

Project: FragGeneScan

Inleiding

Voor het project Computationale Biologie koos ik ervoor om versie 1.31 van FragGeneScan opnieuw te implementeren in Rust, met oog op het verbeteren van de modulariteit en verstaanbaarheid van de code en het voorzien van correct werkende multithreading voor de uitvoering van het Viterbi-algoritme. Om een commandolijn-interface te voorzien maakte ik gebruik van de bibliotheek clap¹, de verwerking van het FASTA-invoerformaat gebeurt met behulp van Rust-Bio² en om beter het aanwezige data parallelisme te kunnen benutten voegde ik Rayon³ toe.

Geïmplementeerde verbeteringen

Mijn aanpassingen en verbeteringen aan de werking van de toepassing ten opzichte van de bestaande implementatie van FragGeneScan zijn voornamelijk de volgende:

- Waar de toepassing voorheen gebruik maakte van temp-files tijdens de uitvoering werden deze in mijn implementatie vervangen door een aantal *structures* waarmee de resultaten van het Viterbi-algoritme worden teruggegeven, dit heeft als voordeel dat de methoden voor het uitvoerformaat konden worden afgesplitst en dat de code eventueel ook als library zou kunnen worden aangeboden.
- Met behulp van Rayon werd er werkende parallelisatie voorzien bij het verwerken van meerdere sequenties, dit in tegenstelling tot de bestaande implementatie waar race-condities voor problemen zorgden.
- Onveilige geheugentoeegangen (o.a. lezen buiten een gealloceerde array) werden verholpen.
- De niet-gedocumenteerde ``format``-parameter werd uit de toepassing weggehaald.
- Het inlezen van trainingsfiles gebeurt nu in een aparte module van de toepassing en werd duidelijker gestructureerd door opsplitsing in meerdere functies.

Daarnaast werden ook bepaalde constructies uit de C-code omgezet naar hun equivalent in Rust, of werd code verplaatst naar aparte modules om de toepassing beter te structureren.

Structuur van het programma

De toepassing bestaat uit een aantal verschillende modules die hieronder verduidelijkt worden:

src/main.rs	Implementeert de commandolijn interface en roept de Viterbi-methode aan
src/dna_helpers.rs	Implementeert de methoden voor conversie tussen o.a. DNA sequenties en Amino-zuren.

¹ <https://github.com/clap-rs/clap>

² <http://rust-bio.github.io/>

³ <https://github.com/rayon-rs/rayon>

src/helpers.rs	Implementeert een aantal utility methoden voor I/O gebruik en foutafhandeling
src/output.rs	Implementeert de methode verantwoordelijk voor het wegschrijven van de resultaat <i>structures</i> uit de Viterbi methode naar de commandolijn.
src/train.rs	Implementeert de <i>structures</i> en methoden gebruikt voor het inlezen van de training files.
src/viterbi.rs	Implementeert het Viterbi-algoritme en de <i>structures</i> gebruikt voor de resultaten.

Benchmarks en evaluatie met UMGAP

Om de uitvoeringstijden van mijn implementatie te kunnen evalueren koos ik ervoor de vergelijking te maken ten opzichte van de originele implementatie en niet FragGeneScan+(+) gezien deze enkele fouten bevatten die ten koste blijken te gaan van sensitiviteit en precisie. De impact van mijn verbeteringen valt vooral op in de uitvoeringstijden van invoer die geen volledige genoomsequentie voorstelt, immers daar kunnen meerdere instanties van het Viterbi-algoritme parallel worden uitgevoerd. De impact is minder significant in het geval van volledige genoomsequenties waar het potentieel om de code te paralleliseren een pak beperkter is.

Wanneer we met behulp van UMGAP de precisie en sensitiviteit van de FragGeneScan 1.31, de laatste versie van FragGeneScan++ (22 augustus 2019) en mijn implementatie vergelijken over 10 uitvoeringen merken we op dat deze waarden van mijn implementatie gemiddeld zeer dicht bij deze van FragGeneScan 1.31 liggen, en beide versies scoren hoger dan FragGeneScan++. (zie figuur 2)

Bijlagen

Figuur 1: Vergelijking van de uitvoeringstijden in seconden, gemiddelde over 10 uitvoeringen

Invoerbestand	FragGeneScan1.31	Rust-implementatie
example/NC_000913*	3.99s	3.28s
example/NC_000913-454**	10.38s	2.88s

*: met het profiel train/complete, 1 thread

**: met het profiel train/454_10, 4 threads

Figuur 2: Vergelijking van sensitiviteit en precisie met UMGAP, gemiddelde over 10 uitvoeringen.

	FragGeneScan1.31	FragGeneScan++	Rust-implementatie
Sensitiviteit	9284	9260.6	9291
Precisie	4605	4460.8	4596.5