

Elektronische Laborbücher in der Max-Planck-Gesellschaft

Electronic laboratory notebooks in the Max Planck Society

Franke, Michael; Weraach, Jalal; Haarländer, Markus

Max Planck Digital Library (MPDL), München

Korrespondierender Autor/in

E-Mail: franke@mpdl.mpg.de

Zusammenfassung

Rechnergestützte Dokumentationssysteme halten immer stärker Einzug in wissenschaftliche Labore. Sie versprechen effizientes, kooperatives und leichtes Arbeiten, standardisierte Eingabe und Ablage sowie die Anbindung an andere elektronische Anwendungen. Die MPDL untersuchte die aktuelle Situation in der MPG, prüfte, welche Anforderungen deren Forschende an ein solches System haben und welche Hürden bei der Einführung auftauchen können. Im Jahr 2016 wurde schließlich eine Laborbuchsoftware von der MPDL lizenziert, die lokal an den Instituten oder als zentrale MPG-Plattform genutzt werden kann.

Summary

More and more, computerized documentation systems find their way into scientific laboratories. They promise efficient, cooperative and easy working, standardized input and filing as well as connections to other electronic applications. MPDL investigated the current situation in the MPG, examined which demands researchers have on such a system and what barriers might arise when implementing it. Eventually, in 2016, laboratory notebook software was licensed by the MPDL, which can be used locally in the institutes or as a central MPG platform.

Einleitung

Die Digitalisierung ist derzeit in aller Munde. Sei es die Wirtschaft, die öffentliche Verwaltung, der Unterricht an den Schulen oder die Wissenschaft: Neue Technologien wie Breitbandnetzwerke, Massenspeicher oder mobile Endgeräte ermöglichen den innovativen Umgang mit vorhandenen Informationen, aber auch die Erfassung und Erschließung völlig neuer Datenquellen. Ob der Einsatz digitaler Methoden sinnvoll ist, wird zum Beispiel bei der bundesweiten Einführung von Computertechnologie an Schulen kontrovers, teilweise erbittert diskutiert. Ähnlich verhält es sich bei der Debatte um wissenschaftliche Literatur. Während in vielen Disziplinen elektronische Publikationen längst die Regel geworden sind, halten andere, insbesondere geisteswissenschaftlich Forschende, am gedruckten Buch fest, durchaus mit überzeugenden Argumenten.

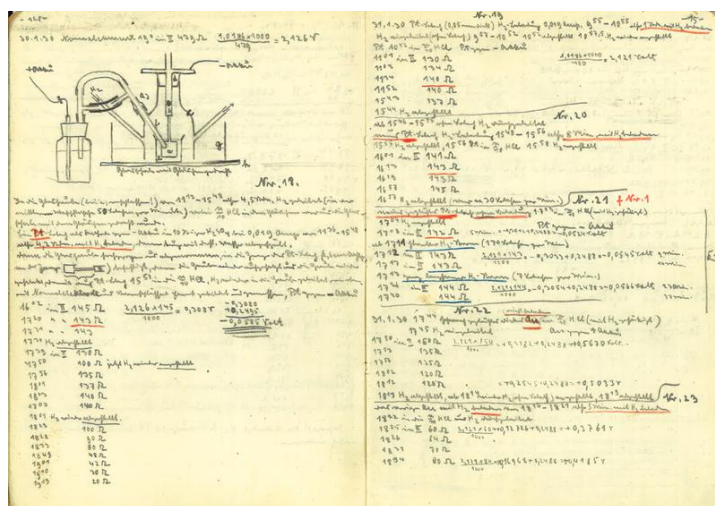


Abb. 1: Laborbuch am Kaiser-Wilhelm-Institut für Chemie 1929-1931, Autor unbekannt.
© Archiv der Max-Planck-Gesellschaft

Ein Refugium, in dem ebenfalls noch in vielen Fällen das Papier das Mittel der Wahl ist, stellt das Forschungslabor dar. Seit Jahrhunderten werden Laborbücher geführt um Quellen, Aufbauten, Parameter und Beobachtungen zu notieren, um die Fortschritte von Experimenten und Studien zu erfassen, um später daraus wissenschaftliche Veröffentlichungen zu generieren, um den Anspruch auf eine Entdeckung zu belegen und um den Ablauf der Untersuchung nachvollziehbar zu machen. Aber auch vor dem Labor macht der Fortschritt nicht Halt.

Heutzutage werden Hunderte verschiedene elektronische Lösungen für Labore angeboten. Welche Argumente lassen sich für oder gegen den Einsatz solcher Systeme anführen?

Das Für und Wider

In den letzten Jahren wird von immer mehr Verantwortlichen, Forschenden, Laborleitern und Laborleiterinnen abgewogen, ob sich die Einführung eines elektronischen Dokumentationssystems (ELN, **E**lectronic **L**aboratory **N**otebook) für ihre Einrichtung lohnt. Dafür werden viele naheliegende Argumente ins Feld geführt.

Durch die Möglichkeit der direkten Anbindung von elektronischen Messgeräten zur automatischen Erfassung der Daten kann die Arbeit im Labor erheblich beschleunigt werden. Ebenso wird dadurch eine standardisierte Datenerfassung ermöglicht und Fehler bei der Erhebung der Ergebnisse werden reduziert. Während Papierlaborbücher nur vor Ort bearbeitet werden können (und oftmals dürfen), besteht bei ihren elektronischen Pendanten die Möglichkeit, sie jederzeit und von jedem Ort aus einzusehen. Darüber hinaus bieten sie die Möglichkeit, weltweit kollaborativ zu arbeiten. In vielen Fällen werden dadurch große Kooperationsprojekte erst ermöglicht.

Auch die Durchsuchbarkeit elektronischer Daten, welche bei den allermeisten Produkten gegeben ist, bietet große Pluspunkte gegenüber klassischen Laborbüchern. Sie ermöglicht eine leichte Auffindbarkeit spezieller Informationen, die noch verbessert wird, je genauer die Einträge mit speziellen Kontextinformationen (Metadaten) versehen sind. Ein weiterer Vorteil liegt in der einfachen Weiterverwendbarkeit der abgelegten Informationen. Diese können über Schnittstellen an andere Systeme übergeben werden, wie etwa an Datenbanken oder Textverarbeitungsprogramme. Auch bei einem vermeintlich profanen Problem können elektronische Laborbücher Abhilfe schaffen: Die Lesbarkeit von handschriftlichen Eintragungen ist für Kollegen und Dritte, mitunter sogar für den Forscher selbst, oftmals eine Herausforderung. Die elektronische Notiz ist

hier deutlich überlegen – und kann bei Bedarf sogar barrierefrei dargeboten werden. Weiter müssen zum Zwecke der guten wissenschaftlichen Praxis Laborbücher über lange Zeit hinweg aufbewahrt werden: Diese sammeln sich zu immer größeren Papiermengen an, welche Platzprobleme und logistische Schwierigkeiten verursachen können, etwa bei Umzügen. Die Aufbewahrung auf digitalen Speichermedien stellt dagegen im Allgemeinen keine große technische Herausforderung dar.

Diesen Argumenten für den Einsatz von elektronischen Laborbüchern stehen aber auch eine Reihe von Vorbehalten und Hürden gegenüber.

Zu den größten Anlaufschwierigkeiten gehört oft die fehlende technische Ausstattung in den Laboren. So ist die einmalige Grundinvestition in angemessene WLAN-Infrastruktur sowie eine adäquate Ausstattung der Forschungseinrichtungen mit modernen Hilfsmitteln, wie etwa Tablet-PCs, ein nicht zu unterschätzender Faktor. Überhaupt stellt die Einführung eines elektronischen Systems die Labore vor eine große Herausforderung, zumal es gerade in der Grundlagenforschung bislang noch keine durchgängigen Erfahrungswerte gibt. So ist oft unklar, welche zusätzlichen finanziellen und personellen Ressourcen mit dem Betrieb eines solchen Systems verbunden sind und wieviel Zeit in die Konzeption der Arbeitsabläufe und die Schulung der Benutzer investiert werden muss.

Viele Wissenschaftler befürchten zudem zeitlichen und finanziellen Mehraufwand durch die elektronische Eingabe. Besonders in der Umstellungsphase vom analogen auf das digitale Laborbuch befürchten Forscherinnen und Forscher, dass sie ihre Daten und Forschungsergebnisse sowohl auf Papier als auch elektronisch dokumentieren müssen.

Zu bedenken ist auch die Art und Anordnung der Versuchsreihen im Labor. So kann in manchen Einrichtungen der Umgang mit Säuren, radioaktiver Strahlung oder toxischen Stoffe dazu führen, dass digitale Eingabegeräte zu schnell unbrauchbar werden. Für solche Settings müssen spezielle, maßgeschneiderte Lösungen erarbeitet werden.

Eine weitere Hürde ist die Rechtsunsicherheit bei der Umsetzung von gesetzlichen Vorgaben. Besonders im klinischen Bereich gelten hohe Anforderungen an die Unverfälschbarkeit und die Reproduzierbarkeit der Einträge. Zwar bieten einige ELN-Systeme geeignete Mechanismen an, jedoch ist eine Klärung im Einzelfall mit zusätzlichem Aufwand verbunden.

Auch steigen mit der Digitalisierung und dem möglichen sofortigen Zugriff auf sensitive Daten die Sicherheitsbedenken. So müssen Forschungseinrichtungen mit Einführung eines elektronischen Dokumentationssystems Sorge tragen, dass dieses in eine vertrauenswürdige Netzinfrastruktur eingebettet wird und der Zugriff für Unbefugte ausgeschlossen werden kann. Vielen wissenschaftlichen Einrichtungen fehlt es darüber hinaus bei der Einführung von ELNs an Konzepten zur Langzeitarchivierung elektronischer Ressourcen.

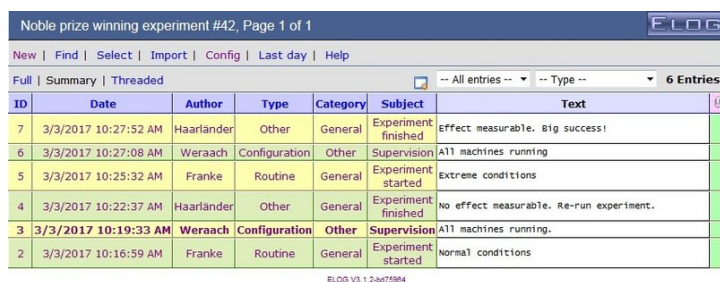
Was bedeutet all dies für die Max-Planck-Gesellschaft und ihre Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler?

Die Situation in der Max-Planck-Gesellschaft

Eine Befragung unter Forschungskordinatorinnen und -koordinatoren in der Max-Planck-Gesellschaft im Jahr 2015 hat ergeben, dass der Umgang mit elektronischen Laborbüchern für sie das wichtigste Diskussionsthema im Bereich digitaler Dienste ist. Dies nahm die Max Planck Digital Library zum Anlass, um eine entsprechende Expertise aufzubauen. Sie ergründet, wie die Forschenden in der Max-Planck-Gesellschaft am besten

unterstützt werden können. Im Zuge dessen veranstaltete sie im März 2016 einen Workshop, auf dem sich Laborpersonal, IT-Verantwortliche, Forschende, Koordinatorinnen und Koordinatoren zu ihren Anforderungen und derzeitigen Lösungen austauschen konnten. Die Ergebnisse dieses Workshops, Gesprächen mit Verantwortlichen an einzelnen Instituten und eine weitere Befragung unter Forschungsgruppen am Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie lieferten wertvolle Hinweise darauf, wie mit dem Thema sinnvoll umzugehen ist.

So wurde deutlich, dass es bei den Bedarfen große Unterschiede gibt, sowohl zwischen den Max-Planck-Instituten als auch zwischen Forschungsgruppen innerhalb einzelner Institute. Einfluss darauf haben zunächst der Forschungsgegenstand und das gewählte Studiendesign. So ist etwa in der chemischen Forschung die Einbindung von Stoffdatenbanken von großem Wert, da dadurch die Arbeitseffizienz entscheidend gesteigert werden kann. Dies wurde zum Beispiel im eigenentwickelten System ELNA des Max-Planck-Instituts für Kohlenforschung umgesetzt. Werden automatisierte Messungen durch Mikroskope oder Experimentalaufbauten vorgenommen, so kann es sinnvoll sein, die dadurch gewonnenen Messwerte direkt in das Laborbuchsystem einzuspeisen. Dies hängt unter anderem davon ab, welche Datenmengen dabei erzeugt werden. Ein Beispiel hierfür findet sich am Fritz-Haber-Institut, wo der Freie Elektronenlaser (FEL) seine Daten direkt in das dort verwendete System einspeist.



The screenshot shows the ELOG software interface. At the top, it says 'Noble prize winning experiment #42, Page 1 of 1'. Below that is a menu bar with 'New | Find | Select | Import | Config | Last day | Help'. There are also filters for '-- All entries --' and '-- Type --', and a count of '6 Entries'. The main part of the interface is a table with the following columns: ID, Date, Author, Type, Category, Subject, and Text. The table contains six entries, each with a unique ID, a date (all from 3/3/2017), an author (Haarländer, Weraach, Franke), a type (Other, Configuration, Routine), a category (General, Supervision), a subject (Experiment finished, Supervision, Experiment started), and a text description of the experiment's status and conditions.

ID	Date	Author	Type	Category	Subject	Text
7	3/3/2017 10:27:52 AM	Haarländer	Other	General	Experiment finished	Effect measurable. Big success!
6	3/3/2017 10:27:08 AM	Weraach	Configuration	Other	Supervision	All machines running
5	3/3/2017 10:25:32 AM	Franke	Routine	General	Experiment started	Extreme conditions
4	3/3/2017 10:22:37 AM	Haarländer	Other	General	Experiment finished	No effect measurable. Re-run experiment.
3	3/3/2017 10:19:33 AM	Weraach	Configuration	Other	Supervision	All machines running.
2	3/3/2017 10:16:59 AM	Franke	Routine	General	Experiment started	Normal conditions

Abb. 2: ELOG
© Paul-Scherrer-Institut

Dieses basiert auf der Open Source-Software ELOG, welche ursprünglich am Paul-Scherrer-Institut entwickelt wurde.

Individuelle Flexibilität ist für die meisten Forschenden essenziell: Da sich die Experimentalanordnungen gerade im Forschungskontext oft ändern sind Systeme, welche auf einen hohen Automatisierungsgrad der Arbeitsabläufe setzen, eher ungeeignet. Solche Systeme, wie etwa das in der Fraunhofer-Gesellschaft entwickelte Merlin, dürften eher in Pharmaunternehmen oder in der chemischen Industrie ihren Platz finden.

Neben Inhalt und Design spielen auch nichtwissenschaftliche Faktoren eine Rolle. Die Größe der Forschungsgruppe, IT-Affinität der Beteiligten und (Kommunikations-)Struktur des Instituts können zu unterschiedlichen Anforderungen führen. Kleine Gruppen und einzelne Wissenschaftler verwenden gerne cloud-basierte, nicht speziell für die Wissenschaft entwickelte Lösungen wie Evernote oder Microsoft OneNote. In solchen Settings kommen auch Wikis zum Einsatz, etwa Confluence der Firma Atlassian. Je größer eine Gruppe ist, desto wichtiger werden Funktionalitäten wie ein gut strukturiertes Workflow-Management und eine feingranulare Rechtehierarchy. Manche ELNs, die im Kontext der Max-Planck-Gesellschaft eingesetzt werden, wie LabGuru oder eLabInventory, beinhalten auch Laborinventarsysteme zur Verwaltung der im Labor benötigten Ressourcen. Ob diese von Nutzen sind, hängt unter anderem davon ab, ob sich die Software in den bestehenden, digitalen Bestellprozess einbinden lässt. Gute Archivierungs- und Suchfunktionalitäten sind überall dort wichtig, wo viel personelle Fluktuation (z. B. bei Doktoranden) gegeben ist.

Eine der wichtigsten Forderungen, die von allen Teilnehmern des Workshops geteilt wurde, ist die nach einer

leichten Bedienbarkeit des Systems. Die Nutzerakzeptanz ist vor allen anderen Faktoren entscheidend für den Erfolg eines Laborbuchsystems. Tauchen bei der Einführung bei den Anwendern Schwierigkeiten mit der Handhabung auf und können diese nicht umgehend behoben werden, wenden sich die potenziellen Nutzer ab. Oft können diese dann auch später nicht mehr für das System gewonnen werden.

Weithin akzeptiert wurde, dass die Umstellung vom Papier- auf ein elektronisches Laborbuch zunächst mit zusätzlichem Zeit- und Ressourcenaufwand verbunden ist. Die optimale Einrichtung des Systems, die Einweisung der Anwender und die Umstellung des gewohnten Arbeitsprozesses sind notwendige Voraussetzungen, um danach effizient und nutzbringend arbeiten zu können.

Weitere Aspekte, die insbesondere für IT-Verantwortliche in der Max-Planck-Gesellschaft eine große Rolle spielen, sind Datenschutz und IT-Sicherheit. Starke Vorbehalte gegenüber Cloud-Lösungen bestehen nicht erst, seit im Jahr 2015 das Safe-Harbour-Abkommen mit den USA für ungültig erklärt wurde. Selbst wenn die Speichermedien in Europa stehen und unter entsprechende Rechtsprechung fallen, bleiben unter Umständen Restrisiken wie Industriespionage und Plagiarismus sowie die Sorge um eine ausreichende Verfügbarkeit bestehen. Bevorzugt werden daher Serversysteme, deren Daten innerhalb der Max-Planck-Gesellschaft abgelegt werden. Dort kann der sichere Zugriff sowie eine adäquate Archivierung der Daten im Sinne der guten wissenschaftlichen Praxis am besten gewährleistet werden. Bei der Abwägung, ob das System am eigenen Institut oder zentral betrieben werden soll, stehen vor allem Fragen des zusätzlichen Aufwands und der individuellen Anforderungen im Vordergrund.

Abschließend wurde deutlich, dass auch die Kostenstrukturen für eine Laborbuchsoftware bei der Entscheidung für oder gegen einen Umstieg von Bedeutung sind. So wurde betont, dass die Schaffung von Synergieeffekten durch eine zentrale Lizenzierung innerhalb der Max-Planck-Gesellschaft spürbare finanzielle Vorteile bringen könnte.

Der Herausforderung, ein Lösungsangebot zu schaffen, das die vorgenannten Punkte ausreichend adressiert, hat sich die MPDL in Zusammenarbeit mit den interessierten Instituten in den folgenden Monaten gestellt. Es sollte dabei ein Lösungsangebot geschaffen werden, welches einerseits generisch genug ist, um für Institute aus allen Sektionen der Max-Planck-Gesellschaft interessant zu sein, und andererseits genügend Funktionalität und Gebrauchstauglichkeit bietet, um das Arbeiten im Labor – und eventuell darüber hinaus – auch tatsächlich zu erleichtern.

Lösungsansatz *labfolder*

Die verschiedenen Lösungsansätze und Softwareprodukte wurden vor diesem Hintergrund evaluiert. Obwohl innerhalb der MPDL geeignete Softwareentwicklungskompetenzen zur Verfügung stehen, schied eine vollständige Eigenentwicklung wie auch der Ausbau eines der bestehenden Open Source Produkte letztlich aus Kostengründen aus. Unter den kommerziellen Produkten erfüllte zum Zeitpunkt der Evaluation nur die browserbasierte Laborbuchsoftware *labfolder* die Anforderungen in hinreichendem Maße. Ohne den Instituten die Möglichkeit nehmen zu wollen, für spezifische Bedarfe individuell auch andere Lösungen zu wählen, wurde dann im Oktober 2016 von der MPDL ein Lizenzvertrag geschlossen, der allen Interessierten in der MPG die Nutzung der Software *labfolder* ermöglicht.

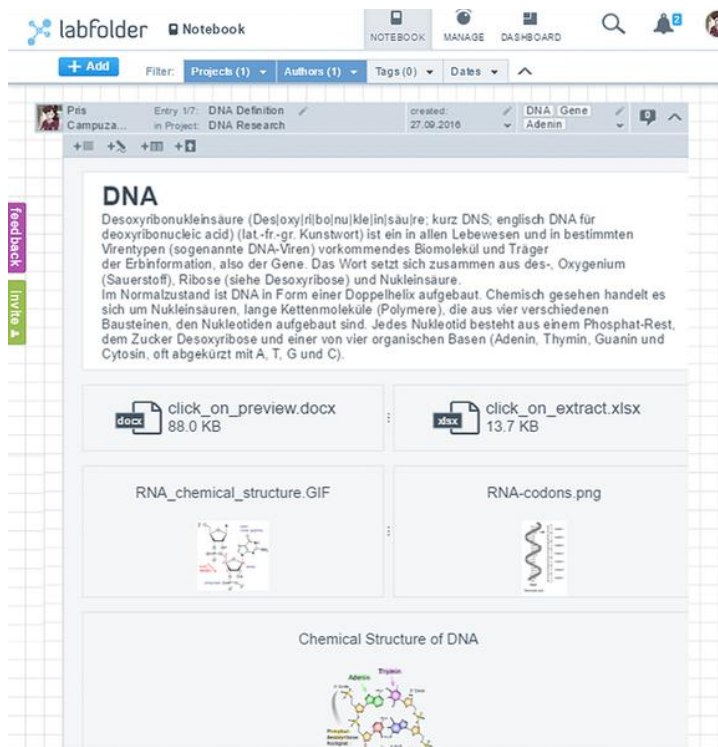


Abb. 3: labfolder - elektronisches Laborbuch
© labfolder GmbH

Ein Charakteristikum von *labfolder* ist die leicht zu handhabende Oberfläche, in die einzelne Dateien wie Excel-Tabellen oder Bilder hineingezogen werden können. Diese können dann durch neue Eintragungen ergänzt oder mit Anmerkungen und Notizen versehen werden. Neben der Möglichkeit, externe Systeme über die Programmierschnittstelle (API) anzusprechen, verfügt *labfolder* auch über eine hinreichend feinkörnige Rechtevergabe. Die Verwendung von selbsterstellten Vorlagen ermöglicht die effiziente Abbildung von bestehenden Arbeitsabläufen. Durch digitale Signaturen, entsprechend FDA- und OECD-Anforderungen, können Daten den Autoren und Zeichnungsberechtigten zugeordnet werden. Einzelne Einträge oder auch das gesamte Laborbuch lassen sich als PDF- oder XHTML-Datenexport vollständig aus *labfolder* extrahieren. Zudem unterstützt *labfolder* auch jene Max-Planck-Institute, die mit einer LDAP/Active Directory-Anbindung für ihr Login-Management arbeiten.

Besonderer Wert wurde bei der Verhandlung des Vertrags darauf gelegt, einen sogenannten Software Lock-in zu verhindern. Dieser Begriff bezeichnet die Schwierigkeiten, welche sich ergeben, wenn man seine Daten in einem proprietären Softwaresystem hinterlegt hat und (aus unterschiedlichen Gründen) auf ein anderes System wechseln möchte. Es wurden adäquate Möglichkeiten geschaffen, im Falle eines Beendens des Vertrags die im System befindlichen Daten vollständig in einem menschen- und maschinenlesbaren Format zu exportieren und in ein etwaiges neues System zu importieren.

Institute, welche bereits eine bestehende Lizenz für *labfolder* hatten, wurden ebenfalls berücksichtigt. So wurde darauf Wert gelegt, dass diese Verträge in der neuen, aus zentralen Mitteln der MPDL finanzierten Lizenz aufgehen.

Wie sieht nun die Nutzung der Software durch die Institute genau aus?

Zur Nutzung der Software gibt es zwei Möglichkeiten: die lokale Installation am Institut und die Nutzung einer zentralen MPG-Instanz. Wie bereits erwähnt, wird der Betrieb eines solchen Systems am eigenen Institut von vielen IT-Verantwortlichen bevorzugt. Dies ermöglicht ihnen, die volle Kontrolle über die darin abgelegten

Daten zu behalten. Zur Installation können sich die IT-Administratorinnen und -Administratoren des jeweiligen Instituts auf dem speziell für die Max-Planck-Gesellschaft eingerichteten Admin-Portal anmelden. Sie erhalten dort alle notwendigen Informationen, um die Software aufzusetzen. Falls notwendig finden sie dort auch Unterstützung durch die *labfolder* GmbH. Nach derzeitigem Stand interessieren sich 30 Institute für diese Form des Einsatzes.

Die Max Planck Digital Library installiert und betreibt darüber hinaus eine zentrale Instanz der *labfolder*-Software, die für alle jene interessierten Max-Planck-Institute und -Einrichtungen zur Verfügung stehen wird, welche keinen lokalen Betrieb wünschen. Die Laborbuchdaten bleiben dabei auf den Servern der Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung in Göttingen (GWDG), also innerhalb der Max-Planck-Gesellschaft.

Ausblick

Die Max Planck Digital Library wird das Thema elektronische Laborbücher in der Max-Planck-Gesellschaft in vielerlei Hinsicht weiter aktiv verfolgen sowie die Institute diesbezüglich begleiten und unterstützen. Sollte im Bereich der ELNs zukünftig Bedarf an weiteren Softwaresystemen oder Funktionalitäten ermittelt werden, so wären hier durch zentrale Bündelung der Lizenzierung oder der Anforderungen sowie durch Koordination der Entwicklung weitere Synergieeffekte zwischen den Max-Planck-Instituten und finanzielle Einsparungen möglich.

Über die MPG-interne ELN-Mailingliste können Interessierte ihre Erfahrungen und Anforderungen teilen. Dies gilt sowohl für *labfolder* im Speziellen als auch für elektronische Laborbücher im Allgemeinen.

Nach der positiven Resonanz des letzten Workshops ist eine Fortsetzung durch die MPDL in Planung. Dabei wird es vor allem darum gehen, wie sich Anbindungen und Schnittstellen von ELNs zu weiteren Softwarelösungen und Messinstrumenten realisieren lassen und welche Möglichkeiten sich daraus ergeben.

So könnte nicht nur die Option, *labfolder* an Publikations- und Archivsysteme anzubinden einen Mehrwert bringen. Auch die Verknüpfungen zu LIMS (**L**aboratory **I**nformation **M**anagement **S**ystems), SDMS (**S**cientific **D**ata **M**anagement **S**ystems) und CRIS (**C**urrent **R**esearch **I**nformation **S**ystems) bieten hier ein großes, bisher weitgehend ungenutztes Potenzial.

Mit der zentralen Lizenzierung von *labfolder* hat die MPDL einen ersten Meilenstein für die verstärkte Unterstützung bei Einführung und Nutzung von elektronischen Laborbüchern in der Max-Planck-Gesellschaft gesetzt. Der Weg zu einer zukünftig noch einfacheren, effizienteren und nachhaltigeren Labordokumentation für die Spitzenforschung unserer Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler ist damit eröffnet.