

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Veröffentlichung der Ergebnisse von Forschungsvorhaben im BMBF-Programm

Biologische Innovation und Ökonomie

Forschungsvorhaben: Verbundprojekt: Go3R - Entwicklung und Etablierung einer semantischen Suchmaschine für Alternativmethoden zu Tierversuchen (Teilprojekt 1)

Förderkennzeichen: 0315489A

Zuwendungsempfänger: Technische Universität Dresden, 01062 Dresden

Ausführende Stelle: Technische Universität Dresden - Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften - Fachrichtung Biologie - Biotec - Bioinformatik, Tatzberg 47-51, 01307 Dresden

Projektleitung: Herr Prof. Dr. Schröder

Laufzeit: 01.06.2009 bis 31.05.2012

"Das diesem Bericht zugrundeliegende BMBF-Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung unter dem Förderkennzeichen 0315489A gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor".



Anlage 2

(zu Nr. 8.2 NKBF 98)

Schlussbericht: Technische Universität Dresden

Verbundprojekt: Go3R – Entwicklung und Etablierung einer semantischen
Suchmaschine für Alternativmethoden zu Tierversuchen

Förderkennzeichen: 614 40003 0315489A

Laufzeit: 01.06.2009 – 31.05.2012

I. Ziel und Inhalte des Projektes.....	2
II. Eingehende Darstellung des Projektes.....	2
1. Verwendung der Zuwendung und erzielt es Ergebnis im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele	2
2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	2
3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit.....	2
4. Voraussichtlicher Nutzen und Verwertung	2
5. Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen.....	3
6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses	3

I. Ziel und Inhalte des Projektes

Dieser Teil wird gemeinsam von den Partnern erstellt (siehe **Anlage 2a**)

II. Eingehende Darstellung des Projektes

1. Verwendung der Zuwendung und erzielttes Ergebnis im Einzelnen, mit Gegenüberstellung der vorgegebenen Ziele

Dieser Teil wird gemeinsam von den Partnern erstellt (siehe **Anlage 2a**)

2. Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Es wurden 232.285€ bewilligt. Die Ausgaben verteilen sich wie folgt:

Personal:	152.124,00€
Verbrauch:	4.500,00€
Reisen:	5.700,00€
Vergabe:	69.961,00€

Dabei ist zu beachten, dass die Zahlen nur vorläufig sind und evtl. von den endgültigen Ausgaben etwas abweichen können.

3. Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Ziel des Go3R Projektes ist die Entwicklung und Etablierung einer semantischen Suchmaschine für Alternativmethoden, die es ermöglicht, die Unerlässlichkeit von Tierversuchen schnell, umfassend und transparent nachvollziehbar zu bewerten, Trends zu erkennen, sowie Fachgebiete so zu vernetzen, dass Arbeiten mit Bezug zum 3R-Prinzip in allen Bereichen verfügbar sind

Im Ergebnis wurde eine semantische Suchmaschine entwickelt, online gestellt, und evaluiert, die vollautomatisch ihren Dokumentdatenbestand aktualisiert und bei Anpassung der im Projekt neu entwickelten Ontologie auf der Webseite selbstständig alle betroffenen Dokument neu indexiert, ohne dass die Nutzung der Suchmaschine davon beeinträchtigt ist. Ein großer Anteil der Arbeit wurde in die Erstellung der Go3R Ontologie, dem Hintergrundwissen der Suchmaschine, sowie in die Beschreibung von endpunktspezifischen Klassenzuordnungen, sowie deren Überprüfung und Evaluierung investiert. Ohne die Förderung des BMBF für ein Verbundprojekt wäre eine derartige Zusammenarbeit von Industrie, Behörde, KMU und Universität und die Bündelung der Kompetenzen nicht koordinierbar und daher nicht möglich gewesen.

4. Voraussichtlicher Nutzen und Verwertung

In Abhängigkeit von den Erfolgen bei der Suche nach Sponsoren im Anschluss an die Erfolgskontrollbericht beschriebenen Evaluierungsphase wird Go3R auch nach Projektende als Rechercheplattform für die Allgemeinheit frei verfügbar bleiben. Die einzelnen Ergebnisse (Ontologie, 3R Klassifizierung, IUCLID Zuordnung, Integrierter Dokumentbestand) habe für sich allein bereits einen Nutzen:

Ontologie: Mit der intensiven Arbeit an der Ontologie haben wir eine wiederverwendbare Ressource geschaffen, die in für das Projekt wichtigen Bereiche bereits gut den aktuellen Stand der Technik und Forschung zu Alternativmethoden abbildet. Diese Ontologie kann und sollte in kommenden Projekten und Produkten genutzt werden und für weitere Bereich vervollständigt werden.

IUCLID Zuordnung: Die erstellten Suchprofile für die indirekte Zuordnung von Dokumenten zu endpunktspezifischen Klassen im Teil „Toxikologische Informationen“ der International Uniform Chemical Information Database (IUCLID Version 5) wurden im Projekt positiv evaluiert und stellen

3R Relevanz Klassifizierung: Im Projekt haben wir mehrere tausend Dokumente gesammelt, die relevant für den Bereich Alternativmethoden sind und für die automatische Bewertung neuer Dokumente in Klassifizierungsverfahren genutzt werden. Diese Referenzen sind für sich wertvoll und sind in Go3R durch das 3R Siegel gekennzeichnet. Wir streben an diese in Anschluss an das Projekt in geeigneter Form zu veröffentlichen.

Die Wissenschaftlichen Erfolgsaussichten werden zusätzlich durch mehrere in der Bioinformatik Arbeitsgruppe verfasste Doktorarbeiten unterstrichen. Dabei wurden Teile der im Rahmen dieses Projektes entwickelten Algorithmen in folgenden Doktorarbeiten erarbeitet, weiterentwickelt und entsprechend veröffentlicht:

- T Wächter, October 2010, Semi-automated ontology generation for biocuration and semantic search.
- H Dietze October 2010. GoWeb: Semantic search and browsing for the life sciences.
- D Alexopoulou, June 2010, Word-sense disambiguation in biomedical ontologies

5. Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Fortschritte auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen sind nicht bekannt geworden.

6. Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses

Neben Publikationen zu Teilbereichen wurde Go3R auf zahlreichen Veranstaltungen vorgestellt und im Rahmen von drei Nutzertreffen demonstriert:

- Nutzertreffen mit europäischem Teilnehmerkreis: „Go3R Search Engine - a knowledge-based Search Engine for Information on Animal Testing Alternatives“ - Workshop. 16th Congress on Alternatives to Animal Testing, Linz, Austria, 02. - 04.09.2010
- Nutzertreffen mit internationalem Teilnehmerkreis: “Presentation of Go3R search engine with hands-on trials on PC terminals”. 8th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences, Montréal, Canada, August 21 - 25, 2011
- Nutzertreffen mit deutschem Teilnehmerkreis: „Anwendung der Suchmaschine Go3R für die Informationsrecherchen zu Alternativmethoden zu Tierversuchen“. 5. Fortbildungsveranstaltung der GV-SOLAS für Tierschutzbeauftragte und Behördenmitglieder, Berlin, 9. - 10. Mai 2012

Publikationen:

- Wächter, T.; Sauer U. G.; Doms, A.; Grune, B.; Alvers, M. A.; et al (2009). *An Ontology To Represent Knowledge On Animal Testing Alternatives*. 3rd International Biocuration Conference, Nature Precedings Link <http://precedings.nature.com/documents/3148/version/1>
- Sauer, U.G.; Wächter, T.; Grune, B.; Doms, A.; Alvers, M. R.; et al (2009). *Go3R - semantic Internet search engine for alternative methods to animal testing*. ALTEX. 2009;26(1):17-31. Link <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19326030>
- Wächter T, Schroeder M (2010) Semi-automated Ontology Generation within OBO-Edit. *Bioinformatics* (2010) 26 (12): i88-i96.

Geplante Publikationen

- Extending ontologies by finding siblings using set expansion techniques.
Götz Fabian, Thomas Wächter, and Michael Schroeder. *Bioinformatics*, 2012 (accepted)
- „Endpoint-centered document classification to support the search for test methods and toxicological data with Go3R“ angestrebt für Journal *Regulatory Toxicology*, 2012
- Präsentation auf EUROTOX, 17. – 20. Juni, Stockholm, 2012
- Präsentation 17th Congress on Alternatives to Animal Testing, Linz, 05.-08. September 2012

Konferenzen, Poster, Workshops

2012	
17. – 20. Juni	EUROTOX, Stockholm, Abstract accepted, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Robert Landsiedel
09. – 10. Mai	5. Fortbildungsveranstaltung der GV-SOLAS für Tierschutzbeauftragte und Behördenmitglieder, Berlin, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Ursula Sauer (TUD), Dr. Barbara Grune (BFR)
19. – 22. März	Jahrestagung der deutschen Gesellschaft für Toxikologie und Pharmakologie, Dresden, zwei Poster, <u>Teilnehmer</u> : Prof. Michael Schroeder, Dr. Robert Landsiedel, Dr. Thomas Wächter
2011	
07. – 09. Dezember	SWAT4LS Workshop, London, <u>Teilnehmer</u> : Michael Schroeder (TUD), Götz Fabian (TUD)
19. – 26. August	8th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences, Montreal (Canada), <u>Teilnehmer</u> : Dr. Ursula Sauer (TUD), Dr. Michael R. Alvers (TI), Dr. Barbara Grune (BFR)
01. Juli	Lange Nacht der Wissenschaften, Dresden
16. – 17. Januar	Jahrestagung der deutschen Gesellschaft für Toxikologie und Pharmakologie, Frankfurt am Main, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Robert Landsiedel, Dr. Thomas Wächter
2010	
21. – 26. November	Dagstuhl Seminar „Scalable Visual Analytics“, Schloss Dagstuhl – Leibniz Center for Informatics, <u>Teilnehmer</u> : Prof. Michael Schroeder (TUD)
30. November	European Partnership on Alternative Approaches to Animal Testing (EPAA), Brussels: Posterpresentation
02. – 03. November	Go3R Ontology Meeting bei BfR, Berlin
04. – 05. Oktober	European Partnership on Alternative Approaches to Animal Testing (EPAA), „2R Workshop“, Poster und Präsentation, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Ursula Sauer (TUD)
02. – 04. September	16th Congress on Alternatives to Animal Testing, Linz, 2-4. September 2010: Demonstration der Go3R Suchmaschine in Form eines Workshops. Nutzer konnten ihre Suchanfragen gemeinsam mit den Wissenschaftlern des Go3R Teams besprechen und direkt Rückmeldung geben. Die Teilnehmer kamen aus den Bereichen der Genehmigungsbehörden, Tierschutzorganisationen, Industrie und Lehre. <u>Teilnehmer</u> : Dr. Ursula Sauer (TUD), Dr. Barbara Grune (BFR), Dr. Liliana Barrio-Alvers (TI)
18. Juni	Lange Nacht der Wissenschaften, Dresden
23. Februar	Intern Demo Go3R, Dresden
2009	
5. November	European Partnership on Alternative Approaches to Animal Testing (EPAA), Brussels
26. Oktober	Poster 20 Jahre ZEBET, Bundesinstitut für Risikobewertung, Berlin, Posterpresentation, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Thomas Wächter (TUD)
30. August – 3. September	7th World Congress on Alternatives and Animal Use in the Life Sciences, Rom (Italien), 2009, Präsentation/Poster Michael Schroeder, <u>Teilnehmer</u> : Dr. Thomas Wächter (TUD), Dr. Ursula Sauer (TUD), Prof. Michael Schroeder (TUD), Dr. Robert Landsiedel (BASF), Dr. Barbara Grune (BfR)

Berichtsblatt

1. ISBN oder ISSN	2. Berichtsart (Schlussbericht oder Veröffentlichung) Schlussbericht		
3. Titel Go3R – Entwicklung und Etablierung einer semantischen Suchmaschine für Alternativmethoden zu Tierversuchen			
4. Autor(en) [Name(n), Vorname(n)] Wächter, Thomas Schroeder, Michael		5. Abschlussdatum des Vorhabens 31.05.2012	6. Veröffentlichungsdatum
		7. Form der Publikation	
8. Durchführende Institution(en) (Name, Adresse) Biotechnologisches Zentrum, TU Dresden, Tatzberg 47/49, 01307 Dresden		9. Ber. Nr. Durchführende Institution	
		10. Förderkennzeichen 614 40003 0315489A	
		11. Seitenzahl 45 (6 TUD + 39 gemeinsamer Teil für alle Partner)	
12. Fördernde Institution (Name, Adresse) Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) 53170 Bonn		13. Literaturangaben	
		14. Tabellen 3	
		15. Abbildungen 2 + 11	
16. Zusätzliche Angaben			
17. Vorgelegt bei (Titel, Ort, Datum)			

18. Kurzfassung

Die Europäische Chemikalienverordnung REACH (Registration, Evaluation and Authorisation of Chemicals) schreibt vor, dass alle Chemikalien ab einer Menge von 1 Tonne pro Jahr in der EU produziert oder importiert werden, registriert werden müssen. Weil für die Registrierungsdossiers detaillierte Informationen zu den Eigenschaften der chemischen Substanzen beigebracht werden müssen, trägt eine umfassende Bereitstellung aller existierenden Daten von Relevanz dazu bei Tierversuche zu reduzieren. Auch dann, wenn neue Test notwendig werden, um das Gefahrenpotential einer Substanz zu bewerten, darf eine Tierversuch nur zu allerletzt durchgeführt werden. Um den Anforderungen von REACH gerecht zu werden, müssen neu entwickelte Testmethoden berücksichtigt werden, die Tierversuche ersetzen, verfeinern oder Tierverbrauchszahlen reduzieren.

Die wissensbasierte Suchmaschine Go3R, www.Go3R.org, wurde zu Unterstützung der Wissenschaftler in der Industrie und in den Regulierungsbehörden bei diesen beiden Aufgaben entwickelt. Bei der Suche in 22 Millionen Dokumenten aus PubMed und dem Toxicology Data Network (TOXNET), nutzt Go3R Expertenwissen über 3Rs Methoden und regulatorischen Toxikologie, welches in einem Netzwerk von Konzepten, Termen, und Synonymen um den Inhalt der Dokumente zu erfassen. Die Suchresultate werden automatisch in einem Inhaltsverzeichnis sortiert, das neben der Liste von Dokumenten angezeigt wird. Durch klicken auf die verschiedenen Bereiche dieses Inhaltsverzeichnisses, kann der Nutzer schnell und einfach nach dem gewünschten Themen filtern.

Dokumente, die Gefahreninformationen enthalten, werden automatisch in den Klassen der "IUCLID5" im Abschnitt "toxicological information" im Inhaltsverzeichnis zugeordnet, welche selbst den endpunktspezifischen Klassen der IUCLID5 Kategorien für die REACH Registrierungsdossiers folgen. Um eine Sortierung nach toxikologischem Endpunkt in Go3R zu realisieren, wurden komplexe Suchanfragen formuliert und in die Suchmaschine integriert. In Abhängigkeit vom konkreten Endpunkt, wurden bis zu 100% der relevanten Dokumente mit in vitro oder in vivo Gefahreninformationen korrekt in die entsprechenden IUCLID5 Kategorien einsortiert.

19. Schlagwörter

Ontologiebasiertes Text Mining, Alternativemethoden zum Tierversuch, REACH, Literatursuche, Semantische Suche, 3R Prinzip, Replacement Methode, Refinement Methode, Reduction Methode

20. Verlag

21. Preis