

28P-am480

天然物フラクション・化合物ライブラリーの構築

○小林 宏司¹, 深水 啓朗¹, 諏訪 雅士¹, 飯島 洋¹, 伴野 和夫¹, 大島 久¹,
伊藤 芳久¹(¹日本大薬)

【目的】平成19年度に採択され本年度末に事業が完了する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—細胞傷害性と保護性に基づく難病の治療薬開発を目指して—」における成果物ライブラリーの概要について報告する。

【方法】ライブラリー専用サーバーの構成は、ライブラリーのデータを管理するDBサーバーとライブラリーの閲覧や検索を行なうWEBサーバーから成り、それぞれVMWare Serverによって構築された個別の仮想PC上で運用を行なっている。また、ライブラリーのデータは情報の種類別テーブルに格納した。

【結果】仮想化技術の導入によりサーバーPCを簡単に構築そして移動することが可能となり、サービス別の複数サーバーを構築することができた。その結果、安易なハッキングによるライブラリーからのデータ流出を防止できている。

ライブラリーはサンプルの基本情報、構造情報、保存情報、計算値情報、アッセイの概略ならびに個別のアッセイ情報を入力した6テーブルで形成され、サンプルIDで各テーブルは互いにリンクされている。現在、本学術フロンティア推進事業ではライブラリーを次のURLでインターネットに公開している。

<http://pnfr01web.pha.nihon-u.ac.jp/frindex/index.aspx>

【考察】本学術フロンティア推進事業は本年度で完了するが、ライブラリーについては今後も継続維持し、新たなデータを入力、蓄積ができるよう改良を進め、当初の事業目的のさらなる発展に寄与させる予定である。