2005年度上期未踏ソフトウェア創造事業

Ruby言語による生物化学情報基盤ライブラリの開発

開発者: 片山俊明 中尾光輝 後藤直也 田中伸也

開発の背景

生物情報学・化学情報学分野では、多種多様なデータベースやソフトウェアが使われているが、これらのリソースを統合的に柔軟に扱えるライブラリがあれば、生命の理解からゲノム創薬まで生物学・薬学・医学の幅広い分野で有用である。

http://bioruby.org/ http://chemruby.org/

シェル on Rails: GUI

BioRuby シェル: CUI

BioRuby ライブラリ ChemRuby ライブラリ 新規開発 ユニットテスト ドキュメント

Ruby:文字列処理,正規表現, I/O, Test::Unit, SOAP

主要な成果

ポストゲノム解析など、生物情報学のためにこれまで開発してきた BioRuby の機能強化を行い、チュートリアルなどのドキュメントを大幅に充実、新規にユニットテストを追加し安定したライブラリを提供できた。また、BioRuby で扱う遺伝子の情報に加え、化合物などの情報を扱う化学情報学のための ChemRuby を新規に開発した。

国産で、習得の容易な Ruby 言語を用いることで、 使いやすいライブラリを整備できたが、プログラ ミングをしないユーザのために CUI と GUI のイン ターフェイス(シェル)も開発した。

本プロジェクトの成果として、ウェットな実験研究者の日常のツールから、製薬などハイエンドな研究開発の現場まで、幅広く利用して頂けるオープンソースの基盤ソフトウェアをフリーで公開した。

E物/化子の多種多様なDBと プリを自由自在に使いこなす LIGAND **EMBL** DNA(ゲノム,遺伝子) タンパク質配列DB **GENES** COM Bio::Sequence **ENZYME** POUND UniProt Pub©hem Bio::GenBank Bio::EMBL etc 酵素,化合物DB KEGG DAS Bio::Flat(BDB) MDL Ensembl Bio::Fetch(HTTP) Bio::SQL(RDB) 各種フォーマット Bio::DAS Bio: : KEGG: : API Bio::Reference (REST CGI) SOAP/WSDL BioRuby ChemRuby Pub Med **PATHWAY** 文献情報 E-Utils (CGI) 化学計算ソフトウェア PDB ROTEIN DATA BANK Bio::BLAST, Bio::HMMER etc. タンパク質立体構造 ArrayExpress 遺伝子発現 解析ソフトウェア