

統合分子生物学環境

1. 背景

生命科学関連のソフトウェアは数多くでているが、それらの多くは UNIX もしくは Linux で動作する CUI ベースのものであることにより、Windows や Macintosh の GUI に慣れている研究者には扱いづらいものとなっている。また、ユーザー層に基本的な UNIX 知識がないため、ソフトウェアの導入ができないという問題がある。これらに加え、プログラム毎に使用方法を覚えるのに加え、プログラムを使用するためのスクリプトを別途用意しなければならないという問題もある。このような現状では、生命科学関連の研究に有用なソフトウェアが宝の持ち腐れ状態になってしまっている。

このような現状を打破するために、ユーザーに UNIX を意識させず、「グラフィカルなインターフェース」、「統一された操作感覚」、そして何よりも「簡単な操作」で生命科学関連のソフトウェアを使うことができるソフトウェアの開発を目的とする。

2. 目的

従来から公開されている生命科学関連のソフトウェアを、簡単かつ統一された感覚で扱える GUI ソフトウェアを開発する。対象ソフトは、以下の通り。

Procheck

<http://www.biochem.ucl.ac.uk/~roman/procheck/procheck.html>

(タンパク質の立体構造予測)

clustalw <http://www.ebi.ac.uk/clustalw/>

MODELLER <http://www.salilab.org/modeller/modeller.html>

(タンパク質の立体構造評価)

open babel <http://openbabel.sourceforge.net/>

3dna <http://rutchem.rutgers.edu/~xiangjun/3DNA/>

今回作成する統合環境では、計算に必要なスクリプトを自動生成し、様々なファイルの形式変換及び適切な Viewer への引き渡しを行う。

MacOS X 対応とし、インストールの簡易化を行う。加えて、マニュアルの充実を図る。

3. 開発内容

次に掲げる機能を有するソフトウェアの開発を行った。

4. 1 MacOS X 版の開発

- ・メインとなる GUI インターフェイスの開発および外部ソフトウェアとの連携を行うコンポーネントの開発.

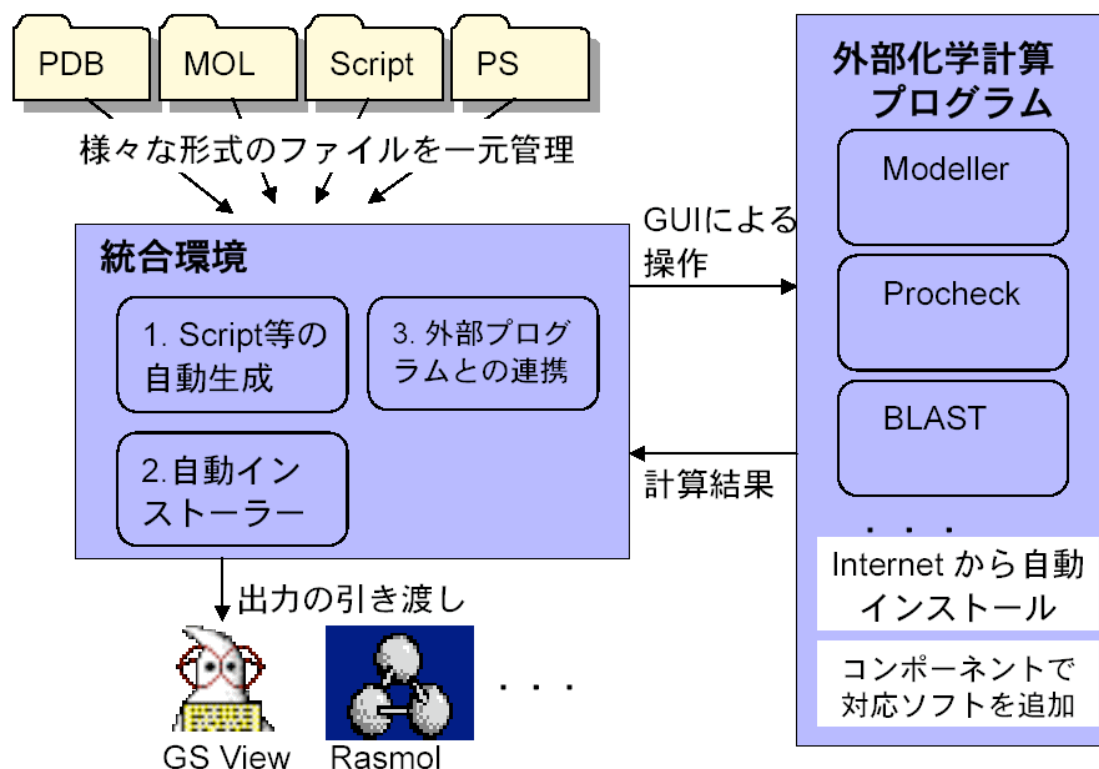


図 1 : 統合環境の概要

具体的内容は、Cocoa アプリでインターフェイス部分とシェルスクリプト実行用クラスなどを実装。シェルスクリプトで、計算の前準備、科学計算プログラムの起動、計算結果の後処理、結果表示用ソフトの呼び出しを実装した。

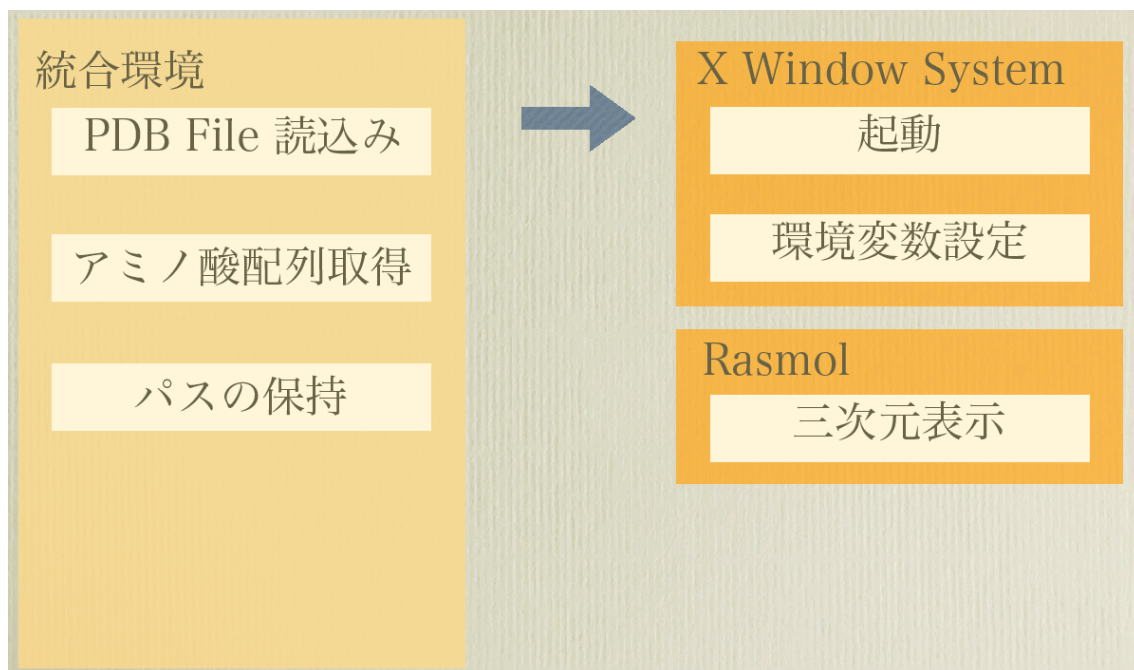


図 2：ファイル読み込み時の動作

・ BSD 系の Port と同等の機能を持つ Fink をインストールシステムに利用することで、インストールの簡易化を図った。CUI ベースである Fink に対し、finkinfo と GUI を用意し、必要なパッケージをクリック一つで全てインストール／アップデートできるようにした。

finkinfo はソフトウェアをインストールするためのスクリプトであり、今回は、生物学関係のソフトウェアをインストールするための finkinfo をいくつか作成し、インターネットからプログラムを入手し、インストールやアップデートまで自動で行えるようにした。

4. 従来の技術との相違点

CUI のものがほとんどであった生命科学関連のソフトウェアを GUI ベースとすることでユーザーに UNIX を意識させないソフトウェアとなった。具体的には、以下の通り。

- ・ CUI を GUI でラッピングさせることで、従来、CUI ベースで動いていた Procheck, clustalw, MODELLER, open babel, 3dna を GUI ベースで動作させることが可能となった。
- ・ ソフトウェアのインストールやアップデートを GUI ベースかつ自動的に行うことが可能となった。

5. 期待される効果

今まで CUI であるために、生命科学関連のソフトウェアの利用を敬遠し

ていた生命科学者に、利用を進める事ができる。これにより、生命科学における研究が促進されと考えられる。

6. 普及の見通し

より生命科学者に利用してもらうために現在、産業技術研究所の田村裕先生が製品化を検討中である。また、開発者自身でもフリーでの公開を検討中である。

7. 開発者

倉井 龍太郎

北海道大学 工学部電子工学科 3年

k_ryu@ps.sakura.ne.jp