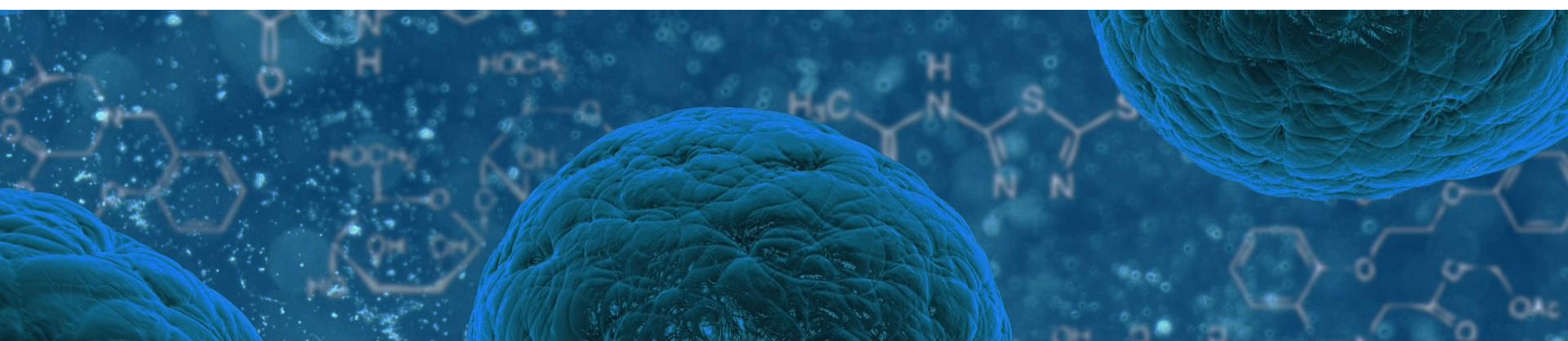




**FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE**
TU Braunschweig



Fachinformationsdienst Pharmazie

Von informationswissenschaftlicher Forschung zum stabilen innovativen
Recherchedienst

Stefan Wulle & Janus Wawrzinek

Bibliothek forschende Informatik

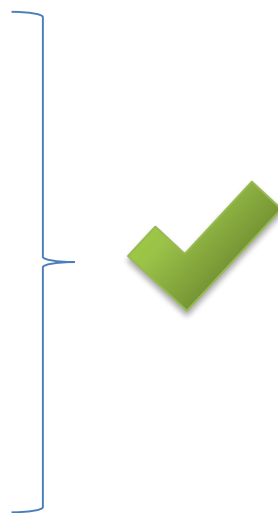
- Fachinformationsdienst Pharmazie seit 2015 durch die DFG gefördert
- Infrastruktureinrichtung für das Fach
 - Wissenschaftsunterstützung in enger Abstimmung mit Fachcommunity
 - Entwicklung forschungsnaher Dienste mit frühzeitiger Einbindung von Forschenden der Pharmazie in die Service-Entwicklung
 - Nachhaltiger Betrieb
- Enge Kooperation mit forschender Informatik mit dem Ziel, auf fachspezifische Anforderungen hin innovative Services zu entwickeln.



Mehrwehrt FID

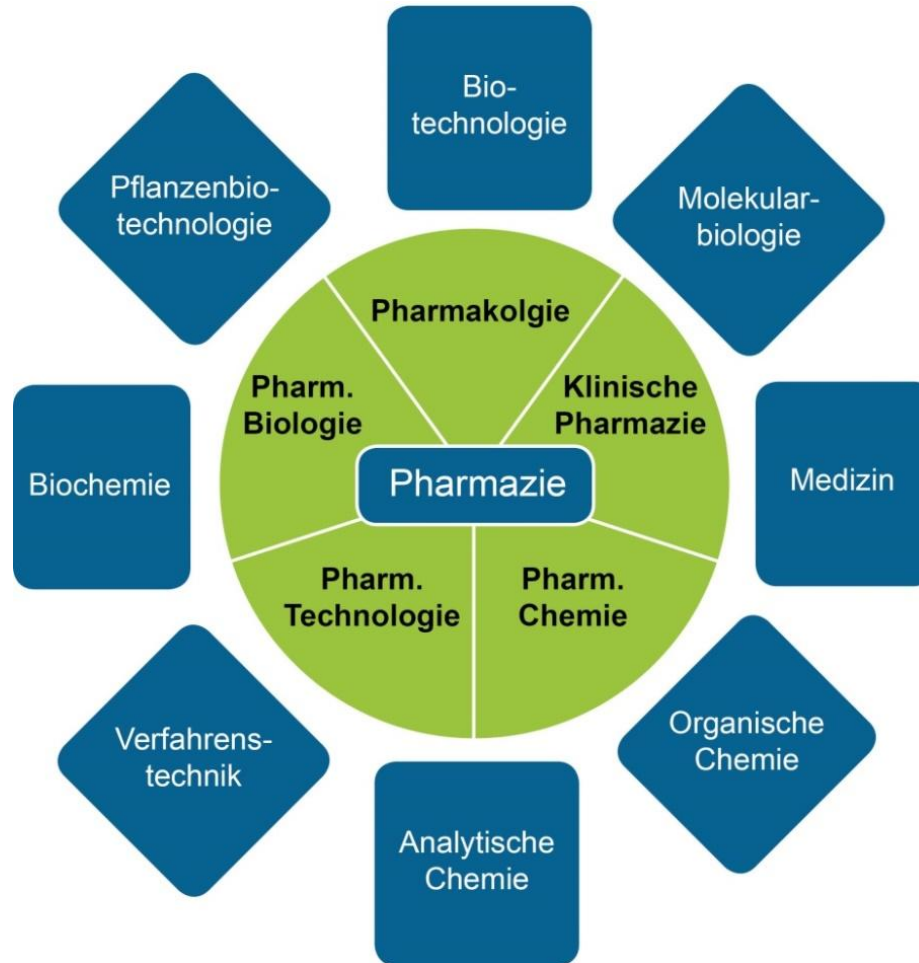
Mehrwerte, die für Forschende der Pharmazie im Übergang vom SSG- zum FID-Förderprogramm leicht zu identifizieren und umzusetzen waren:

- FID-Lizenzen, Erwerbung
- Open-Access Services
- Langzeitarchivierung
- Forschungsdatendienste
- Retrodigitalisierung



Herausforderung: Suchmaschine/Discovery

Interdisziplinarität des Faches Pharmazie



Herausforderung Suchmaschine/Discovery II

Ausgangslage: Bereits etablierte, auch kostenfrei zugänglich Angebote decken Teile des Faches ab (u.a. PubMed, Scopus, SciFinder, Google Scholar).

Welchen Mehrwert muss PubPharm als fachspezifische Suchplattform und zentraler Service in diesem Umfeld für die Fachcommunity bieten?

- Inhaltlich angrenzende Disziplinen abdecken, weit über z.B. Medline hinaus (KI0PlusZentral Index des GBV)
- Einbindung von Metadaten zu klinischen Studien, fachspez. Patenten, Preprints... (KI0PlusZentral Index des GBV, Kooperation mit TIB)
- Spezifische Suchfunktion: Chemische Strukturen (Open Source, PubChem)



Wie können (weitere) Alleinstellungsmerkmale generiert werden?



Entwicklung neuer Retrievalpfade/Informationszugänge

Institut für Informationssysteme der TU Braunschweig - IfIS

- Erforschung innovativer Formen des Retrieval unter Fokussierung auf die Wirkstoff-Recherche.
- Enge Zusammenarbeit im FID zwischen IfIS und Universitätsbibliothek gewährleistet, dass nicht an den Anforderungen des Faches vorbei geforscht und entwickelt wird.
- Agile Entwicklung des Serviceangebots, Evaluierung von Prototyen durch Fachcommunity.



Hand in Hand

Aufgaben der Bibliothek in der Kooperation sind u.a.:

- Vermittlung und Moderation zwischen Informatik und Forschenden der Pharmazie
- Transformation prototypischer Entwicklungen - nach positiver Evaluation - in robuste und nachhaltige Services.

Mehrwert für die Bibliothek über FID hinaus:

- U.a. Aufbau von Knowhow zur Weiterentwicklung und Qualitätsverbesserung von forschungsnahen Diensten.

Mehrwert für das Institut für Informationssysteme:

- Testbed für Methodenentwicklung, Durchführung von Nutzerstudien (Feedback), Überprüfung der Wirksamkeit.



Innovative Services

- Der **exponentielle** Anstieg an wissenschaftlichen Publikationen stellt Digitale Bibliotheken vor große Herausforderungen.
- **Keyword-basierte Suchen** führen zu tausenden von Resultaten.
- Es besteht ein dringender Bedarf für **innovative Zugriffspfade** zur Literatur über die Grenzen von Keyword-basierten Suchen hinaus.

Keyword-basierte Suchen

“Diabetes”

~50.000
Dok.

... allein für das Jahr 2019!

Innovative Services

Eine mögliche

Lösung...

- Automatische Extraktion von **pharmazeutischen Entitäten** und ihren Relationen aus bio-medizinischer Literatur.
- **Neural Embedding Modelle (z.B. Word2Vec*)** können nicht nur verwendet werden, um bestehende Assoziationen zu erlernen, sondern auch um Neue vorherzusagen.



(*) Mikolov, T., Chen, K., Corrado, G., & Dean, J. (2013). Efficient estimation of word representations in vector space. *arXiv preprint arXiv:1301.3781*.

Innovative Services

- Ein Neural Embedding Model “zieht” ein Wort aus einem Wort-Kontext und im nächsten Schritt ist es in der Lage das Wort vorherzusagen, welches die Lücke am wahrscheinlichsten füllt.
- Lernt auf Millionen von Publikationen.

The diagram shows the sentence "drags a word from a word context". The word "word" is highlighted in a blue box, and a blue arrow points from it to a white box containing the word "word".

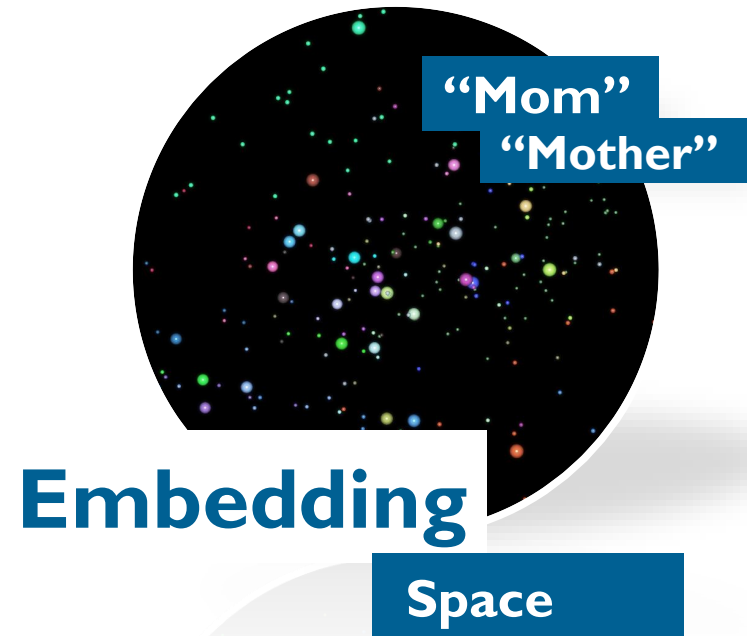
drags a **word** from a word context

Innovative Services

Vektor

Repräsentation

- Die Konsequenz dieses Lernens ist, dass Wörter mit einem ähnlichen Wort-Kontext nahe beieinander in einem hoch-dimensionalen Raum liegen.

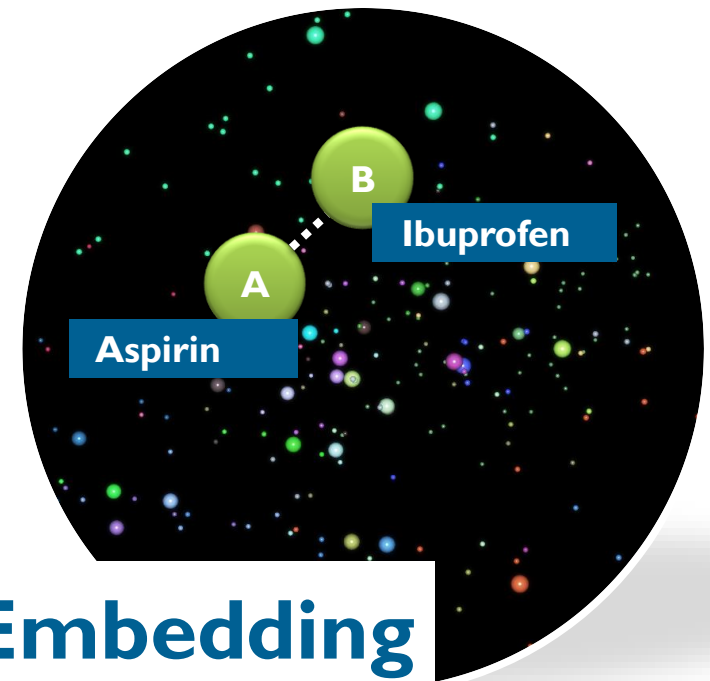


Innovative Services

Eine mögliche

Anwendung...

- Transfer dieser Kontextualisierungseigenschaft auf Wirkstoffe.
- Ein ähnlicher Kontext deutet auf eine intrinsische Ähnlichkeit von Wirkstoffen hin.
- Hypothese: ähnlicher Wort-Kontext deutet auf ähnliche Wirkstoffeigenschaften hin.



Embedding

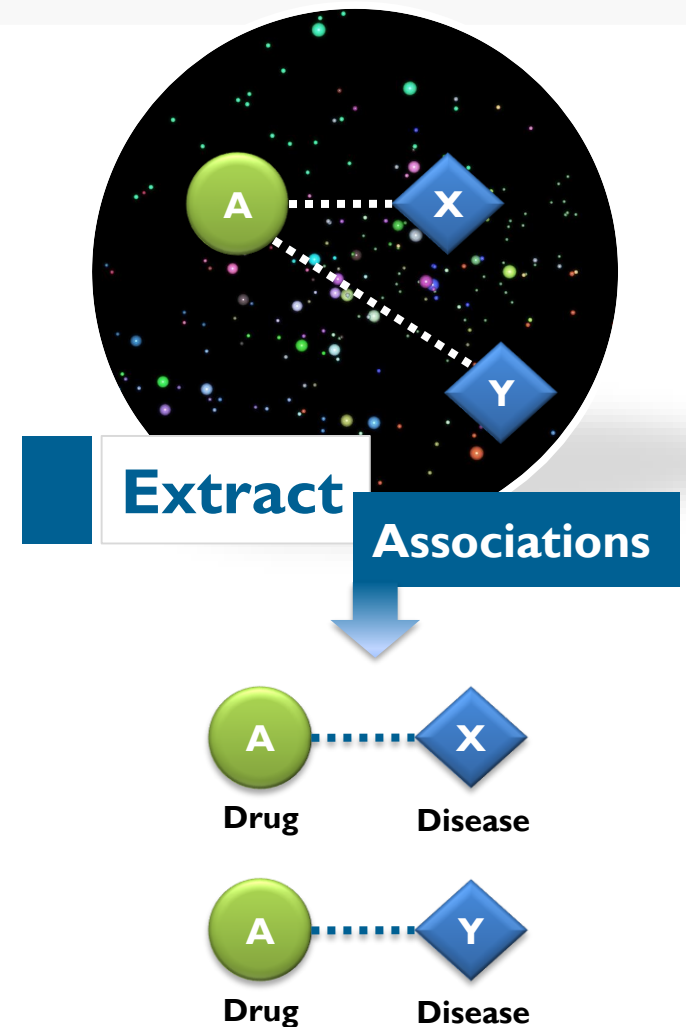
Space

Innovative Services

Eine mögliche

Anwendung...

- Vorhersage von Entitäts-Assoziationen.
- Für jeden Wirkstoff können wir die k -nächsten Krankheits-Nachbarn extrahieren.
- Jedes Paar formt eine Wirkstoff-Krankheit Assoziation.



Innovative Services

Vom Prototypen zum Web-Service...

- Forschung am IfIS
- Vorstellung von Prototypen
- Feedback UB/Experten
- Feedback Community (UB)
- Bei positivem Feedback: Erweiterung und Optimierung des Prototypen zum Web-Service
- Integration in PubPharm mit der UB-IT





FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE
TU Braunschweig



Search



[Advanced Search](#)

[Search History](#)

[Structure Search](#)

[Info Guide](#)

[Quiz](#)

[Blog](#)

▼ Related Substances

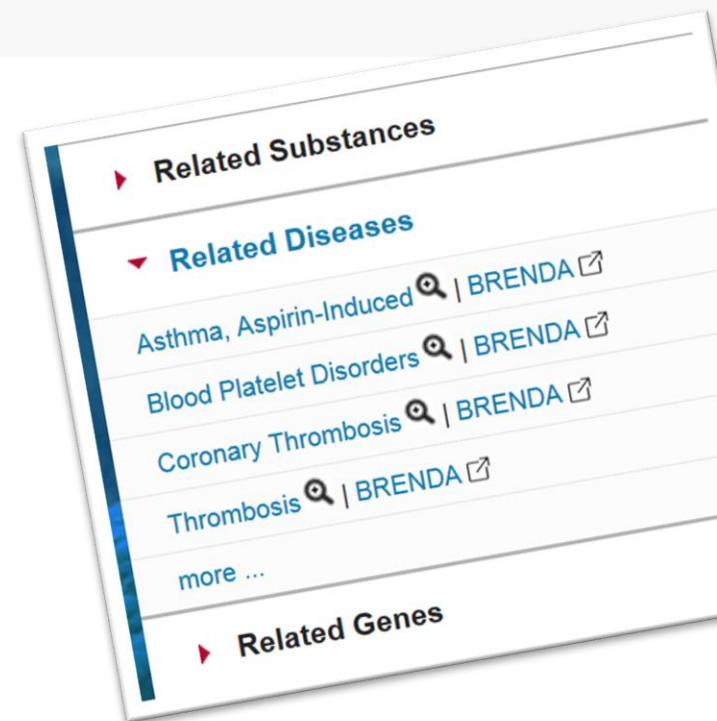
- Sp1049c | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Le-sn38 | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Lapatinib | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Nedaplatin | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Mgi-114 | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- It-101 | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Vinorelbine | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Irinotecan | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Ca4p | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Dha-paclitaxel | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- Doxorubicin | [Structure Search](#) | [BRENDA](#)
- less ...

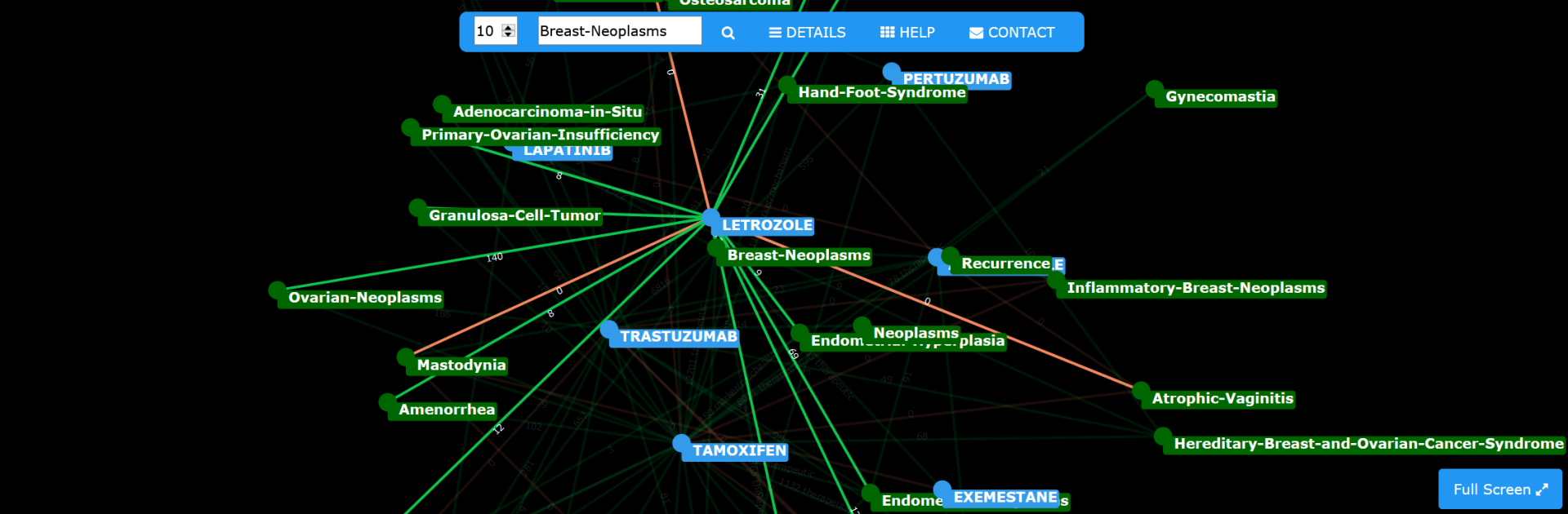
▼ Related Diseases

- [Drug-Related Side Effects And Adverse Reactions](#) | [BRENDA](#)
- [Carcinoma 256, Walker](#) | [BRENDA](#)
- [Leukemia P388](#) | [BRENDA](#)
- [Wolman Disease](#) | [BRENDA](#)
- [Leukemia L1210](#) | [BRENDA](#)
- [Sarcoma 180](#) | [BRENDA](#)
- [Carcinoma, Lewis Lung](#) | [BRENDA](#)
- [Ovarian Neoplasms](#) | [BRENDA](#)
- [Dihydropyrimidine De](#) | [Literature Search+-Ovarian Neoplasms](#)
- [Leukopenia](#) | [BRENDA](#)
- less ...

Innovative Services

Zur Nutzung der Vorschlagslisten konnte in einer repräsentativen Umfrage (N=157) Folgendes ermittelt werden: Ca. 70% der Personen, die PubPharm mehrmals im Monat oder öfter nutzen, gaben an, dass Sie diese kontext-basierten Informationen (semantische Facettierung) für Wirkstoffe, Erkrankungen/Symptome oder Gene mehrmals im Monat oder öfter nutzen.





ASSOCIATION DETAILS

Selected Drug Disease Associations

[LETROZOLE](#) < > [Endometrial-Hyperplasia](#)

Estimated number of publications: 9

[PubPharm](#)

[LETROZOLE](#) < > [Endometrial-Neoplasms](#)

Estimated number of publications: 69

[PubPharm](#)

[LETROZOLE](#) < > [Breast-Neoplasms](#)

Related Substances of: LETROZOLE [DrugBank](#)

[exemestane, ATC: \[L02BG06\]](#)

[PubPharm](#) | [DrugBank](#) | [Structure Search](#)

[anastrozole, ATC: \[L02BG03\]](#)

[PubPharm](#) | [DrugBank](#) | [Structure Search](#)

[fulvestrant, ATC: \[L02BA03\]](#)

[PubPharm](#) | [DrugBank](#) | [Structure Search](#)

[dydrogesterone, ATC: \[G03FA14, G03DB01, G03FB08\]](#)

[PubPharm](#) | [DrugBank](#) | [Structure Search](#)

[tamoxifen, ATC: \[L02BA01\]](#)

[PubPharm](#) | [DrugBank](#) | [Structure Search](#)

Related Diseases/Symptoms of: LETROZOLE

[Aromatase deficiency](#)

[PubPharm](#)

[Progesterone Resistance](#)

[PubPharm](#)

[Menopause, Premature](#)

[PubPharm](#)

[Anovulation](#)

[PubPharm](#)

[Ovarian Diseases](#)

[PubPharm](#)

Related Genes of: LETROZOLE

[PGR](#)
[progesterone receptor](#)
[UniProt](#)

[CYP19A1](#)
[cytochrome P450 family 19 subfamily A member 1](#)
[UniProt](#)

[CNTN3](#)
[contactin 3](#)
[UniProt](#)

[ESR1](#)
[estrogen receptor 1](#)
[UniProt](#)

Vielen Dank an das Team und an die DFG



Herzlichen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!