



**FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE**
TU Braunschweig



Drug-Disease-Networks: innovatives PubPharm-Recherchetooll

Dr. Christina Draheim

21.09.2021, AGMB-Jahrestagung, virtuell

Fachinformationsdienst (FID) Pharmazie

Bibliothek  forschende Informatik



- Kooperationsprojekt der Universitätsbibliothek Braunschweig und des Instituts für Informationssysteme der TU Braunschweig
- DFG-Förderung seit 2015
(Vorgängerprojekt: Sondersammelgebiet Pharmazie 1949-2014)
- 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

PubPharm – Kurzprofil

Inhalt

- Mehr als 50 Mio. Nachweise
 - Ca. 32 Millionen Publikationen aus **Medline** (PubMed)
- Ca. 20 Millionen **weitere Artikel** aus pharmazeutischen und Fachzeitschriften angrenzender Disziplinen
- **Preprints** (u.a. aus bioRxiv, ChemRxiv)
- **Bücher** (E-Books, Dissertationen)
- **Konferenzschriften**
- Informationen zu **klinischen Studien**
- Fachspezifischer Ausschnitt an **Patenten**



Features

- **Freier Zugang**, responsives Design
- Verschiedene Filter- und Sortierfunktionen, erweiterte Suche
- **Integrierte Verfügbarkeitsprüfung** zur Anzeige von Volltextzugriffsmöglichkeiten
- **Struktursuche** mit Substruktur- und Ähnlichkeitssuche
- **Innovative Tools** bei der Suche nach Erkrankungen und Wirkstoffen:
 - Anzeige verwandter Substanzen, Erkrankungen/Symptome und Gene
 - Drug-Disease-Networks (BETA)



Forschung: innovative Services

Bibliothek forschende Informatik



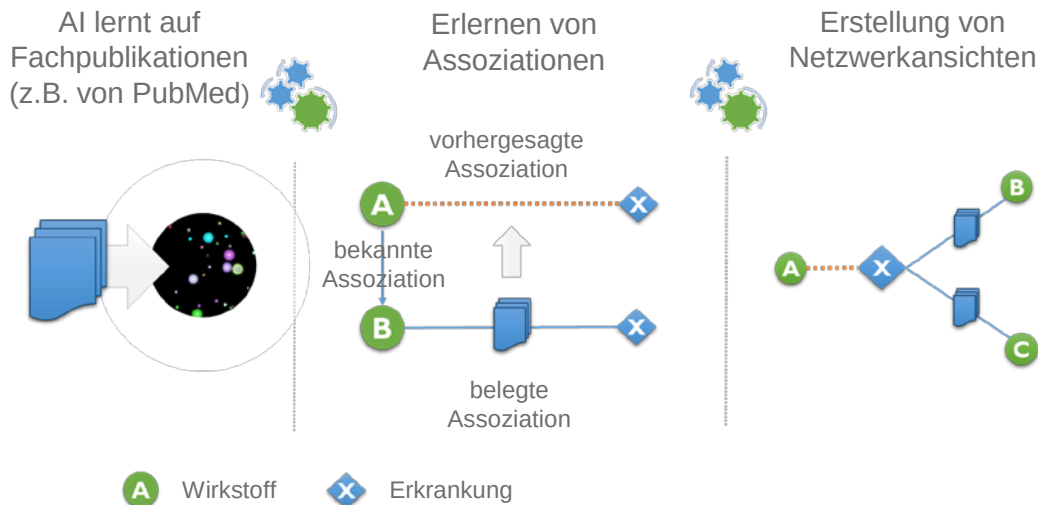
- Enge Kooperation mit forschender Informatik hat das Ziel, auf fachspezifische Anforderungen hin innovative Services zu entwickeln.
 - Gewährleistet, dass nicht an den Anforderungen des Faches vorbei geforscht und entwickelt wird.
 - Agile Entwicklung des Serviceangebots, Evaluierung von Prototypen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

Forschung: innovative Recherche-Tools

Ein möglicher Lösungsansatz

- Künstliche Intelligenz (AI) kann genutzt werden, um automatisch pharmazeutische Entitäten und ihre Relationen aus biomedizinischer Literatur zu extrahieren.

Entwicklung



Wawrzinek, J. et al.: International Conference on Theory and Practice of Digital Libraries. 2019.

Implementierung in PubPharm



- **Neural Embedding Models (z.B. Word2Vec*)** können nicht nur verwendet werden, um bestehende Assoziationen zu erlernen, sondern auch um neue vorherzusagen.
 - Ein *Neural Embedding Model* “zieht” ein  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.
- **Vektor Repräsentation**
 - Wörter mit einem ähnlichen Wort-Kontext liegen in einem hoch-dimensionalen Raum nahe beieinander.



Forschung: innovative Recherche-Tools

Mögliche Anwendungsbereiche

- Transfer dieser Kontextualisierungseigenschaft auf Wirkstoffe
 - Ein ähnlicher Kontext deutet auf eine intrinsische Ähnlichkeit von Wirkstoffen hin.
- Vorhersage von Entitäts-Assoziationen
 - Für jeden Wirkstoff können die k-nächsten Entitäts-Nachbarn (z.B. Wirkstoff, Erkrankung, Gen) extrahiert werden.
 - Jedes Paar formt eine Assoziation zwischen zwei Entitäten.



Forschung: innovative Recherche-Tools

PubPharm

English ☆ Favoritenliste

Suche

[Erweiterte Suche](#) [Suchverlauf](#) [Struktursuche](#) [Drug-Disease-Network \(BETA\)](#) [Info Guide](#)
[Quiz](#) [Blog](#)

PubPharm (5.678)

-  **Sumatriptan activates TRPA1**
in: Cephalalgia Reports | 2019
von Alexandru Babes | Cristian Neacsu | Michael JM Fischer | +1
[Volltextzugang \(Direktlink - Freier Zugang\)](#) ✓ 
-  **Comparison of sumatriptan and propofol VS Sumatriptan and placebo in acute migraine : Comparison of sumatriptan and propofol VS Sumatriptan and placebo in acute migraine**
enthalten in: WHO International Clinical Trials Registry Platform | 2018
[Volltextzugang \(Direktlink - Freier Zugang\)](#) ✓ 
-  **The Effect of Sumatriptan and Placebo on CGRP Induced Headache : The Effect of Sumatriptan and Placebo on CGRP Induced Headache**
enthalten in: ClinicalTrials.gov | 2019
[Volltextzugang \(Direktlink - Freier Zugang\)](#) ✓ 
-  **Sumatriptan as Treatment for Post-traumatic Headache : Sumatriptan as Treatment for Moderate to Severe Post-Traumatic Headache**
enthalten in: ClinicalTrials.gov | 2018
[Volltextzugang \(Direktlink - Freier Zugang\)](#) ✓ 

Filter & Sortierung

Alle Treffer zu Favoriten hinzufügen

Treffer pro Seite

Sortieren

Verwandte Substanzen

Verwandte Erkrankungen/Symptome

Verwandte Gene

- ☐ Systematic Reviews
- ☐ Clinical Studies
- ☐ Patents
- ☐ Covid-19/SARS-CoV-2

Verwandte Substanzen

Für Substanz: Sumatriptan

Sumatriptan | [Struktursuche](#)

Dihydroergotamine | [Struktursuche](#)

Rizatriptan | [Struktursuche](#)

Ergotamine | [Struktursuche](#)

Naratriptan | [Struktursuche](#)

mehr ...

Verwandte Erkrankungen/Symptome

Für Substanz: Sumatriptan

Migraine Disorders

Vascular Headaches

Headache

Headache Disorders

mehr ...

Verwandte Gene

Für Substanz: Sumatriptan

HTR1D | [UniProt](#) | [KEGG](#)

5-hydroxytryptamine Receptor 1D

mehr ...

PubPharm – Drug-Disease-Networks

 Suche Recherche in über 55 Mio. Publikationen...



[Erweiterte Suche](#)

[Suchverlauf](#)

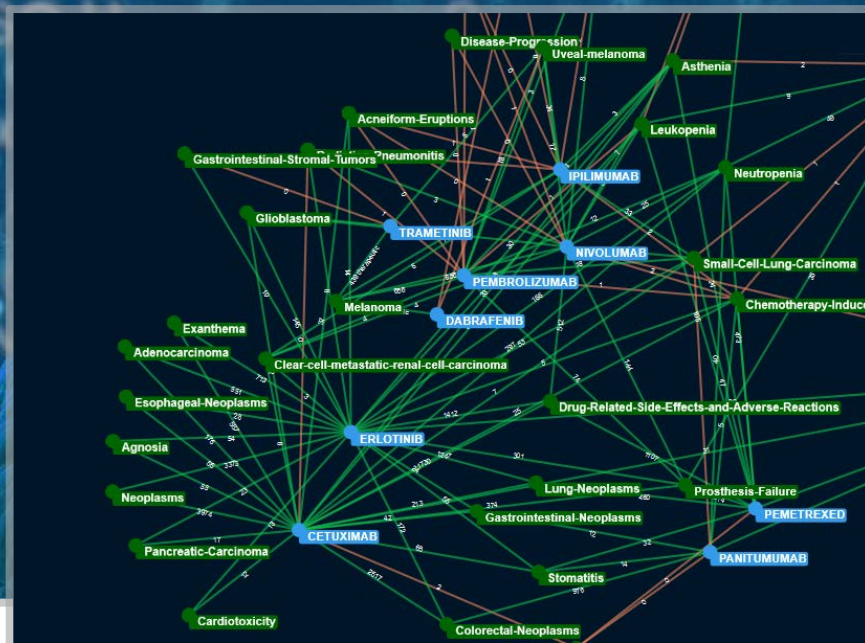
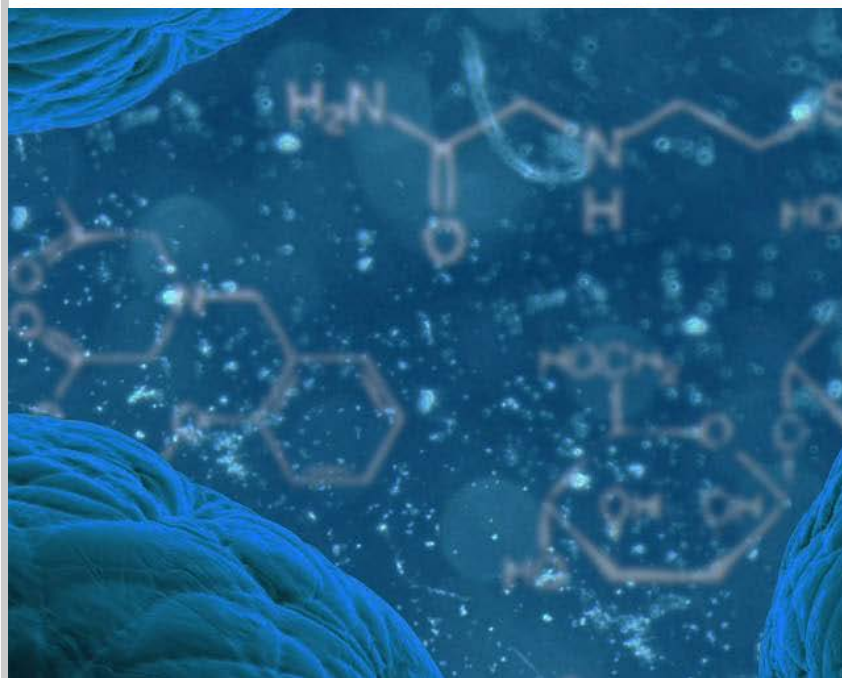
[Struktursuche](#)

[Drug-Disease-Network \(BETA\)](#)

[Info Guide](#)

[Quiz](#)

[Blog](#)





Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!



gefördert durch



Projektlaufzeit 2015-2023



**FACHINFORMATIONSDIENST
PHARMAZIE**
TU Braunschweig



APPENDIX

PubPharm – Drug-Disease-Networks

 Suche Recherche in über 55 Mio. Publikationen...



[Erweiterte Suche](#)

[Suchverlauf](#)

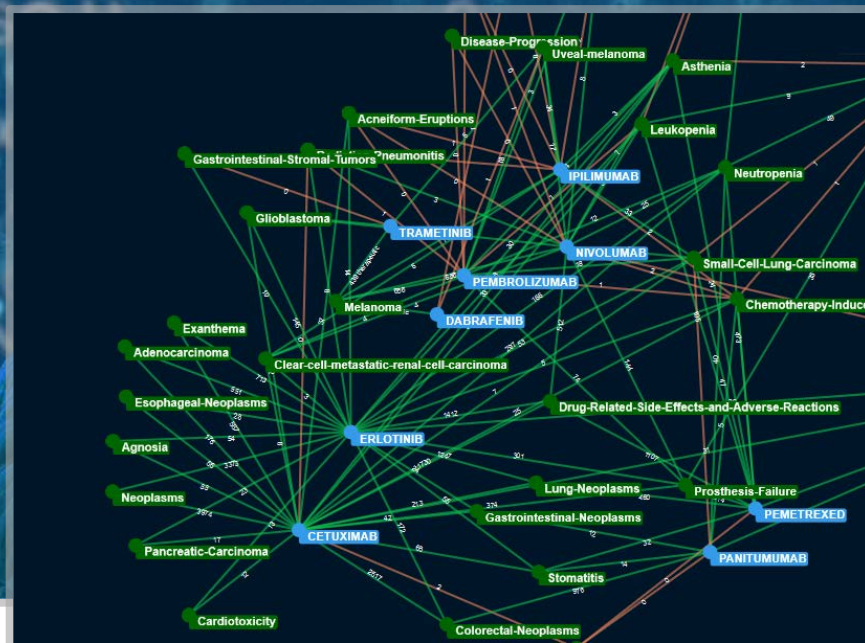
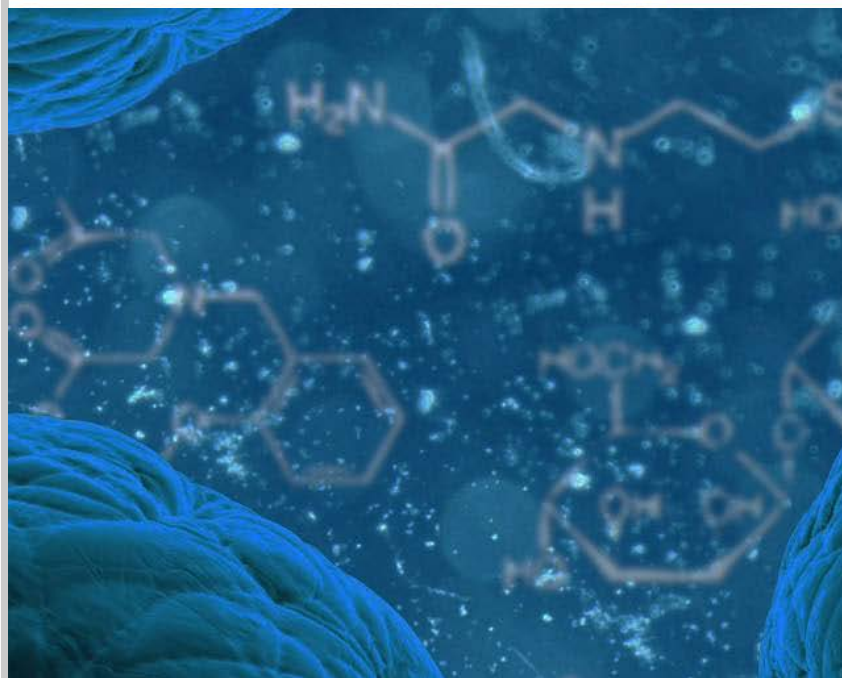
[Struktursuche](#)

[Drug-Disease-Network \(BETA\)](#)

[Info Guide](#)

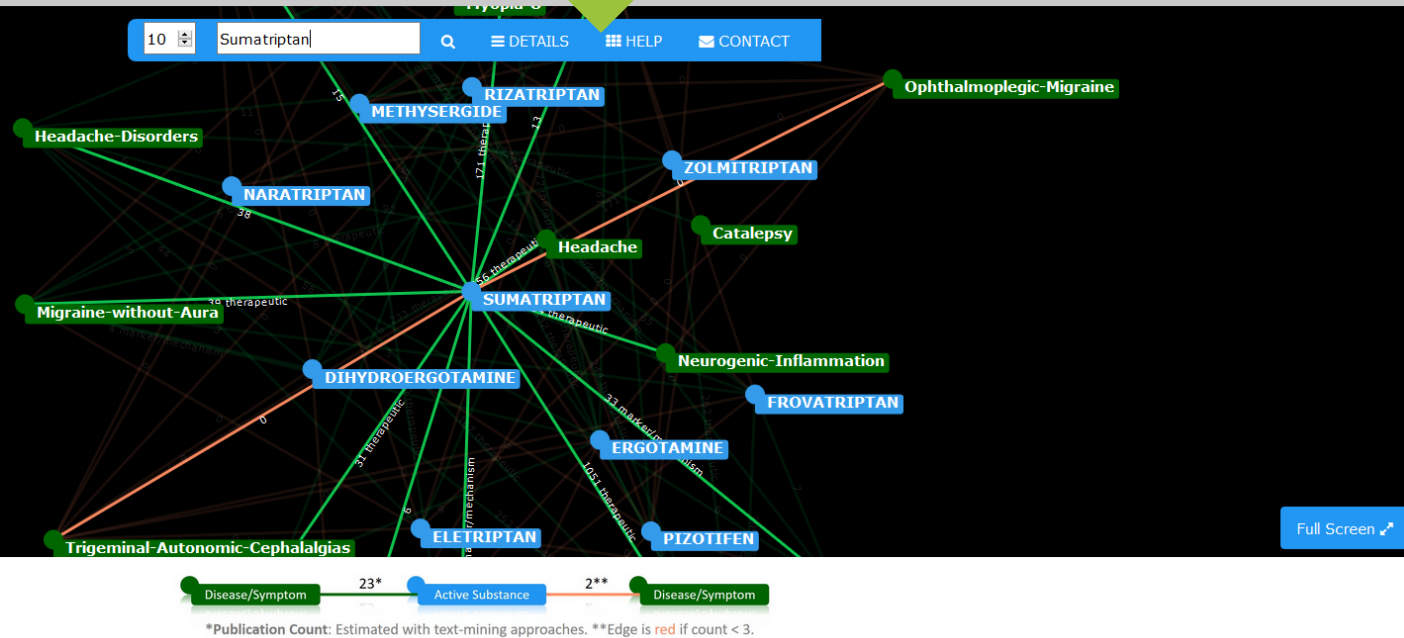
[Quiz](#)

[Blog](#)



Drug-Disease-Networks

BETA-
Version



ASSOCIATION DETAILS

Selected Drug Disease Associations

[SUMATRIPTAN](#) < therapeutic > [Headache](#)

Estimated number of publications: 756

[CTD](#) | [PubPharm](#)

Related Substances of:

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

dihydroergotamine, ATC: [N02CA51, N02CA01]

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

rizatriptan, ATC: [N02CC04]

Related Diseases/Symptoms of:

SUMATRIPTAN

Migraine Disorders

[PubPharm](#)

Vascular Headaches

[PubPharm](#)

Related Genes of:

SUMATRIPTAN

HTR1D

5-hydroxytryptamine receptor 1D

[UniProt](#)

HTR1F

5-hydroxytryptamine receptor 1F

Drug-Disease-Networks

BETA-
Version



10

Sumatriptan



DETAILS

HELP

CONTACT

Full Screen

ASSOCIATION DETAILS

Selected Drug Disease Associations

[SUMATRIPTAN](#) < therapeutic > [Headache](#)

Estimated number of publications: 756

[CTD](#) | [PubPharm](#)

[SUMATRIPTAN](#) < > [Vascular-Headaches](#)

Estimated number of publications: 13

[PubPharm](#)

[SUMATRIPTAN](#) < therapeutic > [Migraine-with-Aura](#)

Estimated number of publications: 31

[CTD](#) | [PubPharm](#)

[SUMATRIPTAN](#) < marker/mechanism >

[Dizziness](#)

Estimated number of publications: 33

Related Substances of:

SUMATRIPTAN [DrugBank](#)

[dihydroergotamine](#), ATC: [N02CA51, N02CA01]

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

[rizatriptan](#), ATC: [N02CC04]

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

[ergotamine](#), ATC: [N02CA02, N02CA52, N02CA72]

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

[naratriptan](#), ATC: [N02CC02]

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

[zolmitriptan](#), ATC: [N02CC03]

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

[eletriptan](#), ATC: [N02CC06]

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

[almotriptan](#), ATC: [N02CC05]

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

Related Diseases/Symptoms of:

SUMATRIPTAN

[Migraine Disorders](#)

[PubPharm](#)

[Vascular Headaches](#)

[PubPharm](#)

[Headache](#)

[PubPharm](#)

[Headache Disorders](#)

[PubPharm](#)

[Migraine without Aura](#)

[PubPharm](#)

[Migraine with Aura](#)

[PubPharm](#)

[Cluster Headache](#)

[PubPharm](#)

[Headache Disorders, Primary](#)

[PubPharm](#)

Related Genes of:

SUMATRIPTAN

[HTR1D](#)

[5-hydroxytryptamine receptor 1D](#)

[UniProt](#)

[HTR1F](#)

[5-hydroxytryptamine receptor 1F](#)

[UniProt](#)

[HTR1B](#)

[5-hydroxytryptamine receptor 1B](#)

[UniProt](#)

[Htr1b](#)

[5-hydroxytryptamine \(serotonin\) receptor 1B](#)

[UniProt](#)

[HTR5A](#)

[5-hydroxytryptamine receptor 5A](#)

[UniProt](#)

[HTR2B](#)

[5-hydroxytryptamine receptor 2B](#)

[UniProt](#)