

ΠΡΟΣΒΑΣΗ ΣΤΗΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑ ΤΟΝ 21ο ΑΙΩΝΑ.

Από τα επιστημονικά έντυπα και τον ηλεκτρονικό τύπο στους ενημερωτικούς ιστότοπους, τις βάσεις mega-δεδομένων και τα "νέφη". ΠΡΟΣΒΑΣΗ ΣΤΗΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑ ΤΟΝ 21ο ΑΙΩΝΑ

Αννα Τσαντίλη

Τμήμα Φαρμακευτικής, Ε.Κ.Π.Α.





Why we Publish

Το παρελθόν το παρόν και το μέλλον της επιστημονικής επικοινωνίας



Δημοσίευση- Publication

Γιατί??

- Δημοσιοποίηση των ερευνητικών αποτελεσμάτων στην επιστημονική κοινότητα
- Κατοχύρωση του ερευνητή

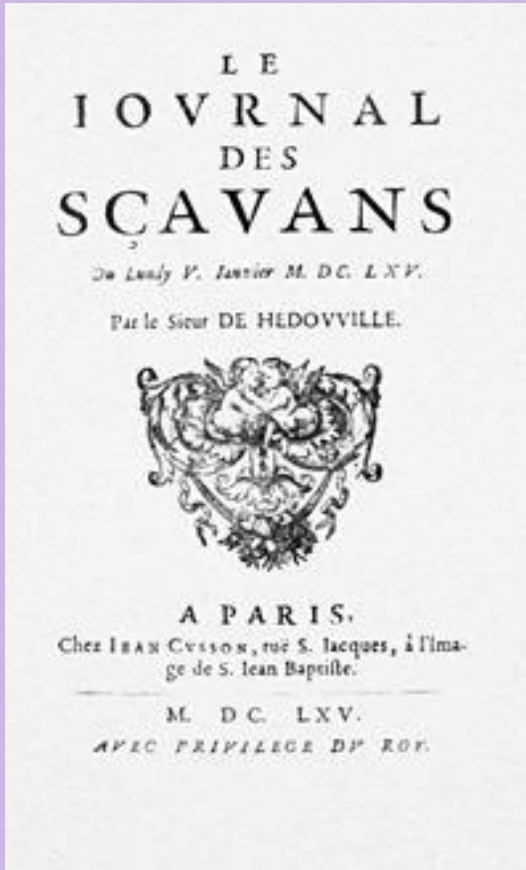
Πού??

Περιοδικά
Βιβλία
Διατριβές



Ανάληψη της δημοσίευσης από τον ερευνητή είναι πολύ δαπανηρή

Λίγα ιστορικά στοιχεία...



17^{ος} αιώνας- η εποχή που αρχίζουν τα πειράματα

The 17th Century: The Coming of Science
James A. Huggins (October 17, 2002, The Scientific Voice)

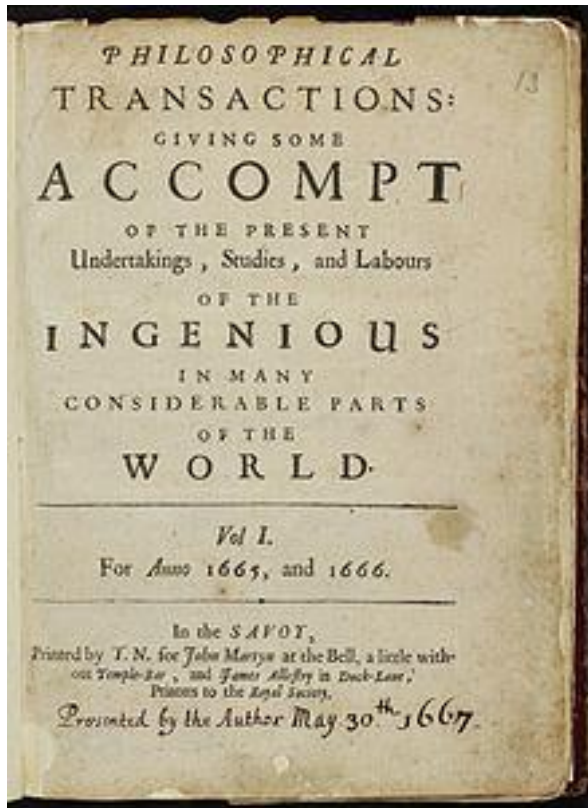
Journal des sçavans (Journal des savants)

10 τευχος: 5 Ιανουαρίου 1665

1669: Ο Huygens δημοσιεύει τους νόμους που διέπουν τις συγκρούσεις σωματιδίων ισχυριζόμενος ότι είναι αποτελέσματα πειραμάτων.

17^{ος} αιώνας

Philosophical Transactions of the Royal Society



6 Μαρτίου 1665

Isaac Newton, Leibnitz

1672: Ο Newton δημοσίευσε εργασία όπου περιέγραφε το τηλεσκόπιο του και τα πειράματά του με το φως.

Αναγράμματα

Αναγραμματισμός:

εξασφάλιζε την κατοχύρωση του ερευνητή, αλλά δεν ήταν δυνατή η κατανόηση από τους άλλους

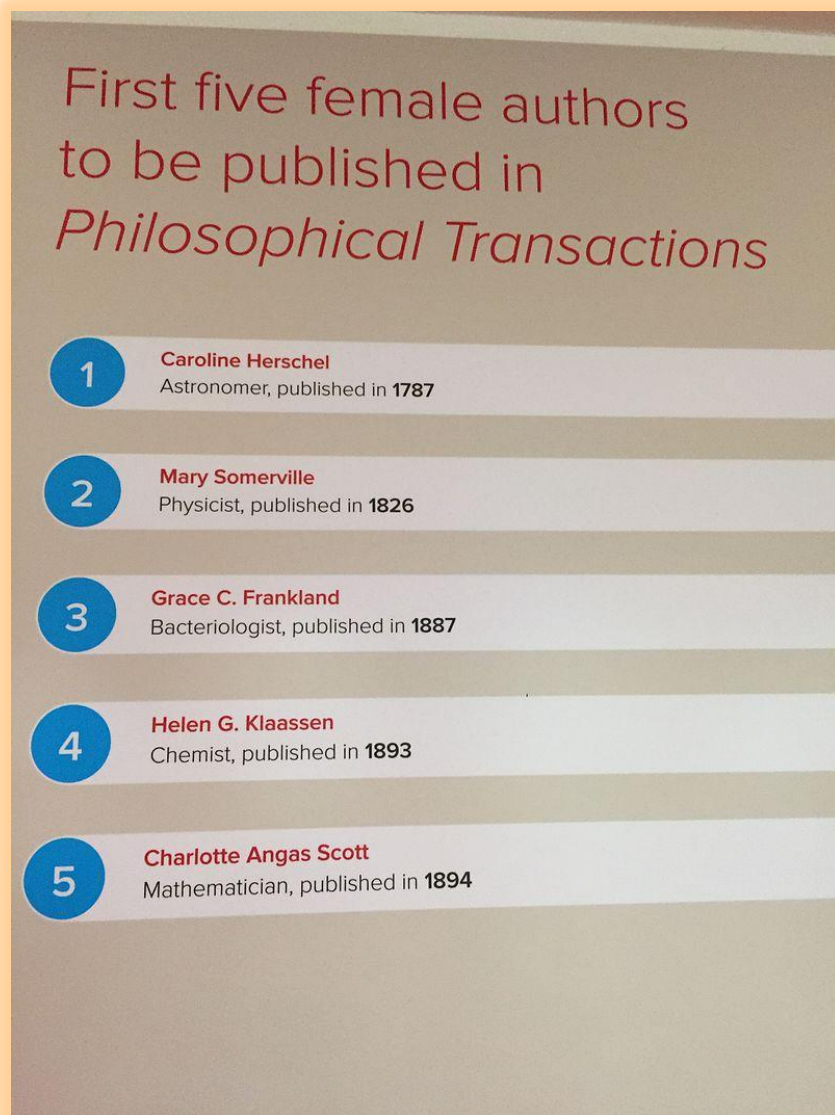
Ο Galileo χρησιμοποίησε τον αναγραμματισμό *smaismrmilmepoetaleumibunenugttauras* αντί του *Altissimum planetam tergeminum observavi* (Παρατήρησα τον πιο απομακρυσμένο πλανήτη που έχει τριπλή μορφή) για την ανακάλυψη των δακτυλίων του Κρόνου το 1610

Ο νόμος του Hooke (1660) δημοσιεύτηκε αρχικά σε μορφή αναγράμματος, *ceiinosstuv*, αντί *ut tensio, sic vis* (Όση η τάση τόση η δύναμη)

18^{ος} αιώνας....μετά τον Newton

A Journal of Natural Philosophy, Chemistry and the Arts	1797
Allgemeines Journal der Chemie ["German Journal of Chemistry"]	1798
Journal für die Botanik ["Journal of Botany"]	1799
Parisian Chirurgical [Surgical Journal]	1794
The Chemical News and Journal of Physical Science (including the Chemical Gazette)	1773
The London Medical Journal	1781

Η παρουσία της γυναίκας στον επιστημονικό τύπο



18^{ος}-19^{ος} αιώνας

1787, Caroline Herschel αστρονόμος

1826, Mary Somerville, φυσικός

1887, Grace Frankland, βακτηριολόγος

1893, Helen Klaasen, χημικός

1894, Charlotte Angas Scott, μαθηματικός

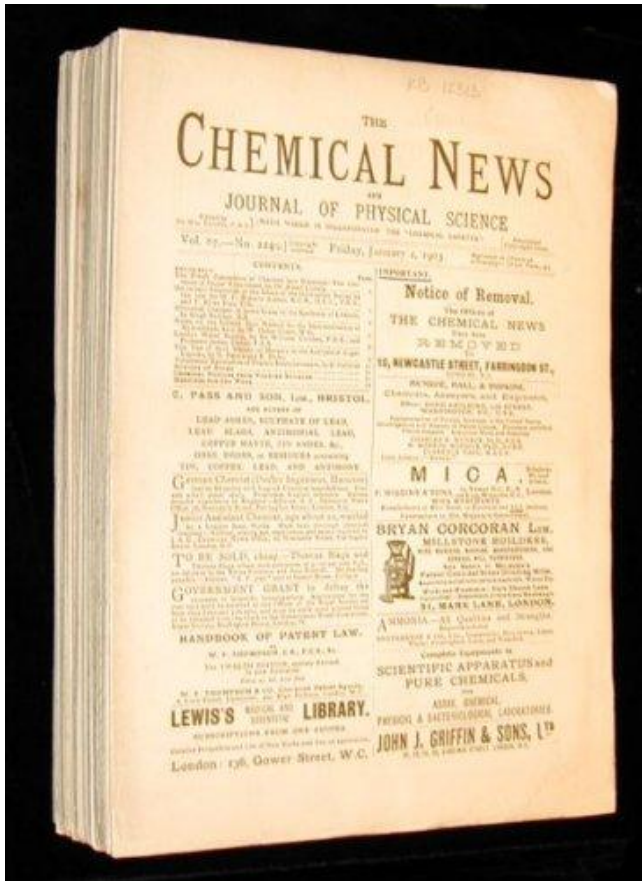
19^{ος}-20^{ος} αιώνας



INSTITUT DE FRANCE
Académie des sciences

Sur une nouvelle substance fortement radio-
active contenue dans la pechblende
Note de P. et M. Curie et G. Bémont. C.R. T.127
(1898) 1215-1217

Curie, Marie Sklodowska. "Radio-Active
Substances." In: The Chemical News, Vol. 88,
no. 2282 - Vol. 88, no. 2297. London: Edwin
John Davey, 1903



19^{ος} αιώνας

Το πρώτο τεύχος του *Nature*, 4
Νοεμβρίου 1869



A WEEKLY ILLUSTRATED JOURNAL OF SCIENCE

To do and grand

Of things from the mind which leads for ever—WAGNER

THURSDAY, NOVEMBER 4, 1869.

NATURE: ADDRESS BY GUSTAV

NATURE! We are surrounded and sustained by her; powerless to separate ourselves from her, and powerless to penetrate beyond her.

Without asking, or wanting, she marches up into her smiling dance, and whiles an eye until we are tired, and deep into her arms.

She is ever shaping new forms: what is, has never yet been; what has been, comes not again. Everything is new, and yet sought but the old.

We live in her world and know her not. She is incessantly speaking to us, but betrays not her secret. We constantly see upon her, and yet have no power over her.

The one thing she seems to see in individuality; yet she cares nothing for individuality. She is always building up and destroying; but her workshop is unceasing.

Her life is in her children; but where is the mother? She is the only artist; working up the most perfect material into other organisms; moving, without a trace of effort, or perfection, at the most exact precision, though always veiled under a certain softness.

Each of her phenomena has an essence of its own; each of her phenomena a special characteristic; and yet their diversity is in unity.

She performs a play; we know not whether she sees it herself, and yet she acts for us, the lookers-on.

Inconstant life, development, and movement are in her, but she advances not. She changes by ever and ever, and rests not a moment. Quiescence is insupportable to her, and she has laid her course upon rest. She is free. Her steps are unnumbered, her mysterious ways, her laws unchangeable.

She has always thought and always thinks; though not as a man, but as Nature. She broods over an

all-comprehending idea, which no searching eye had seen.

Marked death in her and she is there. With all her art she plays a game for lives, and enjoys the more they win. With many, her moves are so hidden, that the game is over before they know it.

That which is most sustained is still Nature; the simplest phenomena her a touch of her genius. Whom cannot see her everywhere, men her existence rightly.

She loves herself, and her immeasurable eyes and affections are fixed upon herself. She has divided herself that she may be her own delight. She causes an endless succession of new capacities for enjoyment to spring up, that her insatiable sympathy may be avenged.

She rejoices in flowers. Whom deceives it is himself and others, how she provides with the necessary means. Whom follows her in death, how she takes it a child to her bosom.

Her children are wandering. To none is she altogether steady; but she has her favorites, in whom she spends much, and for whom she makes great sacrifices. Over generous she spends her wealth.

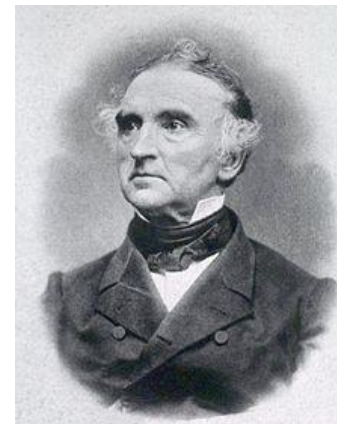
She turns her treatment out of nothingness, and will them not whom they claim, but whither they go. It is their business to run, she knows the road.

Her mechanism has few springs—but they never wear out, are always active and manifold.

The spectacle of Nature is always new, for she is always renewing the spectrum. Life is her most exquisite invention; and death is her expert contrivance to get plenty of life.

She steps man in darkness, and makes him for ever long for light. She creates him dependent upon the earth, soil and honey; and yet is always shaking him, will be always to see above it.

19ος-20^{ος} αιώνας: Τα επιστημονικά περιοδικά εξελισσονται- η ενημέρωση εξελίσσεται



- *Annalen der Pharmacie*, 1832–1839
- *Annalen der Chemie und Pharmacie*, 1840–1873)
- *Justus Liebig's Annalen der Chemie und Pharmacie*, 1873–1874 (
- *Justus Liebig's Annalen der Chemie*, 1874–1944 & 1947–1978)
- *Liebigs Annalen der Chemie*, 1979–1994
- *Liebigs Annalen*, 1995–1996
- *Liebigs Annalen/Recueil*, 1997 (*Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*)
- [European Journal of Organic Chemistry](#), 1998+

➤ 1852

Journal of the American Pharmaceutical Association
Scientific Edition



➤ 1961


Journal of Pharmaceutical Sciences

➤ 1973

Journal of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics



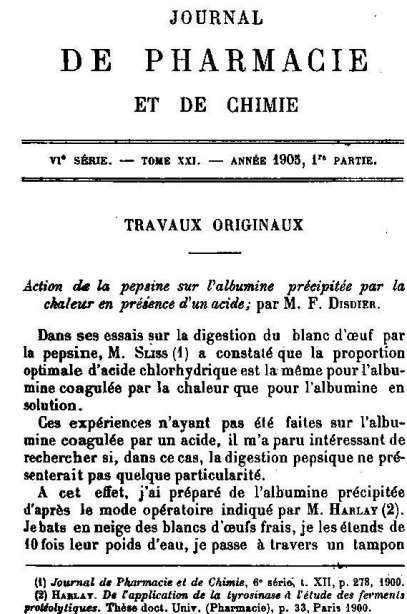
19ος-20^{ος} αιώνας: Τα επιστημονικά περιοδικά εξελίσσονται- η ενημέρωση εξελίσσεται

- *Bulletin de pharmacie*, 1809-1814
- *Bulletin de pharmacie et des sciences accessoires*, 1815-1844
- *Journal de pharmacie et de chimie*, 1842-1942,
+*Bulletin des sciences*
- *Annales pharmaceutiques françaises*, 1943-

1959 -*Journal of Medicinal and
Pharmaceutical Chemistry*

1963-. *Journal of Medicinal
Chemistry*

1966-The *European Journal of
Medicinal Chemistry*



145137

20^{ος}-21^{ος} αιώνας- Η Επανάσταση της ενημέρωσης

1993- Ανάπτυξη του διαδικτύου

World Wide Web

Ηλεκτρονική υποβολή

- Μέσω e-mail, διαδικτυακής πλατφόρμας ή άλλο ηλεκτρονικό μέσο- compact disc, a hard disk , USB
- Δημιουργία στα πανεπιστήμια πλατφορμών η-ταξη (e-class) με διαφορετικούς βαθμούς πρόσβασης με δυνατότητα ανάρτησης 'γκρίζας' βιβλιογραφίας
- Ασύγχρονη τηλεκπαίδευση

Αρχειοθέτηση

Αρχειοθέτηση τίτλων/ περιλήψεων/περιοδικών

1881: Beilstein (από το 2009 Elsevier)

1907:Chemical Abstracts
(American Chemical Society,ACS) CAS registry number **SciFinder**

Current Contents (από το 2009 Thomson Reuters)

Web of Science/Science Citation Index	διεπιστημονικό	Thomson Reuters
EMBASE	Βιο-ιατρική-Φαρμακολογία	Elsevier
Scopus	διεπιστημονικό	Elsevier
Academic Search	διεπιστημονικό	EBSCO
MedlinePlus	Ιατρική	US National Library of Medicine, US National Institute of Health, US Department of Health and Human Services
PubMed	Βιο-ιατρική	National Institutes of Health ,U.S. National Library of Medicine
Google Scholar	διεπιστημονικό	Google
Europe PMC	Βιο-ιατρική	EMBL-EBI



Κριτήρια για την αξιολόγηση της έρευνας Η 'ποσοτικοποίηση' της Επιστήμης

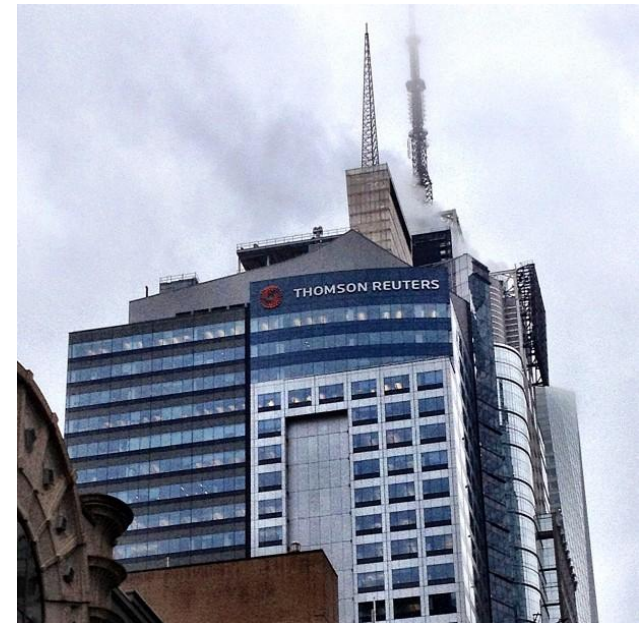
Garfield E (1955) Citation indexes for science: a new dimension in documentation through association of ideas. *Science* 122:108-111



1961 - Institute for Scientific Information
Science Citation Index



1992: Thomson Reuters Corporation-
πολυεθνική εταιρεία με έδρα το
Μανχάτταν



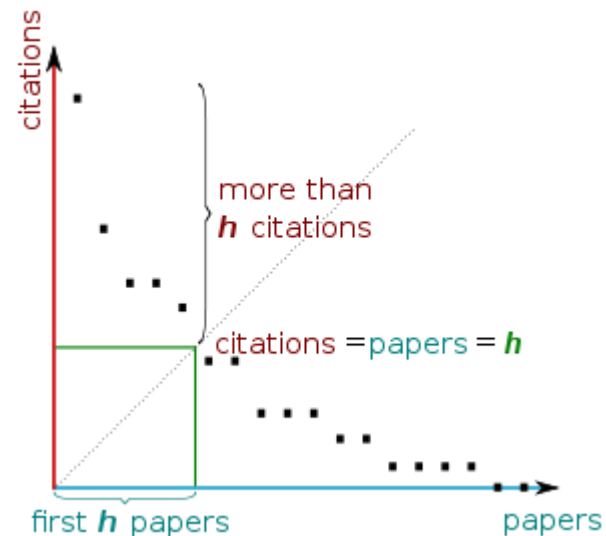
Βιβλιομετρικά στοιχεία- η ποσοτικοποίηση της επιστήμης

Impact Factor – το πηλίκο του αριθμού των αναφορών σε άρθρα που δημοσιεύονται στο συγκεκριμένο περιοδικό σε περίοδο δυο ετών δια του συνολικού αριθμού των δημοσιευμένων άρθρων στο ίδιο περιοδικό για την ίδια χρονική περίοδο

Immediacy Index – ο μέσος όρος του αριθμού των αναφορών σε άρθρο που δημοσιεύτηκε συγκεκριμένο έτος στο συγκεκριμένο περιοδικό εντός του ίδιου έτους

2005, Jorge Hirsch  **h-factor**

Ο συντελεστής h σημαίνει ότι ο συγγραφέας έχει δημοσιεύσει h άρθρα, το καθένα από τα οποία έχει τουλάχιστον h αναφορές



Γκρίζα βιβλιογραφία, Grey(gray)literature

1985- 2005 European Association for Grey Literature Exploitation” (EAGLE)



System for Information on Grey Literature in Europe” ([SIGLE](#))

OpenSIGLE

- Μεταπτυχιακές εργασίες
- Διδακτορικές διατριβές
- Παραδοτέα χρηματοδοτούμενων έργων
- Τεχνικές αναφορές
- Πρακτικά/παρουσιάσεις συνεδρίων και άλλων επιστημονικών εκδηλώσεων
- Έρευνες
- Στατιστικά στοιχεία
- Κυβερνητικά έγγραφα



Ιδρυματικά αποθετήρια γκρίζας βιβλιογραφίας:

ΕΘΝΙΚΟ ΚΑΙ ΚΑΡΟΔΙΣΤΡΙΑΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΑΘΗΝΩΝ
NATIONAL AND KAPODISTRIAN UNIVERSITY OF ATHENS



ΨΗΦΙΑΚΗ
ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΗ
ΓΚΡΙΖΑΣ
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑΣ

GREY
LITERATURE
DIGITAL
LIBRARY



Πλατφόρμα ΠΕΡΓΑΜΟΣ

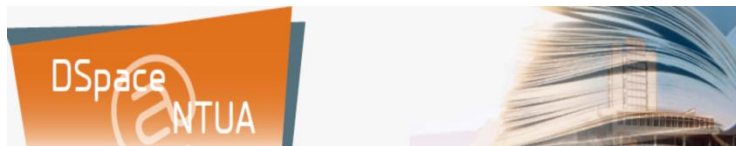
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΚΕΝΤΡΟ ΒΙΒΛΙΟΘΗΚΩΝ

LIBRARIES COMPUTER CENTER



Βιβλιοθήκη &
Κέντρο Πληροφόρησης
ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Πλατφόρμα ΙΚΕΕ



Dspace

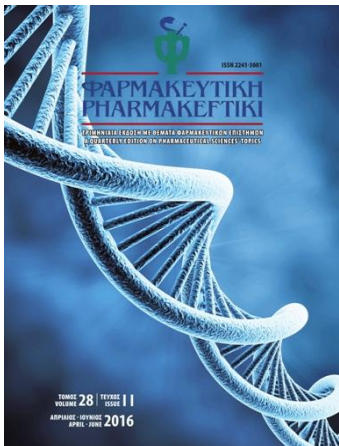
Ελληνικά Επιστημονικά Φαρμακευτικά Περιοδικά



1927 -**Αρχεία της Φαρμακευτικής**, περιοδική έκδοση της ΕΦΕ

1983-**Επιθεώρηση Κλινικής Φαρμακολογίας και Φαρμακοκινητικής**

**Review of Clinical Pharmacology and Pharmacokinetics
- International Edition**



1987- **Φαρμακευτική**- αρχικά περιοδική έκδοση της ΕΕΦ

Πρόσβαση στα επιστημονικά περιοδικά

μέσω συνδρομής :

- ατομικής
 - των πανεπιστημιακών τμημάτων
 - Κοινοπραξία Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών
- παραγγελία μεμονωμένων άρθρων



- 32 ελληνικά ακαδημαϊκά ιδρύματα (Ανώτατα και Τεχνολογικά Εκπαιδευτικά Ιδρύματα)
- 18 ερευνητικά ιδρύματα της ΓΓΕΤ
- Το Παιδαγωγικό Ινστιτούτο
- Το Ίδρυμα Τεχνολογίας Υπολογιστών
- Το Πανεπιστήμιο Κύπρου
- Η Ακαδημία Αθηνών
- Η Εθνική Βιβλιοθήκη της Ελλάδος

Το κίνημα ανοικτής πρόσβασης (Open Access)

Ανάπτυξη των περιοδικών ελεύθερης πρόσβασης
Open Access Journal

1993- Ανάπτυξη του διαδικτύου

World Wide Web

- Budapest Open Access Initiative (Feb. 14, 2002),
- Bethesda Statement on Open Access Publishing (Apr. 11, 2003),
- Berlin Declaration on Open Access (Oct. 22, 2003),
- Lyon Declaration on Access to Information and Development (Aug. 2014)

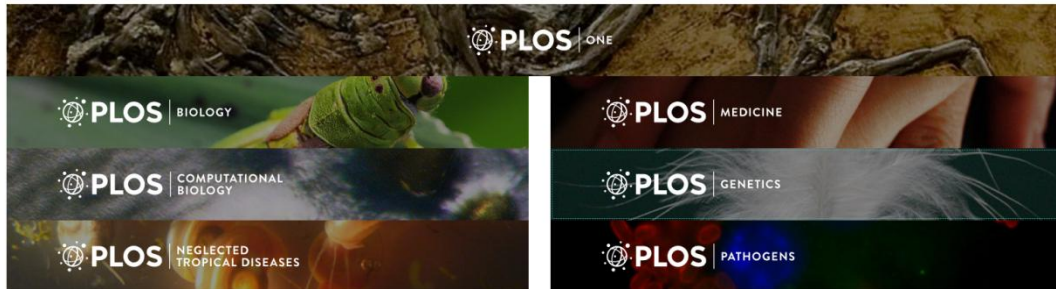
Public Library of Science (PLOS) (2000),

Creative Commons (2001)



Τα πνευματικά δικαιώματα επίσης διαφοροποιούνται και παραμένουν στους συγγραφείς, ενώ οι εκδότες έχουν την άδεια να εκδίδουν, να τυπώνουν και να διανέμουν (εμπορικά) τα άρθρα.

Public Library of Science (PLOS)



Ελεύθερη Πρόσβαση σε όλους όσον αφορά στη φόρτωση (download) των άρθρων, στην εκτύπωση, στη διανομή και στη μετάφραση.

Δυνατότητα χρήσης των άρθρων από περισσότερα των 1700 διεθνών μέσων συμπεριλαμβανομένων των *The New York Times*, *The Times of India*, *The Guardian*, BBC, NPR, *National Geographic* κλπ

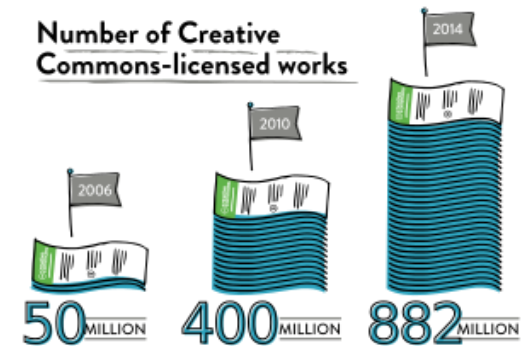
Ορατότητα (Visibility)

Εύκολη πρόσβαση των άρθρων PLOS μέσω Google, Google Scholar, Medline and PubMed.

Creative Commons

Τα χαρακτηριστικά των αδειών Creative Commons

- Προσφέρονται δωρεάν μέσω διαδικτύου.
- Δεν είναι αποκλειστικές.
- Επιτρέπουν την ανταλλαγή έργων μέσω διαδικτύου.
- Η χρήση τους δεν απαιτεί την πλήρη παραίτηση του δικαιούχου των δικαιωμάτων πνευματικής ιδιοκτησίας από τα δικαιώματα που διαθέτει, καθώς οι τύποι αδειών ποικίλλουν.



Οι βασικότεροι τύποι των αδειών Creative Commons



Αναφορά στον αρχικό δημιουργό (Attribution)

- οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή τροποποίηση του έργου οφείλει να αναφέρεται στον αρχικό δημιουργό



Απαγόρευση εμπορικής χρήσης του έργου (Non-commercial)



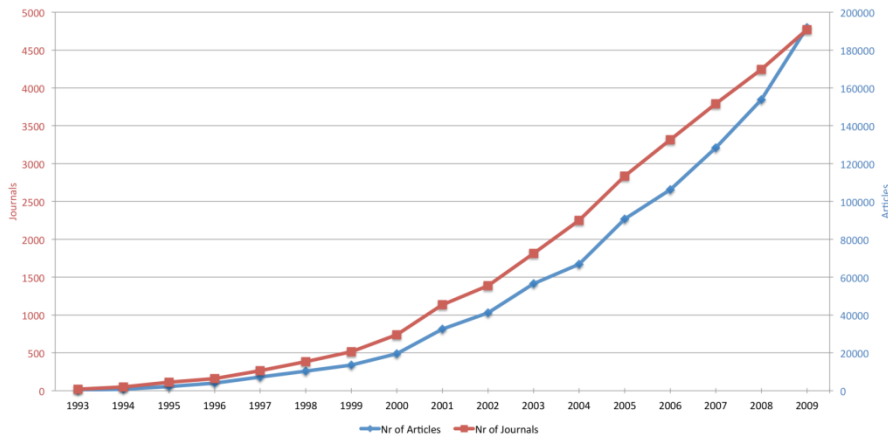
Απαγόρευση δημιουργίας παραγώγων έργων (No Derivatives)



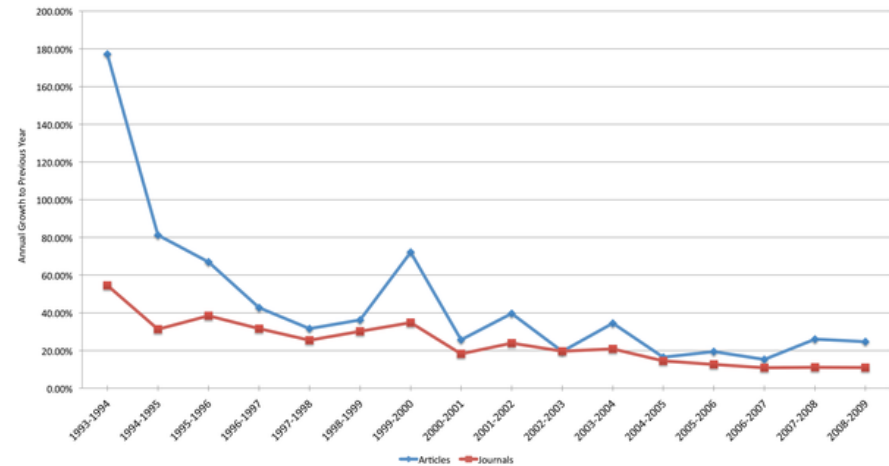
Διανομή του παράγωγου έργου με τους όρους της αρχικής άδειας (Share alike)

Η Επανάσταση της ενημέρωσης

Αύξηση του αριθμού περιοδικών (με κόκκινο)/ άρθρων (με μπλέ)
Περίοδος 1993-2009



Αύξηση του ποσοστού άρθρων /περιοδικών -
Περίοδος 1993-2009



Η Επανάσταση της ενημέρωσης

Αύξηση του αριθμού άρθρων /περιοδικών - στατιστικά στοιχεία Περίοδος 1993-2009

	1993	1994	1995	1996	1997	1998	1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009
Nr of Articles	247	781	2174	3972	7285	10 357	13 614	19 521	32 519	41 152	56 619	66 859	90 720	106 245	128 363	153 814	191 851
% Increase to Previous Year		216.0%	178.4%	82.7%	83.4%	42.2%	31.5%	43.4%	66.6%	26.6%	37.6%	18.1%	35.7%	17.1%	20.8%	19.8%	24.7%
Number of observations	2	5	13	19	33	47	62	92	140	170	215	260	322	374	422	469	522
Variance	1615	1609	1597	1601	1586	1571	1567	1579	1599	1697	1852	1674	2086	2083	3105	7900	12459
Standard Deviation	40.18	40.11	39.97	40.01	39.82	39.64	39.58	39.74	39.98	41.19	43.04	40.92	45.68	45.64	55.72	88.88	111.62
Confidence Interval for Total Article Count	5667	5657	5636	5643	5616	5589	5583	5605	5639	5809	6070	5771	6442	6436	7858	12534	15742
Nr of Journals	20	49	111	161	264	385	515	741	1135	1387	1815	2251	2837	3315	3790	4246	4767
% Increase to Previous Year		60.0%	55.4%	31.3%	38.0%	31.4%	25.3%	30.4%	34.8%	18.2%	23.5%	19.4%	20.7%	14.4%	12.5%	10.7%	11.0%
Annual Average of Articles per Journal	12.5	15.8	19.6	24.6	27.6	26.9	26.4	26.4	28.6	29.7	31.2	29.7	32.0	32.1	33.9	36.2	40.2
Confidence Interval For Annual Average	1.10	1.09	1.09	1.09	1.09	1.08	1.08	1.08	1.09	1.12	1.17	1.12	1.24	1.24	1.52	2.42	3.04

doi:10.1371/journal.pone.0020961.t002

Ποσοστά open Access

	All articles 2009	OA-articles 2009	Share of OA
Ulrich's	1 470 000	112 782	7.7%
Scopus	1 391 438	94 160	6.8%
ISI	1 033 610	61 436	5.9%

Η επανάσταση της επικοινωνίας

Μέσα επιστημονικής κοινωνικής δικτύωσης

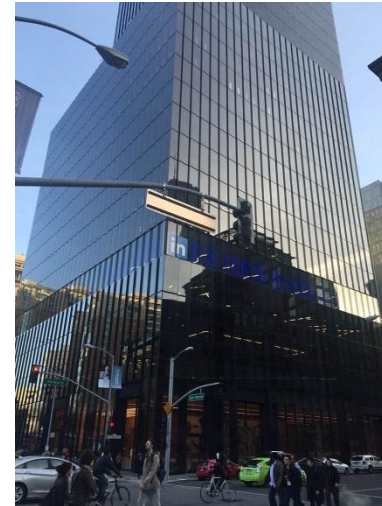
1997-2001 SixDegrees

Αυτό-αρχαιοθήκη

2003- LinkedIn 400 M μέλη σε
περισσότερες από 200 χώρες

2008-ResearchGate 9 M μέλη

2008-Academia.edu 34 M μέλη



Η επανάσταση της πληροφορίας

Βάσεις μεγα-δεδομένων - Big Datasets

Η διαφοροποίηση των βάσεων
Μεγα-Δεδομένων από τις
συμβατικές στηρίζεται :

στον όγκο (*volume*)



Πολύ μεγάλος αριθμός δεδομένων terabytes (10^{12})–petabytes (10^{15})-hexabytes (10^{18})

στην ταχύτητα (*velocity*)



Υψηλοί ρυθμοί αύξησης της πληροφορίας

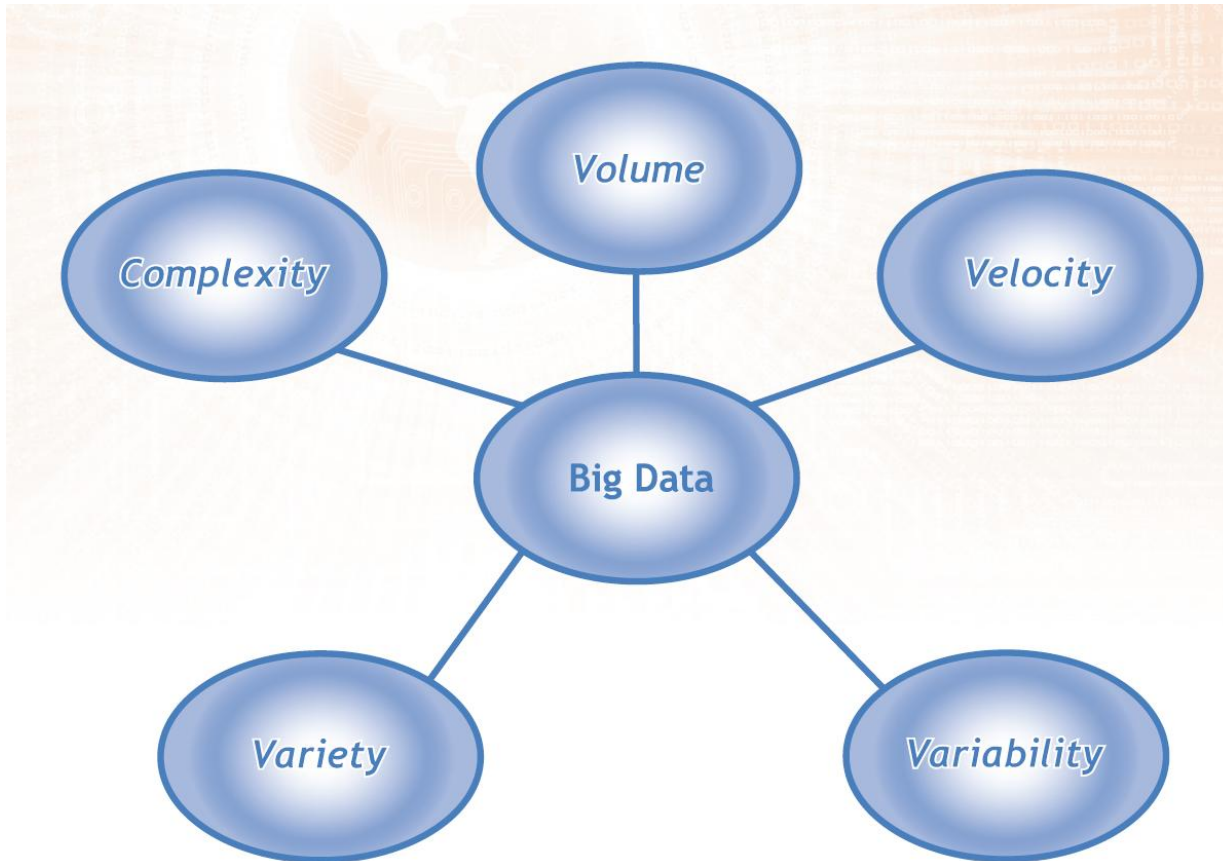
στην ποικιλία (*variety*)

στη μεταβλητότητα
(*variability*)



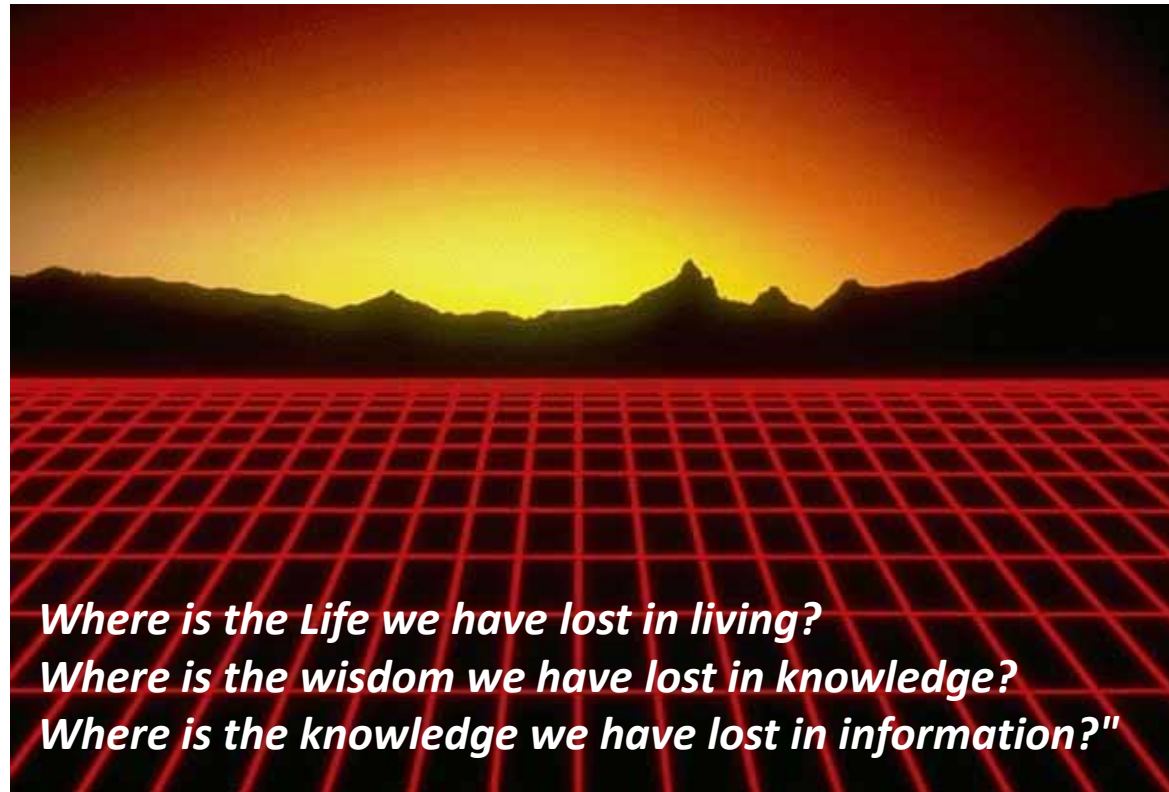
Υψηλός βαθμός ποικιλίας και
πολυπλοκότητας της πληροφορίας

στην πολυπλοκότητα
(*complexity*)





**Thomas Stearns Eliot
(1888-1965)**



***Where is the Life we have lost in living?
Where is the wisdom we have lost in knowledge?
Where is the knowledge we have lost in information?"***

Big Data

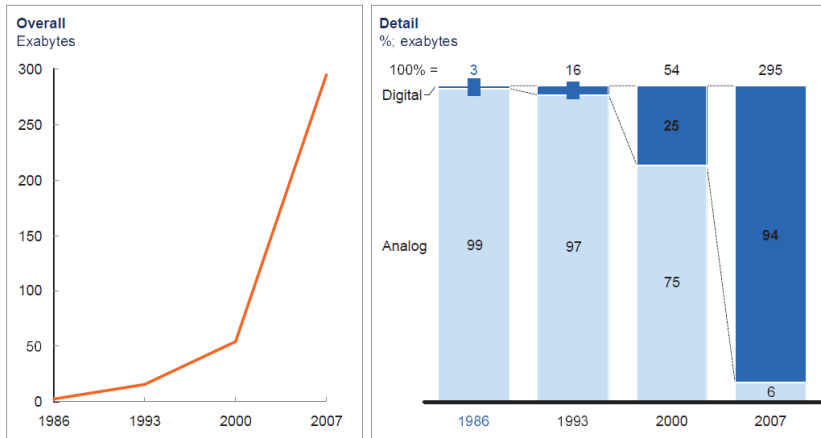
Μέτρηση στη βάση bytes TB,PB,EB

Τρόποι κωδικοποίησης (π.χ. SMILES)

Ψηφιακή αποθήκευση

Data storage has grown significantly, shifting markedly from analog to digital after 2000

Global installed, optimally compressed, storage



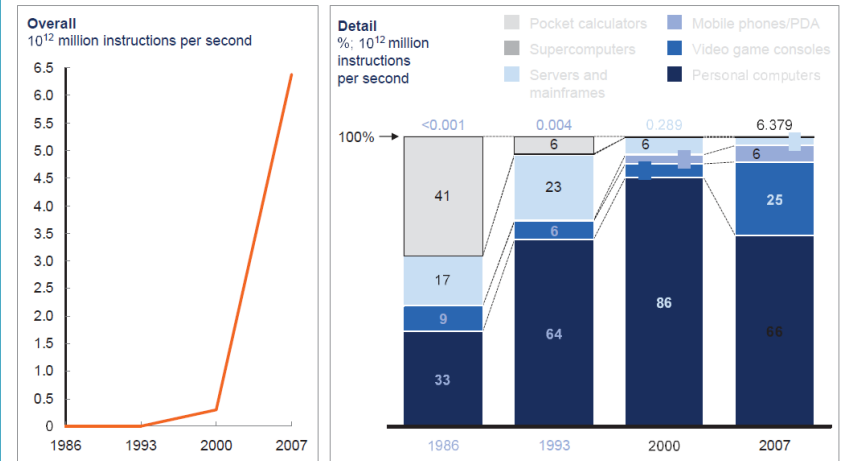
NOTE: Numbers may not sum due to rounding.

SOURCE: Hilbert and López, "The world's technological capacity to store, communicate, and compute information," *Science*, 2011

Αύξηση της υπολογιστικής ικανότητας

Computation capacity has also risen sharply

Global installed computation to handle information



NOTE: Numbers may not sum due to rounding.

SOURCE: Hilbert and López, "The world's technological capacity to store, communicate, and compute information," *Science*, 2011

Συμβολή των βάσεων mega-δεδομένων στην Υγεία

Big data: The next frontier for innovation, competition, and productivity

McKinsey Global Institute

Η έρευνα McKinsey (2011) υποστηρίζει ότι η ανάλυση mega-δεδομένων στις ΗΠΑ θα μπορούσε να μειώσει το κόστος της υγείας περίπου κατά 300 δισεκατομμύρια \$ το χρόνο

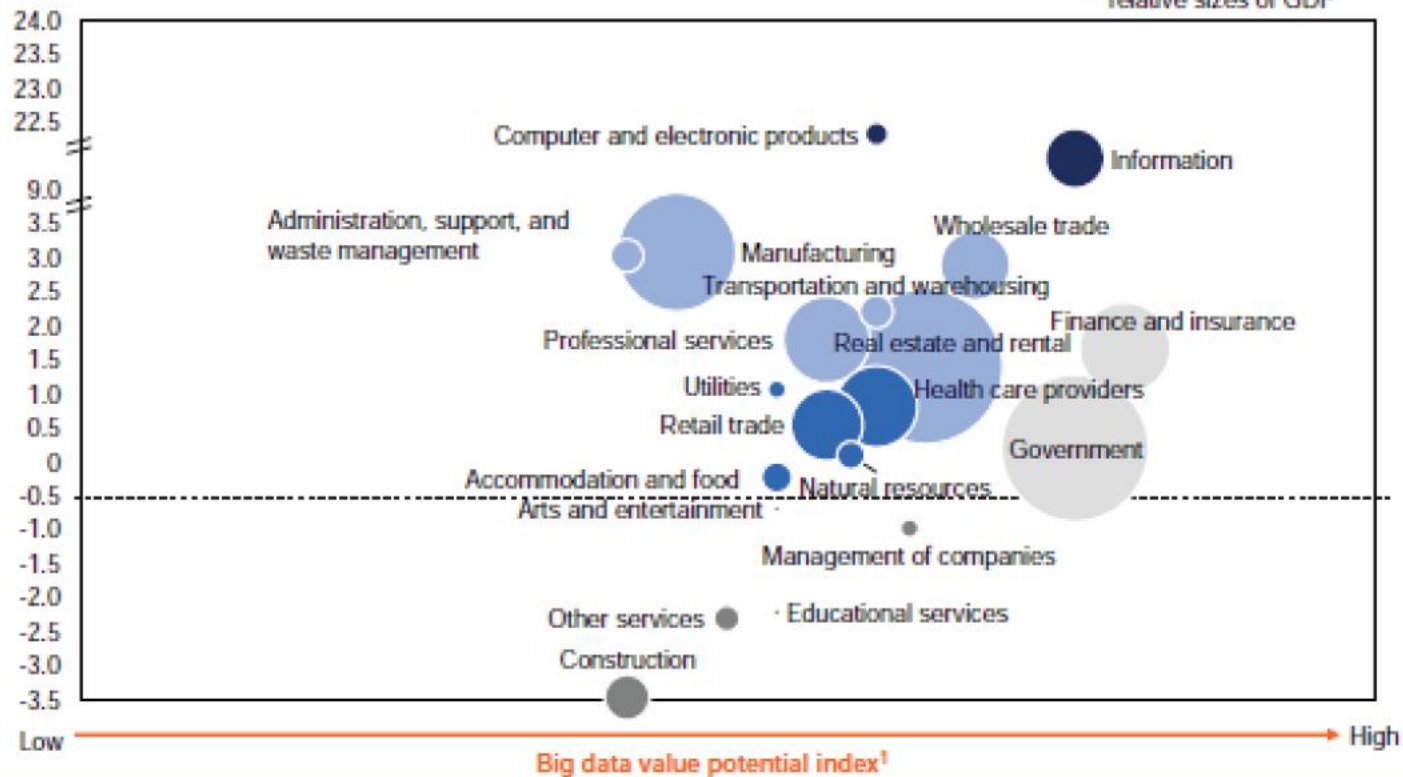
2012 : Ο Obama ανακοίνωσε τη διάθεση > 200 M \$ για το πρόγραμμα

Big Data Research and Development Initiative

Some sectors are positioned for greater gains from the use of big data

Historical productivity growth in the United States, 2000–08

%



Big data: the next frontier for innovation in therapeutics and healthcare

Issa et al *Expert Rev Clin Pharmacol.* (2014) 7: 293–298.

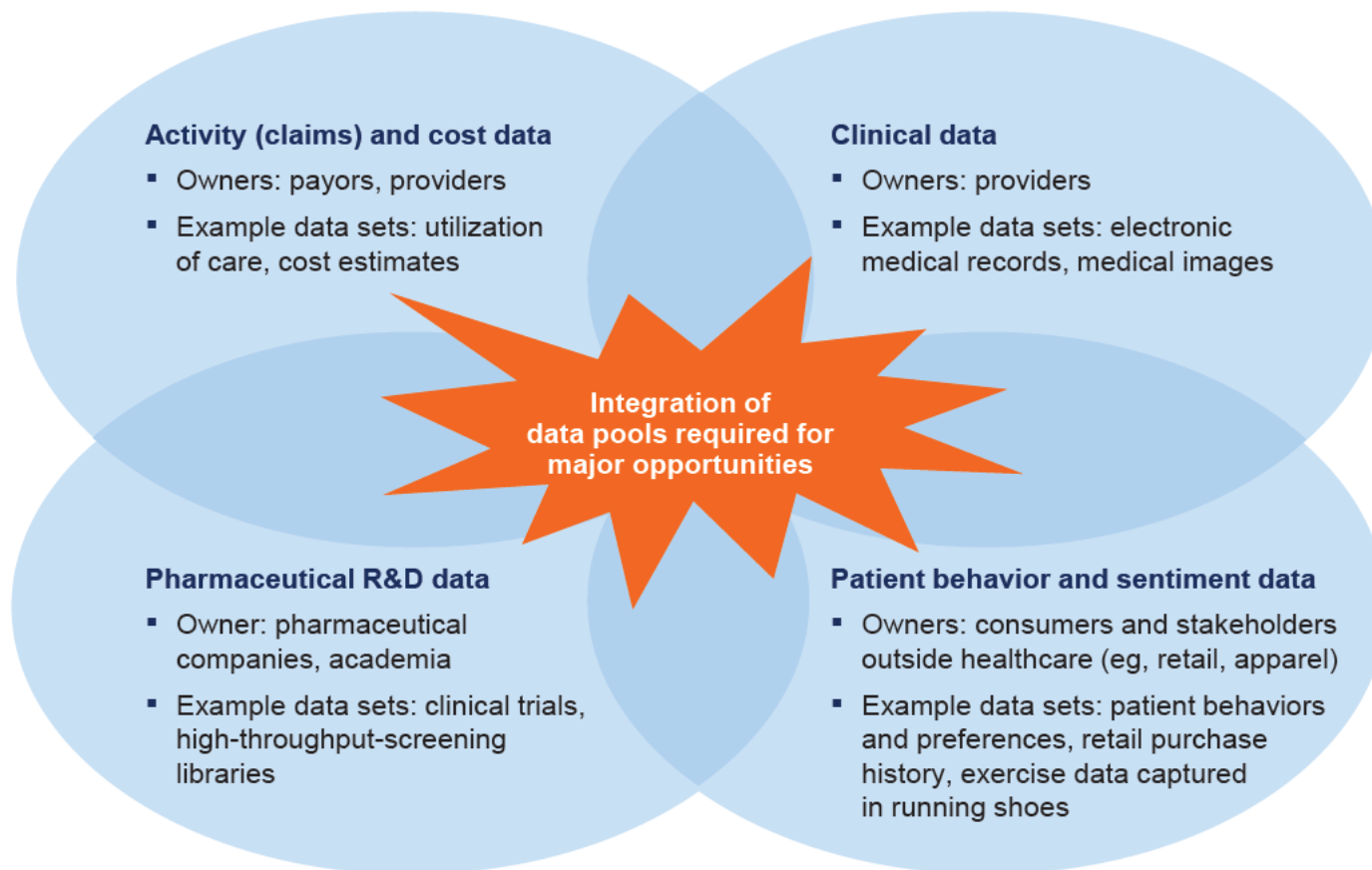
Big data in clinical discovery

Big data in systems medicine & pharmacology

Big data & toxicity prediction

Big data & electronic medical records

Πρωτογενείς δεξαμενές δεδομένων στην καρδιά της ‘επανάστασης’ των μεγα-δεδομένων στην φροντίδα υγείας

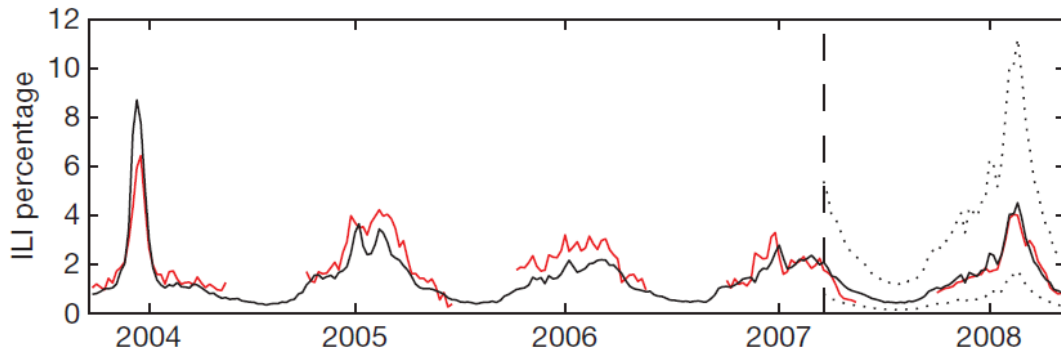


Παράδειγμα συμβολής των mega-δεδομένων στη φροντίδα υγείας

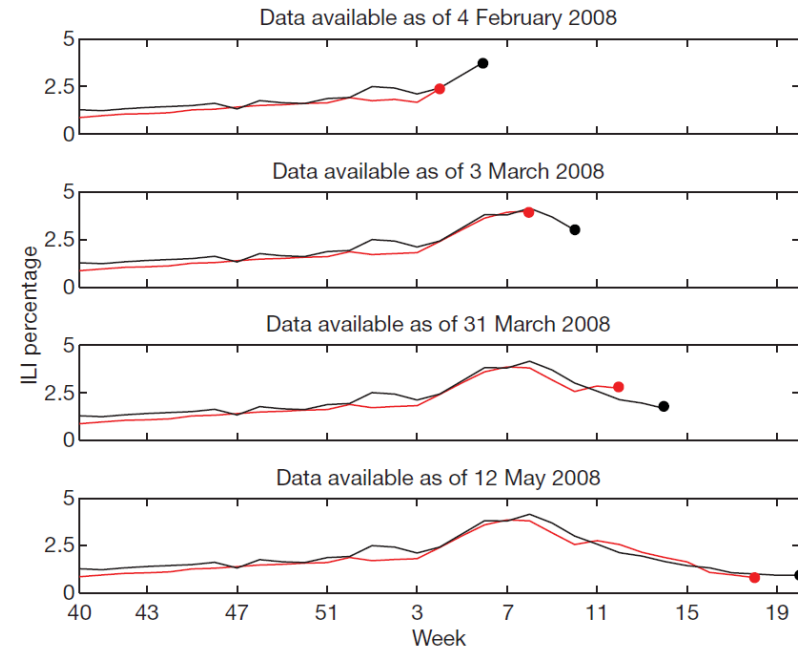
Google: η μεγαλύτερη βάση δεδομένων- επεξεργάζεται
~24 petabytes (10^{15}) πληροφορίες την ημέρα,

Ανάλυση των queries των χρηστών οδήγησε σε πρόβλεψη της γρίπης το 2009

Ginsberg et al., 2009



ILI percentages estimated by the model (black) and provided by the CDC (red) in the mid-Atlantic region, showing data available at four points in the 2007-2008 influenza season



Αξιοπιστία δεδομένων

Full Papers

QSAR & Combinatorial Science



Are the Chemical Structures in Your QSAR Correct?

Douglas Young^{a*}, Todd Martin^a, Raghuraman Venkatapathy^b, and Paul Harten^a

^a US Environmental Protection Agency, 26 West Martin Luther King Drive, Cincinnati, OH 45268, USA;
E-mail: young.douglas@epa.gov

^b Pegasus Technical Services, 26 West Martin Luther King Drive, Cincinnati, OH 45268, USA

Keywords: Databases, *N*-octanol/water partition coefficient, Quantitative structure-activity relationships, SMILES

Received: June 26, 2008; Revised: August 13, 2008; Accepted: August 21, 2008

DOI: 10.1002/qsar.200810084

Θεραπεία δεδομένων
Data Curation

OpenFacts

Ποσοστά σφαλμάτων
απο **0.1** ως **3.4-10** % ανάλογα με τη βάση δεδομένων

Τόσο τα χημικά όσο και τα βιολογικά
δεδομένα μπορεί να μην είναι ακριβή και να
απαιτούν 'θεραπεία' (curation)

700,000 bioassays

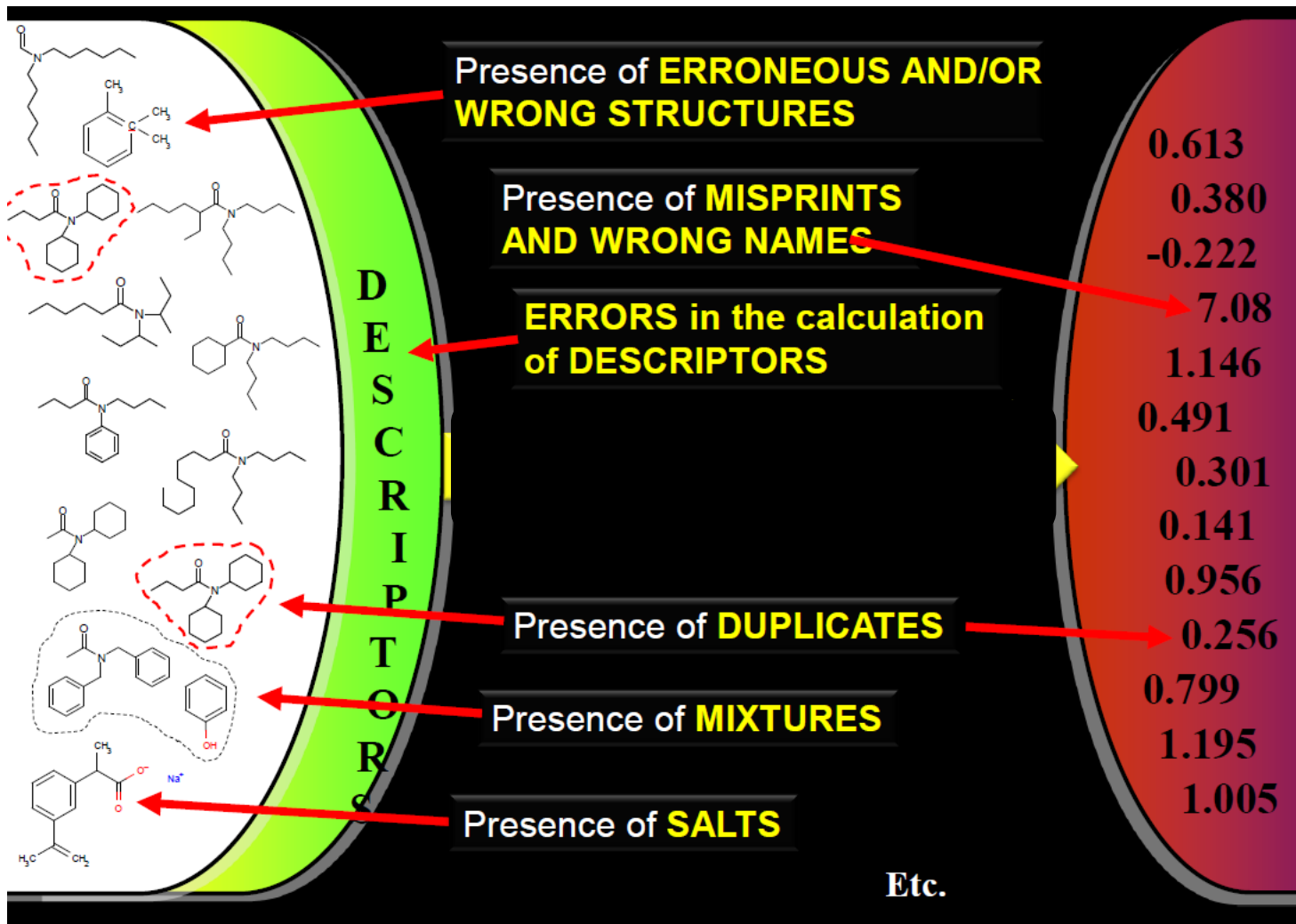
☒ 200,000,000 bioactivity outcomes

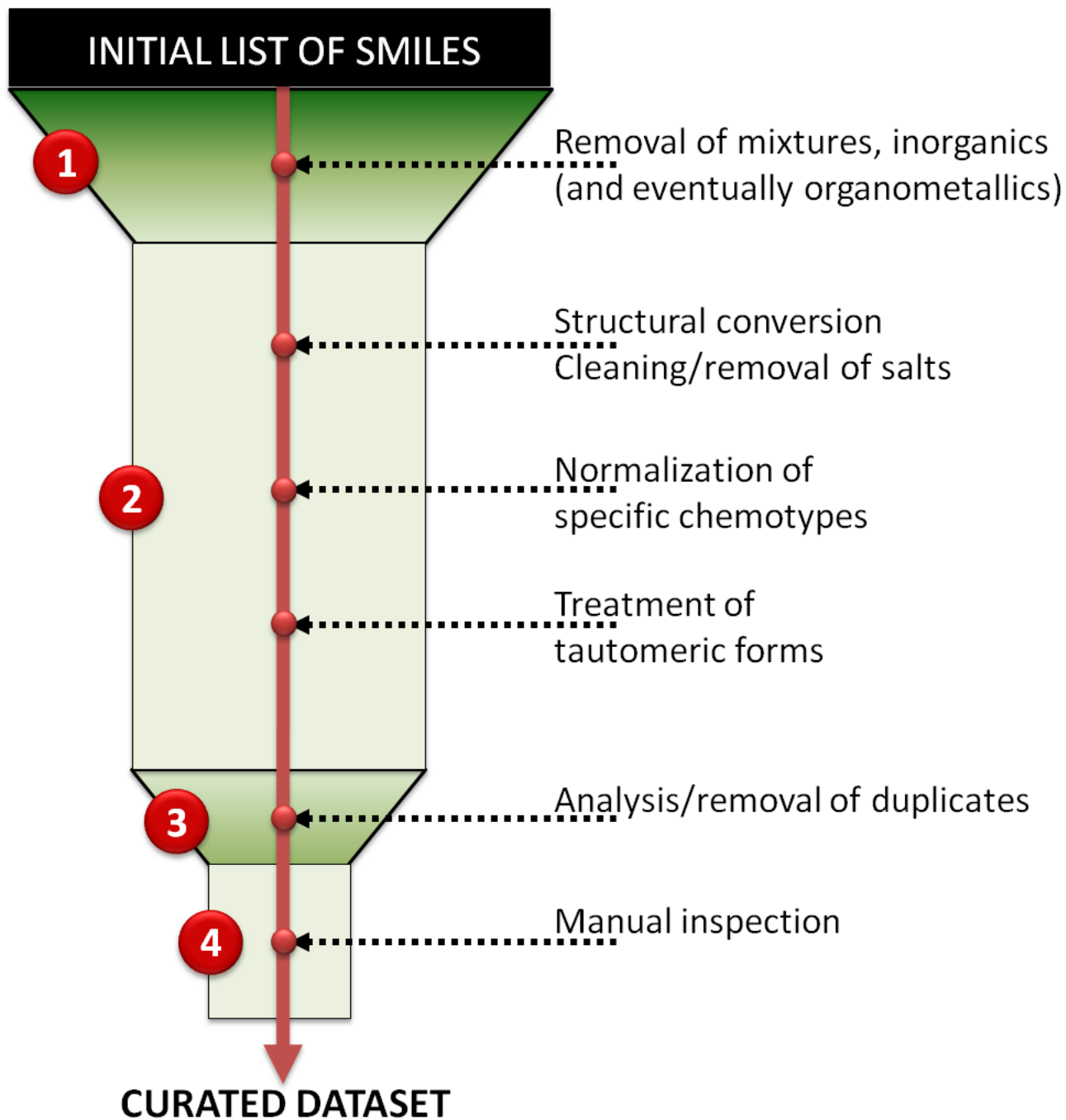
☒ 1,200,000,000 data points

☒ 2,800,000 small molecule samples

☒ 1,900,000 chemical structures

☒ 108,000 RNAi reagents





Στατιστικά εργαλεία

Βασική στατιστική π.χ. μέσοι όροι, αθροίσματα, ανάλυση παλινδρόμησης

Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα
Αναγνώριση προτύπων

Μείωση διαστάσεων στο χώρο- επιλογή
χαρακτηριστικών

Ανάλυση Κυρίων Συνιστωσών (PCA)
Ανάλυση Μερικών Ελαχίστων Τετραγώνων
(PLS)

Προβολή σε Λανθάνουσες
Μεταβλητές/Δομές

Ταξινόμηση

Μηχανές εκμάθησης (Machine learning)
Decision trees
Support Vector machines
Ant colonies
Πειραματικός Σχεδιασμός

Ανάλυση Fourier
Μετασχηματισμοί Wavelet

Βάσεις Δεδομένων

Chemical Abstracts Service: CAS REGISTRY... www.cas.org/content/casdatabases	Δεδομένα για 117 Μ μικρά μόρια	Χημικές δομές, χημικές ονομασίες, πειραματικά δεδομένα, υπολογιστικές τιμές	Βιβλιογραφία από το 1800
Reaxys www.reaxys.com	Συγχωνευθείσες βάσεις δεδομένων 9 Μ (<i>Beilstein</i>), 2.5 Μ (<i>Gmellin</i>) & <i>Patents chemistry</i>	Χημικές και φυσικές ιδιότητες, μέθοδοι παρασκευής, χημική συμπεριφορά/αντιδραστικότητα-σχεδιασμός σύνθεσης	10 Μ χημικές αντιδράσεις και ιδιότητες Βιβλιογραφία από το 1771; κυρίως FCS data
ZINC zinc.docking.org	Πάνω από 2,7 Μ εμπορικά διαθέσιμες ενώσεις	Δομές 3- D δραστηκότητα, IC50 (εάν διαθέσιμες)	Ελεύθερη βάση δεδομένων για εικονική διαλογή- υποβάσεις ανάλογα με τον προμηθευτή ή άλλα κριτήρια (π.χ. κανόνας Lipinski, κλπ) (V)CS and FCS compounds

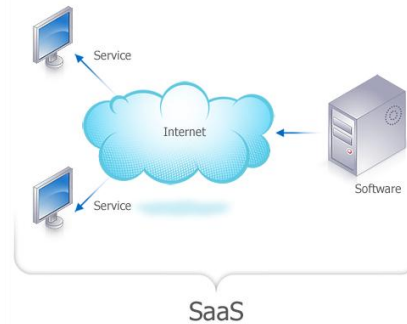
ChEMBL European Bioinformatics Institute www.ebi.ac.uk/chembl/	Μοριακοί στόχοι: 11.019; Ενώσεις ~ 2 Μ; Δεδομένα δραστικότητας: 13.967.816	Δραστικότητα και τιμές IC50	FCS compounds
PubChem pubchem.ncbi.nlm.nih.gov	Ενώσεις 140 Μ Δοκιμασθείσες ενώσεις 3 Μ δεδομένα βιοδραστικότητας 226 Μ Βιολογικές μέθοδοι 1 Μ protein target ca. 6 (Cheng et al. 2014)	Βιοδραστικότητα και φυσικοχημικές ιδιότητες	FCS compounds compounds, bioassay, bioactivity, target, patent data
Therapeutic Target Database	Γνωστοί στόχοι φαρμάκων, βιοχημικά μονοπάτια και αντίστοιχα φάρμακα		

Ηλεκτρονικά σύννεφα-Cloud computing



Storage as a service (StaaS) -dropbox

Software as a service (SaaS)



Platform as a Service (PaaS)

παρέχει την πλατφόρμα την οποία χρησιμοποιεί ένας χρήστης για να δημιουργήσει κάτι, για παράδειγμα ένα web application, χωρίς να εγκαταστήσει τίποτα.

Database as Service (DaaS)

Μία υπηρεσία online παρέχει την βάση δεδομένων την οποία μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε με κάποιο web application. Πληρωμή ανάλογα με τη χρήση

Public cloud



Flexibility to access the resources you need,
when you need them.

Private cloud

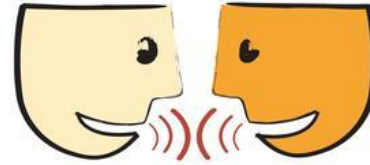


The additional level of security you want
with the benefits of cloud.



Why we publish

Το παρελθόν το παρόν και το μέλλον της επιστημονικής επικοινωνίας



Where is the Life we have lost in living?

Where is the wisdom we have lost in knowledge?

Where is the knowledge we have lost in information?



Σας ευχαριστώ!!