



Cahier de laboratoire électronique Biovia ELN (Dassault Systemes)

Un exemple utilisé à l'IBS
Pas sponsorisé par Dassault:)

Cedric Laguri /Chargé de Recherche CNRS
Auriane Denis-Meyere



- Présentation du cahier de laboratoire
- Retour des utilisateurs
- Remarques générales

Contexte du cahier électronique à l'IBS

Biologie Structurale

300 personnes

150 « non
permanents »

Biologistes

Chimistes

Physiciens

- Protocoles
- données brutes (fichiers numériques, images...)
- données traitées et analysées
- Scripts (morceaux de programmes)
- Informatique : Open-source
Linux/ Windows/Mac

Comment assurer pérennisation /transmission des
savoirs

Travail collaboratif

Presentation du cahier de laboratoire : Biovia ELN (version cloud)

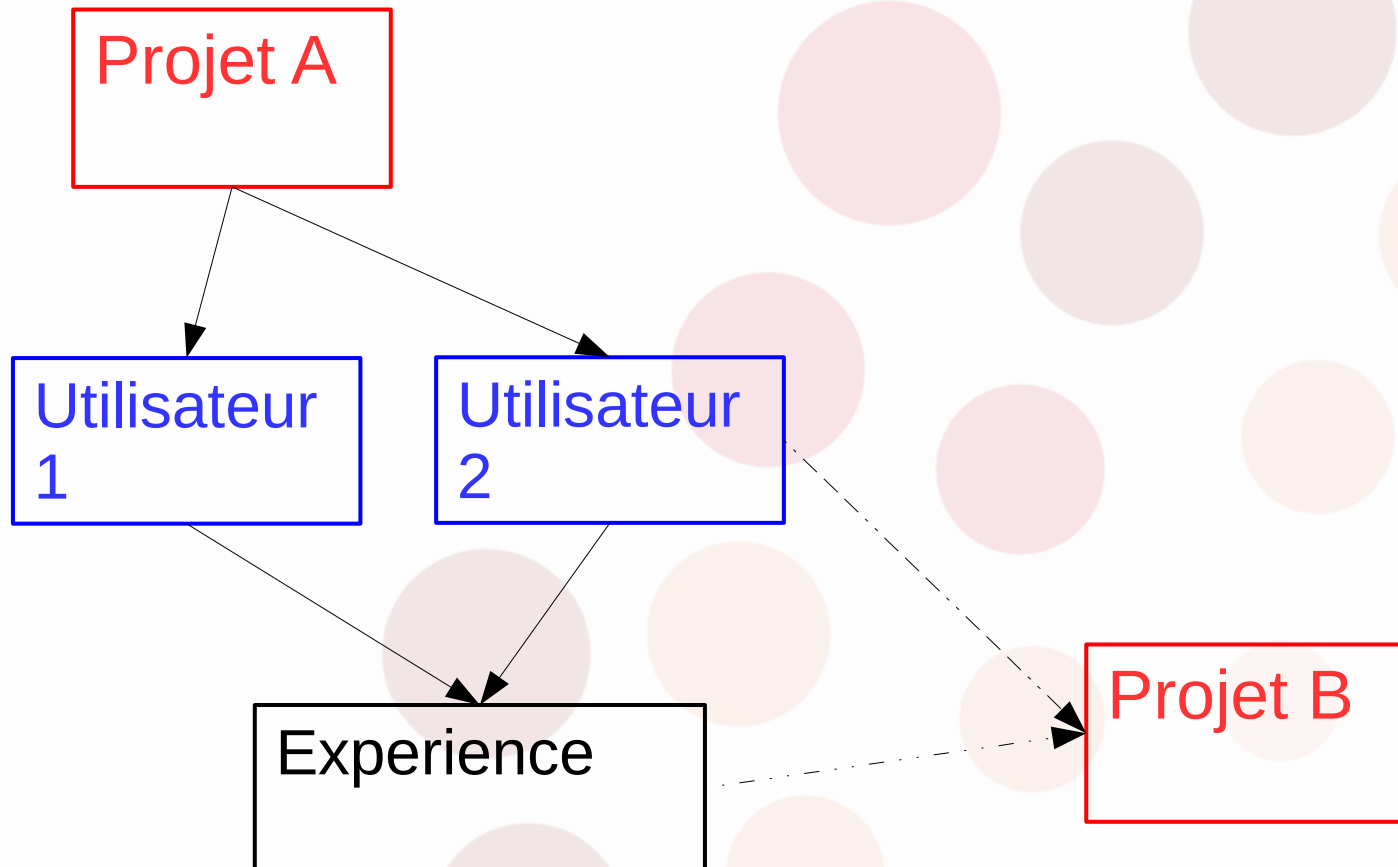


- Windows et Mac avec installation plugin (quelques fonctionnalités non gérées par Linux)
- Client Windows
- Stockage sur Cloud externe (USA) ou interne à l'institut
- Accès par Interface Internet (Firefox, SAFARI, IE)
- Créé par Dassault Système /Biovia

Coût négociable à grande échelle, actuellement **100€/an** pour une licence avec hébergement des données.

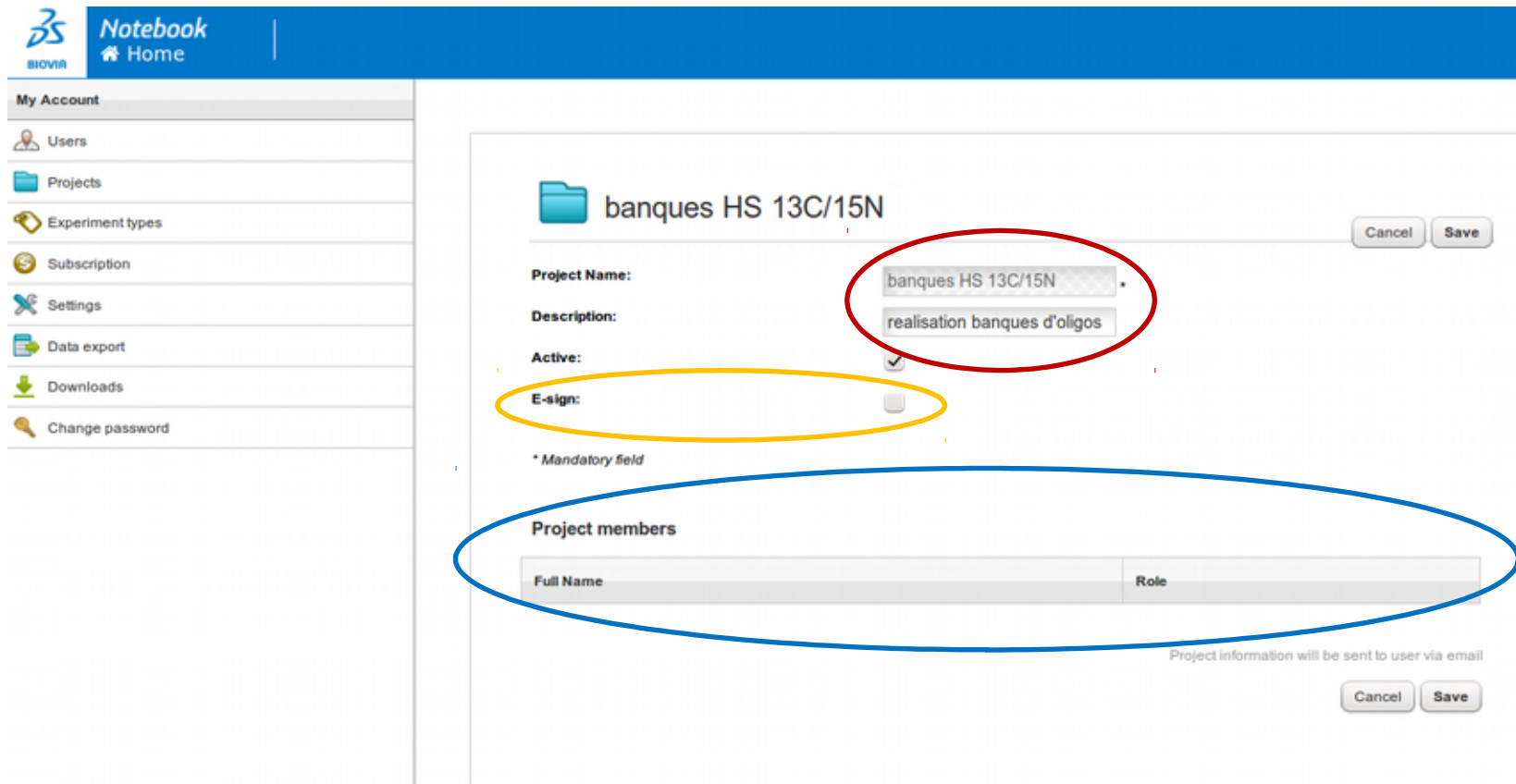
Environ **4500** utilisateurs dans le monde sur 20 sites :
Industriels : HEINZ, Evotec (Drug Discovery)
Academiques : Yale University

Organisation du cahier de laboratoire



Organisation simple, assez lineaire mais non personnalisable

Structure du cahier en projet/expérience/section



My Account

- Users
- Projects
- Experiment types
- Subscription
- Settings
- Data export
- Downloads
- Change password

banques HS 13C/15N [Cancel] [Save]

Project Name: banques HS 13C/15N

Description: realisation banques d'oligos

Active: ☒

E-sign: ☐

* Mandatory field

Project members

Full Name	Role
-----------	------

Project information will be sent to user via email

[Cancel] [Save]

Inclusion ou non
de signature
électronique

Définition de tous les participants, de leur
rôle (rédacteur, valideur...) et de leur droit
(lecture et/ou écriture...)

Users

Create new user

You have reached the maximum number of active users allowed by your subscription. To be able to create a new active users you must either purchase additional seats or de-activate existing users.

Full Name	User Name	Active	Email	Last Login
 Laguri, Cedric	cedric.laguri	☒	cedric.laguri@ibs.fr	2014-10-13 09:24:49
 Maurin, Damien	damien.maurin	☐	damien.maurin@ibs.fr	
 Pegeot, Mathieu	mathieu.pegeot	☐	mathieu.pegeot@ibs.fr	2013-02-13 13:58:40
 Lortat-Jacob, Hugues	hugues.lortat-jacob	☐	hugues.lortat-jacob@ibs.fr	
 Sadir, Rabia	rabia.sadir	☐	rabia.sadir@ibs.fr	2013-03-01 14:54:35
 Vives, Romain	romain.vives	☐	romain.vives@ibs.fr	2013-02-15 13:16:50
 Bourcier, Sebastien	sebastien.bourcier	☐	sebastien.bourcier@ibs.fr	2013-02-20 15:28:04
 Seffouh, Amal	amal.seffouh	☐	amal.seffouh@ibs.fr	2013-03-28 15:49:30
 ancelet, sarah	sarah.ancelet	☐	sarah.ancelet@ibs.fr	2013-02-22 10:06:05
 prechoux, aurelie	aurelie.prechoux	☐	aurelie.prechoux@ibs.fr	2014-03-06 15:57:00

Autant d'utilisateurs que de licences/tickets achetés

Gestion par l'administrateur

Connected to Notebook

Page d'accueil de l'auteur



The screenshot shows the BIOVIA Notebook Home interface. The sidebar on the left contains the following sections:

- My Searches
- My Notebook (highlighted with a red circle)
- Me as Author
- Shared with Me
- Me to Lock (highlighted with a yellow circle)
- Personal Templates
- My Submissions (highlighted with a purple circle)
 - Me to Submit
 - Me to Sign
 - Rejected by Co-Signer
 - Waiting for Co-Signer
 - Submitted by Me
 - Co-Signed by Me
- All Notebooks
 - All Experiments
 - Public Templates

The main content area is titled "Notebook of Laguri, Cedric" and contains:

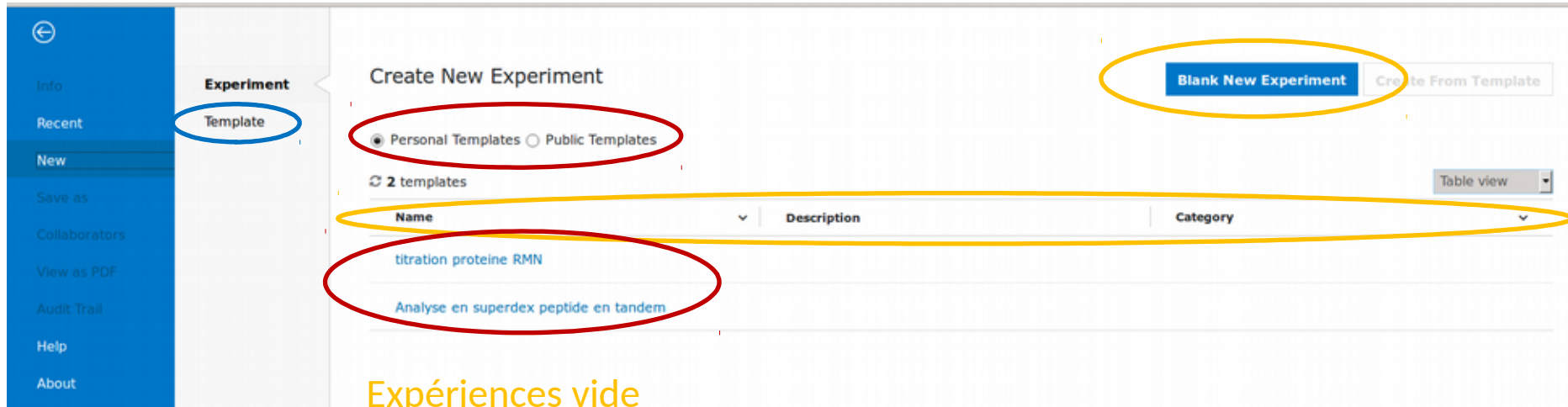
- A "Recently Updated Experiments" list with three entries, each with a lock icon (highlighted with a yellow circle):
 - Analyse liquid/ssNMR des LPS de P. Arguginosa (EXP-15-CC8762, 4 days)
 - Preparation des interactions avec les bibliotheques d'oligos d'HS (EXP-15-CC8763, 4 days)
 - Expression/purification LptC UD AILV methyl 1H et chaines 13C pour attribution (EXP-15-CC8759, 11 days)
- A "+ Start New Experiment" button.
- A "Reminder List" section with two sub-sections:
 - "Me to Lock" (highlighted with a yellow circle) showing "No experiments to lock".
 - "Me to Submit" showing 2 experiments, with the first one being "Analyse liquid/ssNMR des LPS de P. Arauginosa".

The footer indicates "Last Updated 09 Jun 2015, 09:38:16".

Expériences en cours

Expériences à verrouiller (signature auteur)

Validation des expériences (signature témoin)



The screenshot shows the 'Create New Experiment' page. On the left is a blue sidebar with a back arrow and menu items: Info, Recent, New (highlighted), Save as, Collaborators, View as PDF, Audit Trail, Help, and About. The main area has a 'Template' button circled in blue. Below it, 'Personal Templates' and 'Public Templates' are circled in red. A yellow oval highlights the 'Blank New Experiment' button and the 'Create From Template' button. A yellow oval also highlights the table of templates. The table has columns: Name, Description, and Category. Two templates are listed: 'titration proteine RMN' and 'Analyse en superdex peptide en tandem', both circled in red. A 'Table view' dropdown is in the top right.

Name	Description	Category
titration proteine RMN		
Analyse en superdex peptide en tandem		

Expériences vide

Expériences prédéfinies dans la description et les étapes à suivre

Création de template à partir d'expériences déjà validées

Passage d'une experience « mise au point » a une experience de routine

Exemple d'expérience



Notebook
Experiment

Digestion HepIII de 1mg C5Dec et C5simu et analyse des oligos
EXP-13-CC8708 (You: Author)

Sections

- Body Text
- Text Field
- Image
- Excel Worksheet
- Word Document
- PDF Document
- File Attachment
- Chemical Sketch
- Chemical Reaction
- Date
- Errata Section
- Project
- Experiment Type
- Related Experiments
- My Sections
- Deleted Sections

Experiment no.: EXP-13-CC8708

Author: Laguri, Cedric (CEDRIC.LAGURI)

Date Started: 11 Apr 2013 17:30 (UTC + 2)

Title: Digestion HepIII de 1mg C5Dec et C5simu et analyse des oligos

Project: C5epi/2OST

Related Experiments: EXP-13-CC8700 [analyse de l' action combinée C5/2OST pour réaliser des domaines epi-2S 22/1/13]

Date: 2013-03-27

But

Purifier et identifier la structure des oligosaccharides des echantillons C5_Dec et C5_simu (voir expce EXP-13-CC8700) générés par digestion extensive par HepIII.
Oligos posséderont en théorie tous une majorité d'IdoA2S

Echantillons

- C5_Dec lyophilisé= 3.95mg repris à 5mg/ml dans H2O (ajout 790µl)
- C5_simu lyophilisé=4.95mg repris à 5mg/ml dans H2O (ajout 990µl)

Digestions HepIII de 1mg de C5_Dec et C5_simu

Chaque digestion: 1mg de polysaccharide

- 200µl (C5Dec ou C5Simu à 5mg/ml dans H2O) + 1800µl tampon heparinase (5mM Tris PH7.5, 10mM NaCl, 2mM CaCl2, 0.1mg/ml BSA)
- Ajout 10mU/ml d'enzyme finale (HepIII) (0.8µl de 25mU/µl dans chaque reaction)
- Incubation 25°C 24h (Début 11h00)
- Lendemain matin 27/3/13 denaturation 95°C 10min
- 14000g 5min Gros culot (BSA?)
- 25µl de chaque prélevés et injecté superdex peptide: Digestion incomplète?
- on rajoute a 14h 5mU/ml HepIII final dans chaque echantillon
- lendemain denaturation 95°C 10minutes
- On reinjecte 25µl de C5 Simu: Meme profil que la veille OK digestion HepIII complète

Analyses en Superdex Peptide en tandem de C5Dec HepIII, C5Dec HepIII 25µl de digestion

Last Changed 26 Jun 2013 by Me

Génération
automatique du
N° d'expérience

Insertion de
fichiers facile et
modifiables en
« ligne » pour les
.doc et .xls

Outil de design
de molécules ou
de réactions
chimiques

Liens entre
expériences

Ajouter des
sections

Insertion différents types de fichiers

Notebook Experiment Purification de la 2-OST avec TAG Histidine
EXP-13-CF8015 (You: Contributor)

Sections

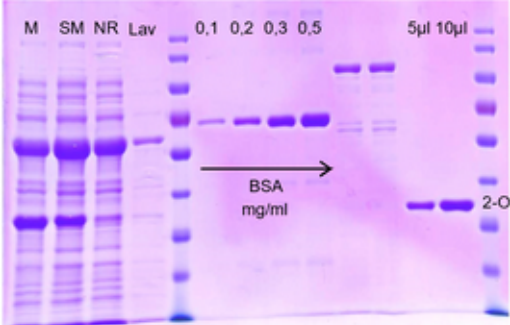
- Body Text
- Text Field
- Image
- Excel Worksheet
- Word Document
- PDF Document
- File Attachment
- Chemical Sketch
- Chemical Reaction
- Date
- Errata Section
- SDFile
- Project
- Experiment Type
- Related Experiments

My Sections

Deleted Sections

130529 Gel SDS 10% - Purif 2-OST His sur Ni-NTA - 5µl échantillon

Image1.jpg



M : éch microfluidizer
SM : Surnageant centri après microfluidizer
Dépôts de 5 et 10µl 2-OST d'1 mélange 5µl pool 2-OST + 15µl PBS

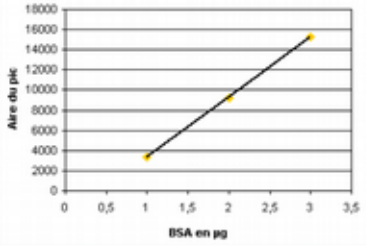
130530 Quantification de la 2-OST-Histidine

sheet1.xls

µg BSA	Aire du pic
1	3331,255
2	9255,347
3	15245,13
5	19651,1

=> dernier point enlevé saturé...

Gamme de BSA



Last Changed 18 Jul 2013 by prechoux, aurelie All Changes Saved

Images avec editeur image
integre (Fleches/legendes)
Excel/word editables
(windows)
PDF visibles
Toutes sortes de fichiers
attachés.
Limite de taille d'une
experience environ 10Mo

Texte des
legendes/pdfs/word/excel
indexes pour recherche par
mot-clé

Description des expériences/sections personnalisables

Notebook Experiment | Preparation des interactions avec les bibliotheques d'oligos d'HS
EXP-15-CC8763

My Sections

- RMN integration PNPS calcul PAPS
- Essai precipitation 1 HS naturels celsius + SDFg 13C/15N hsnat gamma
- Analyse en hplc propac PA1 analytique**
- Reaction de epi/2S /ASTIV
- Superdex 200 10/300 GL 2OST
- reaction modification C5/2OST/ASTIV
- composition milieu M9
- Transformation 6/2/13
- Analyse en Superdex Peptide en tandem de C5Dec HepI, C5Dec HepIII, C5Simu HepI, C5Dec HepIII
- Digestions HepI ou HepIII de C5Dec et C5Simu suivi de Superdex peptide en tandem 4/2/13
- Analyse RMN de C5Simu et C5Dec
- Désalage/concentration des échantillons

Analyse en hplc propac PA1 analytique

Colonnes: propac PA1 (echange anions) 4*250 S/N 3580
 Tampon: A: eau HPLC pH 3.5 B: eau HPLC pH 3.5 2M NaCl FD (Tampons Els Saesen)
 Appareil: HPLC
 Débit: 1ml/min Pression 62bars DO230nm
 Collecte: NON
 Boucle Injection 100µl

Echantillons: pics 1,2 et 3 issus de Superdex peptide 50µl échantillon + 50µl de TpA
 Pic1 injecté 2x pour vérifier si le pic à 19 min est un contaminant

Lundi 8 juin15 Text

Vérification en eretic de plusieurs oligos par rapport à 2mM sucrose controle sur tube 3 (dp2)
 -tubes 1.7mm 17 a 22
 -test hsqe se vs hsqe CT pour le mix (t17)

Related Experiments:

- EXP-14-CC8733 [AP - Caractérisation RMN des oligos à cribler]
- EXP-15-CC8761 [Quantification oligos eretic contre sucrose]

Experiment Type: Interaction proteine/sucre

Last Changed Today 09:54 by Me | All Changes Saved

Sections libres

Sections
préenregistrées
personnalisables

Liens avec
d'autres
expériences

Classification de
l'expérience par
catégorie (flag)

Recherche par mot-clé/suivi des expériences



- Recherche avancée avec plusieurs critères
- Sauvegarde de recherches personnalisées

Experiment Search [Clear All Criteria](#)

☐ Include Invalid Experiment ☐ Me to Lock ☐ Recently Viewed

Number EXP-YY Sequence No.

Author

Created Any time

Title

Project

My Role ☐ Author ☐ Contributor ☐ Co-Editor ☐ Co-Signer

Experiment Type

Submitted Any time or never

Submission Experiment ☐ Not Submitted ☐ Partly Submitted ☐ Fully Submitted

Submission Part ☐ Sections to Submit ☐ Author to Sign ☐ Co-Signer to Sign
☐ Part Submitted ☐ Rejected by Co-Signer

Chemical Structure

Reaction Yield: 0 %

Recherche des expériences préliminaires à une manip

AP - Caractérisation RMN des oligos à cribler
EXP-14-CC8733

Experiment no.: EXP-14-CC8733

Author: Laguri, Cedric (CEDRIC.LAGURI)

Date Started: 25 Mar 2014 10:52 (UTC + 1)

Title: AP - Caractérisation RMN des oligos à cribler

Project: banques HS 13C/15N [realisation banques d'oligos]

Experiment Type: RMN

Related Experiments:

- EXP-14-CC8731 [AP - Quantif HPLC des différents disaccharides pour calibration des oligos par RMN]
- EXP-14-CF8051 [Modifications DP4, DP6, DP8 NS par C5/2-OST/6-OST]
- EXP-14-CF8056 [Digestion Hep III des 19,7 mg HSAN IdoA2S 60%]
- EXP-13-CF8028 [Digestion du reste du lot HSAN NS 2S 6S (7,75mg) par Hep I]

140318-21 Préparation des différents oligos

Tubes RMN de 1,7mm - 40µl échantillon
Shim réalisé sur D₂O 10% / H₂O 90% (tube 1)
Estimation de la quantité d'oligos nécessaire à la caractérisation basée sur DP2 NS
- un tube avec 26µg (tube 2)
- un tube avec 12µg (tube 3)

=> A partir de ces analyses, choix de réaliser la caractérisation des oligos avec 6µg d'éch en moyenne.
Protocole pour chaque oligo : cf fichier Excel

Caractérisation du mélange de DP6 issu de la digestion Hep I (labber 8028)
- Analyse avec 100µM comme pour les autres DP6 ;
=> 10,7µl à 374µM, lyophilisé et repris dans 40µl de tampon X en D₂O = tube 17

140321 Calculs pour caractérisation RMN des oligos + numérotation des tubes RMN

140321 Calcul pour caract RMN oligos_ced_AP.xls

SHA512 checksum
k=3U0S+Ozmv10hyPwDq19T718WQx0Jun+zk77OK0Bda850WT3ZrIWgF126bNQ5Bx4gIM6bRQnD59YJ7+o/SA==

Validation(soumission) et Suivi des modifications



Notebook Experiment Preparation des interactions avec les bibliotheques d'oligos d'HS
EXP-15-CC8763

Sections

- Body Text +
- Text Field +
- Image +
- Excel Worksheet +
- Word Document +
- PDF Document +
- File Attachment +
- Chemical Sketch +
- Chemical Reaction +
- Date +
- Errata Section** + Add a date stamp
- Project +
- Experiment Type +
- Related Experiments +

My Sections

Deleted Sections

Considerations pour les oligos.

Oligos: verifier en RMN les oligos avec les memes temps de retention en HPLC pour eventuellement augmenter les quantites

Tubes d'interaction: 1.7mm 40µl en Tp temperature 25deg C 50µM

Analyse en hplc propac PA1 analytique

Colonne: propac PA1 (echange anions) 4*250 S/N 3580
Tampon: A: eau HPLC pH 3.5 B eau HPLC pH 3.5 2M NaCl FD (Tampons Els Saesen)
Appareil: HPLC
Débit 1ml/min Pression 62bars DO230nm
Collecte: NON
Boucle Injection 100µl

Echantillons: pics 1,2 et 3 issus de Superdex peptide 50µl echantillon + 50µl de TpA
Pie1 injecté 2x pour vérifier si le pic a 19 min est un contaminant

Lundi 8 juin15 Text

Vérification en eretic de plusieurs oligos par rapport a 2mM sucrose controle sur tube 3 (dp2)
-tubes 1.7mm 17 a 22
-test hsqc se vs hsqc CT pour le mix (t17)

Related Experiments:

- EXP-14-CC8733 [AP - Caractérisation RMN des oligos à cribler] X
- EXP-15-CC8761 [Quantification oligos eretic contre sucrose] X
- Delete All

Last Changed Today 09:54 by Me All Changes Saved

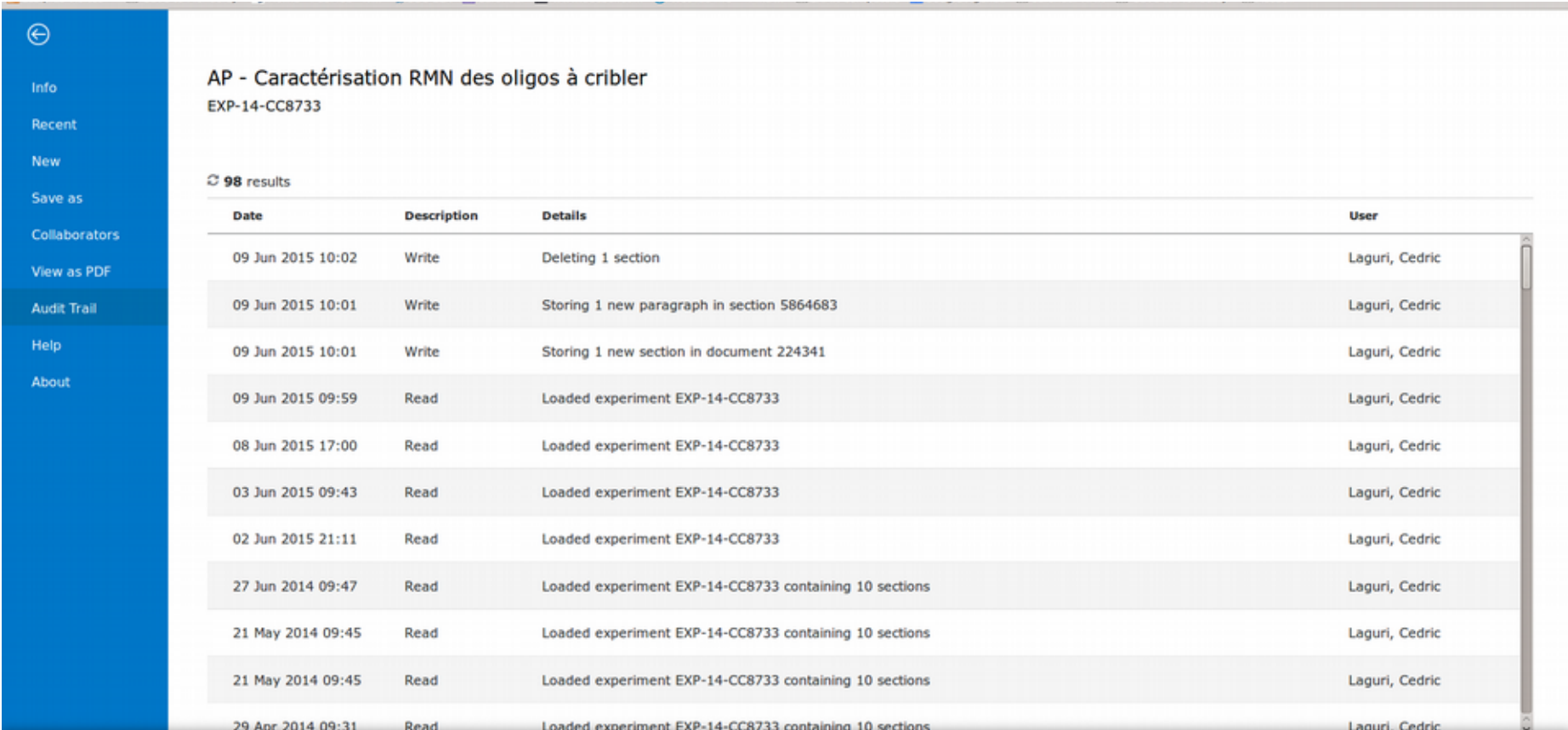
Une fois validée
(verrouillage
puis
soumission)
des
modifications
peuvent être
apportées à
une expérience
sous forme
d'erratum daté

Suivi de toutes les modifications du cahier



Toute utilisation ou modification du cahier est enregistrée dans un journal d'administration mentionnant : date, heure, action et auteur.

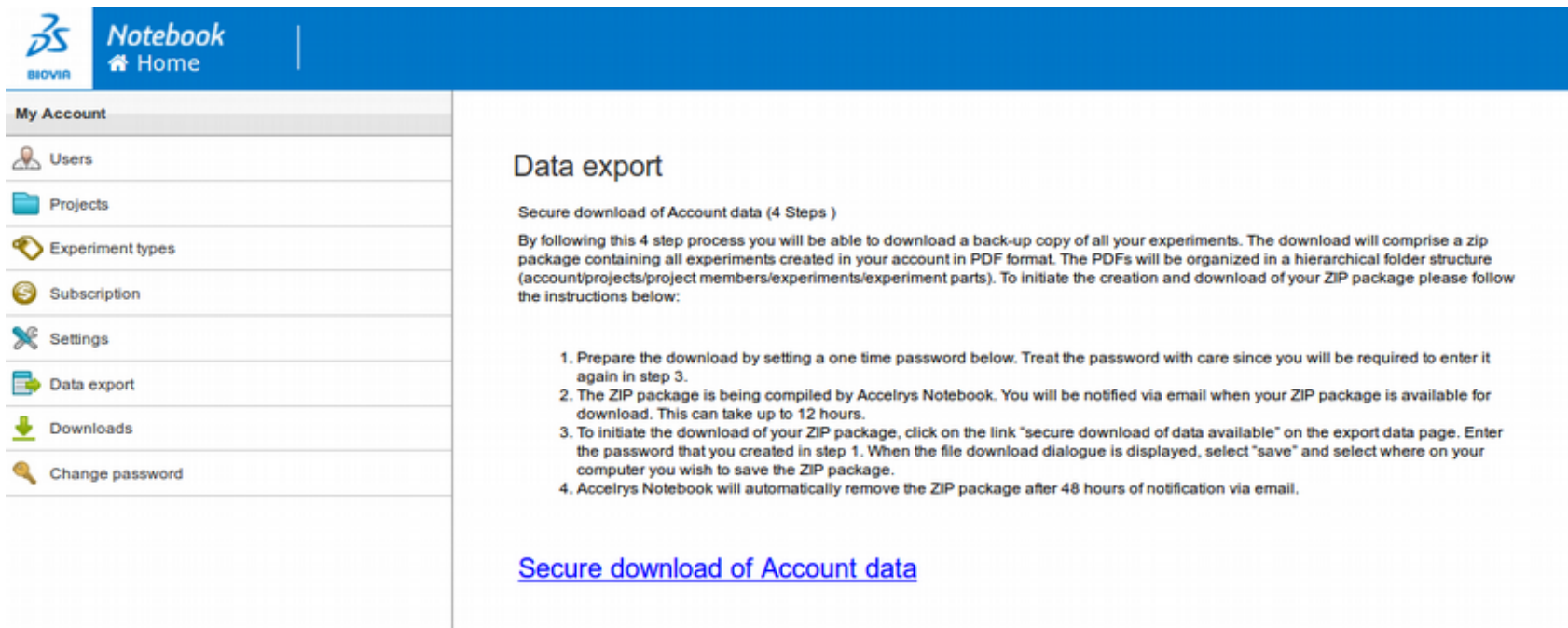
Cet « audit trail » est consultable par projet



Date	Description	Details	User
09 Jun 2015 10:02	Write	Deleting 1 section	Laguri, Cedric
09 Jun 2015 10:01	Write	Storing 1 new paragraph in section 5864683	Laguri, Cedric
09 Jun 2015 10:01	Write	Storing 1 new section in document 224341	Laguri, Cedric
09 Jun 2015 09:59	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733	Laguri, Cedric
08 Jun 2015 17:00	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733	Laguri, Cedric
03 Jun 2015 09:43	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733	Laguri, Cedric
02 Jun 2015 21:11	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733	Laguri, Cedric
27 Jun 2014 09:47	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733 containing 10 sections	Laguri, Cedric
21 May 2014 09:45	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733 containing 10 sections	Laguri, Cedric
21 May 2014 09:45	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733 containing 10 sections	Laguri, Cedric
29 Apr 2014 09:31	Read	Loaded experiment EXP-14-CC8733 containing 10 sections	Laguri, Cedric

La totalité du cahier peut également être exporté pour être archivé à tout moment.
Fichier Zip (projets/utilisateurs/experiences)

Chaque experience : pdf + fichiers attachés



The screenshot displays the Accelrys Notebook web application interface. The top navigation bar is blue with the 'Notebook' logo and a 'Home' link. A left sidebar contains a 'My Account' menu with options: Users, Projects, Experiment types, Subscription, Settings, Data export, Downloads, and Change password. The main content area is titled 'Data export' and includes a section for 'Secure download of Account data (4 Steps)'. This section explains that following a 4-step process will allow users to download a back-up copy of all experiments in PDF format, organized in a hierarchical folder structure. It then lists four steps: 1. Setting a one-time password, 2. Waiting for the ZIP package to be compiled (up to 12 hours), 3. Initiating the download and saving the ZIP file, and 4. Automatic removal of the ZIP package after 48 hours. A blue link at the bottom of the section reads 'Secure download of Account data'.

Notebook
Home

My Account

- Users
- Projects
- Experiment types
- Subscription
- Settings
- Data export
- Downloads
- Change password

Data export

Secure download of Account data (4 Steps)

By following this 4 step process you will be able to download a back-up copy of all your experiments. The download will comprise a zip package containing all experiments created in your account in PDF format. The PDFs will be organized in a hierarchical folder structure (account/projects/project members/experiments/experiment parts). To initiate the creation and download of your ZIP package please follow the instructions below:

1. Prepare the download by setting a one time password below. Treat the password with care since you will be required to enter it again in step 3.
2. The ZIP package is being compiled by Accelrys Notebook. You will be notified via email when your ZIP package is available for download. This can take up to 12 hours.
3. To initiate the download of your ZIP package, click on the link "secure download of data available" on the export data page. Enter the password that you created in step 1. When the file download dialogue is displayed, select "save" and select where on your computer you wish to save the ZIP package.
4. Accelrys Notebook will automatically remove the ZIP package after 48 hours of notification via email.

[Secure download of Account data](#)

Retour des utilisateurs : Groupe de RMN de l'IBS



Experimentation débutée en Juin

3 utilisateurs intensifs

4 utilisateurs occasionnels

Utilisateurs de laboratoire :

- Facilité utilisation
- Cloner experiences/Templates
- Tracabilité
- Integration directe des resultats (images/graphiques/fichiers divers)
- Entrées dans le cahier par ordinateurs sur machines/libre accès
- Recherche par mot clé
- Enorme avantage pour les collaborations
- Utilisateurs multiprojets
- **ATTENTION ORGANISATION EN FONCTION UTILISATEUR**

Points négatifs de la solution dassault : plateforme spécifiques

Manque de fonctionnalités sur Linux :

- Copier-Coller!!!.
- Fort Impact en particulier sur les utilisateurs faisant du calcul /programmation sur ordinateur.
- Copie a partir de pages web (evernote, onenote etc...)

Remarques générales

- Manque d'adaptation des organismes de recherches a la transition numerique
- Entente des différentes tutelles (CEA/CNRS/UGA) sur un cahier de laboratoire electronique : Appel d'offre global/solution IN HOUSE ?
- Vide comblé par des solutions existantes (evernote/word)
- Probleme pour faire passer les utilisateurs de solutions extremement flexibles et faciles de type evernote vers des solutions plus rigides :
 - Personnalisation de l'organisation du cahier
 - Prise de notes « informelles » :
 - Reunions (administratives ou scientifiques)
 - Recherche bibliographiques
 - Congrès/seminaires
 - Recherche



Conclusions : Enorme avancée par rapport au papier !!!!



- ▢ Toutes les expérience d'un projet rassemblées
- ▢ Aspect collaboratif facilité
- ▢ Une fois validée les modifications sont obligatoirement tracées en tant que telles
- ▢ Les design expérimentaux peuvent être réutilisés facilement : Bonnes Pratiques du laboratoire
- ▢ Recherche date, projet, type d'expérience, terme scientifique
- ▢ Dossiers de **publications/brevet** en peu de temps
- ▢
- ▢ Coût à comparer à celui du développement **en intra ?? Quand par Qui ?**
- ▢ Hébergement des données ?