.1. IValidator

Responsabilidad: Realizar el control de calidad para las secuencias. Determinar si una secuencia se encuentra en un marco de lectura válido o no.

Colaboradores:

4.1.2. IControlSeq

Responsabilidad: Realizar el control estadístico sobre las secuencias.

Colaboradores:

4.1.3. IFold

Responsabilidad: Proveer al sistema el *"folding"* de secuencias de RNA.
Colaboradores:

1. Vienna Package (RNAFold).
2. UNAFold.
3. MFold.
4. Otros.

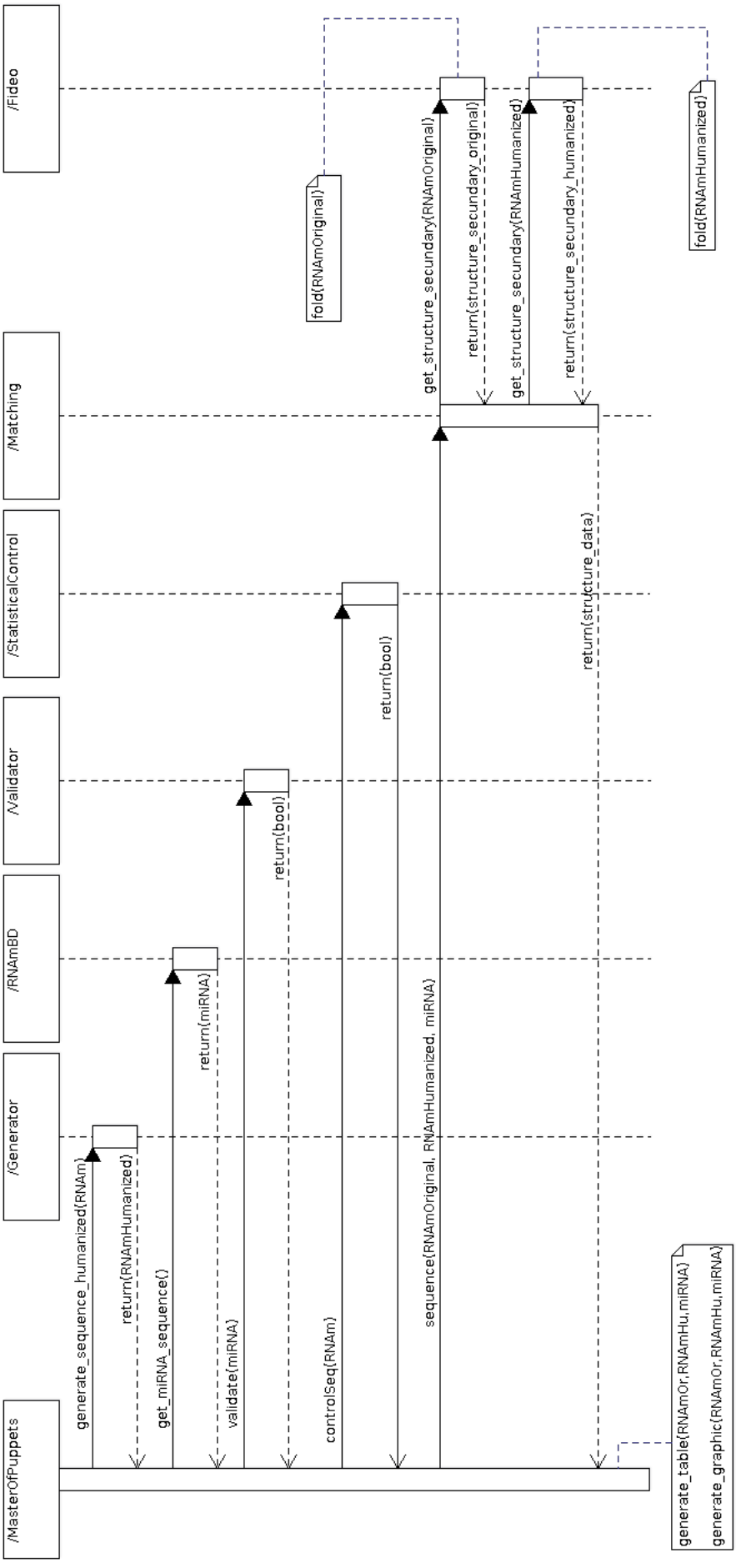
4.1.4. ISequence

Responsabilidad: Provee al sistema el *"matching"* de secuencias.
Colaboradores:

4.1.5. IData

Responsabilidad: Provee al sistema las secuencias de small-RNA$_s$.
Colaboradores:

1. FastaParse
2. ProxyBlast


/MasterOfPuppets
/Generator
/RNAmBD
/Validator
/StatisticalControl
/Matching
/Fideo
generate_sequence_humanized(RNAm)
return(RNAmHumanized)
get_miRNA_sequence()
return(miRNA)
validate(miRNA)
return(bool)
controlSeq(RNAm)
return(bool)
sequence(RNAmOriginal, RNAmHumanized, miRNA)
return(structure_data)
fold(RNAmOriginal)
get_structure_secundary(RNAmOriginal)
return(structure_secundary_original)
get_structure_secundary(RNAmHumanized)
return(structure_secundary_humanized)
fold(RNAmHumanized)
generate_table(RNAmOr,RNAmHu,miRNA)
generate_graphic(RNAmOr,RNAmHu,miRNA)

5. Diseño de bajo nivel

5.1. Paquetes y clases concretas

En esta sección se presentan las clases concretas que implementan las interfaces presentadas en la sección 4. Para mayor claridad, se dividieron los diagramas UML por paquetes.

5.1.1. Validator

En la figura 4 se exhibe el diagrama de clases correspondiente al componente validator. Este paquete representa el módulo "Validator" que se observa en la figura 1 en la sección 3.

La responsabilidad de este componente es realizar un control de calidad sobre las secuencias de small-RNA$_s$ determinando si las mismas se encuentran en un marco de lectura válido. Para garantizar esta calidad, es necesario traducir la cadena de nucleótidos a una cadena de aminoácidos y verificar que no queden nucleótidos libres, conocidos como *codones stops*. Para ello se utilizará la librería *BioPP*.

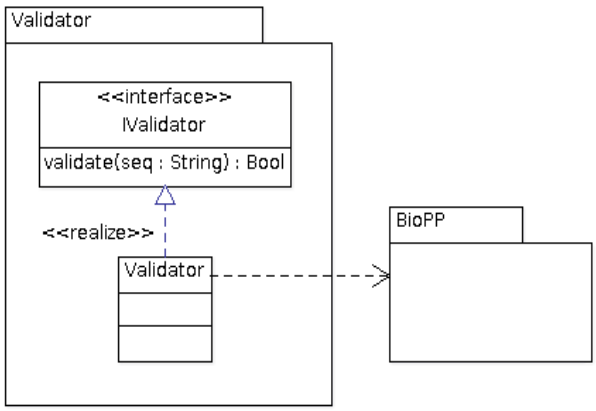


Figura 4: UML - Validator

5.1.2. StatisticalControl

En la figura 5 se observa el diagrama de clases correspondiente al componente statisticalControl. El mismo representa el módulo "StatisticalControl" que se exhibe en la figura 1 en la sección 3.

La responsabilidad de este componente radica en realizar controles estadísticos sobre las secuencias de RNA_m. Para estos controles, será necesario la generación de secuencias random.

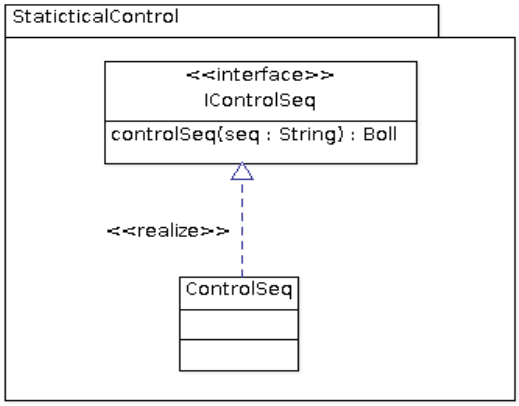


Figura 5: UML - StatisticalControl

5.1.3. RNAmData

En la figura 6 se observa el diagrama de clases correspondiente al componente RNAmData. El mismo representa el módulo "RNAmData" que se exhibe en la figura 1 de la sección 3.

Este componente corresponde a una interface que brinda al sistema las diversas secuencias de RNA mensajero. Permite utilizar diversas fuentes de datos, en primera instancia se abarcan dos fuentes; por un lado, *fasta parser* que corresponde a un archivo en formato FASTA, y por el otro (a futuro), *BlastProxy* que corresponde a la obtención de secuencias a través de BLAST.

5.1.4. Matcher

En la figura 7 se observa el diagrama de clases para el paquete Matcher. Este paquete representa el componente Matcher correspondiente a la figura 1 de la sección 3.

La responsabilidad de este componente es realizar el matching entre secuencias y calcular el score de matching. Para ello, se generarán diversas cadenas por cada posición del RNA_m resultantes de matching diferentes.

5.1.5. Generator

complete

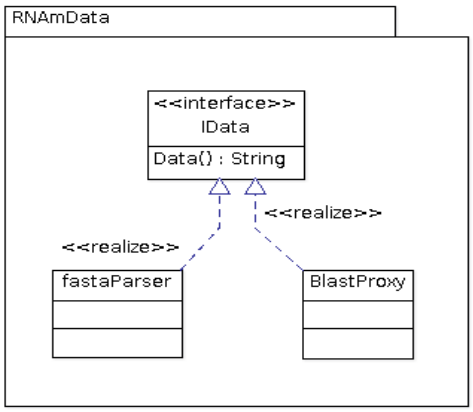


Figura 6: UML - RNAmData

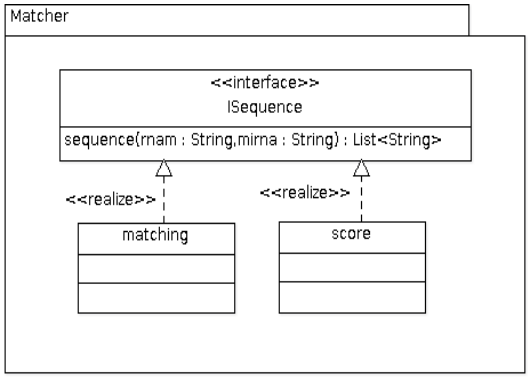


Figura 7: UML - Matching

5.1.6. fideo

En la figura 8 se observa el diagrama de clases para el paquete fideo. Este paquete representa el componente fideo correspondiente a la figura 1 de la sección 3.

La responsabilidad de este componente es brindar al sistema el servicio de *"folding"* sobre secuencias de RNA_m. Para cumplir con esta responsabilidad, se ofrece al sistema el acceso a librerías externas de manera transparente y permitiendo utilizar diferentes librerías para acceder a diferentes servicios.

Se contemplan los siguientes tipos de folding:

- RNAFold.
- UNAFold.
- MFold.

La importancia de este paquete y las interfaces que contiene radica en que permite abstraerse del uso de una u otra librería.

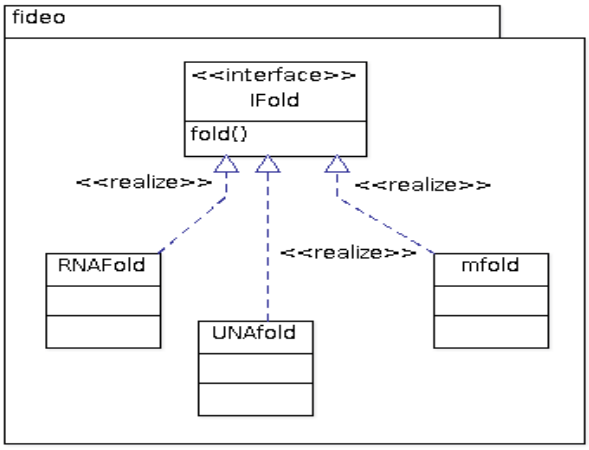


Figura 8: UML - fideo

6. Fud-agnostic

Referencias

[1] *"Design Principles and Design Patterns."* Robert C. Martin, 2000. http://www.objectmentor.com

[2] *"Object Design: Roles, Responsibilities."* Rebecca Wirfs-Brock and Alan McKean and Collaborations, Addison-Wesley, 2003.

[3] *"Unified Modeling Language."* http://www.uml.org/

[4] *"ArgoUML."* http://argouml.tigris.org/

[5] *"Dia."* http://live.gnome.org/Dia