



Euclia

Εταιρικό προφίλ

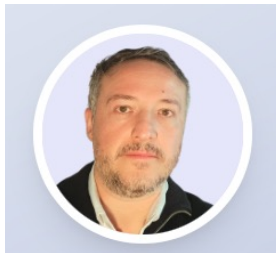
&

Προσφερόμενες λύσεις
στο GR digiGOV-innoHUB

Εταιρικό προφίλ



- Ίδρυση: 2022
- Τεχνοβλαστός (spinoff) του ΕΜΠ
- Ιδρύθηκε από ερευνητές της Μονάδας Αυτόματης Ρύθμισης και Πληροφορικής της Σχολής Χημικών Μηχανικών ΕΜΠ



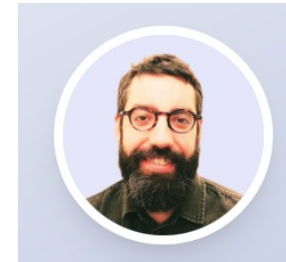
Δρ. Φίλιππος Δογάνης
Διευθύνων Σύμβουλος

Ειδικεύεται στη μοριακή μοντελοποίηση και βελτιστοποίηση, εφαρμόζοντας υπολογιστικές μεθόδους για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων.



Καθ. Χαράλαμπος Σαρίμβης
Επικεφαλής Επιστημονικός
Σύμβουλος

Η εκτεταμένη έρευνά του στη μηχανική μάθηση και την επιστήμη δεδομένων τροφοδοτεί την καινοτόμο τεχνολογία και τη στρατηγική κατεύθυνση της Euclia.



Περικλής Τσίρος
Διευθυντής Έρευνας Τεχνητής Νοημοσύνης / Βιοκινητικής
Αξιοποιεί την εξειδικευμένη γνώση του στη στατιστική υπολογιστική για την ανάπτυξη πρακτικών λύσεων μοντελοποίησης.

Διακρίσεις



Η Euclia διακρίθηκε στο διαγωνισμό Ψηφιακής Καινοτομίας **Start4Health** που διοργανώθηκε από το Κέντρο Ψηφιακής Καινοτομίας (CDI) της **Pfizer** στη Θεσσαλονίκη.

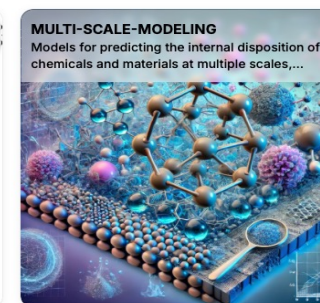
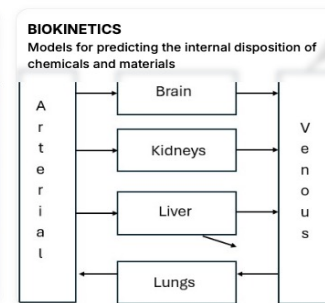
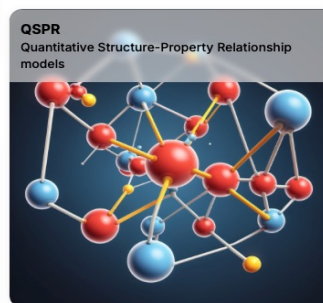
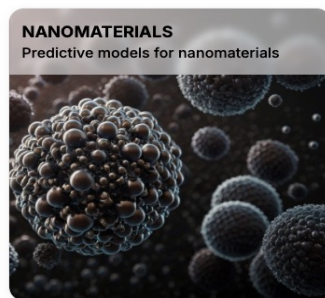
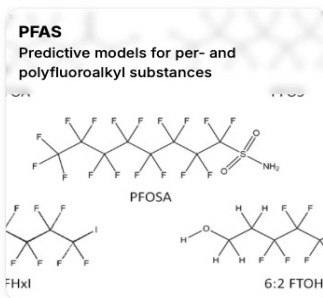
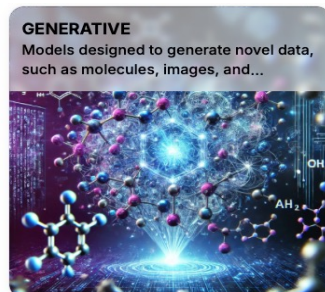
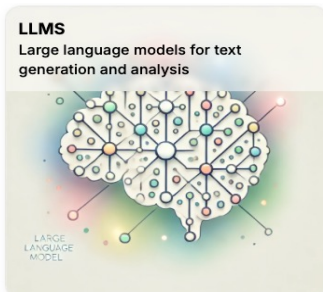
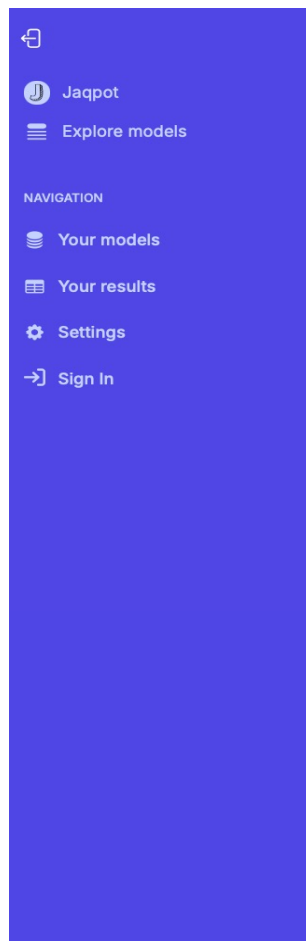


start4health

The Pfizer CDI accelerator for healthtech innovators

Η ομάδα έλαβε το 2ο Βραβείο, για την πρότασή της που αφορά στην έξυπνη ανακάλυψη φαρμάκων και χημικών ουσιών.

Η πλατφόρμα Jaqpot της Euclia



Αποτέλεσμα
πολυετούς
ερευνητικής
προσπάθειας

Φιλοξενεί
πληθώρα
μοντέλων
Μηχανικής
Μάθησης και
Χημειο-
πληροφορικής

Δοκιμάστε το
Jaqpot εδώ:
<https://app.jaqpot.org>

Η πλατφόρμα Jaqrot της Euclia

Χρήση μοντέλων χωρίς τεχνικές γνώσεις



Q Jagot

Explore models

NAVIGATION

Your models

Your results

Settings

YOUR MEMBERSHIPS

SCENARIOS

INSIGHT

PINK

CHIASMA

🔍 Search models

+ 🔔 🔄 📄 🌐 filippo@gsnail.it

Explore models > Nanomaterials

Nanomaterials

Predictive models for nanomaterials

TIO2 IV RAT PBK MODEL

A PBK model for describing the biodistribution of TIO2 nanoparticles in rats after IV injection

MWCNTS GENOTOXICITY

Random Forest model for the genotoxicity classification of Multi-walled Carbon nanotubes

PAA-PEG PBK MODEL

A PBK model for describing the biodistribution of PAA-PEG nanoparticles in rats after IV...

TECHNETIUM PBK MODEL

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jagor

Explore models

Jaquot

Explore models

filepsos@gmail.com

NAVIGATION

Your models

Your results

Settings

YOUR MEMBERSHIPS

SCENARIOS

INSIGHT

PINK

CHIASMA

PFOS/POFA HUMAN PBK

The model of this application is a deployment of the model published by Luccisano et al. (2011).

EXTENDED PFOA MALE RAT PBK

This PBK model describes the biotransformation of PFOA in male rats after IV or oral administration...

PFASs PROTEIN-BINDING FISH PBK

This PBK model predicts the biotransformation of various PFASs in fish, who are exposed via...

PFOS RAINBOW TROUT PBTK

This PBK model predicts the biotransformation of PFOS in Rainbow trout after both oral and...

PFDA RAT PBK

This PBK model developed by Kim et al., 2019 for describing the biotransformation of PFDA in rat...

Organizations

SCENARIOS

EU Horizon project (grant agreement No. 101037509)

CHIASMA

EU Horizon project (grant agreement No. 101137613.)

Jagpot
Explore models

NAVIGATION

- Your models
- Your results
- Settings

YOUR MEMBERSHIPS

- S SCENARIOS
- I INSIGHT
- P PINK
- C CHIASMMA

[Dashboard](#) >
 [Organizations](#) >
 PINK

PINK

Harry Sarimveis

@hsarimv@mail.ntua.gr

Description
People
Shared

This section showcases all the models that have been privately shared with your organization. Only members of your organization have access to view and use these models.

Name	Type	Description	Visibility
Skin Reaction Classification	SKLEARN_ONNX	### Endpoint Description The endpoint classified by this model is Skin Reaction. Given a drug SMILES string, it classifies it whether it cause skin reaction (1) or not (0). Repetitive exposure to a chemical agent can induce an immune reaction in inherently susceptible...	ORG_SHARED
QSAR for predicting pEC ₅₀ on Algae	SKLEARN_ONNX	**Endpoint description** This model predicts the pEC ₅₀ (mol/L) of Pseudokirchneriella subcapitata. pEC ₅₀ is a toxicity endpoint that measures the ecotoxicological effect (immobilization) caused by endocrine disrupting chemicals. The species being modeled ...	ORG_SHARED
QSAR for predicting pEC ₅₀ of Fish	SKLEARN_ONNX	**Endpoint description** This is a reproduction of the model developed by [Kabiruddin Khan, et al. (2019)] (https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389419301499#upi0005) that...	ORG_SHARED

Η πλατφόρμα Jaqpot της Euclia

Χρήση μοντέλων χωρίς τεχνικές γνώσεις



Prediction tab
—
from
SMILES

Jaqpot
Explore models

NAVIGATION

Your models

Your results

Settings

YOUR MEMBERSHIPS

SCENARIOS

INSIGHT

PINK

CHIASHMA

Search models

+ v 🔔 🔄 ? 🌙 🤖 filipposd@gmail.com v

Dashboard > Models > Animal Carcinogenicity Classification

Animal Carcinogenicity Classification

giannis savvas
@john_savvas

📅 13 days ago

👤 SKLEARN_ONNX

Description

Features

Predict

Metrics

Discussion

Endpoint Description

The endpoint predicted by this model is **Animal Carcinogenicity**. The dataset used for modeling was obtained from the **Carcinogenic Potency Database (CPDB)**, which contains long-term study results for over **1,500 chemical substances** on rodent (mouse and rats) species. Carcinogenicity is defined through the OECD Test No. 451. Each author in the literature evaluated the tissue-tumor combination of the chemical substance and gave his opinion on carcinogenicity which was evaluated from NCI/NTP. In the dataset:

- **Carcinogenic chemicals** are labeled as 1.
- **Non-carcinogenic chemicals** are labeled as 0.

Model Description

Prior to model development, the dataset was split into **training** and **test sets** while ensuring **class balance** to avoid bias. The model developed is a **Random Forest Classifier**, trained on a subset of **RDKit Descriptors** after rigorous feature preprocessing, including:

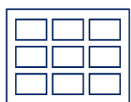
1. **Variance Threshold**: Removal of low-variance features.
2. **Correlation Analysis**: Elimination of highly correlated features.
3. **Mutual Information**: Selection of features with the highest predictive power.

The model achieved a **ROC-AUC score of 0.68** on the test set, which is consistent with the performance reported in the [literature](#). For determining chemicals outside the domain of applicability (DOA), leverage function was used.

Η πλατφόρμα Jaqpot της Euclia



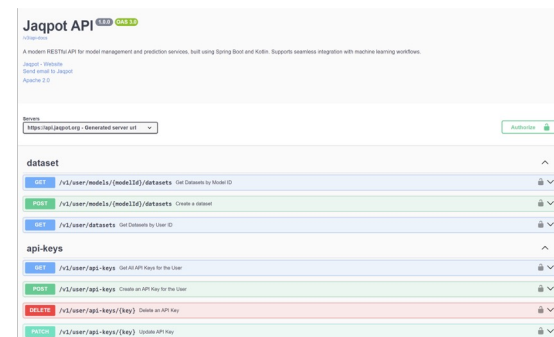
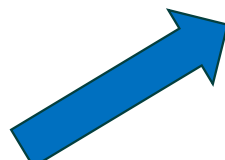
Δημιουργία και διαμοίρασμός μοντέλου



```
model.deploy_on_jaqpot(jaqpot=jaqpot,  
name=" My first Jaqpot model ",  
description="Model for experiment #E9861",  
visibility="PRIVATE",  
)
```



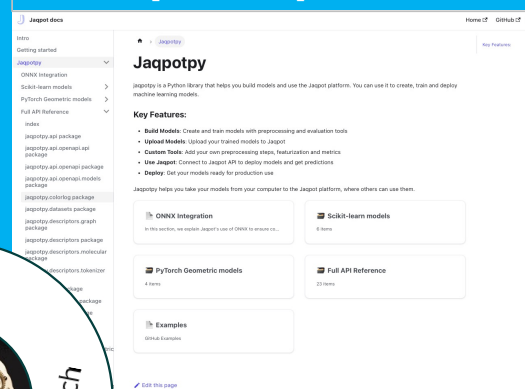
Jaqpotpy



1 γραμμή κώδικα:
απλός τρόπος να
ανέβει το μοντέλο

Jaqpotpy Descriptors engine

- Molecular
- RDKit
- Mordred
- MACCS keys
- Topological fingerprints
- Graph-based



Graph Neural Network (GAT) for ReadyBiodegradability Classification

giamis services @john_savvas about 2 months ago TORCHSCRIPT

Description Features Predict Metrics Discussion

Choose Your Prediction Input Method

☒ Fill out the form or ☐ Upload a CSV file (max 100 rows)

@ SMILES *

N#C/C=C/C(=O)OCC(C)(C)C(=O)C1CCCCC1

Submit

Result

ID 10584 of

Success

Less than a minute ago less than 5 seconds

Export CSV

SMILES	ReadyBiodegradability	Probabilities
<chem>N#C/C=C/C(=O)OCC(C)(C)C(=O)C1CCCCC1</chem>	0	0: 0.867 1: 0.133

<https://app.jaqpot.org/dashboard/models/1928/description>

Input SMILES to get the prediction

```
[7]: input_data = [{"SMILES": "N#C/C=C/C(=O)OCC(C)(C)C(=O)C1CCCCC1"}]
```

Get prediction though SDK

```
[8]: prediction = jaqpot.predict_sync(model_id=1928, dataset=input_data)  
print(prediction)  
[{'jaqpotMetadata': {'probabilities': [0.867, 0.133], 'jaqpotRowId': '0', 'ReadyBiodegradability': 0.0}]
```

Η πλατφόρμα Jaqrot της Euclia

Προσαρμοσμένος AI agent

- Χρήση μοντέλων με φυσική γλώσσα



What is the solubility of Methane?

Step 1

Thought: To determine the solubility of Methane, I will first retrieve the SMILES string for Methane using the `retrieve_smiles_tool`. Then, I will use the `qsartoolbox_get_property_value_tool` with the appropriate QSAR model to predict the solubility.

Code:

```
smiles_methane = retrieve_smiles_tool(compound_name="Methane")
print("SMILES for Methane:", smiles_methane)
```

Used tool `python_interpreter`

```
smiles_methane = retrieve_smiles_tool(compound_name="Methane")
print("SMILES for Methane:", smiles_methane)
```

Execution Logs

SMILES for Methane: C
Last output from code snippet:
None

Step 1 | Input-tokens:8,271 | Output-tokens:101 | Duration: 13.57

Step 2

Thought: Now that I have the SMILES string for Methane, I will use the `qsartoolbox_get_property_value_tool` to predict its solubility. I will use the "Water Solubility (fragments) (EPISUITE)" model for this purpose.

Code:

```
solubility_result = qsartoolbox_get_property_value_tool(smiles=
print(solubility_result)
```

Calling tools:

```
[{'id': 'call_2', 'type': 'function', 'function': {'name': 'python_interpreter', 'argument': 'Solubility (fragments) (EPISUITE)'}}, {'id': 'call_3', 'type': 'function', 'function': {'name': 'python_interpreter', 'argument': 'Solubility (fragments) (EPISUITE)'}}, {'id': 'call_4', 'type': 'function', 'function': {'name': 'python_interpreter', 'argument': 'Solubility (fragments) (EPISUITE)'}}]
```

Used tool `python_interpreter`

```
solubility_result = qsartoolbox_get_property_value_tool(smiles=
print(solubility_result)
```

Execution Logs

Step 2 | Input-tokens:9,036 | Output-tokens:97 | Duration: 13.79

Step 3

Thought: The solubility of Methane has been predicted to be 428.49 mg/L using the "Water Solubility (fragments) (EPISUITE)" model from the QSAR Toolbox. The domain result is undefined, so there might be some uncertainty, but we can still use this value as our best estimate.

Code:

```
final_answer(answer="428.49 mg/L")
```

Used tool `python_interpreter`

```
final_answer(answer="428.49 mg/L")
```

Execution Logs

Last output from code snippet:
428.49 mg/L

Step 3 | Input-tokens:9,036 | Output-tokens:97 | Duration: 13.79

Final answer:
428.49 mg/L

Ποια είναι η διαλυτότητα του μεθανίου?



Ο AI Agent επεξεργάζεται το αίτημα και απαντά σε φυσική γλώσσα



Τελική απάντηση:
428.49 mg/L

Υπηρεσίες Τεχνητής Νοημοσύνης



Modelling-as-a-service

Δημιουργία μοντέλων

Η ομάδα της Euclia σας υποστηρίζει στη δημιουργία μοντέλων που εξυπηρετούν τις ανάγκες σας.

Φιλοξενία μοντέλων στην πλατφόρμα μας

Η πλατφόρμα Jaqrot της Euclia παρέχει ευκολία στη χρήση μοντέλων Μηχανικής Μάθησης.



Υπηρεσίες Τεχνητής Νοημοσύνης



Οφέλη για τον χρήστη

Διαχειριστικά Οφέλη: Δραστική μείωση λειτουργικού φόρτου μέσω αυτοματοποίησης επαναλαμβανόμενων διαδικασιών και βελτιστοποίησης πόρων.

Λειτουργικά Οφέλη: Επεξεργασία μεγάλων όγκων δεδομένων σε πραγματικό χρόνο με υψηλή ακρίβεια.

Βελτίωση Υπηρεσιών: Γρήγορη προσαρμογή σε νέες ανάγκες με συνεχή μάθηση και καινοτόμες λύσεις.

Υποστήριξη Αποφάσεων: Τεκμηριωμένες αποφάσεις βασισμένες σε δεδομένα με προβλεπτική ανάλυση και προσομοίωση σεναρίων.



Υπηρεσίες Τεχνητής Νοημοσύνης



Πλεονεκτήματα της λύσης μας

Φιλική προς το Χρήστη Διεπαφή

Ανεβάστε το μοντέλο σας χωρίς κόπο και μοιραστείτε το άμεσα.

Δεν απαιτούνται γνώσεις προγραμματισμού για τη χρήση του μοντέλου.

Πληθώρα διαθέσιμων μεθόδων

Αποκτήστε πρόσβαση στα πιο πρόσφατα μοντέλα AI, από Deep Learning έως παραδοσιακή στατιστική.

Αξιοποιήστε ένα αποθετήριο προβλεπτικών μοντέλων προσαρμοσμένων για τις ερευνητικές σας ανάγκες.

Απρόσκοπτη Συνεργασία

Μοιραστείτε μόνο το μοντέλο, όχι τα δεδομένα με όποιους επιθυμείτε.

Χωρίς Επιβάρυνση σε υποδομές

Οι υπηρεσίες παρέχονται από τις δικές μας υποδομές, χωρίς να προσθέτουν ανάγκες υποστήριξης στον οργανισμό.



Υπηρεσίες Χημειοπληροφορικής



Cheminformatics

Πρόβλεψη ιδιοτήτων για χημικές ουσίες

Η ομάδα της Euclia σας παρέχει ένα πλήρες προφίλ της χημικής ουσίας, αξιοποιώντας τεκμηριωμένα δημόσια και εταιρικά μας μοντέλα πρόβλεψης ιδιοτήτων

Φιλοξενία μοντέλων στην πλατφόρμα μας

Η πλατφόρμα Jaqrot της Euclia παρέχει ευκολία στη χρήση μοντέλων Χημειοπληροφορικής.



Υπηρεσίες Χημειοπληροφορικής



Οφέλη για τον χρήστη

Αξιολόγηση ουσιών: Ταχεία αξιολόγηση χημικής ασφάλειας χωρίς ακριβές εργαστηριακές δοκιμές.

Περιβαλλοντικές Υπηρεσίες: Πρόβλεψη περιβαλλοντικών επιπτώσεων χημικών για στοχευμένες στρατηγικές προστασίας οικοσυστημάτων.

Δημόσια Υγεία: Άμεση εκτίμηση τοξικολογικών κινδύνων για προστασία πολιτών σε έκτακτες περιστάσεις.

Εκπαιδευτικά Ιδρύματα: Πρόσβαση σε προηγμένα εργαλεία χημειοπληροφορικής για ακαδημαϊκή έρευνα.

Οικονομικά Οφέλη: Δραστική μείωση κόστους με in silico μεθόδους αντί παραδοσιακών εργαστηριακών αναλύσεων.





 Address

Zografou Campus

9, Iroon Polytechniou Str, 15780 Zografou,
Greece

 Telephone

+30-772-3236

 Website

www.euclia.io