C库协同开发——实验报告

一、项目要求

1、用C语言为某个基因组的genbank文件写两个动态共享库libgenbank.so、libfasta.so。

genbank.h:解读genbank文件,提取CDS序列。

fasta.h: 将提取的序列保存为FASTA格式的文件。

- 2、为库和应用程序编写Makefile,或用autotools完成这一个过程。
- 3、在github中建立账号,并将库程序和对应的提取工具程序通过git上传到建立的repository中

二、genbank 和 FASTA文件格式分析

1、genbank格式

对genbank文件格式的理解参考了该网站: https://www.ncbi.nlm.nih.gov/Sitemap/samplerecord.ht
ml

- (1) CDS:
 - 1. 一个genbank文件中可能有多个CDS1
 - 2. 编码起点到终点有3中表示方式:

完整的: 2345...5823从5'开始: <1...240结束在3': 234...6928>

- 3. complement表示反向互补链是编码部分
- 4. join(b1...e1,b2...e2)表示将多个exon连接起来
- (2) 基因序列:

位于origin到//之间

2、FASTA格式

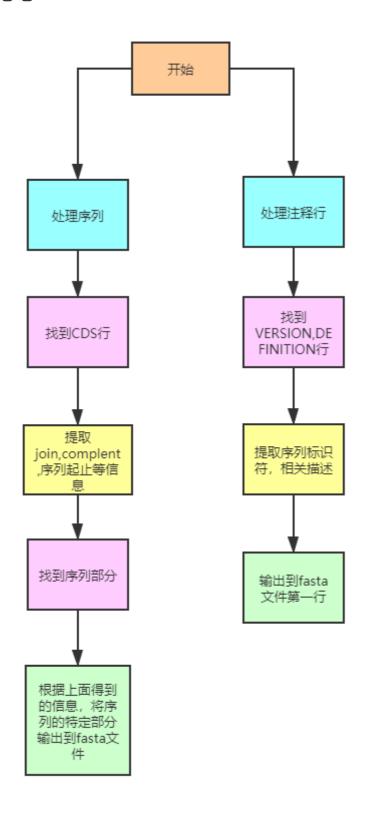
对fasta文件格式的理解参考了该网站:https://phaster.ca/input

FASTA格式中的一条完整序列,包括开头的单行描述符和多行序列数据。

- (1) 描述行行首前置半角大于号(">")以和数据行区分。">"后进阶的内容为该序列的标识符,剩余部分为序列的描述。标识符和描述均非必须。
- (2) 标识符可从genbank文件VERSION行获得,描述信息可从DEFINITION行获得。

三、程序的实现

1、程序设计思想



2、核心代码的解析

(1)提取CDS序列

```
#define MAXCOL 5000
#define SECTION 100
typedef struct {
   char **str; //the PChar of string array
   size_t num; //the number of string
}IString;
char buf[MAXCOL];
char line[MAXCOL];
IString subline;
IString data;
IString location;
char *data_join[SECTION] = {NULL}; //存储join的起始终止位置信息
char *data_complement[SECTION] = {NULL}; //存储complement的起始和终止位置信息
int num_join = 0;
                                     //需要正向连接的区间个数
int num_complement = 0;
                                     //互补链的区间个数
char defination[MAXCOL];
                                     //存储genbank的defination的内容
char note_fasta[MAXCOL];
                                     //存储fasta文件注释行输入的内容
char complement_output[MAXCOL];
int num_array_complement = 0;
int *section_start_c;
int *section_end_c;
int *section_start_j;
int *section_end_j;
int split(char *src, char *delim, IString* istr); //分割函数
//void Reverse(char s[]);
                                                  //倒置函数
void tackle_join(FILE *fp,FILE *target);
                                                   //处理join类型的连接
void tackle_complement(FILE *fp,FILE *target); //处理complement类型的连接
void get_sequence(int begin,int end,FILE *fp,int* i,FILE *target);
间内的母链序列
void get_sequence_p(int begin,int end,FILE *fp,int *i,FILE *target);
                                                                   //获取区
间内的互补链序列
void reverse_basic(char basic);
                                                           //互补链,转置字符
void get_CDS(char name[],FILE *target);
                                                   //处理genbank的CDS内容
void get_note(FILE *fp,FILE *target);
                                                    //处理genbank需要输入到
fasta文件的注释行内容
void output(FILE *fp,FILE *target);
void get_note(FILE *fp,FILE *target)
   int i = 0;
   note_fasta[i++] = '>';
   int num_def = 0;
   while(fgets(line,MAXCOL,fp))
       split(line," ",&subline);
       if (strcmp(subline.str[0],"DEFINITION") == 0){ //把defination的
数据拷贝下来
           for (int z = 1; z < subline.num; ++z){
              defination[num_def++] = ' ';
               strcpy(defination + num_def,subline.str[z]);
```

```
num_def += strlen(subline.str[z]);
           }
           free(subline.str);
       }
       else if (strcmp(subline.str[0],"VERSION") == 0){ //处理version
           for (int j = 1; j < subline.num; ++j){}
               if (subline.str[j][0] == 'G'){
                                                            //处理GI
                   note_fasta[i++] = 'g';
                   note_fasta[i++] = 'i';
                   note_fasta[i++] = '|';
                   strcpy(note_fasta + i,subline.str[j] + 3);
                   i += strlen(subline.str[j] + 3);
                   if (subline.str[j][strlen(subline.str[j]) - 1] == '\n')
note_fasta[i - 1] = '|'; //防止最后一个字符为\n破坏格式
                   else note_fasta[i++] = '|';
               }
               else {
                                                           //其他的引用情况
                   note_fasta[i++] = 'r';
                   note_fasta[i++] = 'e';
                   note_fasta[i++] = 'f';
                   note_fasta[i++] = '|';
                   strcpy(note_fasta + i,subline.str[j]);
                   i += strlen(subline.str[j]);
                   if (subline.str[j][strlen(subline.str[j]) - 1] == '\n')
note_fasta[i - 1] = '|';
                   else note_fasta[i++] = '|';
               }
           }
       else if (strcmp(subline.str[0],"DBLINK") == 0)
           break;
   strcpy(note_fasta + i,defination);
   writeFasta_note(note_fasta,target);
}
void get_CDS(char name[],FILE *target) //进行CDS预处理
{
   FILE *fp = fopen(name, "r");
   get_note(fp,target);
   while(fgets(line,MAXCOL,fp))
                                           //读取文件直至CDS那一行
       split(line," ",&subline);
       if (strcmp(subline.str[0],"CDS") == 0){
           split(subline.str[1],",<>()",&data); //划分出编码的方式以及编码的起始
终止位置,存在data
                                                  //由于\n的存在,因此,data.num
应该减一
           if (data.str[0][0] >= '0' && data.str[0][0] <= '9'){</pre>
               data_join[num_join++] = data.str[0];
           }
           else
           {
               for (int i = 0; i < data.num - 1;)
               {
                   if (data.str[i][0] == 'j'){
                                                              //处理CDS的join
                       i++;
```

```
while (i < data.num - 1 && data.str[i][0] >= '0' &&
data.str[i][0] <= '9')</pre>
                        {
                           data_join[num_join++] = data.str[i++];
                       }
                   }
                   complement
                       i++;
                       if (data.str[i][0] == 'j') i++;
                       while (i < data.num - 1 && data.str[i][0] >= '0' &&
data.str[i][0] <= '9')</pre>
                        {
                           data_complement[num_complement++] = data.str[i++];
                       }
                   }
               }
           }
        else if(strstr(subline.str[0],"ORIGIN")){
           free(subline.str);
           break;
        }
   }
   if (num_join != 0)
        tackle_join(fp,target);
    if (num_complement != 0)
        tackle_complement(fp,target);
    output(fp, target);
    char end[] = "//";
   writeFasta_note(end, target);
    fclose(fp);
}
void output(FILE *fp,FILE *target)
    char sequence[] = "1";
                                                      //定位到序列行
   while(fgets(line,MAXCOL,fp))
        split(line," ",&subline);
        if (strcmp(subline.str[0],sequence) == 0)
            break;
        else free(subline.str);
   int line_num_ = 0;
                                                      //序列行号
   int i = 0, j = 0;
    while (i < num_join && j < num_complement){</pre>
        if (section_start_j[i] < section_start_c[j]){</pre>
           get_sequence(section_start_j[i], section_end_j[i], fp, &line_num_,
target);
           i++;
        }
        else{
            get_sequence_p(section_start_c[j], section_end_c[j], fp, &line_num_,
target);
```

```
j++;
        }
   }
    if (i < num_join) {</pre>
        for(; i < num_join; ++i) get_sequence(section_start_j[i],</pre>
section_end_j[i], fp, &line_num_, target);
   if (j < num_complement){</pre>
        for (; j < num_complement; ++j)</pre>
            get_sequence_p(section_start_c[j], section_end_c[j], fp, &line_num_,
target);
   }
   writeFasta_seq('\n', target);
}
void tackle_complement(FILE *fp,FILE *target) //处理complement
    section_start_c = (int *)malloc(sizeof(int) * num_complement);
    section_end_c = (int *)malloc(sizeof(int) * num_complement);
    int j = 0;
    for (int i = 0; i < num_complement; i++)</pre>
                                              //把起始终止的片段存储在数组中
        split(data_complement[i],".",&location);
        section_start_c[j] = atoi(location.str[0]);
        section_end_c[j++] = atoi(location.str[1]);
        free(location.str);
   }
}
void tackle_join(FILE *fp,FILE *target)
                                                 //处理join
    section_start_j = (int *)malloc(sizeof(int) * num_join);
    section_end_j = (int *)malloc(sizeof(int) * num_join);
    int j = 0;
    for (int i = 0; i < num_join; i++) //把起始终止的片段存储在数组中
    {
        split(data_join[i],".",&location);
        section_start_j[j] = atoi(location.str[0]);
        section_end_j[j++] = atoi(location.str[1]);
        free(location.str);
   }
}
void get_sequence(int begin,int end,FILE *fp,int* i,FILE *target) //处理join序
列读取
{
    int line_begin = (begin - 1) / 60;
    int line_end = (end - 1) / 60;
    int col_begin = (begin - 1) % 60;
    int col_end = (end - 1) \% 60;
   int z;
   do //序列读取
        if ((*i) == line_begin){
            split(line," ",&subline); //读到最后
```

```
int subcol = col_begin / 10 + 1; //获取字串所在的subline的位置
            int col_start = col_begin % 10; //获取列数
            for (;col_start < 10;++col_start)</pre>
            {
                writeFasta_seq(subline.str[subcol][col_start],target);
            }
            subcol++;
            for (;subcol < 7;++subcol)</pre>
            {
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    writeFasta_seq(subline.str[subcol][z],target);
            free(subline.str);
        }
        else if ((*i) > line_begin && (*i) < line_end){ //输出整行
            int subcol = 1;
            split(line," ",&subline); //读到最后
            for (;subcol < 7;++subcol)</pre>
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    writeFasta_seq(subline.str[subcol][z],target);
            free(subline.str);
        }
        else if ((*i) == line_end){ //输出到col_end
            split(line," ",&subline);
            int subcol = col_end / 10 + 1;
            int col_over = col_end % 10;
            int col = 1;
            for (;col < subcol;++col)</pre>
            {
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    writeFasta_seq(subline.str[col][z],target);
            int k = 0;
            for (;k \le col_over;++k)
                writeFasta_seq(subline.str[subcol][k],target);
            free(subline.str);
            break;
        }
        (*i)++;
    }while(fgets(line,MAXCOL,fp));
}
void get_sequence_p(int begin,int end,FILE *fp,int *i,FILE *target) //处理
complement序列读取
{
    int line_begin = (begin - 1) / 60;
    int line_end = (end - 1) / 60;
    int col_begin = (begin - 1) % 60;
    int col_end = (end - 1) \% 60;
    int z; //计数因子
```

```
do //序列读取
        if ((*i) == line_begin){
            num_array_complement = 0;
            split(line," ",&subline); //读到最后
            int subcol = col_begin / 10 + 1; //获取字串所在的subline的位置
            int col_start = col_begin % 10; //获取列数
            for (;col_start < 10;++col_start)</pre>
            {
                reverse_basic(subline.str[subcol][col_start]);
            }
            subcol++;
            for (;subcol < 7;++subcol)</pre>
            {
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    reverse_basic(subline.str[subcol][z]);
            //complement_sequence[realnum++] = '\n'; //使整个数组中只有序列部分
            free(subline.str);
        }
        else if ((*i) > line_begin && (*i) < line_end){ //输出整行
            int subcol = 1;
            split(line," ",&subline); //读到最后
            for (;subcol < 7;++subcol)</pre>
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    reverse_basic(subline.str[subcol][z]);
            }
            free(subline.str);
        }
        else if ((*i) == line_end){ //输出到col_end
            split(line," ",&subline);
            int subcol = col_end / 10 + 1;
            int col_over = col_end % 10;
            int col = 1;
            for (;col < subcol;++col)</pre>
                for (z = 0; z < 10; ++z)
                    reverse_basic(subline.str[col][z]);
            }
            int k = 0;
            for (;k \le col_over;++k)
                reverse_basic(subline.str[subcol][k]);
            free(subline.str);
            for (int i = num\_array\_complement - 1; i >= 0; --i)
                writeFasta_seq(complement_output[i], target);
            break;
        }
        (*i)++;
    }while(fgets(line,MAXCOL,fp));
void reverse_basic(char basic)
```

```
if (basic == 'a') complement_output[num_array_complement++] = 't';
    else if (basic == 't') complement_output[num_array_complement++] = 'a';
    else if (basic == 'c') complement_output[num_array_complement++] = 'g';
    else if (basic == 'g') complement_output[num_array_complement++] = 'c';
}
int split(char *src, char *delim, IString* istr) //split src, 将分割后的子串存
入结构体的str中
{
   int i;
    char *str = NULL, *p = NULL;
    (*istr).num = 1;
    str = (char*)calloc(strlen(src)+1, sizeof(char));
    if (str == NULL) return 0;
    (*istr).str = (char**)calloc(1,sizeof(char *));
    if ((*istr).str == NULL) return 0;
    strcpy(str,src);
    p = strtok(str, delim);
    (*istr).str[0] = (char*)calloc(strlen(p)+1, sizeof(char));
    if ((*istr).str[0] == NULL) return 0;
    strcpy((*istr).str[0],p);
    for(i=1; p = strtok(NULL, delim); i++)
    {
        (*istr).num++;
        (*istr).str = (char**)realloc((*istr).str,(i+1)*sizeof(char *));
        if ((*istr).str == NULL) return 0;
        (*istr).str[i] = (char*)calloc(strlen(p)+1, sizeof(char));
        if ((*istr).str[0] == NULL) return 0;
        strcpy((*istr).str[i],p);
    free(str);
    str = p = NULL;
   return 1;
}
```

(2)保存为fasta格式文件

```
putc(c,fp);
    currentcol = 1;//长度重新设为1
}

void writeFasta_note(char note[],FILE *fp) //自带换行符,输入注释信息
{
    fputs(note,fp);
}
```

3, debug

- 1. 在debug的过程中,出现最多的问题就是输不出结果
- 首先利用printf确保每个模块是否能够执行。
- 在确定模块全部正确执行后,查看两个输出函数 get_sequence 和 get_sequence_p 是否有问题。
- 在确保上述两个函数没有问题后,确定每一段区间的起始和终止是否正确。在本程序中,问题就是首先从这里开始的,即区间的起始和终止位点个数不正确或者根本没有。这里采用的方式就是printf输出每个区间的起始和终止位置,从而发现了问题。
- 发现区间有问题,首先回到处理区间的函数,tackle_complement与tackle_join,发现这两个函数仅仅是对输入的字符串进行拆分与整形处理,不会有大问题。
- 所以,问题只可能出现在处理genbank的CDS序列模块。发现,原来的程序,为了处理CDS位于不同行的情况(当然序列还是要在一行的,本程序在这一点做了简化),采用了while循环,但是break的位置设置的并不对,因而造成了那一行之后的CDS序列无法读取。
- 2. debug过程中还出现了注释行输出不到一行、输出函数output有问题等情况,但是这些情况都是小问题,按照上述思路很轻松就可以解决。
- 3. 我们的测试文件采用的是eg1.txt, eg2.txt和linux.txt,发现比较复杂的eg1.txt和eg2.txt跑出了正确的结果,这说明我们的代码本身是没有问题的。但是比较简单的linux.txt却跑出了没有序列的空文件。为了查找原因,我们把跑出的fasta文件从linux拷贝到windows后,发现格式有差别。

```
>ref|NC_000086.7M | Mus musculus strain C57BL/6J chromosome X, GRCm38.p6 C57BL/6J.
atgctgctgctggcagacatggacgtggtgaatcagctggtggctggggtcagttccgggtggtcaagg\\
 agccccttggcttcgtgaaggtgctgcagtgggtctttgccatcttcgcctttgctacgtgcggcagcta
caccggagagcttcggctgagcgtggagtgtgccaacaagacggagagtgccctcaacatcgaagtcgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtgaagtga
tttgagtacccattcaggctgcaccaagtgtactttgatgcaccctcctgcgttaaagggggcactacca
agatcttcctagttggtgactactcctcctcggctgaattctttgtcaccgtggctgttttgccttcct\\
ctactccatgggggccctggccacctacatcttcctgcagaacaagtaccgagagaacaacaaagggcca
atgatggacttcctggccacagcagtgttcgctttcatgtggctagttagctcatccgcctgggccaaag
aggaaacacatgcaaggaactgagggaccctgtgacttcaaggactcaacacctcggtggtgtttggcttc\\
\verb|ctgaacctggtgctctgggttggcaacctatggttcgtgttcaaggagacaggctgggccgccccattca||
tgcgcgcacctccaggcgccccagaaaagcaaccagctcctggcgatgcctacggcgatgcgggctatgg
qcaqqqccccqqaqqctatqqqccccaqqactcctacqqqcctcaqqqtqqttatcaacccqattacqqq
cagc cag ccg gcg gtg gcg gtg gctacgg gcctcagg gcgactatgg gcag caaggctacgg ccaacgg gccaacgg 
 agggtgcgccacctccttctccaatcagatgtaa
sequence.fasta (END)
```

```
ref NC_000086.7
   Mus musculus strain C57BL/6J chromosome X, GRCm38.p6 C57BL/6J.
atgctgctgctggcagacatggacgtggtgaatcagctggtggctgggggtcagttccgggtggtcaagg
caccgg agag cttcgg ctg agcgtg gag tgtccaacaagacgg agag tgccctcaacatcg aagtcg aacatcg agag tgccctcaacatcg aagtcg aacatcg agag tgccctcaacatcg agag tgcccaacatcg agag tgcccaacatcg agag tgccctcaacatcg agag tgcccaacatcg agag tgcccaacatc
tttgagtacccattcaggctgcaccaagtgtactttgatgcaccctcctgcgttaaagggggcactacca
agatcttcct agttggtgactactcctcctcggctgaattctttgtcaccgtggctgtttgccttcct\\
\verb|ctactccatgggggccctggccacctacatcttcctgcagaacaagtaccgagagaacaacaaagggcca||
\verb|atgatggacttcctggccacagcagtgttcgctttcatgtggctagttagctcatccgcctgggccaaag|
gcctgtccgatgtgaagatggccactgacccagagaacattatcaaggagatgcctatgtgccgccagac
aggaaacacatgcaaggaactgagggaccctgtgacttcaggactcaacacctcggtggtgtttggcttc
\verb|ctgaacctggtgctctgggttggcaacctatggttcgtgttcaaggagacaggctgggccgccccattca||
tgcgcgcacctccaggcgccccagaaaagcaaccagctcctggcgatgcctacggcgatgcggctatgg
gcagggccccggaggctatgggccccaggactcctacgggcctcagggtggttatcaacccgattacggg
\verb|cagccagccagcggtggcggtggctacgggcctcagggcgactatgggcagcaaggctacggccaac||
agggtgcgcccacctccttctccaatcagatgtaa
```

因此推测linux.txt从windows拷贝到linux的过程中格式发生了错乱,从而导致了其格式已经不符合genbank的要求了,所以输出了没有序列的文件。

查找资料后,发现windows和linux换行符不一样。windows下是\n,\r,在linux下是^M\$。在写程序时查找序列的部分用的是查找origin跟换行符,这样在linux下是不适用的。

```
≣ Linux.txt X
/organism= Absidia giauca
                           /mol_type="genomic DNA'
                           /strain="CBS 101.48"
                           /sub_strain="RVII-324 met-"
                           /culture_collection="CBS:101.48"
                           /db xref="taxon:4829"
                           /mating_type="minus"
           gene
                           complement(<9..1783)
                           /gene="ABSGL_05122.1 scaffold 6499"
           CDS
                           join(201..310,321..450,complement(join(8214..8503,8701..8900)))
                           /gene="ABSGL_05122.1 scaffold 6499
                           /codon start=1
                           /product="hypothetical protein, partial"
                           /protein_id="SAL99496.1"
                           /translation="MEKQPNNNNMEVDVENSYQSDVARAIHSLDVLKKRAVDAQGKAD
                           EALAADAPEEEYEALMDVYNKKWELYQRTRSNFAARFPEEGVFRTGKASGGPNQGSNK
                           NPVAAPALKVSDLPFLASARERASGNRALVTQNVREFATAFEALMELHQLNINDVYQR
                           YLPICLGKYYKTFIYSKRTLTGETNIETWPMVKGWLVEFTNTPRQKVKNTTAWMELTP
                           GSDETGEDFFHRVREFKEAHELANISADALLFFAVFTNCRFGWRNKISEAIRDTHOPF
                           VENFFEEMCAFASDLELNAGKPDAEDRHDNHQRSTTSSQRTNRKRSAADNNHYGNRTW
                           {\tt TNNNASTPRRMKGPTGPYPGGGRYCDNGCGEKFMPPHKGVCPAIINRETNDRRSNEDR}
                           RDSKRHQSEPDRQHQRRQDRPVSRAASEYIDQVRADDVERLQSTFRGTTLDDDEDDKL\\
                           PCKLKGQKSEGNTPILLEHEINVPLYIENKRTLALVDSGANFSSINKNFCTEHNVPIL
                           PHKKESNILLANAGISIKSYGYTPPITIKYNGSYYTCQLEVMDLALGRTMSVVFEPSI
                           DAVYLQTPLKRFSIFSNAAVKLSCQ"
      CONTIG
                  join(FKIZ01004832.1:1..3226)
```

之后在windows下运行该测试文件linux.txt发现结果是正确的,印证了上述猜想。 为了消除这个bug,在代码中将定位ORIGIN的部分进行了更改,改用了strstr。

四、Makefile

Makefile文件内容:

五、运行测试

编译过程截图:

```
• 0 0 1 liuxinyi — root@85da6d850f33:/home/bio/bi296/lab6/lab6 — docker - rundocker.sh — 91x...
[[root@85da6d850f33 lab6]# make
cc -c test.c
test.c: In function 'main':
test.c:16:5: warning: implicit declaration of function 'get_CDS' [-Wimplicit-function-decla
ration]
     get_CDS(argv[1],target);
cc -o GENBANK_FASTA test.o -L. -I. -lfasta -lgenbank
[[root@85da6d850f33 lab6]# export LD_LIBRARY_PATH=$(pwd)
[[root@85da6d850f33 lab6]# ./GENBANK_FASTA eg1.txt
sh: PAUSE: command not found
[60[root@85da6d850f33 lab6]# cp sequence.fasta sequence_1.fasta
[[root@85da6d850f33 lab6]# ./GENBANK_FASTA eg2.txt
sh: PAUSE: command not found
[3466[root@85da6d850f33 lab6]# cp sequence.fasta sequence_2.fasta
[root@85da6d850f33 lab6]# |
```

测试文件及运行结果文件见附录:

测试文件: eg1.txt , eg2.txt , Linux.txt

运行结果: eg1.fasta, eg2.fasta, Linux.fasta

六、结果讨论

1、支持的情况

(1)程序支持线性linear的序列,暂不支持环形circular序列。

(2)在序列的处理中,通过查找ORIGIN定位序列时,支持ORIGIN直接加回车,ORIGIN前后有任意个空格再加回车。

(3)我们的程序支持大部分常规写法。

• 支持文件中有多个CDS的情况

但对于CDS的序列信息位于多行的情况,需要手动调整至一行再进行处理,如:

```
CDS join(123..234,245..267,345..399,404..487, 555..578,613..699,876,..987,1000..2876)
```

• 支持最简单的无嵌套情况,如:

```
CDS 2341..7623
```

• 支持仅有complement或仅有join的情况,如:

```
CDS complement(123..765)
```

```
CDS join(234..544,786..998)
```

• 支持complement和join的嵌套:

```
CDS complement(join(233..425,876,999))
```

大多genbank的文件都遵守后面的序列数比前面大的规则

```
CDS join(220..350,6200..6500,complement(2300..3600))
```

```
CDS join(200..300,450..600,complement(join(750..800,890..1100)))
```

如果前面的序列数字比后面的大,会造成输出顺序错乱(这种格式的文件很少见)

```
CDS join(6200..6500, 220..350, complement(2300..3600))
```

2、备注

(1)我们的算法中, join(complement())主要用于先连接顺序, 再连接逆序。 join(200..300,complement(500..800))

(2)join只起连接作用。complement之后都是互补链,如果还要从母链开始,需要再写一个CDS

(3)join(200..300,450..600,complement(join(750..800,890..1100)))join(complement(),complement()) 这种写法主要用于连接非顺序的序列。但是,由于我们只考虑线性的序列,因此对于这种写法,前面的 complement起始位置需要比后面的complement小。其实也就等价于complement(join())。

(4)complement要逆序输出,所以在写程序时将complement中的放到一个数组中。我们的程序设置的数组大小是5000,所以如果genbank中出现了1..6000这样的情况就不行。如果想比较灵活的处理的话,可以用链表。

(5)join和complement分割的字段, 100..200,300..400,字段个数不能超过100个。