

ELEKTRONISCHE LABORBÜCHER

IN PHYSIK UND INGENIEURWISSENSCHAFTEN

3 MARCH 2022

TORSTEN BRONGER

ZENTRALBIBLIOTHEK, FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH

DEFINITION



Ein elektronisches Laborbuch (electronic lab notebook, ELN) ist eine Software, die als Datenbank Forschungsdaten speichert.

Eine Instanz bedient üblicherweise ein Institut oder eine Forschergruppe.

Es werden Metadaten gespeichert. Für Experimente beispielsweise: Datum, Experimentator, Probenname, Prozeßparameter.

Rohdaten sind nicht direkt im ELN, aber die Speicherorte der Rohdaten sind im ELN.

WARUM?

Die Forscher wünschen sich ELNs, weil:

- wenn jemand geht, sollen seine Daten brauchbar bleiben
- Forschung rechtssicher dokumentieren
- Qualitätssicherung
- im eigenen Datenbestand suchen
- Daten mit Kooperationspartnern bequem teilen
- einfacher Daten veröffentlichen
- Leitung der Einrichtung will es



WIE BISLANG?

Wo holen wir potentielle zukünftige ELN-Nutzer ab?

- Excel!
- auch Word & Access; ja wirklich: Word.
- analoge Laborbücher mit eingeklebten Screenshots von proprietären Programmen
- meist geringe Bereitschaft, Workflows zu ändern
- nochmal Excel

Daraus folgt:

- ein Freitextfeld pro Experiment muß möglich sein
- so weit wie möglich automatisieren
- der Export nach Excel muß möglich sein



KLASSIFIZIERUNG

„frei“ = schlecht und „strukturiert“ = gut: Das greift zu kurz!



Struktur ist teuer, daher muß man sich gut überlegen, wo man sie braucht.

	frei	strukturiert
Vorteile	<ul style="list-style-type: none">• einfache Benutzung• flexibel aus Nutzersicht• billig	<ul style="list-style-type: none">• Sonderwünsche (z.B. Visualisierung) kein Problem• spezifische Suche nach Daten möglich• Konvertierung nahezu verlustfrei: Export nach Excel, Austausch mit anderen ELNs
Nachteile	<ul style="list-style-type: none">• Suche nur nach Textschnipseln• Konvertierung unmöglich• Nutzer müssen sich Konventionen auferlegen	<ul style="list-style-type: none">• Handhabung erfordert Disziplin• jede Erweiterung muß konfiguriert (u.U. sogar programmiert) werden• teuer

PROPRIETÄR?

Sollte man sich proprietäre Lösungen anschauen?

→ Für Ingenieur- und Naturwissenschaften nicht

→ aber eingekaufte Unterstützung bei Auswahl und Einrichtung des ELNs kann sinnvoll sein.



NETZWERK-EFFEKT

Metcalfesche Gesetz: Nutzen eines Netzwerks ist $\sim n(n-1)$.



Folgt daraus, daß man auf ein ELN setzen sollte, das auch viele andere nutzen?

→ Nein, denn

- kaum eine ELN-Software kann nutzbringend fördern
- das One-Size-Fits-All-ELN gibt es nicht
- Austauschmethoden zwischen ELNs, auch unterschiedlicher Hersteller, in der Mache (insbesondere in NFDI4Ing!)

→ Gleiche ELN-Software wie die Kollegen kann dennoch sinnvoll sein, um sich gegenseitig Support geben zu können. Außerdem neigt Open-Source dazu, am besten mit großer Nutzerschaft gewartet und weiterentwickelt zu werden.

MISZELLANEA



Berechtigungen

Sollten Berechtigungen (Zugangseinschränkungen) konfigurierbar sein, bitte im Zweifel *offen* gestalten.

Innerhalb eines Instituts/Gruppe sollte man sich vertrauen ...

Zunageln verursacht Reibungsverluste!

Import von Altdaten

Das ist eine vergiftete Frucht: Man unterschätzt *immer* und *deutlich*, wie schlecht Altdaten-Bestände automatisch importierbar sind.

→ Wenn es keinen konkreten Nutzungsplan für Altdaten gibt, den Import besser lassen.

ELN-Finder

eln-finder.ulb.tu-darmstadt.de (https://eln-finder.ulb.tu-darmstadt.de/) (*Noch in der Testphase!*)

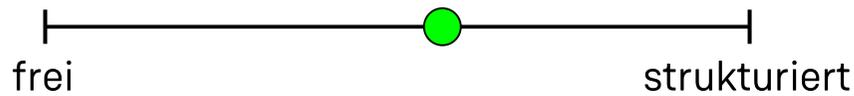
BEISPIEL-ELNS



Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft



ELABFTW



Konzept

- Ad-hoc Freitext-Datensätze, u.U. mit einigen zusätzlichen Einzel-Feldern.
- Vorbefüllung der Datensätze durch *Templates*.
- „Experiments“ können mit „Items“ (und u.U. weiteren Konzepten) verknüpft werden.

ELABFTW

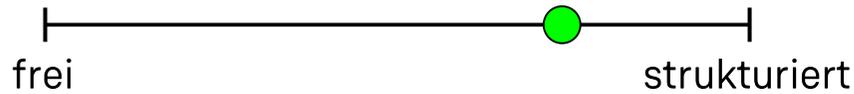
Bemerkungen

- Templates ermöglichen Realisierung von Schemas, von denen aber abgewichen werden kann, wenn sinnvoll.
- Brandneu: Einzel-Felder können im Template definiert werden.
- Autor hat Software als Open-Source veröffentlicht und bietet einen kommerziellen Support drumherum an.
- Entwickelt aktuell ein recht großes Momentum.

Webseite: [elabftw.net](https://www.elabftw.net/) (<https://www.elabftw.net/>)



KADI4MAT



Konzept

- Records (Key-Value-Paare)
- Collections von Records
- Verlinkungen zwischen Records

Bemerkungen

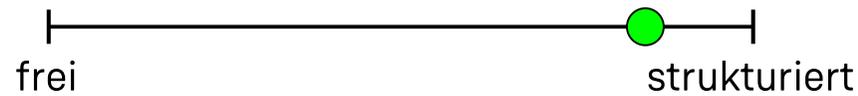
- Bereits gut etabliert in der Batterie-Community.
- Mehr als nur ELN, sondern Kollaborationsplattform mit Datenaustausch, Datenpublikation, Analysewerkzeugen etc. Sehr modular.

Webseite: kadi.iam-cms.kit.edu (<https://kadi.iam-cms.kit.edu/>)

Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft



SAMPLEDB



Konzept

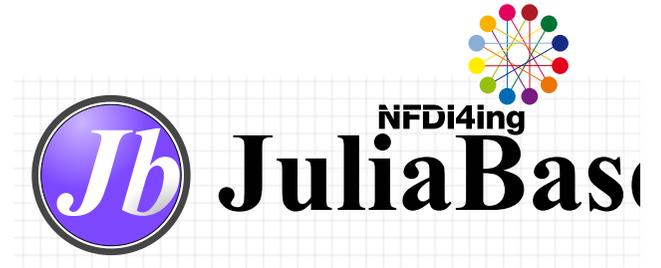
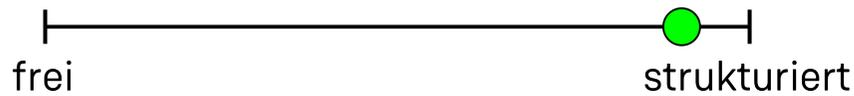
- Starke Schemas für Experimente, die online konfiguriert werden können.
- Sub-Experimente (also Verschachteln der Schemas) möglich.

Bemerkungen

- Spezifische Suchen möglich.
- Kann seit neuestem föderieren mit anderen SampleDB-Instanzen.
- Sehr gut dokumentiert.

Webseite: scientific-it-systems.iffgit.fz-juelich.de/SampleDB/ (<https://scientific-it-systems.iffgit.fz-juelich.de/SampleDB/>)

JULIABASE



(Full disclosure: Mein Baby, since 2008.)

Konzept

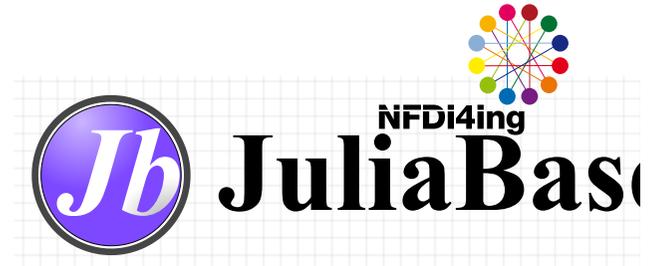
- Es gibt zwei große Tabellen, *Proben* und *Prozesse*, und eine many-to-many-Beziehung dazwischen.
- Für jede Prozeßart gibt es ein striktes Schema.
- Eingabe und Visualisierung werden für jede Prozeßart spezifisch programmiert.

JULIABASE

Bemerkungen

- Man braucht einen Python-Programmierer. Man ist aber mit 10 Zeilen Python-Code pro Apparatur schon dabei.
- Bibliotheken für Remote-Zugriff für Python, LabView, Delphi und Visual Basic.
- Nicht geeignet zum Verwalten beliebiger Daten-Artefakte, z.B. Ergebnissen von Daten-Auswertungen. (Weil halt starkes Schema.)
- Spezifische Suchen möglich.
- Sehr gut dokumentiert.

Webseite: juliabase.org (<https://juliabase.org>)



AUSBLICK: SCIMESH

Ziel

Inhalte eines ELN sollen auch in einem anderen darstellbar sein ~ Verbesserung der Zusammenarbeit von Instituten/Gruppen.

Idee

ELN-Software wird erweitert um die Fähigkeit, Inhalte als RDF-Graphen mit einer in SciMesh definierten Struktur auszugeben.

Außerdem müssen ELNs diese Graphen verstehen können und mit den eigenen Daten verschmelzen können. (Mindestens für die Darstellung.)

ELN A makes an HTTP GET request against the URL, requesting an RDF content-type



ELN A shows the data from ELN A and ELN B together in one data sheet



ope
EL
an

AUSBLICK: SCIMESH

Idee (Forts.)

RDF hat den Vorteil, daß man es ad-hoc erweitern kann, ohne daß es bestehende Anwendungen beeinflusst.

Alle Entitäten (Experimente, Proben etc) bekommen global eindeutige Namen, die meist auch als URL funktionieren, um per HTTP den Graphen zu bekommen.

Status

Pre-Alpha. Mitstreiter herzlich willkommen!

Webseite: scimesh.org (<https://scimesh.org>)

Mitglied der Helmholtz-Gemeinschaft

ELN A makes an HTTP GET request against the URL, requesting an RDF content-type



ELN A shows the data from ELN A and ELN B together in one data sheet



oper
EL
an

THANK YOU

Torsten Bronger
Zentralbibliothek, Forschungszentrum Jülich
t.bronger@fz-juelich.de (mailto:t.bronger@fz-juelich.de)

