

## 28Q-am175

仮想 PC を用いた化合物ライブラリーデータベースの構築

○小林 宏司<sup>1</sup>, 飯島 洋<sup>1</sup>, 深水 啓朗<sup>1</sup>, 森 啓<sup>1</sup>, 大島 久<sup>1</sup>, 伴野 和夫<sup>1</sup>(<sup>1</sup>日本大薬)

【目的】 本学の学術フロンティア推進事業「天然物フラクション・化合物ライブラリーの構築」における成果物ライブラリーのデータベースの作成にあたり必要となる専用サーバー機の構築を行なった。このサーバー機およびデータベースの特徴について報告する。

【方法】 サーバー機は、メインとサブの 2 機から構成され、基本 OS には Windows Server 2003 を採用した。さらに VMWare Server を用いて基本 OS 上に複数の仮想 PC を構築し、サーバーをサービスの用途別に分割して運用している。データベースについては SQL サーバーを採用し、情報の種類別に複数のテーブルを作成した。また、化合物データの構造式表示には分子グラフィックスソフト MOE を用いた。

【結果】 複数の仮想 PC を構築したことにより、サーバーが行なう各サービスを用途別に分散して運用することができるため、一部のサービスに不具合が生じても他のサービスに悪影響を及ぼすことが少ない。また、稼働中のサーバーを停止することなく新たなサービスを追加して開始することが可能である。今回構築中の化合物ライブラリーについてもハッキングによるデータの流出を防ぐため、データを蓄えるデータベース用サーバーと情報を公開し検索を行なう WEB サーバーを別々の仮想 PC 上に作成し、1 台のサーバー機に収納した。データベースについてはデータを複数のテーブルに別けて格納することにより、データテーブルのインデックス機能を用いての検索の効率化が図られた。

【考察】 仮想 PC では、システム全体を仮想ドライブとして保存、移動することが可能であるため、将来のハードウェアの機種変更による影響を受けない。よって、長期間にわたるサーバーの運用が可能となる。