Zeitschrift: Arbido-R : Revue

Herausgeber: Vereinigung Schweizerischer Archivare; Verband der Bibliotheken und der Bibliothekarinnen/Bibliothekare der Schweiz; Schweizerische Vereinigung für Dokumentation

Band: 5 (1990)

Heft: 2

Artikel: Der EDV-Arbeitsplatz des Chemikers

Autor: Poppinger, D.

DOI: https://doi.org/10.5169/seals-771745

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. Mehr erfahren

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. En savoir plus

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. Find out more

Download PDF: 16.07.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, https://www.e-periodica.ch

Der EDV-Arbeitsplatz des Chemikers

D. Poppinger

Im Forschungsprozess der chemischen Industrie spielen Computermethoden heute eine wesentliche Rolle. Seit Anfang der 80er Jahre sind Systeme im Gebrauch, die auf Grund ihrer leichten Bedienbarkeit grossen Anklang beim Endbenutzer gefunden haben und ihm erlauben, teilweise auf die Dienstleistungen des I+D-Spezialisten zu verzichten. Die heutigen EDV-Anwendungen sind leistungsfähig, aber wenig integriert. Ein aktuelles Projekt bei Ciba-Geigy hat zum Ziel, Informations- und Modelliersysteme in eine für den Endbenutzer tauglichere und vor allem besser integrierte Form am Arbeitsplatz des Chemikers zur Verfügung zu stellen.

Dans l'industrie chimique, les méthodes de recherche informatisées jouent un rôle prépondérant. Plusieurs systèmes sont en fonction depuis le début des années quatre-vingts. Grâce à leur facilité d'emploi, ils ont rencontré beaucoup de succès auprès des usagers, au point de leur permettre de renoncer partiellement aux services offerts par les «spécialistes de l'information et de la documentation». Toutefois, les applications informatiques sont aujourd'hui efficaces, mais peu intégrées. C'est ainsi qu'un projet est actuellement en cours chez Ciba-Geigy, dans le but de parvenir à mettre à la disposition des chimistes des systèmes plus efficaces et mieux intégrés.

Nell' industria chimica, i metodi di ricerca informatizzati giocano un ruolo preponderante. Diversi sistemi funzionano sin dall' inizio degli anni Ottanta. Essendo di facile impiego, hanno riscontrato molto successo fra gli utenti, fino al punto da permettere loro di fare in gran parte a meno dei servizi offerti dagli «specialisti dell' informazione e della documentazione». Nonostante le applicazioni informatiche possano ritenersi efficaci, per il momento risultano ancora poce integrate. Non a caso la Ciba-Geigy sta elaborando un progetto per poter arrivare a mettere a disposizione dei chimici sistemi ancor più efficaci e, in ogni caso, meglio integrati.

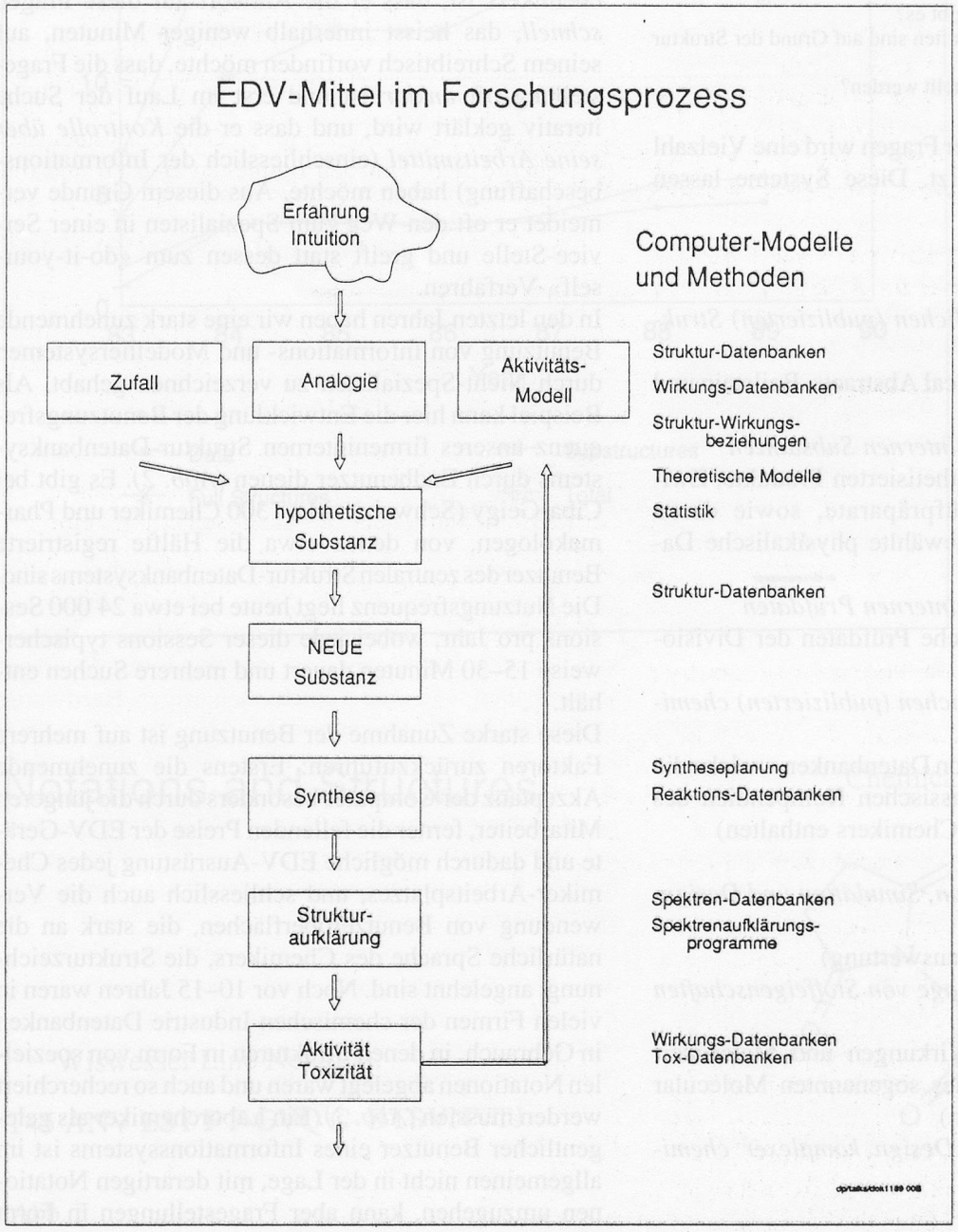


Abb. 1

Anforderungen des Chemikers an EDV-Unterstützung

Die Informationsbedürfnisse des Chemikers in der industriellen chemischen Forschung richten sich nicht nur auf Substanzen und deren Eigenschaften, sondern auch auf die Analyse und eventuelle Voraussage von Prozessen oder von Eigenschaften chemischer Verbindungen. Diese Anforderungen entstehen in verschiedenen Stadien des Forschungsablaufs, der hier am Beispiel der pharmazeutischen Entwicklung schematisch aufgezeichnet ist *(Abb. 1)*.

Typische Fragestellungen des Forschungschemikers in diesem Ablauf sind:

- ist diese Substanz neu?
- ist diese Substanz erhältlich (intern oder kommerziell)?
- welche Substanzeigenschaften sind dazu bekannt? Zum Beispiel biologische Prüfdaten, Toxizität, physikalische Daten, administrative Daten.
- welche ähnliche Substanzen gibt es?
- welche Anwendungseigenschaften sind auf Grund der Struktur zu erwarten?
- wie kann die Substanz hergestellt werden?

Bei der Beantwortung dieser Fragen wird eine Vielzahl von EDV-Mitteln eingesetzt. Diese Systeme lassen sich klassieren als:

- *Informationssysteme*
- *Datenbanken mit öffentlichen (publizierten) Strukturen und Daten*
  Datenbanken von Chemical Abstracts, Beilstein und anderen)
- *Datenbanken mit firmeninternen Substanzen*
  (diese enthalten alle synthetisierten Produkte, Zwischenprodukte und Prüfpräparate, sowie deren administrative und ausgewählte physikalische Daten)
- *Datenbanken mit firmeninternen Prüfdaten*
  (beispielsweise biologische Prüfdaten der Divisionen Agro und Pharma)
- *Datenbanken mit öffentlichen (publizierten) chemischen Reaktionen*
  (hier gibt es eine Reihe von Datenbanken, welche die Information aus den klassischen Kompendien des synthetisch arbeitenden Chemikers enthalten)

- *Systeme für Interpretation, Simulation und Design*
- *Statistische Methoden*
  (Versuchsplanung und -auswertung)
- *Simulation und Voraussage von Stoffeigenschaften und Wirkungen*
  Versuch, biologische Wirkungen und Materialeigenschaften mit Hilfe des sogenannten Molecular Modeling vorauszusagen)
- *Computer-unterstütztes Design komplexer chemischer Synthesen*
  (Expertensystem)

- *Allgemeine Arbeitsmittel*
- *Dokument- und Bürosysteme*
  (All-In-1, ALIS und verschiedene PC-Software)
- *Kommunikation-Software*
  Übermitteln von Electronic Mail oder für den Zugriff auf entfernte Hostrechner)
- *Graphik, Tabellenverarbeitung etc.*
  (PC-Programme für Präsentationsgraphik und Spreadsheets)

Die in den Informationssystemen zu hantierende Informationsmenge ist oft erheblich; beispielsweise enthalten die internen Datenbanken Daten zu mehr als einer halben Million chemischer Substanzen. Öffentliche Datenbanken wie zum Beispiel Chemical Abstracts umfassen grössenordnungsmässig 10 Millionen chemische Verbindungen.

Charakteristisch für die Arbeitsweise des Forschungschemikers ist, dass er die Antwort auf diese Fragen *schnell*, das heisst innerhalb weniger Minuten, auf seinem Schreibtisch vorfinden möchte, dass die Fragestellung oft *unklar* ist und erst im Lauf der Suche iterativ geklärt wird, und dass er die *Kontrolle über seine Arbeitsmittel* (einschliesslich der Informationsbeschaffung) haben möchte. Aus diesem Grunde vermeidet er oft den Weg zum Spezialisten in einer Service-Stelle und greift statt dessen zum «do-it-yourself»-Verfahren.

In den letzten Jahren haben wir eine stark zunehmende Benutzung von Informations- und Modelliersystemen durch Nicht-Spezialisten zu verzeichnen gehabt. Als Beispiel kann hier die Entwicklung der Benutzungsfrequenz unseres firmeninternen Struktur-Datenbanksystems durch Endbenutzer dienen *(Abb. 2)*. Es gibt bei Ciba-Geigy (Schweiz) zirka 1300 Chemiker und Pharmakologen, von denen etwa die Hälfte registrierte Benutzer des zentralen Struktur-Datenbanksystems sind. Die Nutzungsfrequenz liegt heute bei etwa 24 000 Sessions pro Jahr, wobei jede dieser Sessions typischerweise 15–30 Minuten dauert und mehrere Suchen enthält.

Diese starke Zunahme der Benutzung ist auf mehrere Faktoren zurückzuführen: Erstens die zunehmende Akzeptanz der Computer besonders durch die jüngeren Mitarbeiter, ferner die fallenden Preise der EDV-Geräte und dadurch mögliche EDV-Ausrüstung jedes Chemiker-Arbeitsplatzes, und schliesslich auch die Verwendung von Benutzeroberflächen, die stark an die natürliche Sprache des Chemikers, die Strukturzeichnung, angelehnt sind. Noch vor 10–15 Jahren waren in vielen Firmen der chemischen Industrie Datenbanken in Gebrauch, in denen Strukturen in Form von speziellen Notationen abgelegt waren und auch so recherchiert werden mussten *(Abb. 3)*. Ein Laborchemiker als gelegentlicher Benutzer eines Informationssystems ist im allgemeinen nicht in der Lage, mit derartigen Notationen umzugehen, kann aber Fragestellungen in Form

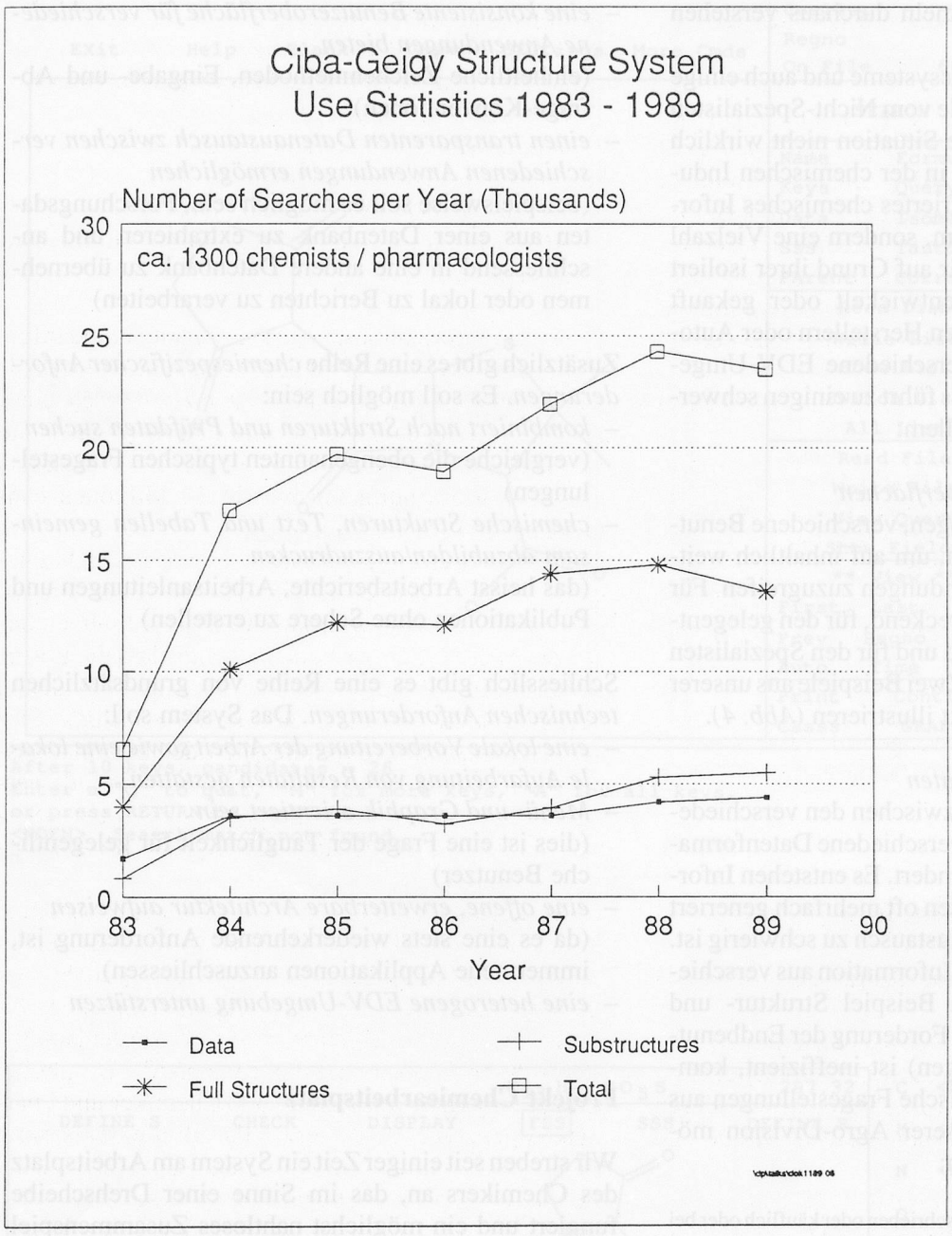


Abb. 2

Notations and Structures

Wiswesser Line Notation:

T45 ANV EST F F GVQ C- BTSVNVTJ

Chemical Structure

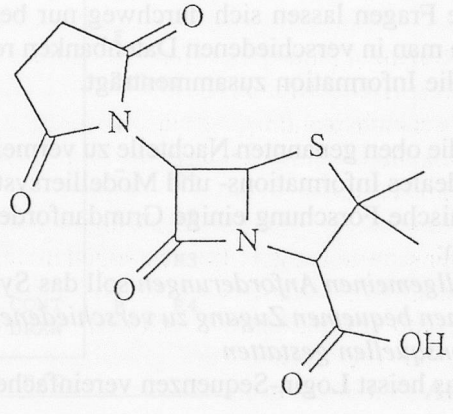


Abb. 3

von chemischen Strukturformeln durchaus verstehen und hantieren.
Obwohl Chemie-Informationssysteme und auch einige Modelliersysteme mittlerweile vom Nicht-Spezialisten gut akzeptiert werden, ist die Situation nicht wirklich befriedigend. Was wir heute in der chemischen Industrie vorfinden, ist kein integriertes chemisches Informations- und Modelliersystem, sondern eine Vielzahl einzelner Systeme, die primär auf Grund ihrer isoliert betrachteten Funktionaliät entwickelt oder gekauft wurden, die von verschiedenen Herstellern oder Autoren stammen und die auf verschiedene EDV-Umgebungen ausgerichtet sind. Dies führt zu einigen schwerwiegenden Nachteilen, vor allem:

- *Verschiedenen Benutzeroberflächen*
  Der Benutzer wird gezwungen, verschiedene Benutzeroberflächen zu erlernen, um auf inhaltlich weitgehend äquivalente Anwendungen zuzugreifen. Für den Neuling ist dies abschreckend, für den gelegentlichen Benutzer verwirrend und für den Spezialisten eine Zeitverschwendung. Zwei Beispiele aus unserer Praxis mögen diesen Punkt illustrieren (*Abb. 4*).
- *Inkompatiblen Datenformaten*
  Der Austausch von Daten zwischen den verschiedenen Systemen wird durch verschiedene Datenformate erschwert oder gar verhindert. Es entstehen Informationsinseln. Daten werden oft mehrfach generiert und eingegeben, weil ihr Austausch zu schwierig ist. Das Zusammenführen von Information aus verschiedenen Quellen, wie zum Beispiel Struktur- und Prüfdaten (eine oft gehörte Forderung der Endbenutzer in den F&E-Abteilungen) ist ineffizient, komplex und teuer. Einige typische Fragestellungen aus den Forschungslabors unserer Agro-Division mögen diesen Punkt erläutern:

- Ist Substanz X in der Literatur beschrieben oder käuflich oder bei CG vorhanden?
- Welche Substanzen der Klasse Sulphonylharnstoffe stammen vom Chemiker X?
- Welche Nicht-Triazole haben im Test X eine Bewertung von mindestens y erhalten?
- Welche Metaboliten wurden bei Substanz X isoliert und charakterisiert?

Diese Fragen lassen sich durchweg nur beantworten, wenn man in verschiedenen Datenbanken recherchiert und die Information zusammenträgt.

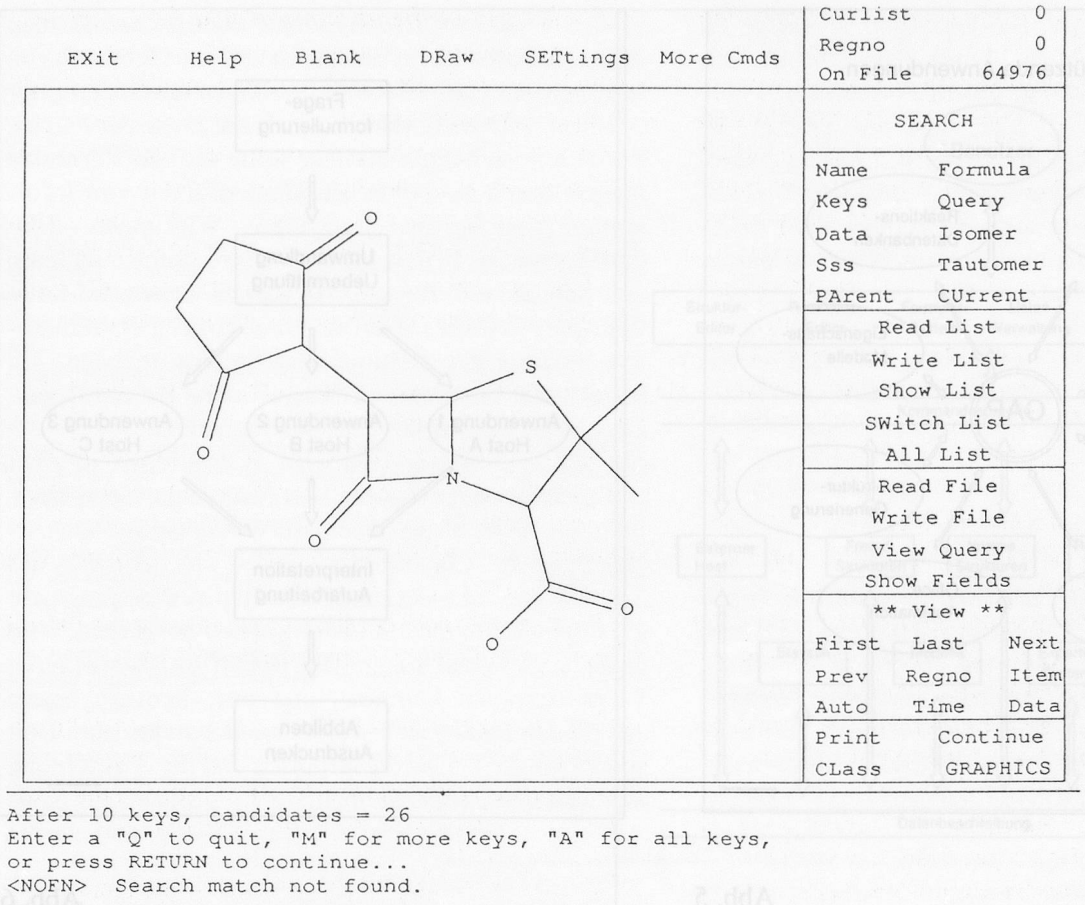
Um die oben genannten Nachteile zu vermeiden, sollte ein ideales Informations- und Modelliersystem für die chemische Forschung einige Grundanforderungen erfüllen:
An *allgemeinen Anforderungen* soll das System:
- *einen bequemen Zugang zu verschiedenen Informationsquellen gestatten*
  (das heisst Login-Sequenzen vereinfachen, etc.)
- *eine konsistente Benutzeroberfläche für verschiedene Anwendungen bieten*
  (einheitliche Zeichenmethoden, Eingabe- und Abfrage-Konventionen)
- *einen transparenten Datenaustausch zwischen verschiedenen Anwendungen ermöglichen*
  (beispielsweise soll es möglich sein, Forschungsdaten aus einer Datenbank zu extrahieren und anschliessend in eine andere Datenbank zu übernehmen oder lokal zu Berichten zu verarbeiten)

Zusätzlich gibt es eine Reihe *chemiespezifischer Anforderungen*. Es soll möglich sein:
- *kombiniert nach Strukturen und Prüfdaten suchen*
  (vergleiche die obengenannten typischen Fragestellungen)
- *chemische Strukturen, Text und Tabellen gemeinsam abzubilden/auszudrucken*
  (das heisst Arbeitsberichte, Arbeitsanleitungen und Publikationen ohne Schere zu erstellen)

Schliesslich gibt es eine Reihe von grundsätzlichen *technischen Anforderungen*. Das System soll:
- *eine lokale Vorbereitung der Arbeit sowie eine lokale Aufarbeitung von Resultaten gestatten*
- *Menü- und Graphik-orientiert sein*
  (dies ist eine Frage der Tauglichkeit für gelegentliche Benutzer)
- *eine offene, erweiterbare Architektur aufweisen*
  (da es eine stets wiederkehrende Anforderung ist, immer neue Applikationen anzuschliessen)
- *eine heterogene EDV-Umgebung unterstützen*

Projekt Chemiearbeitsplatz

Wir streben seit einiger Zeit ein System am Arbeitsplatz des Chemikers an, das im Sinne einer Drehscheibe fungiert und ein möglichst nahtloses Zusammenspiel von verschiedenartigen, aus verschiedenen Quellen stammenden und auf verschiedenartiger Hardware laufenden Applikationen erlaubt (*Abb. 5*).
In diesem Diagramm sind noch einmal einige der Anwendungen eingezeichnet, die über diese Drehscheibe erreichbar sein sollen: Bürosysteme, Datenbanken mit Prüfdaten, Strukturdatenbanken, Reaktionsdatenbanken, Syntheseplanungsprogramme und andere eher spezialisierte Anwendungen.
Unter «nahtlosem Zusammenspiel» verstehen wir dabei, dass sich die einzelnen Applikationen unter einer gemeinsamen, soweit möglich uniformen Benutzeroberfläche präsentieren, und ihre Daten in einer für den Benutzer transparenten Art und Weise austauschen – soweit das eben technisch möglich ist.
Ein solches System ist in *Abb. 6* skizziert.


EXit Help Blank DRaw SETtings More Cmds
Curlist 0
Regno 0
On File 64976
SEARCH
Name Formula
Keys Query
Data Isomer
Sss Tautomer
PArent CUrrent
Read List
Write List
Show List
SWitch List
All List
Read File
Write File
View Query
Show Fields
** View **
First Last Next
Prev Regno Item
Auto Time Data
Print Continue
CLass GRAPHICS
After 10 keys, candidates = 26
Enter a "Q" to quit, "M" for more keys, "A" for all keys,
or press RETURN to continue...
<NOFN> Search match not found.

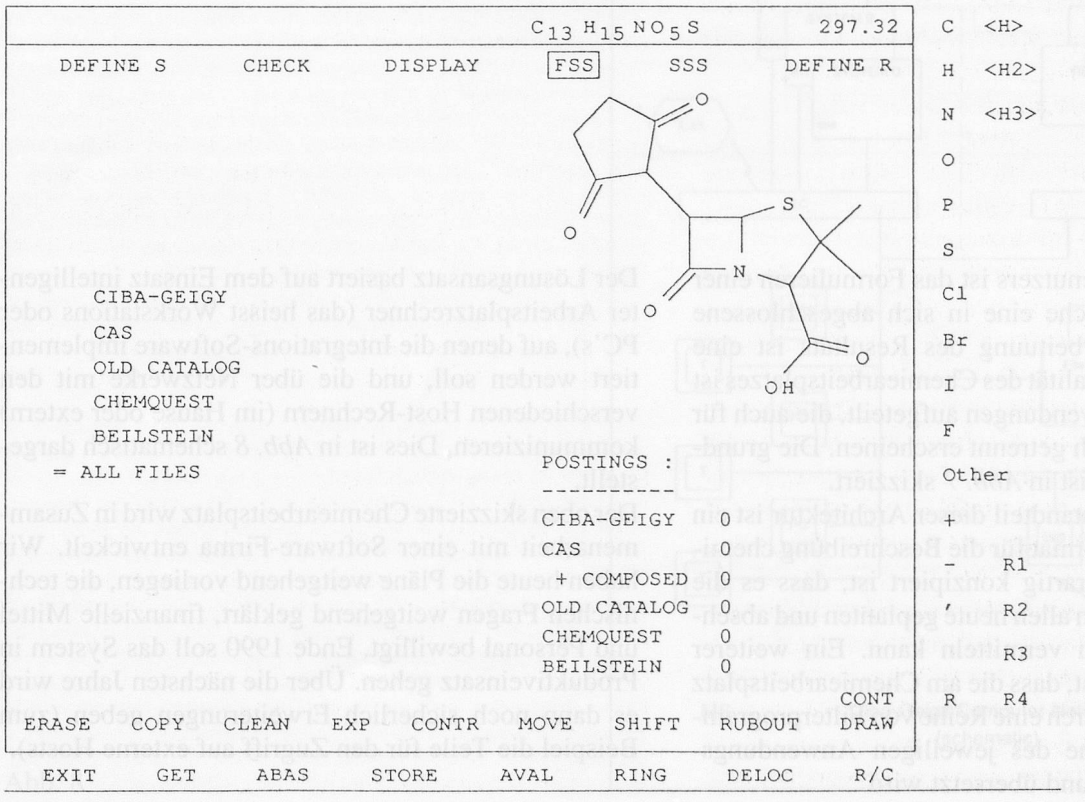

C13 H15 NO5 S 297.32
DEFINE S CHECK DISPLAY FSS SSS DEFINE R
CIBA-GEIGY
CAS
OLD CATALOG
CHEMQUEST
BEILSTEIN
= ALL FILES
POSTINGS :
CIBA-GEIGY 0
CAS 0
+ COMPOSED 0
OLD CATALOG 0
CHEMQUEST 0
BEILSTEIN 0
C <H>
H <H2>
N <H3>
O
P
S
Cl
Br
I
F
Other
+
- R1
R2
R3
R R4
ERASE COPY CLEAN EXP CONTR MOVE SHIFT RUBOUT CONT DRAW
EXIT GET ABAS STORE AVAL RING DELOC R/C

Abb. 4

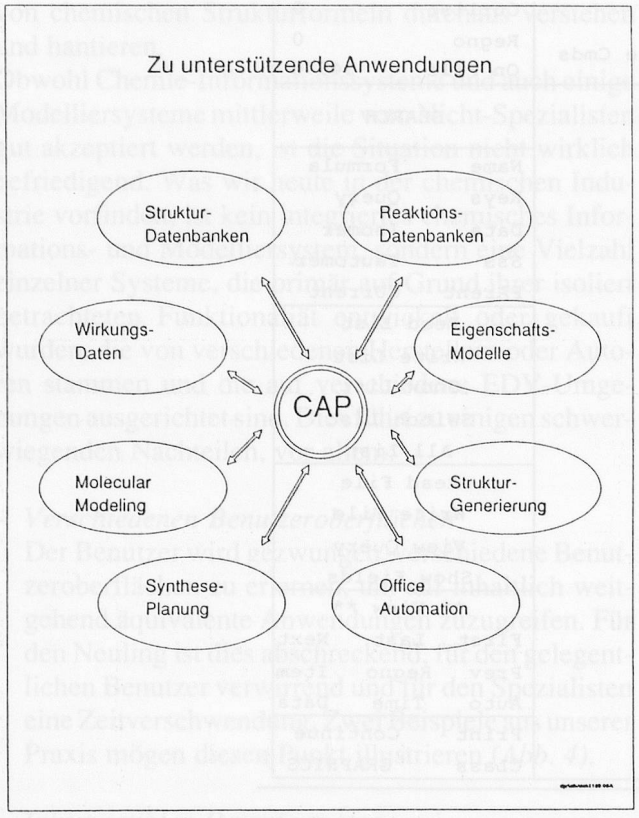


Abb. 5

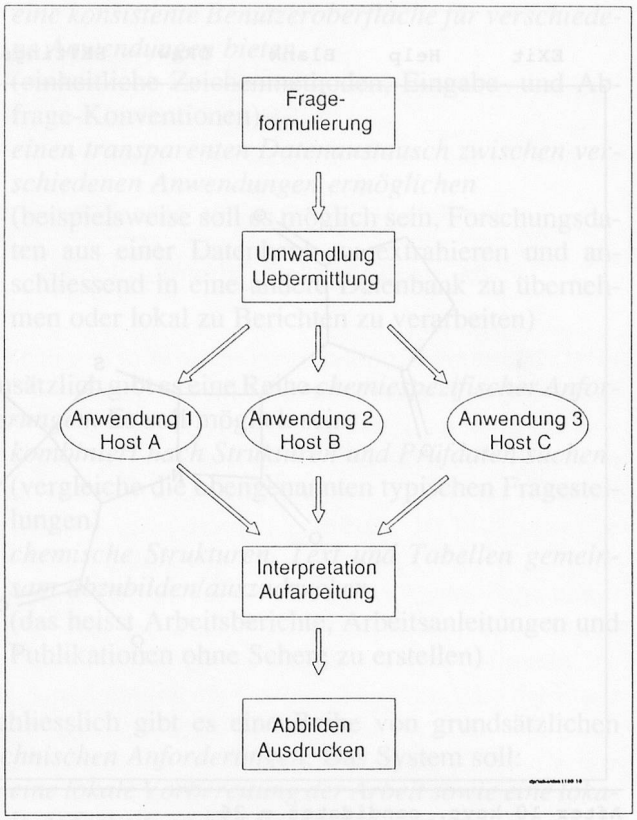


Abb. 6

Aus der Sicht des Benutzers ist das Formulieren einer strukturellen Recherche eine in sich abgeschlossene Tätigkeit, die Verarbeituung des Resultats ist eine andere. Die Funktionalität des Chemiearbeitsplatzes ist deshalb in Einzelanwendungen aufgeteilt, die auch für den Benutzer deutlich getrennt erscheinen. Die grundlegende Architektur ist in *Abb. 7* skizziert.

Ein wesentlicher Bestandteil dieser Architektur ist ein verallgemeinertes Format für die Beschreibung chemischer Daten, das derartig konzipiert ist, dass es die Information zwischen allen heute geplanten und absehbaren Anwendungen vermitteln kann. Ein weiterer wesentlicher Punkt ist, dass die am Chemiearbeitsplatz vorbereitete Frage durch eine Reihe von Filterprogrammen in die Sprache des jeweiligen Anwendungssystems im Hintergrund übersetzt wird.

Der Lösungsansatz basiert auf dem Einsatz intelligenter Arbeitsplatzrechner (das heisst Workstations oder PC's), auf denen die Integrations-Software implementiert werden soll, und die über Netzwerke mit den verschiedenen Host-Rechnern (im Hause oder extern) kommunizieren. Dies ist in *Abb. 8* schematisch dargestellt.

Der oben skizzierte Chemiearbeitsplatz wird in Zusammenarbeit mit einer Software-Firma entwickelt. Wir haben heute die Pläne weitgehend vorliegen, die technischen Fragen weitgehend geklärt, finanzielle Mittel und Personal bewilligt. Ende 1990 soll das System in Produktiveinsatz gehen. Über die nächsten Jahre wird es dann noch sicherlich Erweiterungen geben (zum Beispiel die Teile für den Zugriff auf externe Hosts).

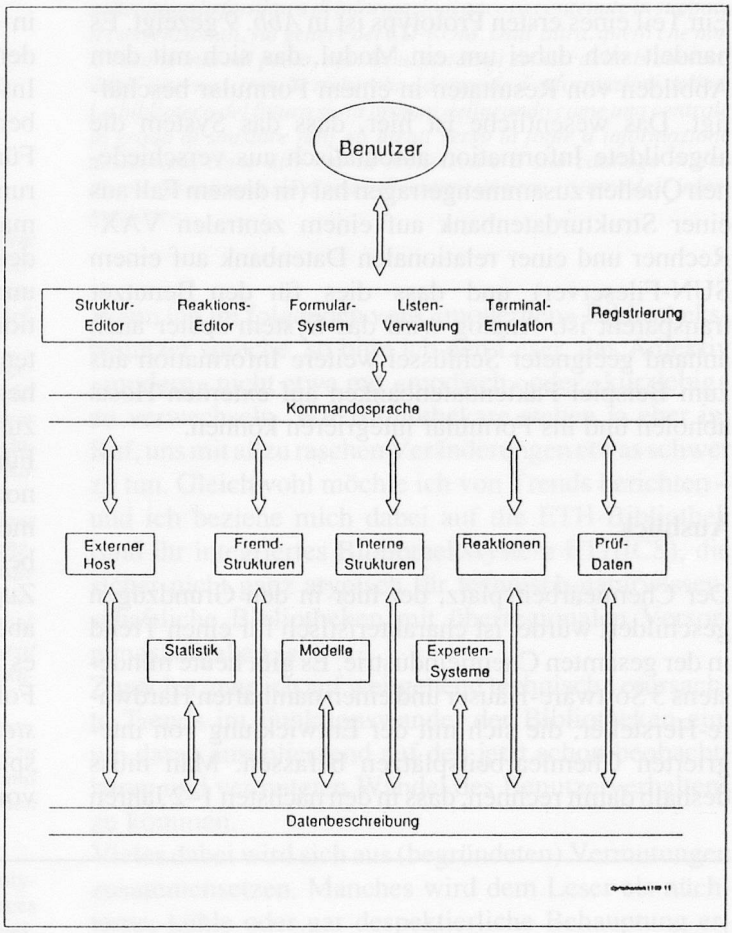

Benutzer
Struktur-Editor
Reaktions-Editor
Formular-System
Listen-Verwaltung
Terminal-Emulation
Registrierung
Kommandosprache
Externer Host
Fremd-Strukturen
Interne Strukturen
Reaktionen
Prüf-Daten
Statistik
Modelle
Experten-Systeme
Datenbeschreibung

Abb. 7

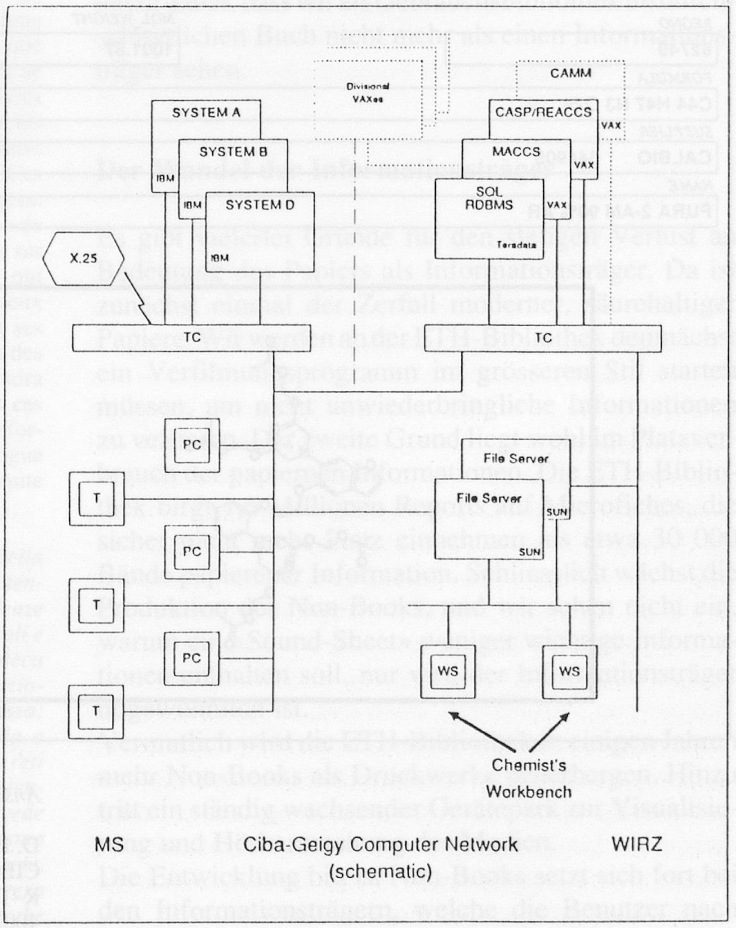

Divisional VAXes
CAMM
SYSTEM A
CASP/REACCS
VAX
SYSTEM B
MACCS
VAX
IBM
IBM
SYSTEM D
SQL RDBMS
VAX
IBM
Teradata
X.25
TC
TC
PC
File Server
T
File Server
SUN
PC
SUN
T
PC
WS
WS
T
Chemist's Workbench
MS
Ciba-Geigy Computer Network (schematic)
WIRZ

Abb. 8

Ein Teil eines ersten Prototyps ist in *Abb. 9* gezeigt. Es handelt sich dabei um ein Modul, das sich mit dem Abbilden von Resultaten in einem Formular beschäftigt. Das wesentliche ist hier, dass das System die abgebildete Information automatisch aus verschiedenen Quellen zusammengetragen hat (in diesem Fall aus einer Strukturdatenbank auf einem zentralen VAX-Rechner und einer relationalen Datenbank auf einem SUN-Fileserver) und dass dies für den Benutzer transparent ist. Analog wird das System später auch anhand geeigneter Schlüssel weitere Information aus zum Beispiel Faktendatenbanken auf externen Hosts abholen und ins Formular integrieren können.

Ausblick

Der Chemiearbeitsplatz, der hier in den Grundzügen geschildert wurde, ist charakteristisch für einen Trend in der gesamten Chemieindustrie. Es gibt heute mindestens 3 Software-Häuser und einen namhaften Hardware-Hersteller, die sich mit der Entwicklung von integrierten Chemiearbeitsplätzen befassen. Man muss deshalb damit rechnen, dass in den nächsten 1–2 Jahren in den F+E-Abteilungen vieler chemischer Firmen derartige Software im Einsatz ist und den Gebrauch von Informations- und Modelliersystemen durch den Endbenutzer noch mehr erleichtert als das heute der Fall ist. Für den Forschungschemiker sollte dies zu Verbesserungen durch leichteres Zusammenführen von Information (zum Beispiel Strukturen – Wirkungen – Modelle) sowie zu Effizienzsteigerungen durch leichteren und schnelleren Zugang zu verschiedenen Informationsquellen führen. Man muss auch mit einer vermehrten Nutzung der Informationsangebote rechnen, das heisst unter anderem, erhöhten Kosten für die Benutzung von Datenbanken auf externen Hosts.

Für den I+D-Spezialisten wird es zweifellos zu einer noch stärkeren Entlastung von Routineanfragen kommen. Da jedoch die neuen EDV-Werkzeuge am Arbeitsplatz des Chemikers zwar den Mechanismus des Zugriffs auf die Informationsquellen verbessern, nicht aber die inhaltlichen Schwierigkeiten beseitigen, wird es auch zu einem steigenden Bedarf an komplexeren Folge-Anfragen kommen, und vor allem zu einem *steigenden Bedarf an inhaltlicher Beratung*, zum Beispiel über die Erfassungskriterien und die Ausrichtung von einzelnen Datenbanken.

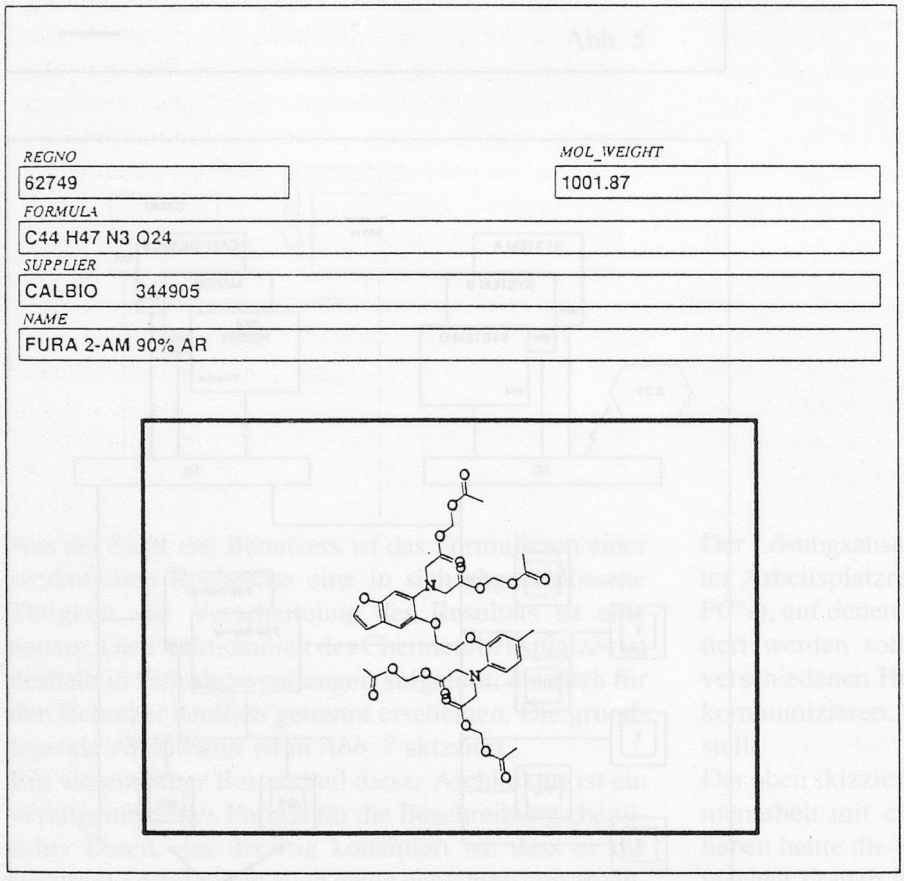


Abb. 9

Anschrift des Autors:

D. Poppinger
CIBA-GEIGY AG
R–1045.115
4002 Basel