



NovaMechanics

Cheminformatics & Nanoinformatics Excellence

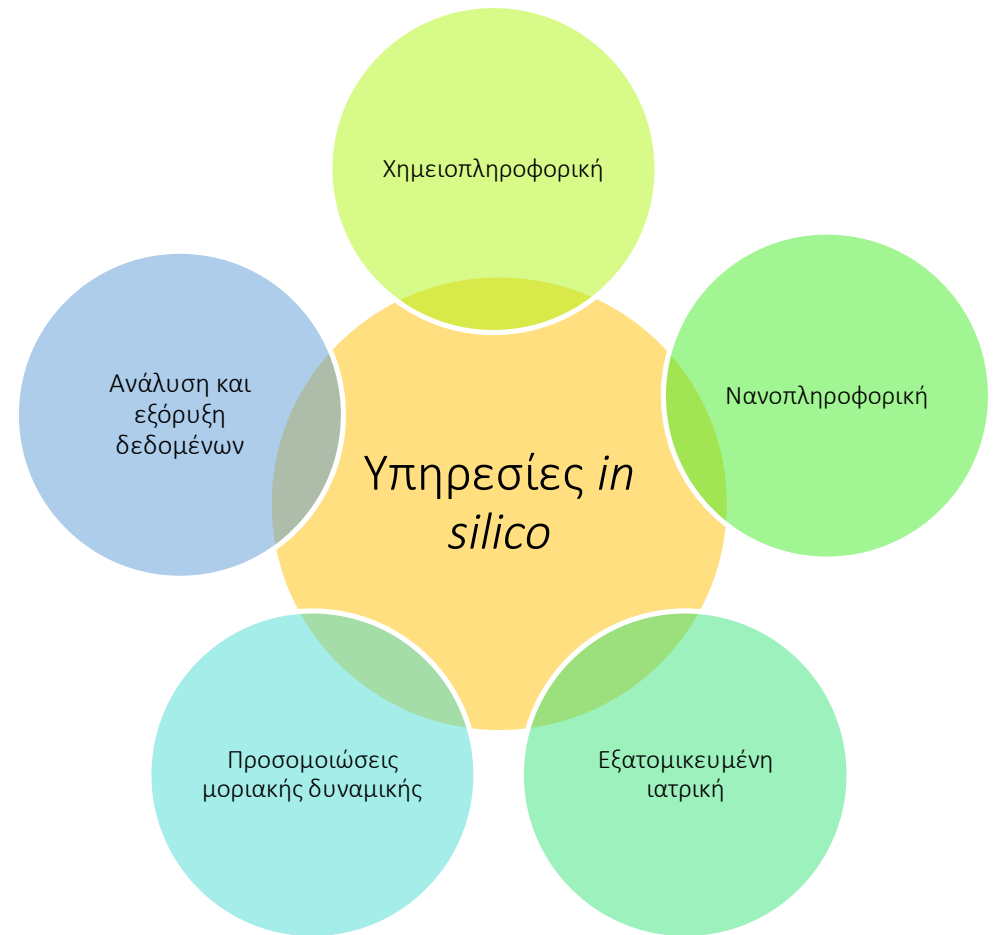
NovaMechanics Ltd

Αντρέας Αφαντίτης

Πειραιάς, 28 Ιουλίου 2022

Σχετικά με εμάς

- Δραστηριότητα σε Κύπρο και Ελλάδα
- 18 άτομα (14 κάτοχοι διδακτορικού)
- > 30 επιχορηγούμενα προγράμματα έρευνας και ανάπτυξης (R&D)
- > 90 Επιστημονικές δημοσιεύσεις
- Ανάπτυξη προϊόντων σε ένα εύρος επιστημονικών κλάδων




NanoSolveIT

NanoSolveIT Consortium

- 26 Εταίροι
- 16 Ευρωπαίοι (12 χώρες)
- 10 Διεθνή ιδρύματα (5 χώρες)

Project Information 

NanoSolveIT
Grant agreement ID: 814572




Start date 1 January 2019 **End date** 28 February 2023

Funded under
H2020-EU.2.1.3.
H2020-EU.2.1.2.

Overall budget
€ 7 485 194,50

EU contribution
€ 6 098 527,50



Coordinated by
NOVAMECHANICS LIMITED
Cyprus



NANOSOLVEIT CONSORTIUM



CompSafeNano

CompSafeNano Consortium

- 22 Εταίροι
- 16 Ευρωπαϊκά ιδρύματα/ΜΜΕ
- 6 Διεθνή ιδρύματα

Project Information

CompSafeNano

Grant agreement ID: 101008099

Status

Grant agreement signed

Start date

1 June 2021

End date

31 May 2025

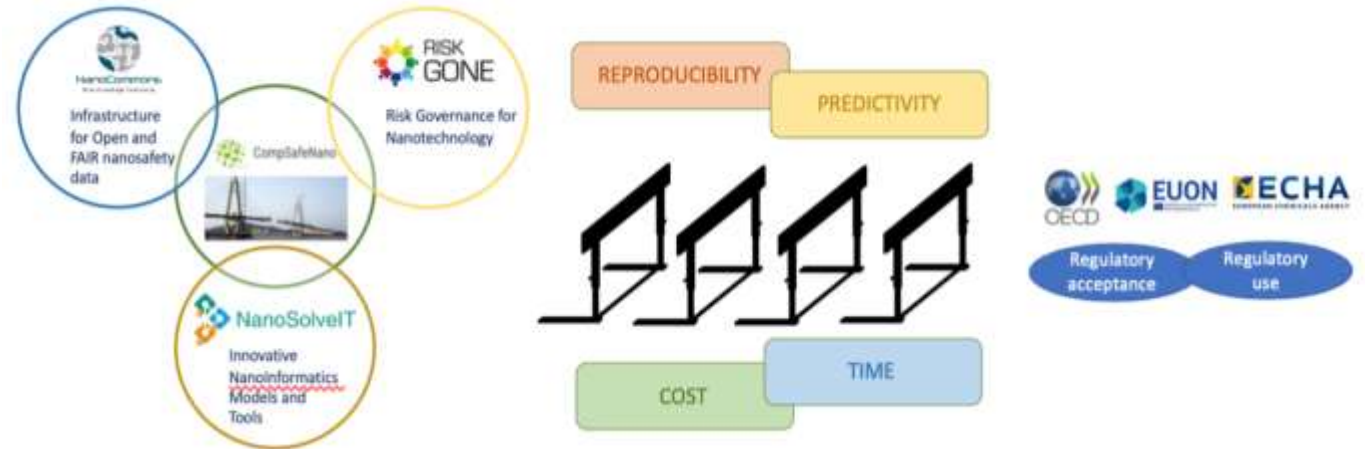
Funded under
H2020-EU.1.3.3.

Overall budget
€ 2 093 000

EU contribution
€ 1 748 000

Coordinated by
NOVAMECHANICS LIMITED

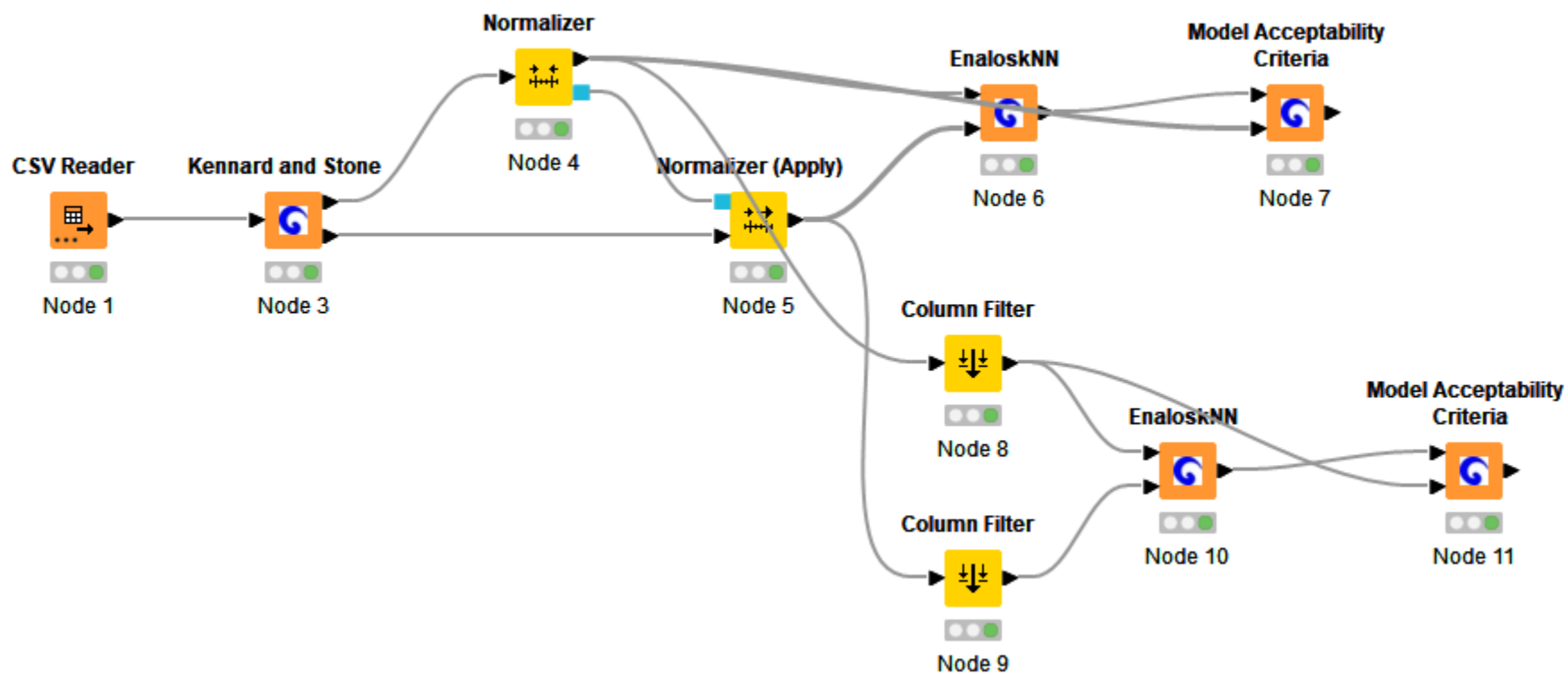
Cyprus



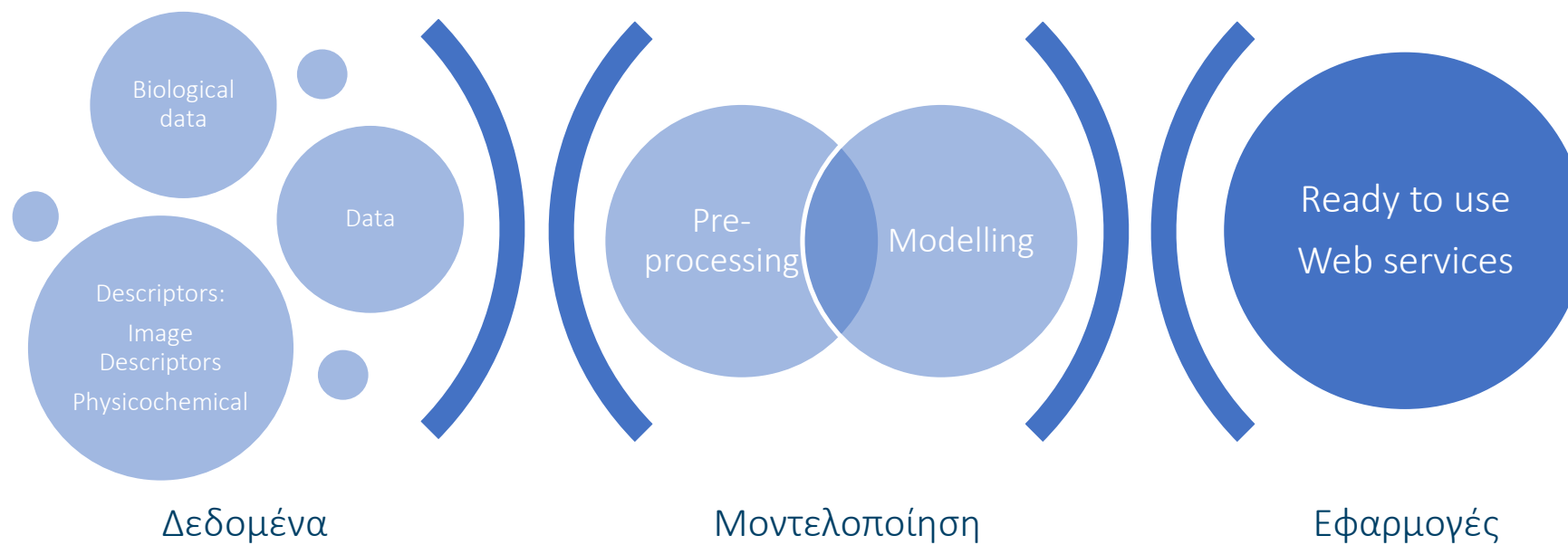
Προϊόντα λογισμικού



Ανάπτυξη μοντέλων μέσω KNIME



Διάδοση των μοντέλων



Enalos Cloud Platform

Enalos Cloud Platform
Democratizing Access to Data Driven, Machine Learning & Artificial Intelligence Models

Categories: [All services](#) [Cheminformatics](#) [Nanoinformatics](#) [Image Analysis](#) [Exposure models](#) [Risk kinetics models](#)

Menu

- Home
- Services
- Licensing system
- About
- Contact

Projects

- EnalosWebApps
- NanoCommons
- NanoSolveIT
- RiskONE
- DIAGONAL
- SABYDOMA
- Scenarios
- CY-Nephron

NanoXtract image analysis tool

NanoXtract is a unique online tool for the calculation of all image descriptors based on Transmission Electron Microscopy (TEM) images of nanomaterials.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

NinChi: InChi generation for nanomaterials

This tool enables the generation of NinChi for a nanomaterial (NM) of preference, assuming that the NM is specified following the inside-to-outside structure approach.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

MS3bD zeta potential model

This web service provides the functionality to predict the zeta-potential in water of individual or a set of engineered nanomaterials based on physicochemical and molecular properties.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

Image nanodescriptors zeta-potential model

A MN/read-across model for the prediction of nanomaterials (NMs) zeta-potential based on the NM type of core, main elongation and medium's pH value.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

Safe-by-design tool for functionalised NMs

Two predictive QNAR/ANN models for the assessment of decorated multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) biological and toxicological profile.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

NanoCommons risk assessment tool

This web application, hosted and implemented within Enalos Cloud Platform, estimates the risk of triggering AOP (Lung Fibrosis) in mice due to exposure to 20nm TiO₂ engineered nanoparticles.

[Visit service](#) [Relevant publication](#) [Documentation](#) [API](#)

<http://www.enaloscloud.novamechanics.com/>

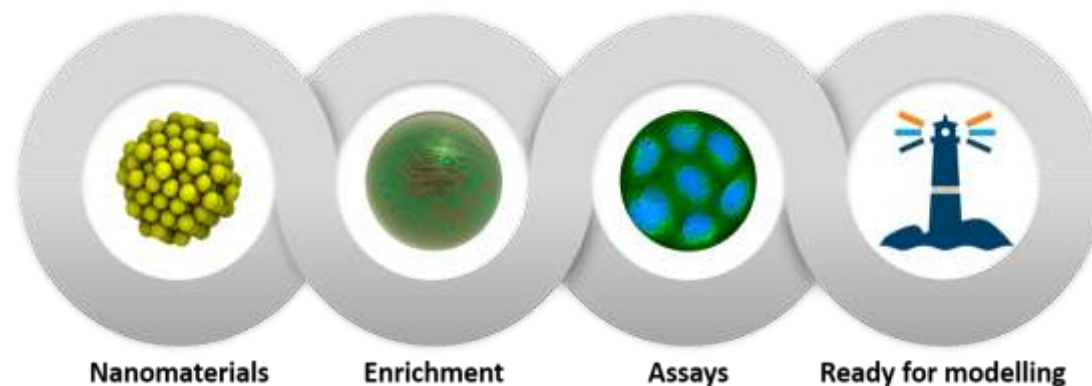


Διάδοση δεδομένων

- Εκδημοκρατισμός των δεδομένων στο πεδίο των νανο-επιστημών
- Δεδομένα σε μορφή πινάκων –ιδανικά για ανάπτυξη μοντέλων



Βάση δεδομένων NanoPharos



NanoPharos Create/Modify Computational Property


Modify: 583 - VII O atoms surface

Title	Content
583 - VII O atoms surface	VII O atoms surface
582 - VII O atoms core	Avg. length of force vector surface tangent component for O atoms in surface region
581 - VII O atoms all	
580 - VII Me atoms surface	
579 - VII Me atoms core	
578 - VII Me atoms all	
577 - VII atoms surface	
576 - VII atoms core	
575 - VII atoms all	
574 - v_l_ O atoms surface	
573 - v_l_ O atoms core	
572 - v_l_ O atoms all	
571 - v_l_ Me atoms surface	

Datatype of Value: 1 - Number



Βάση δεδομένων NanoPharos

 **NanoPharos Datasets' Query**

ID	Dataset
1	Cytotoxicity data for 14 metal oxide nanoparticles
2	A collection of 34 curated transcriptomics datasets for toxicogenomic assessment of 12 engineered nanomaterials
3	Zeta potential dataset for 69 engineered nanomaterials
4	Solubility data of C60 fullerene in 124 solvents
5	Ecotoxicity (Daphnia Magna) dataset of 11 nanomaterials
6	Metal oxide toxicity dataset utilizing theoretical and experimental descriptors
7	Computational data for the toxicity and bioactivity assessment of 83 functionalized MWCNTs
8	Cell membrane damage assessment of 42 metal oxide nanoparticles
9	Toxicity data of 30 copper nanoparticles against Escherichia coli
10	Surface adsorption dataset of 28 probe compounds
11	Periodic table-based data for the cytotoxicity assessment of 17 metal oxide nanoparticles
12	Photo-induced cytotoxicity of 17 metal oxide nanoparticles to Escherichia coli
13	Cytotoxic effects in Escherichia coli of 16 metal oxide nanoparticles
14	Cytotoxicity dataset of 25 metal (hydr)oxide ENMs

Description

Curated dataset (retrieved from S2Nano database - data produced in: doi.org/10.1021/nn3010087) containing 14 distinct metal oxide (MexOy) nanoparticles (NPs), including 15 physicochemical, structural and assay-related descriptors and 62 atomistic computational descriptors (in total 494 data points - License: [CC-BY 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).) and exploited to produce a robust and validated in silico model for prediction of NP cytotoxicity using Isalos Analytics Platform. More information about the data can be found in: <https://doi.org/10.3390/nano10102017>. Access the model through NanoSolveIT Cloud Platform: <https://cellviability.cloud.nanosolveit.eu/>

<https://db.nanopharos.eu/Queries/Datasets.zul>





NovaMechanics

Cheminformatics & Nanoinformatics Excellence

Isalos Analytics Platform

Μια σουίτα λογισμικού μηχανικής μάθησης

Δήμητρα-Δανάη Βάρσου, Ανδρέας Τσουμάνης, Μενέλαος Αρτεμίου,
Αναστάσιος Παπαδιαμάντης, Γεωργία Μελαγράκη, Αντρέας Αφαντίτης

Κύρια χαρακτηριστικά

- Πρόσβαση σε μια πληθώρα μεθοδολογιών μηχανικής μάθησης (machine learning) για την ανάπτυξη μοντέλων πρόβλεψης (predictive modelling)
- Πλήρες γραφικό περιβάλλον
- Αντικατάσταση του κώδικα με εργαλεία και δυνατότητες που χρησιμοποιούν -σχεδόν ενστικτωδώς- όλοι οι χρήστες/-τριες Η/Υ καθημερινά
 - Μενού, καρτέλες, κουμπιά και λογιστικά φύλλα
- Διαχείριση και ανάλυση δεδομένων, και ανάπτυξη μοντέλων από μη-προγραμματιστές
 - Πρόβλεψη ιδιοτήτων υλικών, στατιστική ανάλυση πειραμάτων, κοινωνικές επιστήμες, ρυθμιστικά/νομοθετικά όργανα

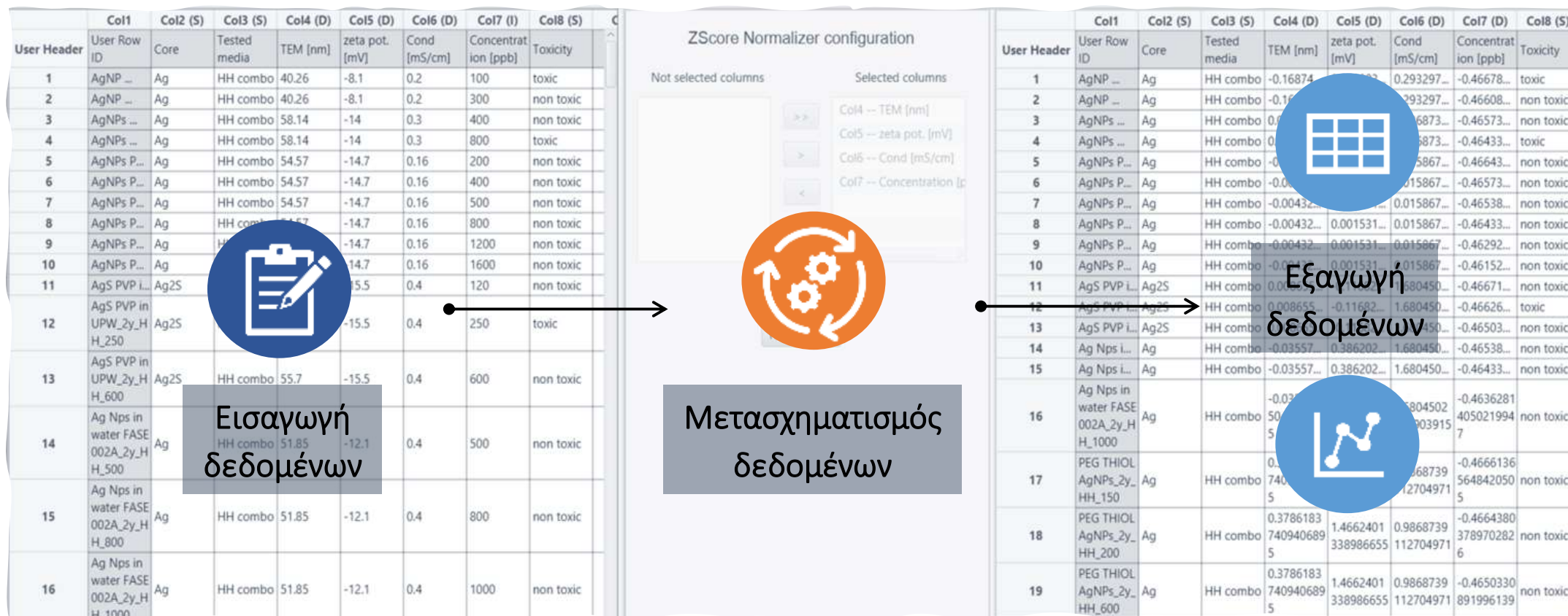


Ανάπτυξη διαγράμματος ροής

- Τα δεδομένα μεταβαίνουν μεταξύ των διαφορετικών καρτελών (tabs)
- Κάθε καρτέλα ενέχει το ρόλο ενός κόμβου (node) στον οποίο εισέρχονται δεδομένα, μετασχηματίζονται μέσω μίας συνάρτησης και στη συνέχεια εξέρχονται σε νέα μορφή
- Τα δεδομένα εξόδου, αποτελούν την είσοδο σε μια νέα καρτέλα-κόμβο



Λειτουργία καρτελών



Διαχείριση δεδομένων

File Edit Data Transformation Analytics Statistics Help

Action

Λογιστικό φύλλο εισαγωγής δεδομένων

	Col1	Col2	Col3	Col4	Col5	Col6	Col7
User Header	User Row ID						
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							
10							
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							

Λογιστικό φύλλο εξαγωγής δεδομένων

	Col1	Col2	Col3	Col4	Col5	Col6	Col7	Col
User Header	User Row ID							
1								
2								
3								
4								
5								
6								
7								
8								
9								
10								
11								
12								
13								
14								
15								
16								
17								
18								

Action +



Διαχείριση δεδομένων

File Edit Data Transformation Analytics Statistics Help

Action

Επιλογή και εφαρμογή συνάρτησης

Εισαγωγή δεδομένων

Αποτελέσματα

Χειροκίνητα/Copy-paste

Από άλλη καρτέλα

Από αρχείο

Fill Missing Column(s) Values

Select Method: Manual

Selected List:

- Col2 -- Y
- Col3 -- X1
- Col5 -- X2
- Col4 -- X3

Reconfigure

User Header	Col1	Col2 (I)	Col3 (I)	Col4 (I)	Col5 (D)	Col6	Col7
User Row ID	Y	X1	X2	X3			
1	31460000	22	94.4	2			
2	34320000	24	91.2	1			
3	27500000		79.76	3			
4		24		4			
5	30800000	24	106.16				
6	22000000	16	70.96	4			
7	29260000	16	99.2	4			
8	26180000	16	77.84	3			
9	24970000	24	95.44	6			
10	22660000	24	88	6			
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
--							

User Header	Col1	Col2 (I)	Col3 (I)	Col4 (I)	Col5 (D)	Col6	Col7
User Row ID	Y	X1	X3	X2			
1	31460000	22	2	94.4			
2	34320000	24	1	91.2			
3	27500000	21	3	79.76			
4	27683333	24	4	89.2178			
5	30800000	24	4	106.16			
6	22000000	16	4	70.96			
7	29260000	16	4	99.2			
8	26180000	16	3	77.84			
9	24970000	24	6	95.44			
10	22660000	24	6	88			
11							
12							
13							
14							
15							
16							
17							
18							
19							
--							



Συναρτήσεις

Μετατροπή δεδομένων (Data transformation)

- Κανονικοποίηση δεδομένων
- Φιλτράρισμα στηλών
- Ταξινόμηση δεδομένων
- Αντιμετάθεση πίνακα
- Συμπλήρωση κενών τιμών

Ανάλυση (Analytics)

- Μεθοδολογίες μοντελοποίησης: παλινδρόμηση (regression) και κατηγοριοποίηση (classification)
- k -Nearest Neighbours
- Linear Stochastic Gradient Descent
- Extreme Gradient Boosting
- Multilayer Perceptron
- Radial Basis Function
- Self-Organizing Maps

Στατιστική (Statistics)

- Περιγραφική στατιστική
- Μέτρα αξιοπιστίας μοντέλων παλινδρόμησης & κατηγοριοποίησης
- Πεδίο εφαρμογής



Διαχείριση δεδομένων

The screenshot displays a software interface for data management. At the top, a menu bar includes 'File', 'Edit', 'Data Transformation', 'Analytics', 'Statistics', and 'Help'. Below the menu is an 'Action' button. The main workspace is divided into three sections:

- Εισαγωγή δεδομένων (Data Input):** A table with columns Col1 to Col6. The data is as follows:

User Header	User Row ID	Y	X1	X2	X3	
1	31460000	22	94.4	2		
2	34320000	24	91.2	1		
3	27500000		79.76	3		
4		24		4		
5	30800000	24	106.16			
6	22000000	16	70.96	4		
7	29260000	16	99.2	4		
8	26180000	16	77.84	3		
9	24970000	24	95.44	6		
10	22660000	24	88	6		
- Fill Missing Column(s) Values Configuration:** A central panel titled 'Fill Missing Column(s) Values' with a 'Select Method' dropdown set to 'None'. It features a 'Selection List' and a 'Selected List' containing 'Col2 -- Y', 'Col3 -- X1', 'Col5 -- X3', and 'Col4 -- X2'. A 'Reconfigure' button is at the bottom.
- Αποτελέσματα (Results):** A table showing the output of the configuration, with columns Col1 to Col7. The data is as follows:

User Header	User Row ID	Y	X1	X3	X2		
1	31460000	22	2	94.4			
2	34320000	24	1	91.2			
3	27500000	21	3	79.76			
4	27683333	24	4	89.2178			
5	30800000	24	4	106.16			
6	22000000	16	4	70.96			
7	29260000	16	4	99.2			
8	26180000	16	3	77.84			
9	24970000	24	6	95.44			
10	22660000	24	6	88			

Annotations include a curved arrow pointing from the 'Action' button to the configuration panel, labeled 'Επιλογή και εφαρμογή συνάρτησης' (Selection and application of function), and a straight arrow pointing from the 'Action' button to the bottom of the interface.



Διάγραμμα ροής

Γραφική απεικόνιση ροής δεδομένων

The screenshot displays a software interface with a menu bar (File, Edit, Data Transformation, Analytics, Statistics, Help) and a workflow diagram on the left. The diagram shows a sequence of steps: 'Train data import', 'Modelling', 'Test data import', 'Domain', 'Model application', 'External validation', 'Reliability', and 'Data visualization'. A large arrow points from the 'Train data import' step to a data table below. The table has columns for 'User Header', 'User Row ID', 'Core', 'Charge', 'Tested media', 'TEM [nm]', 'DLS [nm]', 'Concentration [ppb]', and 'Toxicity'. A context menu is open over the 'DLS [nm]' column, with options: 'Import from Spreadsheet', 'Import from file', and 'Clear Spreadsheet'. To the right of the table is a 'ZScore Normalizer configuration' panel with 'Not selected columns' and 'Selected columns' sections. The 'Selected columns' section lists 'Col2 -- DLS [nm]', 'Col3 -- TEM [nm]', and 'Col7 -- Concentration [ppb]'. Below the table is a 'Reconfigure' button. At the bottom of the interface is a 'Καρτέλες' (Cards) section with tabs for 'Train data import', 'Modelling', 'Test data import', 'Model application', 'External validation', 'Domain', and 'Reliability'.

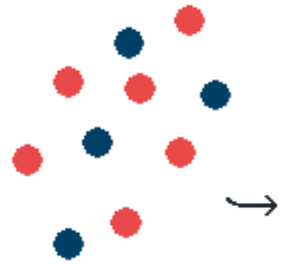
User Header	Col1	Col2 (S)	Col3 (S)	Col4 (S)	Col5 (I)	Col6 (I)	Col7 (D)	Col8 (S)
1	AgNP prom uncoated_pristine_10	Ag	negative	HH combo	61	123		
2	AgNP prom uncoated_pristine_15	Ag	negative	HH combo	61	323		
3	AgNP prom uncoated_pristine_20	Ag	negative	HH combo	61	323	20.0	non toxic
4	AgNP prom uncoated_pristine_30	Ag	negative	HH combo	61	323	30.0	non toxic
5	AgNP prom uncoated_pristine_50	Ag	negative	HH combo	61	323	50.0	toxic

User Header	Col1	Col2 (S)	Col3 (S)	Col4 (S)	Col5 (D)	Col6 (D)	Col7 (D)
1	AgNP prom uncoated_pristine_10	Ag	negative	HH combo	0.3054991 872866874 6	-0.4433577 399741752 7	-0.46224 0501932
2	AgNP prom uncoated_pristine_15	Ag	negative	HH combo	0.3054991 872866874 6	-0.4433577 399741752 7	-0.46222 3948656 7
3	AgNP prom uncoated_pristine_20	Ag	negative	HH combo	0.3054991 872866874 6	-0.4433577 399741752 7	-0.46220 7395380
4	AgNP prom uncoated_pristine_30	Ag	negative	HH combo	0.3054991 872866874 6	-0.4433577 399741752 7	-0.46215 4288828 6
5	AgNP prom uncoated_pristine_50	Ag	negative	HH combo	0.3054991 872866874 6	-0.4433577 399741752 7	-0.46206 8075723

Καρτέλες

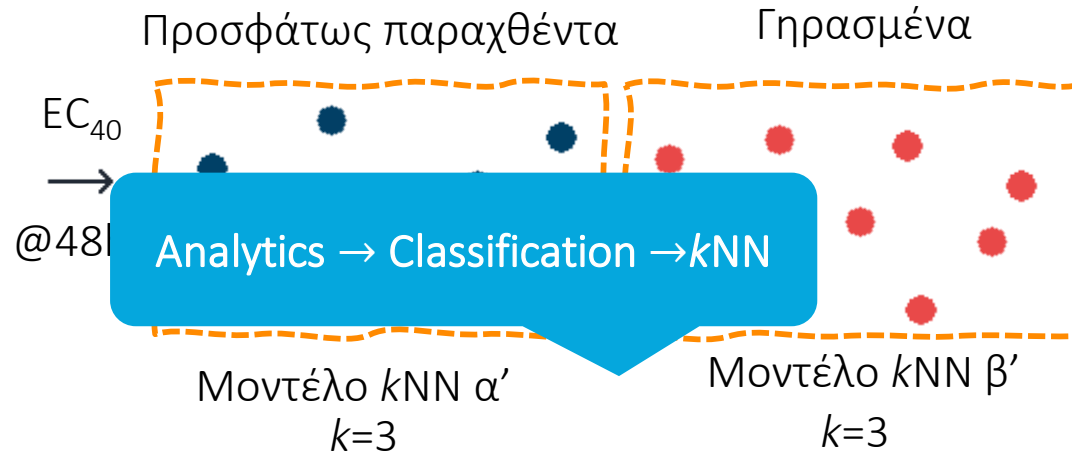


Εφαρμογή στη νανοπληροφορική



11 είδη νανοσωματιδίων
13 γνωστές ιδιότητες

Daphnia Magna



προβλέψεις

?
τοξικό/μη
τοξικό

Πεδίο
εφαρμογής

Statistics ->
Domain - APD

Data
Transformation -> Split ->
Random Partitioning

Στατιστικά εξωτερικής αξιολόγησης	Προσφάτως παραχθέντα νανοσωματίδια	Γηρασμένα νανοσωματίδια
Ακρίβεια (Accuracy)	0.906	0.857
Ευαισθησία (Sensitivity)	0.941	0.917
Ειδικότητα (Specificity)	0.867	



Statistics -> Model Metrics ->
Classification Metrics



Σχετικές δημοσιεύσεις

Open Access Article

Predicting Cytotoxicity of Metal Oxide Nanoparticles Using Isalos Analytics Platform

by  Anastasios G. Papadimitris^{1,2}  Jaak Jänes³  Evangelos Voyiatzis¹  Lauri Sikk³  Jaanus Burk³  Peeter Burk³  Andreas Tsoumanis¹  My Kieu Ha⁴  Tae Hyun Yoon^{4,5}  Eugenia Valsami-Jones²  Iseult Lynch²  Georgia Melagraki⁶  Kaido Tamm^{3,*} and  Andreas Afantitis^{1,*}

¹ NovaMechanics Ltd., Nicosia 1065, Cyprus

² School of Geography, Earth and Environmental Sciences, University of Birmingham, Birmingham B15 2TT, UK

³ Institute of Chemistry, University of Tartu, 50411 Tartu, Estonia

⁴ Department of Chemistry, College of Natural Sciences, Hanyang University, Seoul 04763, Korea

⁵ Institute of Next Generation Material Design, Hanyang University, Seoul 04763, Korea

⁶ Division of Physical Sciences and Applications, Hellenic Military Academy, 16672 Vari, Greece

* Authors to whom correspondence should be addressed

Nanomaterials **2020**, *10*(10), 2017; <https://doi.org/10.3390/nano10102017>



Chemosphere

Volume 285, December 2021, 131452



Ecotoxicological read-across models for predicting acute toxicity of freshly dispersed versus medium-aged NMs to *Daphnia magna*

Dimitra-Danaï Varsou^a, Laura-Jayne A. Ellis^b, Andreas Afantitis^a, Georgia Melagraki^c   Iseult Lynch^b 



NanoImpact

Volume 22, April 2021, 100308



Research paper

Computational enrichment of physicochemical data for the development of a ζ -potential read-across predictive model with Isalos Analytics Platform

Anastasios G. Papadimitris^{a,b}, Andreas Afantitis^a, Andreas Tsoumanis^a, Eugenia Valsami-Jones^b, Iseult Lynch^b   Georgia Melagraki^a 

 Springer Link

Original Research | [Open Access](#) | [Published: 23 December 2021](#)

Using the Isalos platform to develop a (Q)SAR model that predicts metal oxide toxicity utilizing facet-based electronic, image analysis-based, and periodic table derived properties as descriptors

M. M. Thwala, A. Afantitis, A. G. Papadimitris, A. Tsoumanis, G. Melagraki, L. N. Dlamini, C. N. M. Ouma, P. Ramasami, R. Harris, T. Puzyn, N. Sanabria, I. Lynch & M. Gulumian 

Structural Chemistry **33**, 527–538 (2022) | [Cite this article](#)

777 Accesses | [Metrics](#)



Σας ευχαριστώ!

info@novamechanics.com

