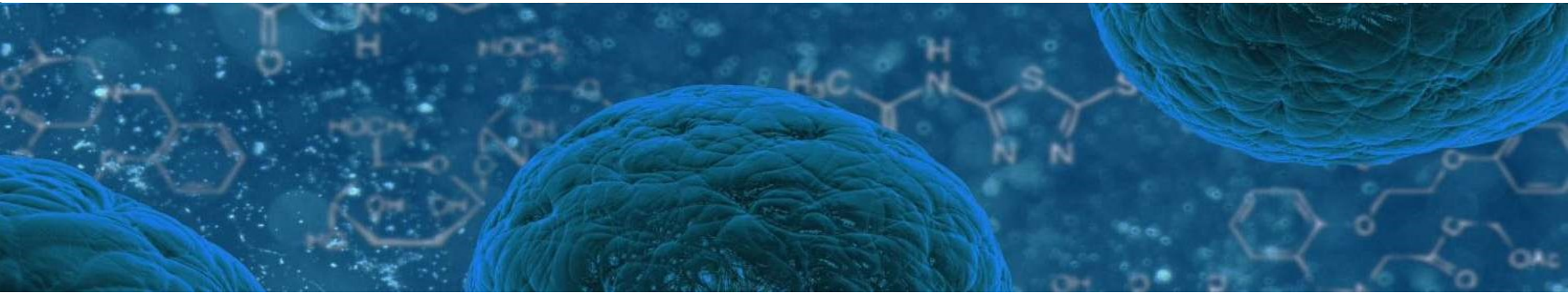
FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig



FID Coffee Lecture: FID Pharmazie – Der Narrative Service

Dr. Christina Draheim

20.01.2023, virtuell

Fachinformationsdienst (FID) Pharmazie

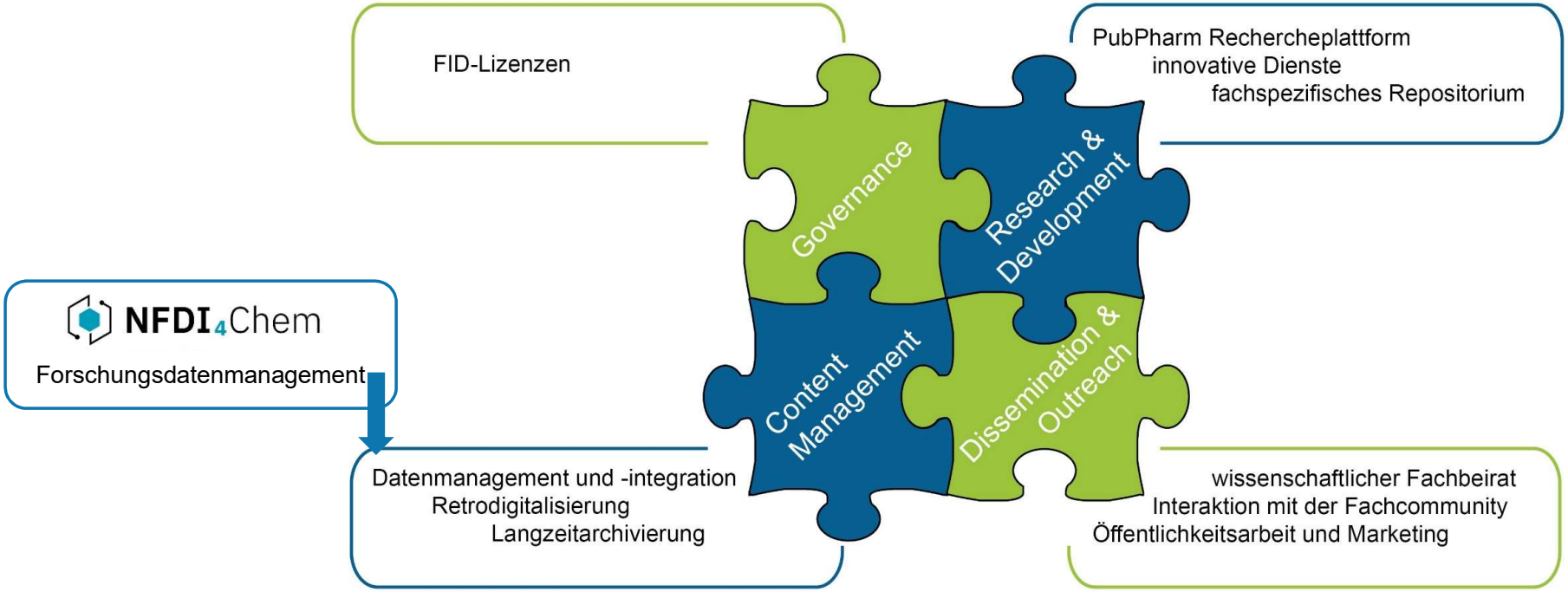
- Kooperationsprojekt der Universitätsbibliothek Braunschweig und des Instituts für Informationssysteme der TU Braunschweig
  Bibliothek ⚭ forschende Informatik
- DFG-Förderung seit 2015

- Infrastruktureinrichtung für das Fach
  - Wissenschaftsunterstützung in enger Abstimmung mit Fachcommunity
  - Entwicklung forschungsnaher Dienste mit frühzeitiger Einbindung von Forschenden der Pharmazie
  - Nachhaltiger Betrieb

www.pubpharm.de

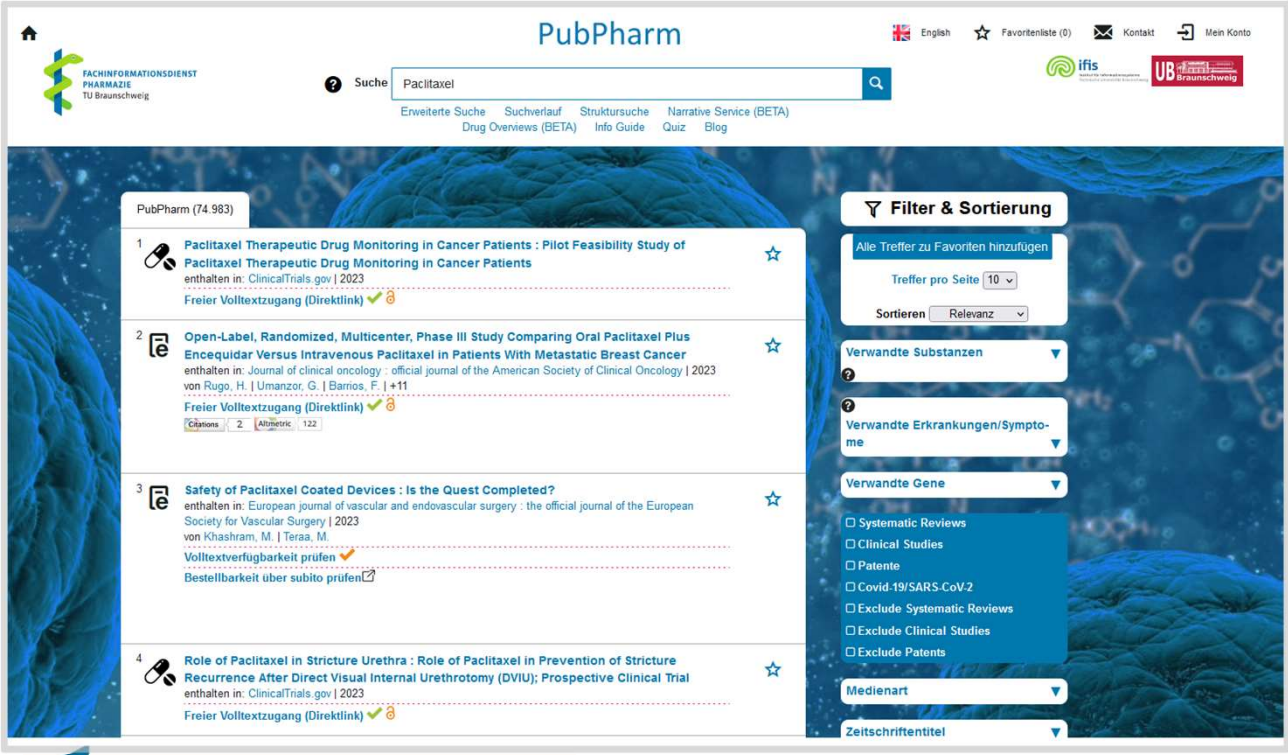
FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Arbeitsbereiche des FID Pharmazie



FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

PubPharm – pharmaziespezifische Inhalte



FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

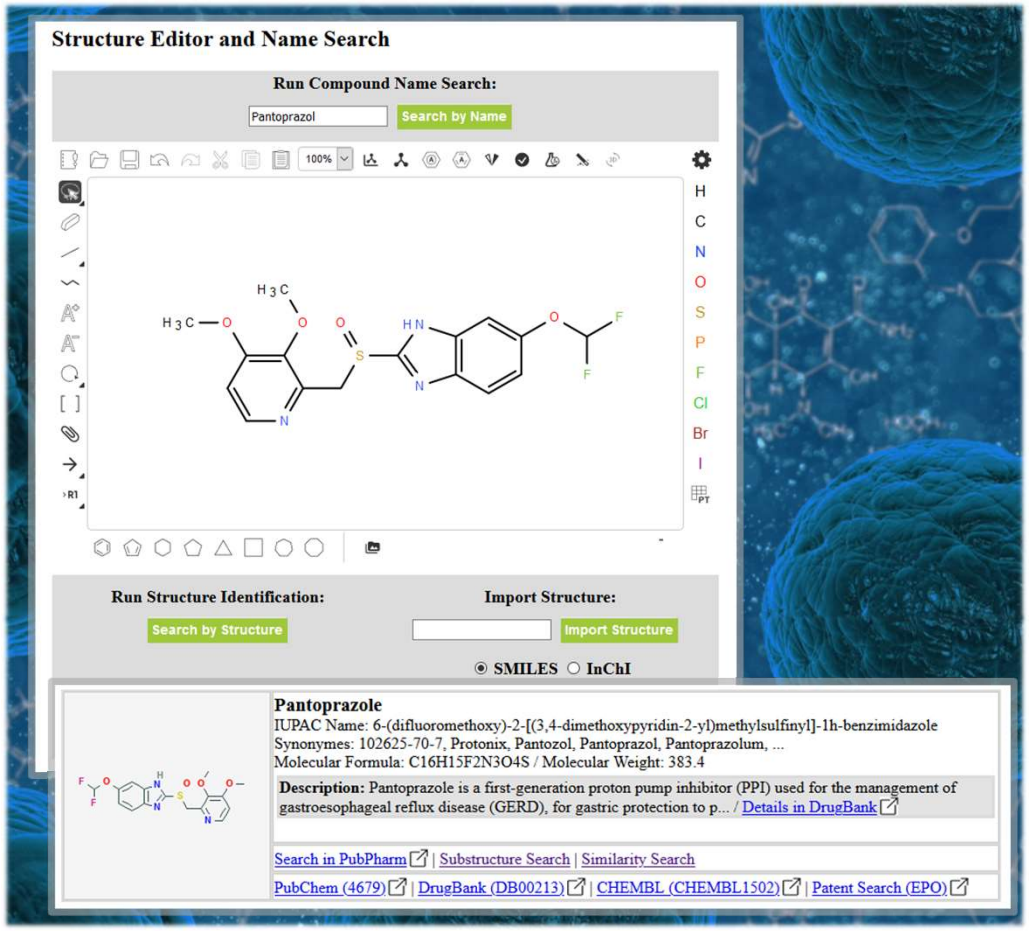
www.pubpharm.de

- Mehr als **55 Mio. Nachweise**
  - Davon ~34 Mio. aus **Medline** (PubMed)

- Inhalt über Medline hinaus:
  - **Weitere Zeitschriftenartikel** aus der Pharmazie **und angrenzenden Disziplinen**
  - **Preprints** (z.B. von bioRxiv, ChemRxiv)
  - **Pharmazeutische Bücher** (E-Books, internationale Dissertationen)
  - **Konferenzschriften**
  - Informationen zu **klinischen Studien**
  - Pharmazie-relevante **Patente**

PubPharm – Struktursuche

- **Suche über**
  - Molekulare Struktur
  - Import von SMILES oder InChI-Code
  - Substanznamen (z.B. Internationaler Freiname)
- **Möglichkeit der Substruktur und Ähnlichkeitssuche**
- Bietet weiterführende **Wirkstoffinformationen**



FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Entwicklung innovativer Services im FID Pharmazie

Bibliothek ∞ forschende Informatik

- Enge **Kooperation** mit **forschender Informatik** hat das Ziel, auf fachspezifische Anforderungen hin **innovative Services zu entwickeln**.
  - Gewährleistet, dass nicht an den Anforderungen des Faches vorbei geforscht und entwickelt wird.
  - Agile Entwicklung des Serviceangebots, Evaluierung von Prototypen durch Fachcommunity

- Entwicklung neuer **Retrievalpfade / Informationszugänge** unter Fokussierung auf die **Wirkstoff-Recherche**
  - Exponentieller Anstieg an wissenschaftlichen Publikationen
  - Keyword-basierte Suchen müssen oft in einem iterativen Prozess mehrfach verfeinert werden.

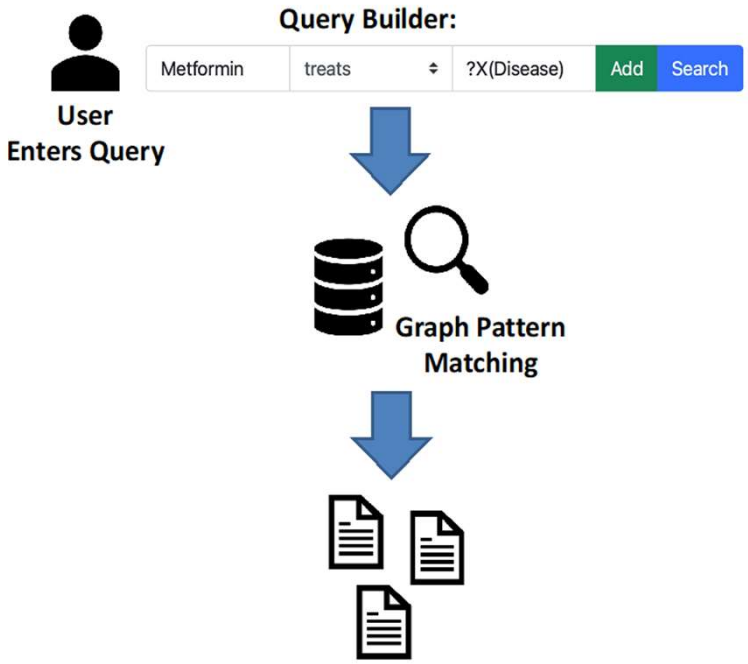
Beispielsuche in PubMed (09/2022)
- "Metformin": 27.697 Treffer
- "Metformin Diabetes": 18.932 Treffer
- "Metformin Diabetes Treatment": 17.003 Treffer

FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Innovative Recherche-Tools: Narrativer Service

ifis
Institut für Informationssysteme
Technische Universität Braunschweig

Narrative Service

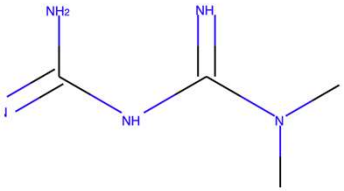


www.narrative.pubpharm.de

Drug Overviews

Hermann Kroll

Molecular Formula:	C4H11N5
Molecular Mass:	129.17
ALogP:	-1.03
CX LogP:	-0.92
CX Acid pKA:	-
CX Basic pKA:	12.33
CX LogD pH 7.4:	-5.62
See ChEMBL:	CHEMBL1431



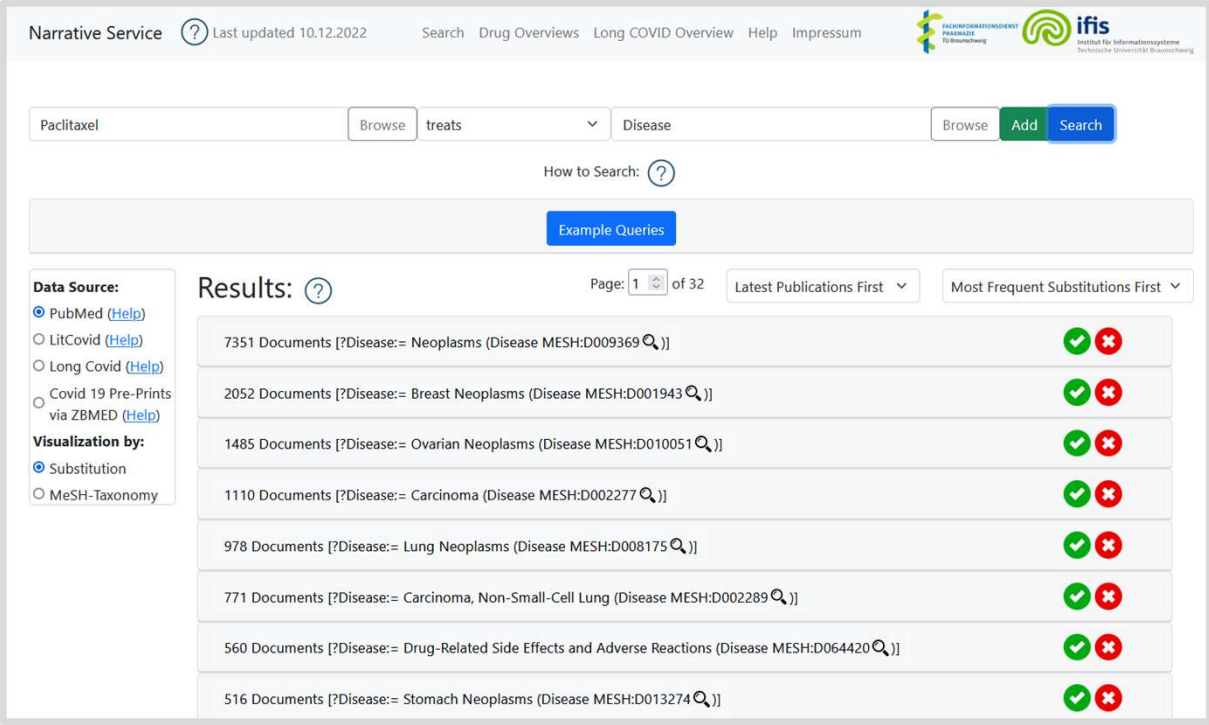
www.narrative.pubpharm.de/drug_overview

FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE
TU Braunschweig

Live Demo: Narrativer Service

- Ermöglicht in der Suchanfrage die Angabe von **Beziehungen** (treats, inhibits, etc.) zwischen pharmazie-relevanten Konzepten (z.B. Wirkstoffen, Targets, Arzneiformen)

- **Präzise** Literatursuche
- **Strukturierte** Literatursuche **mit Platzhaltern**
- **Strukturierte Wirkstoffübersichten** (“Drug Overviews”)



FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Live Demo: Drug Overviews

ifis
Institut für Informationssysteme
Technische Universität Braunschweig

Narrative Service | Last updated 10.12.2022 | Search | Drug Overviews | Long COVID Overview | Help | Impressum

Overview

- Drug
- DTD Network
- Keywords
- Indications 801
- Administration 73
- Target Interactions 294
- Lab Methods 188
- Species 464
- Drug Associations 1422
- Drug Interactions 211
- Adverse Effects 473
- Recent Papers 10

Ibuprofen

Drug-Target-Disease Network

Drug | Target | Disease

Wounds and Injuries (II), Ductus Arteriosus, Patent (IV), (r)-ibuprophen, alb, Aspirin, ptgs2, Ibuprofen, tnf, Fever (IV), Osteoarthritis (IV), Ibuprofen, Naproxen, cox1, cox2, ptgs1, Acetaminophen, Indomethacin, Neoplasms (?), Pain (IV)

Top 6 | Center

Ibuprofen

Molecular Formula:	C13H18O2
Molecular Mass:	206.28
ALogP:	3.07
CX LogP:	3.84
CX Acid pKA:	4.85
CX Basic pKA:	-
CX LogD pH 7.4:	1.34
See ChEMBL:	CHEMBL521
Structure Search:	PubPharm

Keyword Cloud

NSAID STUDY anti-inflammatory increase acid diclofenac indomethacin Naproxen acute medical analgesic Renal due report range IBP event oral adverse inhibitor

Indications (Study Phase via ChEMBL) — Most Relevant — Filter...

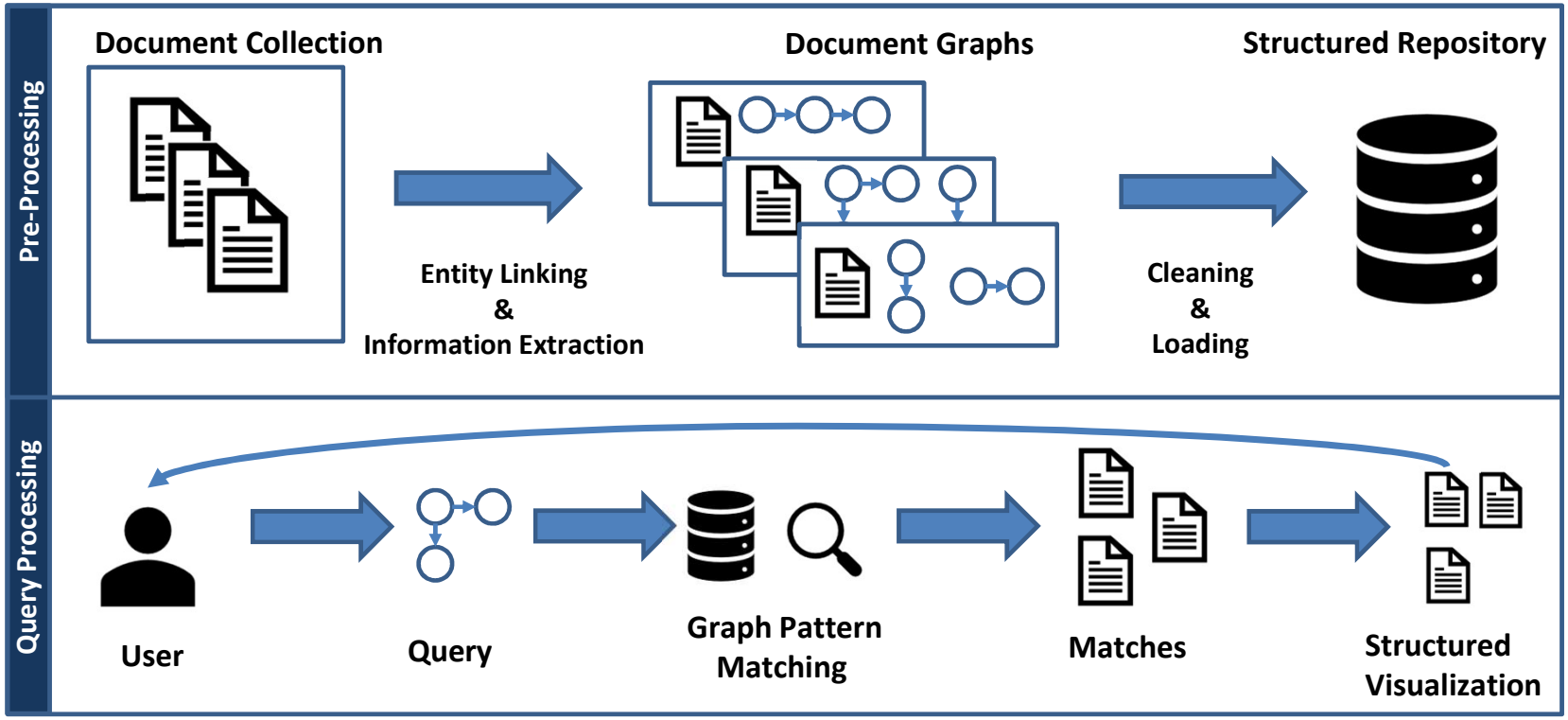
Pain 396 IV | Ductus Arteriosus, Patent 254 IV | Fever 144 IV | Wounds and Injuries 141 II | Neoplasms 116 ? | Osteoarthritis 109 IV
Arthritis 97 IV | Inflammation 81 ? | Arthritis, Rheumatoid 78 IV | Hemorrhage 75 II | Headache 74 IV | Infections 60 III
Migraine Disorders 56 IV | Pain, Postoperative 49 ? | Syndrome 49 ? | Dysmenorrhea 46 IV | Birth Weight 34 ?
Drug-Related Side Effects and Adverse Reactions 32 ? | Hypertension 32 II | Edema 32 ? | Alzheimer Disease 31 I | Cystic Fibrosis 31 ?
Fibrosis 30 ? | Acute Pain 28 IV | Acute Kidney Injury 27 ? | Ulcer 27 ? | Renal Insufficiency 23 ? | Parkinson Disease 22 ?

Administration — Most Relevant — Filter...

Delayed-Action Preparations 222 | Tablets 210 | Administration, Oral 155 | Nanoparticles 133 | Injections 113 | Capsules 110
Pharmaceutical Vehicles 80 | Hydrogels 71 | Emulsions 69 | Microspheres 65 | Powders 65 | Suspensions 61 | Dosage Forms 59
Drug Delivery Systems 58 | Micelles 48 | pellets 40 | granulate 39 | films 38 | Liposomes 35 | Drug Carriers 32 | modified release tablets 26

FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Narrativer Service: Discovery System



FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

Kroll, H., & Draheim, C. (2021). Narrative Information Access for a Precise and Structured Literature Search. *O-Bib. Das Offene Bibliotheksjournal / Herausgeber VDB*, *8*(4), 1–13. https://doi.org/10.5282/o-bib/5730

Übertragbarkeit auf andere Disziplinen

- **Detektion von Konzepten**
  - Relevante Konzepte müssen für eine Domäne identifiziert werden können, d.h. geeignete Vokabulare müssen existieren oder erstellt werden
  - Hier: Wirkstoffe, Krankheiten, Gene usw.
- **Vokabular Relationen**
  - Relevante Relationen zwischen Konzepten müssen benannt werden können, d.h. ein Vokabular von Beziehungen und Synonymen muss erstellt werden
  - Hier: decreases, treats, inhibits, metabolises, usw.
- Informationsbedarf muss in der Community vorhanden sein

Case Study

POLLUX

Source Code ist veröffentlicht - Knowledge Extraction Toolbox

- https://github.com/HermannKroll/KGExtractionToolbox
- https://doi.org/10.1109/JCDL52503.2021.00014 / Video: https://youtu.be/G6ndS0GZBeg
- https://doi.org/10.1145/3529372.3530924 / Video: https://youtu.be/yGlF2M1xB9I

FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

FACHINFORMATIONSDIENST PHARMAZIE
TU Braunschweig

UB Braunschweig

ifis
Institut für Informationssysteme
Technische Universität Braunschweig

Vielen Dank für Ihr Interesse!

Fachinformationsdienst Pharmazie – PubPharm
Technische Universität Braunschweig
Universitätsbibliothek | *University Library*
Universitätsplatz 1
38106 Braunschweig

pubpharm@tu-braunschweig.de
phone: +49 531 391 5046