



# CDD Vault : Gestion sécurisée, collaborative et intégrée des données pour la recherche universitaire



Visualisation gratuite



CDD Vault - Licence d'évaluation gratuite

Faire progresser la recherche grâce à de puissantes solutions de gestion des données, ELN, d'inventaire et d'analyse garantissant la durabilité des données

## Résumé

CDD Vault est une plateforme de gestion de données basée sur le cloud, conçue pour la recherche universitaire et la découverte de médicaments, offrant des flux de travail sécurisés, collaboratifs et reproductibles. Sa gamme complète d'outils comprend l'enregistrement des composés, la gestion des dosages, le suivi des inventaires, un cahier de laboratoire électronique (ELN), la visualisation des données et la gestion des protocoles, tous conçus pour accroître l'efficacité de la recherche et sécuriser la collaboration si nécessaire. L'outil est agnostique à tout type de recherche, y compris les petites molécules, les nucléotides, les peptides, les anticorps, les protéines, les mélanges, etc.

## Introduction

La recherche universitaire a besoin de systèmes de gestion de données robustes, sécurisés et collaboratifs, en particulier dans les domaines de la découverte de médicaments et des sciences de la vie. Les méthodes traditionnelles comme la méthode « papier/crayon » peuvent entraver les progrès, ce qui conduit à la perte de données, des expériences répétées et des transferts inefficaces entre les chercheurs. CDD Vault offre une solution évolutive et moderne pour surmonter ces défis, permettant aux chercheurs de documenter, d'analyser et de partager facilement et en toute sécurité des données entre les établissements.

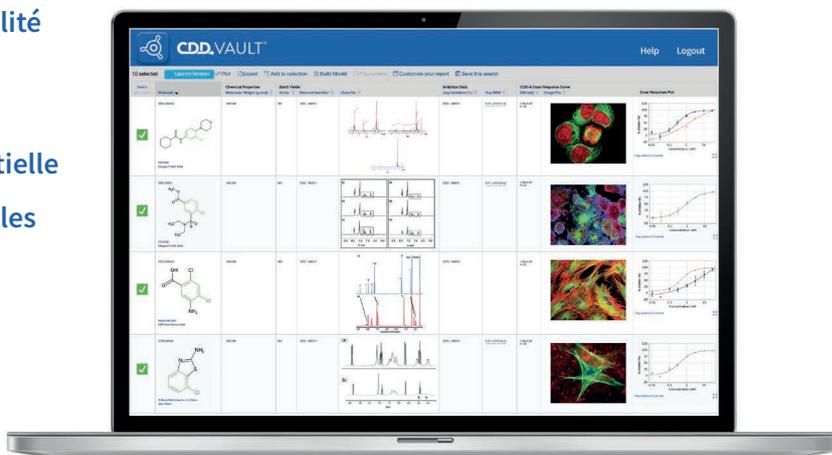
Découvrez comment les établissements qui utilisent CDD Vault ont amélioré leurs normes de conformité, protégé la propriété intellectuelle, développé la collaboration interdisciplinaire et considérablement réduit les coûts grâce à une gestion centralisée et efficace des données.



CDD.VAULT®  
Complexity Simplified

# I. Défis courants relevés

- Facilité de recherche et accessibilité des données
- Durabilité des données
- Collaboration privée et confidentielle
- Découverte de nouvelles molécules et efficacité de la conception
- Accès à distance aux données



## Facilité de recherche et accessibilité des données

Toutes les données de recherche sont stockées et indexées en toute sécurité dans un seul endroit : une source unique de vérité. Cela simplifie les recherches en permettant aux chercheurs de filtrer rapidement toutes les données importées.

## Durabilité des données

Comme toutes les données sont stockées et conservées dans un emplacement unique et sécurisé, aucune donnée ne se retrouve perdue dans un cahier papier égaré, une clé USB ou un ordinateur qui quitte le laboratoire. Cela permet d'éviter la répétition des expériences et, à l'inverse, les projets sont transférés en douceur lorsque de nouveaux chercheurs sont intégrés dans le groupe.

## Collaboration privée et confidentielle

En facilitant la collaboration transparente entre les services et les établissements, les chercheurs peuvent partager en toute sécurité des ensembles de données et des informations en temps réel, ce qui accroît ainsi l'efficacité des projets de recherche collaboratifs. Une fois les autorisations d'accès et les pistes d'audit en place, vous vous assurez que toutes les modifications sont suivies et que toutes les données sont sécurisées.

## Découverte de nouvelles molécules et efficacité de la conception

Améliore la conception des molécules et rationalise les flux de travail de découverte de médicaments, car les chercheurs peuvent rapidement rechercher des structures similaires dans des bases de données telles que ChEMBL, SureChEMBL, Enamine et CDD Public sans quitter l'environnement sécurisé de CDD.

Les solutions d'IA hiérarchisent les molécules synthétisables, en mettant l'accent sur des résultats pratiques et exploitables. Un algorithme innovant de suggestion bioisostérique améliore la puissance moléculaire et la pharmacocinétique, accélérant ainsi le développement de nouvelles thérapies.

## Accès à distance aux données

La plateforme basée sur le cloud CDD Vault permet aux étudiants d'accéder, d'examiner et d'analyser en toute sécurité les données expérimentales de n'importe où, ce qui assure leur productivité où qu'ils se trouvent. En organisant les données dans un système centralisé doté d'outils intuitifs d'analyse et de visualisation, CDD Vault simplifie le processus d'interprétation des résultats et de collecte des informations. Ce flux de travail rationalisé permet aux étudiants de se concentrer efficacement sur la rédaction de documents de recherche, même lorsqu'ils sont loin de leur laboratoire ou de leur campus. Grâce à son accès à distance fiable, CDD Vault aide les étudiants à continuer à avancer sur leurs recherches et leurs travaux universitaires sans interruption.



« Le stockage électronique des données a une si grande importance pour la recherche sur les médicaments qu'il faut abaisser les barrières à l'entrée... L'octroi d'une licence à l'échelle d'un établissement contribue à réduire les obstacles. »

Paul Carlier, Ph.D.

Directeur, centre de recherche de l'université de l'Illinois, Hans W. Valteich, titulaire de la chaire de chimie médicinale, professeur de sciences pharmaceutiques et de chimie, université de l'Illinois



## II. Méthodes et caractéristiques

### 1. Caractéristiques de base incluses

- **Enregistrement** : gérez l'enregistrement des composés/échantillons
- **Activité** : capturez et gérez les données de dosage et de criblage
- **Analyseur** : ingestion directe des données à partir d'instruments, minimisation de la manipulation des données
- **Gestion des dosages** : fonctionnalités supplémentaires pour l'organisation des données de dosage
- **Formulaires de protocole** : gestion basée sur des ontologies des protocoles de dosage
- **Visualisation** : visualisation pour analyser les données de dosage de manière visuelle

### 2. Fonctionnalités supplémentaires (modules complémentaires en option)

- **Cahier de laboratoire électronique (ELN)** : numériser et rationaliser les notes de laboratoire et les données expérimentales
- **Inventaire avancé** : suivez les échantillons grâce à des fonctions de localisation détaillées (racks, congélateurs, etc.)
- **IA** : outil avancé pour identifier des structures similaires et générer des bioisostères, en intégrant les ensembles de données ChEMBL, SureChEMBL, Enamine et CDD Vault Public
- **Courbes et analyses** : tracez divers graphiques, y compris des variables dépendantes du temps
- **Automatisation/API** : accédez à l'intégration programmatique avec CDD Vault à l'aide de KNIME, R, Python et Pipeline Pilot
  - Des connecteurs prédéfinis pour DataWarrior et Star Drop d'Optibrium sont disponibles

## Enregistrement et activité – Organiser, rechercher et collaborer

Enregistrez, organisez et recherchez efficacement les données de recherche sur une plateforme sécurisée et centralisée. CDD Vault prend en charge les flux de travail pour l'enregistrement des composés, la gestion des dosages biologiques et le suivi des échantillons.

Capacité pouvant aller jusqu'à 2 millions d'échantillons, de composés et de mélanges.





CDD VAULT®  
Complexity Simplified

## Cahier de laboratoire électronique (ELN) – Enregistrer et analyser efficacement

Cahier de laboratoire électronique (ELN) – Enregistrer et analyser efficacement CDD Vault soutient la reproductibilité de la recherche en permettant aux utilisateurs de documenter les protocoles expérimentaux, les observations et les résultats dans un format sécurisé et consultable, en garantissant ainsi que toutes les données pertinentes sont centralisées et facilement accessibles. L'ELN offre une vue holistique du contenu lié à la recherche, ce qui permet aux utilisateurs d'enregistrer un large éventail de documents, tels que des PDF d'affiches ou de présentations PowerPoint qu'ils ont créés ou présentés. De plus, l'utilisation de modèles ELN personnalisables avec des champs obligatoires garantit que toutes les informations nécessaires sont enregistrées de manière cohérente, ce qui améliore l'intégrité et l'exhaustivité des données tout au long du processus de recherche.

### Screening of molecules

Project \*  
Biology Lab

Lab temperature  
37

Assigned to  
Mel

Target Date  
2024-07-03

Reference  
COSHH\_categorisation-of-bi...

Instrument Booking  
Yes

Requested by  
Arntima

Experiment progress \*  
In progress

Lab  
345

Reaction type  
COSHH\_categorisation-of-

Duplicate of: Experiment: EAD-000102 - New Canvas DEMO: Screening

#### Purpose

The purpose of this entry is to screen compounds in the growth inhibition assay in Plasmodium falciparum 3D7

#### Description

This is a primary assay to identify potential treatments for malaria, by investigating the biological process of NADH metabolic pathway in Plasmodium falciparum 3D7, specifically targeting *L-lactate dehydrogenase and oxidoreductase*. This is a cell viability assay, measuring the dehydrogenase activity determination. The cell line erythrocyte was used. It was conducted in 96 well plates, with the detection method of action of inhibition by small molecules. In a 96-well microtiter plate, 10 µL of each inhibitor from the master plate and 80 µL of (v/v) parasitemia and 1% (v/v) haematocrit were dispensed in each well. The test concentrations ranged from 0.0064 µM to 1 µM, with each well. Plates were then incubated at 37°C under a 5% CO<sub>2</sub> atmosphere for 72 h. Experiment: EAD-000066 - Duplicate of Entry: EAD-000066

#### Materials

Compounds	RBC	Number of Plates	RBC	Total Time
ABL-0000170-001	Entry: EAD-000003	10	AGN-0000034-001	5 hrs

ID: EAD-000152

- Name: optional  
Compound: ABL-0000170-001  
RUPAC: N-methoxy-N-methyl-(E)-3-(2-aryl)acrylamide  
Safety:
- Name: optional  
Compound: CAW-0004677  
RUPAC: dimethylsulfoxide  
Safety:
- Solvent: Dimethyl sulfoxide  
CAS: 67-68-5  
Safety:
- Name: optional  
Compound: Reagent  
RUPAC: N-methoxy-N-methyl-2-(2-aryl)pyridonecarboxamide  
Safety:

Name	Properties	Amounts	Calculation	Comment
1	MW: 181.19 g/mol FW: 181.19 g/mol Density: optional Exact mass: 181.073893 Da	Mass: 10 g %w/w ratio: 100 % Volume: optional %v/v ratio: 100 % Purity: 100 %	Limiting reagent Equivalent: 1.00e+3 Mole: optional Effective mole: 55.2 µmol	https://app.collaborativelab.com/vaults/6552/entries/1788122
2	MW: 78.14 g/mol FW: 78.14 g/mol Density: optional Exact mass: 78.013936 Da	Mass: optional %w/w ratio: 100 % Volume: optional %v/v ratio: 100 % Purity: 100 %	Limiting reagent Equivalent: 0 Mole: optional Effective mole: optional	optional
3	MW: 78.14 g/mol CAS: 67-68-5 Density: 1.002 g/cm <sup>3</sup> Boiling point: 189 °C Exact mass: 78.013936 Da	Mass: 13500000 g %w/w ratio: 100 % Volume: 1.24 mL %v/v ratio: 100 % Purity: 100 %	Reaction molarity: 4.46e-8 Mole: 17.3 µmol Effective mole: 55.2 µmol Expected mass: 10.8 mg Yield: 15922 %	optional
4	MW: 195.22 g/mol FW: 195.22 g/mol Density: optional Exact mass: 195.089543 Da	Mass: 1.5 g %w/w ratio: 100 % Volume: optional %v/v ratio: 100 % Purity: 100 %	Equivalent: 1 Mole: 7.58 µmol Effective mole: 55.2 µmol Expected mass: 10.8 mg Yield: 15922 %	optional

## Visualisation des données - Simplifier l'analyse de données complexes

Les outils de visualisation de CDD Vault transforment des données complexes en informations exploitables. Générez des tableaux et des graphiques pour identifier les tendances, soutenir les tests d'hypothèses et découvrir des informations cachées dans les ensembles de données.

CDD Visualization

Selected molecules: 105 | 167

log P vs WT inhibition (%)

Selected molecules

3D Scatter Plot

WT inhibition (%) Histogram

CDD Vault | Favoriser la découverte grâce à la gestion intégrée des données.



## III. Exemples de flux de travail

### 1. Enregistrement des composés et analyse de la relation structure-activité (SAR)

#### Enregistrer de nouveaux composés :

- Les chimistes ou les chercheurs se connectent à CDD Vault et utilisent le module d'enregistrement pour saisir de nouvelles structures de composés, y compris des notations SMILES ou InChI.
- Chaque composé reçoit un identifiant unique et des propriétés chimiques calculées automatiquement, y compris, mais sans s'y limiter, le poids moléculaire, le LogP et le pKa.
- Des renseignements supplémentaires tels que la date de synthèse, les informations sur le lot, la pureté, etc., ainsi que des données d'activité peuvent être ajoutés par le ou les utilisateur(s).

#### Organiser les données des composés :

- Les composés enregistrés peuvent être classés en fonction de leurs propriétés telles que le type de composé, la cible et la plage d'activité, ce qui facilite la récupération de groupes spécifiques de composés.
- Les composés peuvent également être organisés par projet afin de simplifier la collaboration entre les équipes ou les établissements.

#### Rechercher et analyser les données des composés :

- Les chercheurs peuvent utiliser la fonction de recherche multiparamètre pour rechercher des ensembles de composés selon des propriétés spécifiques, y compris des (sous-)structures, des données d'activité (par exemple, les valeurs IC50) et des propriétés chimiques, afin d'analyser les relations structure-activité (SAR) à l'aide de l'outil de visualisation de CDD Vault.
- Dans l'outil de visualisation, les résultats et les paramètres des composés peuvent être représentés à l'aide de différents types de tracés, tels que les nuages de points, les histogrammes et la décomposition du groupe R, ainsi que d'un outil d'analyse de cluster pour aider à identifier les tendances et les relations entre la structure et l'activité biologique, ce qui permet d'optimiser les pistes.

**Lancez-vous - demandez dès aujourd'hui une licence d'évaluation gratuite ou contactez notre équipe pour une démonstration personnalisée**

### 2. Gestion et analyse des données de dosages biologiques

#### Saisir des données de dosages biologiques :

- Après avoir exécuté un dosage, les scientifiques saisissent les résultats bruts et calculés dans le module de gestion des dosages biologiques, reliant les données du dosage à des entités spécifiques.
- Le protocole de dosage, les conditions et les données, telles que les valeurs IC50/EC50, sont normalisés et stockés au sein de la plateforme pour assurer la cohérence entre les dosages.

#### Organiser et annoter les résultats :

- Chaque dosage peut être étiqueté avec des informations telles que la cible, la lignée cellulaire ou l'organisme, ce qui permet un suivi organisé des résultats dans le temps.

- Des annotations et des commentaires sur les performances du dosage ou des points de données spécifiques peuvent être ajoutés, favorisant ainsi la communication entre les membres de l'équipe.

#### Analyser et visualiser les données de dosage :

- Les outils de visualisation de la plateforme permettent l'analyse des tendances et les comparaisons entre différents dosages, ce qui aide les chercheurs à hiérarchiser les entités en fonction de leur efficacité.
- Des rapports personnalisables et des flux de données automatisés peuvent être configurés pour une analyse périodique, ce qui simplifie les campagnes de criblage en cours.

## IV. Impact prouvé sur la recherche universitaire

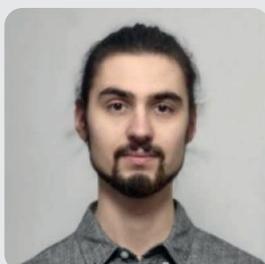


**CDD, VAULT®**  
Complexity Simplified



« Après une brève présentation, j'ai immédiatement été convaincue que CDD était idéal pour mon projet, car j'avais besoin de garder une trace d'une grande bibliothèque de molécules. J'ai été particulièrement impressionnée par l'option de filtrage des fragments structuraux. Si j'avais dû créer par moi-même une configuration comparable, cela m'aurait pris un temps fou. De plus, vous pouvez toujours vous appuyer sur l'excellent support client. »

**Leah Glanzmann**  
Doctorante, université de Heidelberg



« Je crois que nous allons être nombreux à ne plus pouvoir nous passer de Vault et que nous allons inciter nos établissements à l'utiliser pour remplacer les structures de dossiers encombrées sur les réseaux. »

**Leonard Trau**  
Candidat au Master en biotechnologies, université de Münster, iGEM



« J'ai eu un vrai coup de foudre pour CDD. Cette plateforme est si intuitive que j'ai appris à l'utiliser en une journée, avant même de recevoir une formation. Le système est idéal pour gérer des données, qu'elles soient structurées ou non. »

**Iwan Grien**  
Responsable de laboratoire, hôpital universitaire de Tübingen



« La continuité est un gros problème dans le milieu universitaire, car un grand nombre de connaissances sont perdues en raison du roulement des membres du laboratoire. Avec CDD Vault ELN, nous pouvons facilement accéder aux expériences réalisées il y a 5 ans sans avoir à nous plonger dans d'interminables pages de cahiers. CDD est une rampe de lancement pour les nouveaux scientifiques, en leur permettant de travailler plus vite et de se concentrer sur la pensée créative. »

**Digamber Rane**  
Chercheur principal, université d'État de l'Ohio



**CDD, VAULT®**  
Complexity Simplified

## V. Étude de cas

### Le centre UI de l'université de l'Illinois à Chicago améliore la collaboration et l'intégrité des données grâce à l'attribution d'une licence CDD Vault à l'échelle de l'établissement

Le centre de l'université de l'Illinois (université de l'Illinois à Chicago) a observé plusieurs avantages depuis l'adoption de CDD Vault et de l'attribution d'une licence à l'échelle de l'établissement, notamment :

- Fourniture d'une source unique de vérité aux laboratoires
- Collaboration renforcée entre les chimistes et les biologistes
- Satisfaction des exigences des NIH en matière de gestion et de protection des données
- Garantie de l'intégrité des données et soutien à l'exploration approfondie
- Économies substantielles par rapport à l'attribution de licences individuelles
- Protection de la propriété intellectuelle
- Les cahiers de laboratoire électroniques permettent d'accroître les efforts de recherche et de préparer les étudiants au monde professionnel



« La base de données CDD est une plateforme extrêmement élégante. Je la recommande vivement à tous ceux qui génèrent des données de découverte de médicaments. »

**Brian Roth**

Bryan Roth, École de médecin de l'Université de Caroline du Nord | Pharmacologie

## VI. Sécurité et conformité des données

### Sécurité rigoureuse des données, conformité réglementaire, protection de la propriété intellectuelle

- **Autorisations utilisateur et contrôle des données :** Contrôles d'accès granulaires pour les utilisateurs, autorisations et visibilité des données.
  - **Cryptage de la communication :** Le cryptage SSL sécurise toutes les communications du navigateur avec les sites Web de CDD.
  - **Test de sécurité des applications :** Les tests de sécurité automatisés garantissent un accès isolé entre les coffres-forts afin d'empêcher tout accès non autorisé aux données.
  - **Protection par pare-feu :** Configuration d'un pare-feu double couche (« défense en profondeur ») avec une protection matérielle et logicielle pour les serveurs sensibles.
- Plus de détails dans notre livre blanc sur la sécurité, sur demande.*
- Grâce aux pistes d'audit et au contrôle de version de CDD Vault, les chercheurs peuvent valider les flux de travail expérimentaux et garantir la reproductibilité de la recherche.

### CDD Vault : Déploiement spécifique à l'Europe

Pour répondre aux besoins de nos clients européens, CDD Vault proposera une instance dédiée à l'UE. Veuillez envoyer un courrier électronique à l'adresse [info@collaborativedrug.com](mailto:info@collaborativedrug.com) pour en savoir plus.

- **Résidence des données garantie :** vos données restent au sein de l'UE, ce qui assure la conformité avec le RGPD et les réglementations régionales en matière de données.
- **Performances améliorées :** réduction de la latence pour les utilisateurs européens.
- **Une conformité digne de confiance :** inclus dans notre certification SOC 2 Type II.
- **Expérience homogène :** mêmes fonctionnalités, sécurité et support que pour notre déploiement mondial.



**CDD,VAULT**  
Complexity Simplified

## VII. Conclusion : Principaux avantages de CDD Vault pour la recherche universitaire

- Stockage de données sécurisé, basé sur le cloud, optimisé pour la recherche
- Outils de visualisation avancés permettant d'obtenir des informations basées sur les données
- ELN entièrement intégré pour une documentation complète des données
- Collaboration simplifiée entre les équipes et les établissements

CDD Vault offre aux chercheurs universitaires une plateforme sécurisée, évolutive et conviviale qui améliore la gestion des données, la collaboration et la découverte.

Qu'il s'agisse de flux de travail rationalisés ou d'outils de visualisation avancés, elle permet aux équipes de recherche de se concentrer sur l'innovation plutôt que sur la logistique des données.

En adoptant CDD Vault, les établissements peuvent répondre aux normes de conformité, protéger la propriété intellectuelle et favoriser la collaboration interdisciplinaire, tout en réduisant les coûts grâce à une gestion efficace et centralisée des données.

Rejoignez le nombre croissant d'établissements universitaires qui tirent profit de CDD Vault pour faire progresser leurs recherches et profitez des avantages d'une plateforme intégrée conçue pour relever les défis actuels de la découverte de médicaments et des sciences de la vie.

**Demandez dès aujourd'hui une licence d'évaluation gratuite ou contactez notre équipe pour une démonstration personnalisée**

**POUR NOUS CONTACTER :**



[cddvault.com](http://cddvault.com)

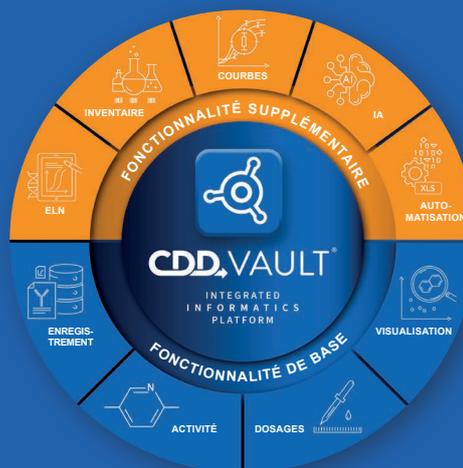


[sales@collaborativedrug.com](mailto:sales@collaborativedrug.com)



+44 (0) 1223 803830

+1 (650) 242 5259



Visualisation gratuite



CDD Vault - Licence d'évaluation gratuite

### Références

- API via DataWarrior - les bases
- Rôles utilisateur de Vault
- Lancement de CDD Visualization
- Études de cas CDD Vault
- Documentation de l'API
- Étude de cas client UIC