
Schöne neue Laborwelt – Elektronische Laborbücher digitalisieren die Labordokumentation

Bert Zulauf, Nina Knipprath

Zentrum für Informations- und Medientechnologie (ZIM), Heinrich-Heine-Universität
Düsseldorf

An deutschen Universitäten und Fachhochschulen erschließt sich aktuell im Bereich der Struktur und des Aufbaus von Laborarbeit eine neue Arbeitsweise: Dokumentation mittels elektronischer Laborbücher (ELB). Forschende produzieren und nutzen eine bunte Mischung an Daten wie Grafikdateien, Formeln, Tabellen oder Mikroskopie-Dateien. An der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf (HHU) findet regelmäßig Beratung und Unterstützung von Forschenden im Bereich des Forschungsdatenmanagements (FDM) statt. Neben Hilfestellungen bei der Antragsstellung bieten wir auch eine Unterstützung mittels diverser FDM-Tools an, unter anderem auch mit elektronischen Laborbüchern. Warum es sinnvoll ist, elektronische Laborbücher einzusetzen, wie unser Weg damit bisher verlaufen ist und was aktuell zu überwindende Hürden sind, stellen wir in diesem Bericht dar.

1 Einleitung

Das Zentrum für Informations- und Medientechnologie (ZIM) ist Teil des Forschungsdatenkompetenzzentrums (FDMK) der HHU und stellte Forschenden bereits seit einigen Jahren das lizenzbasierte ELB „Labfolder“ in einer eigenen Hosting Variante zur Verfügung. Im Zuge des vom deutschen Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Kooperationsprojekts „FoDaKo“ (Knipprath u. a. 2020), einer Zusammenarbeit von den drei nordrhein-westfälischen (NRW) Universitäten Düsseldorf, Wuppertal und Siegen, bauen wir nach Evaluation von verschiedenen Softwarelösungen seit 2018 am ZIM mit „eLabFTW“ eine Open Source Lösung auf.

Aus infrastruktureller Sicht haben wir seitdem maßgeblich eLabFTW gefördert, da es besser zu den Anforderungen der Forschenden passt. Denn Labfolder geht mit Lizenzkosten einher und ist damit nur schwer für kurzfristige Forschungsprojekte mit Gastwissenschaftlern sinnvoll einsetzbar, ganz zu schweigen von einem kostengünstigen Einsatz in der Lehre, den wir aber ebenso vorantreiben wollten.

Publiziert in: Vincent Heuveline, Nina Bisheh und Philipp Kling (Hg.): E-Science-Tage 2023. Empower Your Research – Preserve Your Data. Heidelberg: heiBOOKS, 2023. DOI: <https://doi.org/10.11588/heibooks.1288.c18085> (CC BY-SA 4.0)

Auf dem Campus der Heinrich-Heine-Universität wurde ein Neubau mit 70 % Laborflächen für die Biowissenschaften errichtet, der mittlerweile bezogen ist. Ein guter Zeitpunkt, die Digitalisierung der Labore mithilfe elektronischer Laborbücher weiter voranzutreiben und in die Breite zu tragen.

2 Erste Anforderungen an ein ELB

Beide Entscheidungen für die Softwarelösungen fielen aufgrund von Wünschen der Forschenden speziell nach diesen ELB. Ein wichtiges Kriterium aus Infrastruktursicht war es, vorerst zu einer generischen Lösung zu kommen, mit der eine möglichst große Zielgruppe Forschender gut arbeiten kann. Ein weiterer wichtiger Punkt war, dass es keiner zusätzlichen Software bedarf, um ein ELB zu benutzen, sondern der Service komplett webbasiert angeboten werden kann. Nach einer gleichzeitigen Pilotphase beider Laborbücher entschied man sich dazu, den Fokus auf die Open Source Lösung zu setzen, und nur noch eLabFTW zu betreiben, da diese mehr Anklang unter den Forschenden fand. Deswegen stellte die HHU die Hosting Variante von Labfolder Anfang 2022 ein. Der „ELN-Wegweiser“ der Deutschen Zentralbibliothek für Medizin (ZB-MED; Adam u. a. 2023), sowie der neu erschienene „ELN-Finder“¹, sind sehr gute Leitlinien, um sich für eine Softwarelösung zu entscheiden.

Die Laborarbeit sollte gut strukturiert dokumentiert werden können. Gleichzeitig wollen Forschende auch, vor allem aber in der aktiven Praxisphase, schnell Informationen in einem unstrukturierten Bereich ablegen können, um sie in der Nacharbeit sauber zu dokumentieren. So stellt also die Nutzerseite verschiedene Arten von Anforderungen an ein ELB: Neben den technischen Anforderungen wie Benutzerfreundlichkeit, der Verwendung bekannter Dateiformate und der ständigen digitalen Verfügbarkeit der Daten existiert auch der Wunsch nach Möglichkeit seine Daten komplett wieder aus der ELB Software zu entnehmen und mit anderen Tools weiterzuarbeiten. Hinzu kommen spezifische fachliche Anforderungen, welche sich unter Umständen stark unterscheiden können. Während die Biologen und die Physiker mit dem generischen Tool eLabFTW zufrieden sind, haben die Chemiker speziellere Anforderungen an ein ELB. Sie benötigen beispielsweise einen spezifischen chemischen Formeleditor, damit die Molmasse automatisch übernommen werden kann und damit eine Struktursuche möglich ist. Außerdem können die Messdaten zwar hoch- und heruntergeladen werden, jedoch gibt es kein direktes Öffnen in einer geeigneten Software. Eine der regulatorischen Anforderungen, gerade bei Drittmittelprojekten, ist die Einhaltung der guten wissenschaftlichen Praxis und guten Laborpraxis. Dazu gehört ebenso die sichere Aufbewahrung der Forschungsdaten, wie auch das Sicherstellen der Verfügbarkeit und Auffindbarkeit dieser.

¹ <https://eln-finder.ulb.tu-darmstadt.de/home>; Zuletzt aufgerufen am 20. April 2023.

2.1 Einbindung ins Curriculum

Trotz der stetig wachsenden Benutzung besteht häufig eine interne Schwelle das elektronische Laborbuch auch einzusetzen. Die Motivation der Mitarbeitenden ist hier der wesentliche Punkt, an dem angesetzt werden muss. So sind wir vom ZIM bereits mit Forschenden im engen Austausch, das Thema schon früh Studierenden nahezubringen und attraktiv als Teil des Curriculums darzustellen, um damit die positive Haltung von Studierenden gegenüber Digitalisierungsprojekten auch bei der Digitalisierung von Laborarbeiten zu nutzen.

Mit dem Ziel einen Kulturwechsel hin zu elektronischen Laborbüchern zu gestalten, führte man, als Pilotprojekt in der Neurobiologie, die Master-Studierenden des Kurses „Cellular and molecular analysis of brain function“ mit Hilfe von Videotutorials in die Laborbuchsoftware ein, um unter Laborbedingungen erste Schritte in fluorometrischem Imaging zu erlernen, d.h. wie Daten generiert und ausgewertet werden sollen. Studierende können leichter in die Forschungsarbeit eingebunden werden, da über das ELB Einträge leicht freigegeben werden können. In enger Zusammenarbeit mit den Lehrenden kann so das Laborbuch für die Lehrzwecke optimiert werden. So lernen junge Wissenschaftler früh den Umgang mit elektronischen Laborbüchern und werden in der Forschung an diese neuen Standards anknüpfen.

Um die verschiedenen Anforderungen von Forschung und Lehre bedienen zu können, haben wir eine eigene Instanz von eLabFTW speziell für die Lehre bereitgestellt. Hier ist es den Lehrenden wichtig, dass Testdaten auch wieder gelöscht werden können, und dass Studierende während des Ausprobierens keine wichtigen Daten der Forschungsdokumentation verändern. Trotzdem können Experimente aus dem System der Lehre über die Export & Import Funktionalität in die Hauptinstanz übernommen werden.

3 Vor-Ort-Unterstützung und gemeinsame regionale Zusammenarbeit

Um grundsätzliche Bedarfe von Forschenden zu identifizieren hat uns die Gründung einer NRW-weiten Arbeitsgruppe zum Thema ELB geholfen.² Die Kollaboration der Infrastruktureinrichtungen hat uns voneinander lernen lassen: So erhielten wir Hilfe bei der Implementierung von einer zentralen Authentifizierungsmethode, und helfen anderen beim Einsatz in der Lehre oder wenn es um konzeptionelle Fragestellungen geht. Unter anderem wird in dieser Arbeitsgruppe über die technische Einführung, sowie IT-Sicherheitskonzepte und Schnittstellen zu anderer Forschungsdateninfrastruktur diskutiert.

Die Vernetzung der verschiedenen NRW-Einrichtungen bietet auch einen guten Überblick, denn neben eLabFTW verwenden diese Einrichtungen u.a. auch Labfolder, eLabJournal

² <https://wiki.hhu.de/x/vAMdB>; Zuletzt aufgerufen am 20. April 2023.

oder RSpace als Laborbuchlösungen³. Forschende aus ganz Deutschland wurden auf unsere Pionierarbeit aufmerksam und traten in Kontakt mit uns oder der Arbeitsgruppe. So wuchs die Gemeinschaft auf mittlerweile 100 Mitglieder an. Zusammen haben wir einen Leitfaden entwickelt, der Infrastruktureinrichtungen bei der Einführung von elektronischen Laborbüchern helfen soll (Adam u. a. 2023).

Gleichzeitig wurde im Kooperationsprojekt OER.DigiChem.nrw das Thema der elektronischen Laborbücher in der Chemie speziell mit Fokus auf Studierende erweitert. Im Rahmen dieser Kooperation erstellen die HHU Düsseldorf, die Bergische Universität Wuppertal und die Technische Hochschule Köln zusammen freie Bildungsmaterialien (OER) für Studierende und entwickeln Materialien mit denen intentionales Lernen in der Studiengangphase besser berücksichtigt werden kann (Mertineit u. a. 2021). Die Tutorialvideos zur Nutzung von eLabFTW können über das Portal ORCA.nrw abgerufen werden, und sind sehr gut geeignet zur Gestaltung oder Ergänzung von fachspezifischen Lernräumen zum Thema ELB innerhalb von Learning Management Systemen.

3.1 Rahmenbedingungen an der HHU

Wir erhielten einen besseren Überblick der Forschungsszenarien am eigenen Standort, indem wir verschiedene Forschende aus unterschiedlichen Fachbereichen, wie beispielsweise aus der Physik, der Biologie und der Medizin, eingeladen haben, um über ihre Anforderungen zu sprechen, und um Use cases zu entwickeln (Zulauf und Knipprath 2019). Hier konnten wir gemeinsame Rahmenbedingungen schaffen, was den Service eLabFTW betrifft. Aktuell treffen wir uns monatlich mit Power-Usern, um über Probleme und Möglichkeiten in Bezug auf die Nutzung von elektronischen Laborbüchern an der HHU zu sprechen.

Zur Etablierung des Services wurden Gespräche mit dem Personalrat geführt, erste Versionen von Verfahrensverzeichnissen erstellt und über Datenschutzbetrachtungen nachgedacht. Man muss den Spagat zwischen den Datenschutzrechten der Einzelnen und der guten wissenschaftlichen Praxis meistern, also die Löschmöglichkeit der personenbezogenen Daten gegen Aufbewahrungs- und Nachweispflicht abwägen. Gelöst haben wir das über eine Zustimmung der Nutzenden beim Login über Shibboleth, sowie über den Punkt der Labordokumentation und Aufbewahrungsfrist in den Nutzungsbedingungen. Es muss demnach eine regelmäßige Sensibilisierung der Mitarbeitenden durchgeführt werden, damit die korrekte Dokumentation der im Laborbuch zugelassenen Forschungsdaten gewährleistet ist. Außerdem liegt es in der Verantwortung der Team-Admins, regelmäßig zu prüfen, ob die vorgegebene Aufbewahrungsfrist der gespeicherten Daten erreicht wurde, und diese somit gelöscht werden sollten.

Unveränderlichkeit wird innerhalb eLabFTW durch eine Zeitstempel-Möglichkeit gewährleistet. Hier können Forschende ihre Arbeit zu diesem Augenblick beweislich festhalten. Eine digitale Möglichkeit Aufzeichnungen über gentechnische Arbeiten nach Gentechnik

³ https://www.forschungsdaten.org/index.php/Elektronische_Laborbücher; Zuletzt aufgerufen am 20. April 2023.

Aufzeichnungsverordnung (das sogenannte „Formblatt-Z“) ebenfalls elektronisch zu speichern, wird momentan an unserer Universität diskutiert und entwickelt.

Aktuell erheben wir auch Kennzahlen im Kontext des FDMK, um unsere Forschenden gezielter unterstützen zu können, und entwickelten in einem Projekt unserer Auszubildenden Fachinformatiker ein Tool, welches unter anderem die Benutzer von eLabFTW in Fakultäten und Rollen einteilt. Hauptnutzer ist die Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät mit 400 Mitarbeitenden und 150 Studierenden, gefolgt von der Medizinischen Fakultät mit 230 Mitarbeitenden und 50 Studierenden, welche sich insgesamt in 88 Teams befinden und 25.000 Experimente angelegt haben.

3.2 Anwenderbeispiele

Das FDMK begleitet den SFB1208 sehr intensiv in Bezug auf das Forschungsdatenmanagement. Die Gruppe hat die Nutzung von eLabFTW als verpflichtend eingeführt und entwickelt aktuell in engem Austausch mit uns eine Möglichkeit um Daten aus dem elektronischen Laborbuch zu extrahieren und in einem Archiv zu speichern. Für Forschungsdaten bieten wir bereits ein institutionelles Repositorium auf Basis der Open Source Software DSpace an der HHU an. Jetzt haben Forschende des SFB1208 das Tool LISTER - „Life Science Experiment Metadata Parser“ (Musyaffa, Rapp und Gohlke 2023) programmiert, welches über die eLabFTW API einen Export mit zusätzlichen Metadaten qualifiziert und als JSON Datei an eine Schnittstelle unseres separaten, auf DSpace basierenden Archives, weitergibt. Dort werden die Metadaten sowohl in die DSpace Metadaten übernommen wie auch als Bestandteil der zu archivierenden Daten im S3 Objektstore bzw. Langzeit-speicher abgelegt. Durch die Vorgehensweise sind die Daten nachhaltig und robust auch ohne DSpace als Repository-Anwendung verwendbar. Ein Ziel ist es auch im Laborbuch-Archiv sehr spezifisch, ähnlich wie in der Laborbuchplattform, nach Experimenten suchen zu können. Daneben wird die Plattform entlastet und das Vorhaben unterstützt die gute wissenschaftliche Praxis.

Ein weiteres Anwendungsbeispiel findet sich im Bereich der vorklinischen Studien der Medizin. Dort wird eLabFTW als zentrale Schnittstelle für die Komponenten des Qualitätsmanagementsystems und die digitale Speicherung von Laborjournalen verwendet. Es wurden Standardarbeitsanweisungen (Standard Operating Procedure - SOP) sowie eine verwaltete Biobank für die sichere Langzeitlagerung von Bioproben eingeführt (Hewera u. a. 2020).

Bereits erzielter Nutzen kann am Beispiel der Neurobiologie sehr gut dargestellt werden: Hier wird die Chemikaliendatenbank innerhalb von eLabFTW nach einer festgelegten Vorgabe von allen gepflegt. Jede der 400 Chemikalien hat einen eigenen Eintrag in eLabFTW welcher eine Tabelle beinhaltet, in der auch eingetragen werden kann, falls diese Chemikalie nachbestellt werden muss. Die technischen Assistenten haben so über ein Lesezeichen direkt eine Einkaufsliste zur Hand. Zudem können die Forschenden die Chemikalien direkt mit ihren Experimenten verknüpfen und haben die H- und P-Sätze (Gefahren und Sicherheitshinweise) schnell auf einen Blick. Durch die Einführung von elektronischen

Laborbüchern konnte so auch die viel komfortablere Arbeitsweise mit einer Chemikaliendatenbank etabliert werden. Neben den Chemikalien verwaltet die Arbeitsgruppe auch ihre optischen Elemente, Protokolle und Listen sowie Präparationslösungen über eLabFTW. Durch die Nutzung von eLabFTW ergab sich eine große Zeitersparnis, weil keine bzw. weniger Wiederholungen gemacht werden müssen, Experimente und weitere Daten schneller wiederauffindbar sind, und man leichter an alte Projekte anschließen kann.

Das Feedback der sehr unterschiedlichen Forschergruppen ist zum einen Inspiration für andere Forschende und bietet für uns einen wertvollen Input für die Weiterentwicklung der Plattform. Die Forschenden stehen nicht nur mit den Infrastrukturmitarbeitenden und untereinander in ständigem Austausch, sondern wir beteiligen uns auch aktiv an der eLabFTW Community und halten regelmäßig Rücksprache mit dem Hauptentwickler und seiner Firma, um die Open-Source Software kontinuierlich weiterzuentwickeln und an neue Gegebenheiten anzupassen.

Literaturverzeichnis

- Adam, Beatrix, Lukas C. Bossert, Magdalene Cyra, Matthias Grönwald, Stephan Janosch, Nina Knipprath, Birte Lindstädt u. a. 2023. „Raus aus dem Kladdenchaos: Elektronische Laborbücher als zentrale Dienstleistung – Erfahrungen und Empfehlungen“. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.7529588>.
- Hewera, Michael, Ann-Christin Nickel, Nina Knipprath, Sajjad Muhammad, Xiaolong Fan, Hans-Jakob Steiger, Daniel Hänggi und Ulf Dietrich Kahlert. 2020. „An inexpensive and easy-to-implement approach to a Quality Management System for an academic research lab“. Version 2; peer review: 2 approved, 1 approved with reservations, *F1000Research* 9:660. DOI: <https://doi.org/10.12688/f1000research.24494.2>.
- Knipprath, Nina, Torsten Rathmann, Jessica Stegemann, Bert Zulauf, Thomas von Rekowski und Maurice Schleußinger. 2020. „Schlussbericht FoDaKo - Forschungsdatenmanagement in Kooperation“. DOI: <https://doi.org/10.25819/ubsi/728>.
- Mertineit, Ann-Kathrin, Klaus Schaper, Claudia Bohrmann-Linde, Dirk Burdinski, Bert Zulauf, Nico Meuter, Hans-Niklas Hackrath, Richard Kremer und Nina Knipprath. 2021. „Collaborative development of open educational resources for building competencies in the use of digital tools in chemistry“. In *ICERI2021 Proceedings*. IATED. DOI: <https://doi.org/10.21125/iceri.2021.0325>.
- Musyaffa, Fathoni A., Kirsten Rapp und Holger Gohlke. 2023. „LISTER: Semi-automatic metadata extraction from annotated experiment documentation in eLabFTW“. DOI: <https://doi.org/10.1101/2023.02.20.529231>.
- Zulauf, Bert, und Nina Knipprath. 2019. „Electronic Lab Notebooks - early research practice in teaching“. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.4787258>.