



Considérations pour la mise en œuvre de cahiers de laboratoire électroniques dans un environnement de recherche universitaire

Stuart G. Higgins ^{1,2,3}, Akemi A. Nogiwa-Valdez ^{1,2,3} et Molly M. Stevens ^{1,2,3}^y

Alors que la recherche devient principalement numérisée, les scientifiques ont la possibilité d'utiliser des cahiers de laboratoire électroniques pour enregistrer et accéder aux entrées. Ces systèmes peuvent mieux répondre aux exigences de volume, de complexité, d'accessibilité et de conservation que les cahiers papier. Bien que la technologie puisse apporter de nombreux avantages, ceux-ci ne peuvent être réalisés qu'en choisissant un système qui répond correctement aux exigences d'un contexte donné. Cette revue explore les facteurs qui devraient être pris en compte lors de l'introduction de cahiers de laboratoire électroniques dans un groupe de recherche axé sur les études. Nous citons des études pertinentes et discutons de notre propre expérience de mise en œuvre d'un système dans un environnement de recherche multidisciplinaire. Nous examinons également comment l'investissement financier et en temps requis est partagé entre les individus et les institutions. Enfin, nous discutons de la place des cahiers de laboratoire électroniques dans le contexte plus large de la gestion des données de recherche. Cet article n'est pas une critique de produit ; il fournit un cadre à la fois pour l'examen initial d'un cahier de laboratoire électronique et pour l'évaluation de progiciels spécifiques.

year1 est la création de millions d'autres note de laboratoire
Aux côtés de millions de nouvelles publications de recherche chaque
entrées de livres. Ceux-ci contiennent des métadonnées importantes,
reflétant la nuance du travail expérimental. La possibilité d'accéder, d'utiliser
et de partager facilement les données des cahiers de laboratoire permet aux
chercheurs de déduire rapidement le sens des résultats et peut aider à faciliter
la reproductibilité d'une expérience à l'autre. Les domaines de recherche
collaboratifs ou multidisciplinaires nécessitent des méthodes efficaces pour
capturer et partager les entrées de cahiers entre un large éventail de
scientifiques.

La recherche s'appuie sur l'informatique pour analyser et présenter les
données ; par conséquent, le stockage des entrées des cahiers de laboratoire
dans un format numérique leur permet de s'intégrer parfaitement aux données
de recherche au fur et à mesure de leur traitement. Les cahiers de laboratoire
électroniques (ELN) sont fondamentalement un moyen de numériser les
entrées au point de création, permettant à ces données d'être traitées par ordinateur.
Cependant, ils ne sont pas une panacée. Avant de déployer un ELN, il est
essentiel que les besoins des utilisateurs, ainsi que les avantages et les
inconvenients des différentes approches, soient correctement compris pour
éviter de créer un système qui entrave plutôt qu'aide.

Les 20 dernières années ont vu une augmentation rapide du nombre de
progiciels ELN Les ELN ont été évoqués sous diverses formes depuis la fin
des années 19502 .

Dans les années 1980, des logiciels tels que RS/1 (Bolt, Beranek et New
man, Inc.) offraient aux chercheurs la possibilité de stocker, d'analyser et de
commenter des données3,4 . Les ELN sont présentés comme un outil pour

améliorer la reproductibilité de la recherche en facilitant le transfert de détails
expérimentaux vitaux, à la fois entre les générations de chercheurs et entre
les différents groupes de recherche5,6 .

L'enregistrement, l'accès et la préservation des dossiers papier peuvent être
lents, inefficaces et difficiles à intégrer aux systèmes modernes de saisie de
données contrôlés par ordinateur. Cependant, la mise en œuvre d'un ELN
n'est pas triviale. Son adoption nécessite une compréhension claire de
l'utilisation des ordinateurs portables dans un environnement de laboratoire
donné et la mise à disposition de ressources suffisantes.

La plupart des ELN actuels sont des offres commerciales. Ceux-ci offrent
un accès à des logiciels propriétaires, généralement hébergés à distance et
disponibles par abonnement, dans le cadre d'un modèle commercial de logiciel
en tant que service (SaaS). Il existe quelques ELN open source développés
par la communauté, avec des bases de code librement accessibles. Il existe
également un petit nombre d'ELN commerciaux avec des bases de code open
source et des ELN gratuits (pour les organisations à but non lucratif) avec des
bases de code propriétaires. L'examen de produits spécifiques dépasse le
cadre de cet article⁷; cependant, un certain nombre de comparaisons de
produits sont disponibles en ligne^{7–10}.

Au cours des 20 dernières années, le nombre d'ELN a considérablement
augmenté, car les avantages de la numérisation ont été reconnus (Fig. 1). Sur
ce marché, tous les ELN n'ont pas fait leurs preuves. Un nombre important de
progiciels disponibles dans le commerce et à code source ouvert ont fini par
disparaître. Dans notre analyse (méthode supplémentaire) de 172 produits
ELN (96 actifs et 76 disparus), la durée de vie moyenne d'un ELN s'est avérée
être de $7 \pm 4,4$ ans (médiane \pm écart absolu médian constant). Les vies se
brisent

¹Département des matériaux, Imperial College London, Londres, Royaume-Uni. ²Département de bioingénierie, Imperial College London, Londres, Royaume-Uni. ³Institut de Génie biomédical, Imperial College London, Londres, Royaume-Uni. ^ye-mail: m.stevens@imperial.ac.uk

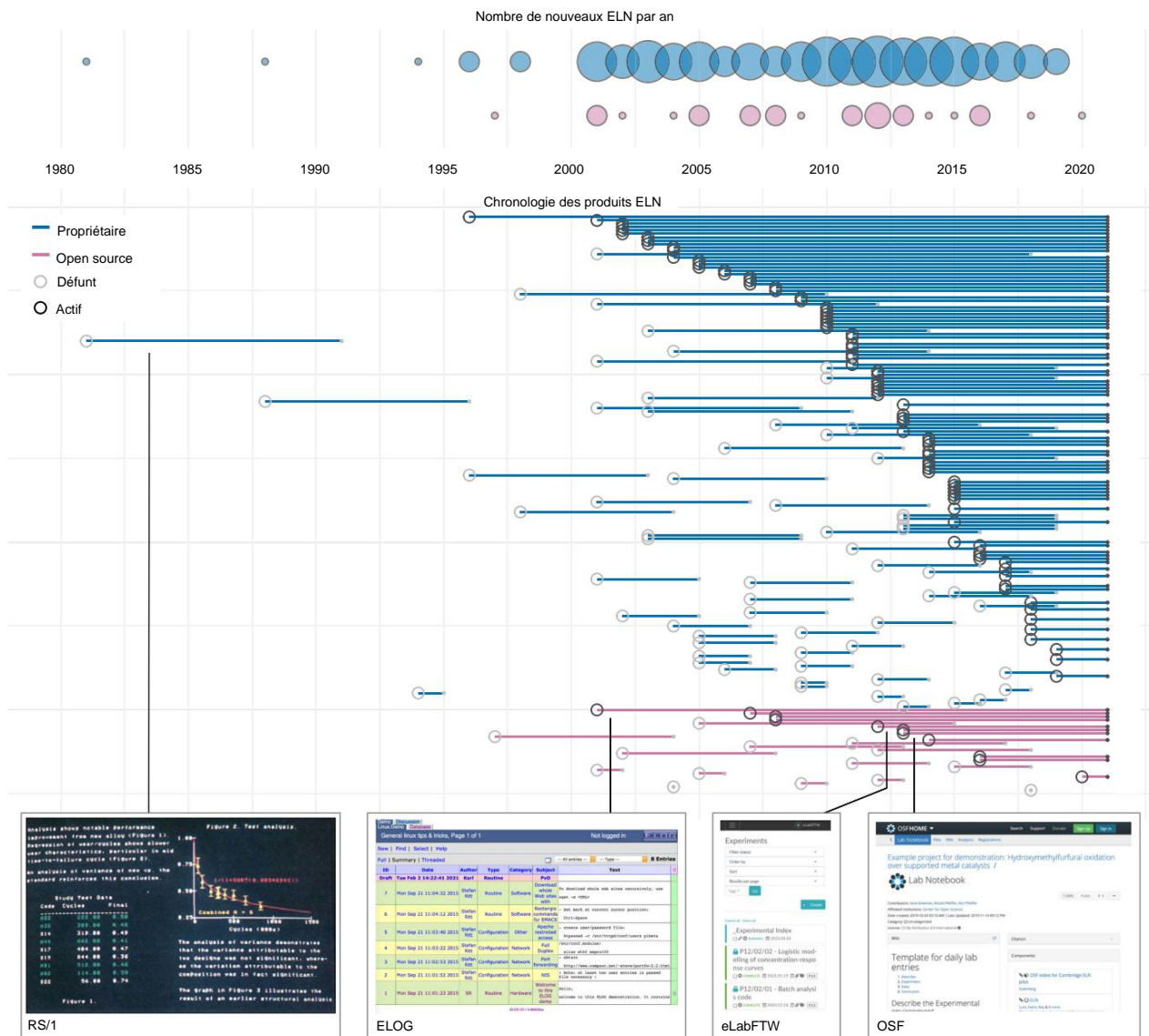


Fig. 1 | Chronologie de 172 progiciels ELN, documentant l'année de sortie et d'arrêt connue ou estimée. Les aires des cercles indiqués à la en haut de la figure sont proportionnels au nombre de nouveaux ELN lancés au cours d'une année donnée. Les données sont séparées en propriétaires (bleu) et open source (rose) et triés dans ces catégories en fonction du nombre d'années d'activité du logiciel. Les encarts sont des captures d'écran d'un sélection d'ELN, montrant la progression du développement logiciel dans le temps, dont : RS/1 (Bolt Beranek et Newman Inc.), adapté avec autorisation de réf. ³, SCAy; ELOG (Stefan Ritt, Paul Scherrer Institute), reproduit avec la permission de la réf. ¹¹; eLabFTW (Deltablatt), reproduit avec autorisation de réf. ²⁴; OSF (Centre for Open Science), reproduit avec la permission de la réf. sous licence CC-BY ⁴⁰. Voir Supplémentaire Méthode pour une description de la méthodologie et des limites de l'enquête. Ce graphique intègre des données provenant de sources primaires et secondaires^{9,14,59}. Une version interactive de cette figure, ainsi que toutes les mises à jour, est disponible à partir d'un référentiel de données (Zenodo) soutenant cet article⁵².

à $6 \pm 4,4$ ans ($n = 25$) et $7 \pm 4,4$ ans ($n = 147$) pour les bases de code open source et propriétaire, respectivement. L'ELN open source le plus ancien de notre enquête était ELOG (Stefan Ritt, Paul Scherrer Institut) ¹¹, qui a été actif depuis 20 ans. L'ELN propriétaire le plus ancien que nous avons trouvé était Gene Inspector (Textco BioSoftware, Inc.)¹², qui est actif depuis 25 ans. acquisitions d'entreprises, les changements du marché commercial et le manque de développeur le soutien ou le financement de projets open source peuvent tous se traduire par anciens ELN. L'assistance à long terme et l'accès aux données doivent être un préoccupation majeure lors de la mise en place d'un ELN⁹: de nombreux avantages

(par exemple, accès rapide aux entrées historiques du carnet de notes) disparaissent si le matériel archivé est piégé dans des systèmes hérités inaccessibles, ou pire, supprimé. Les procédures d'extraction et d'archivage des données dans des formats accessibles devraient faire partie de toute stratégie de déploiement.

Avant de choisir un ELN, le but du laboratoire le cahier doit être identifié

Un cahier de laboratoire sert à plusieurs fins. Pour le chercheur, c'est un compte rendu d'expériences et de travaux menés. Le cahier peut décrire des méthodes expérimentales, être un guide direct

enregistrer les données originales ou fournir les métadonnées nécessaires pour contextualiser d'autres données. Les métadonnées formelles (paramètres de test expérimentaux et conditions de contrôle) peuvent être complétées par des observations et des annotations non planifiées, facilitant à la fois l'analyse et l'interprétation des données. Un cahier peut consigner à la fois la genèse des idées et le processus de prise de décision¹³. Le succès de la capture complète de ces informations est essentiel pour le chercheur et les autres qui tentent de reproduire le travail.

Les cahiers de laboratoire peuvent être utilisés pour appliquer les bonnes pratiques et normaliser les flux de travail. Par exemple, les institutions peuvent imposer l'inclusion de modèles d'évaluation des risques dans les cahiers de chimie synthétique pour encourager les chercheurs à identifier et à atténuer les dangers immédiatement avant de procéder à une réaction. Les procédures de routine avec des résultats bien définis peuvent suivre un modèle de cahier standard, pour rationaliser la saisie des informations et normaliser la tenue des dossiers ou pour enregistrer les procédures de contrôle de la qualité. Ce processus peut contribuer au respect des meilleures pratiques de recherche, par exemple en s'assurant que suffisamment de détails sont capturés pour faciliter la reproductibilité. Un ELN peut simplifier cela en agissant comme une base de données de modèles et de protocoles^{14,15}. Pour les chercheurs, les gestionnaires et les institutions, les cahiers de laboratoire fournissent des preuves du travail effectué, facilitent la responsabilité interne et fournissent un dossier juridique pour démontrer la conformité réglementaire et contribuer potentiellement à la protection de la propriété intellectuelle.

L'identification des exigences d'un laboratoire donné définit et contraint le choix de l'ELN. Les laboratoires de recherche universitaires proposent généralement une gamme variée d'expériences, de types de données et de disciplines, ce qui fait que les utilisateurs ont des exigences différentes pour le même package ELN¹⁶. Bien que de nombreux ELN soient des produits spécialisés destinés aux chercheurs dans un domaine spécifique (par exemple, la biochimie ou la pharmacologie), ils peuvent ne pas être pertinents ou suffisamment flexibles pour la plupart des chercheurs. Bien que cette limite ait été reconnue par les premiers créateurs d'ELN dans les années 1990¹⁷, elle reste un problème qui a été à nouveau mis en évidence dans des études récentes¹⁴. La tenue de registres peut être nécessaire pour respecter les normes réglementaires, par exemple, pour les laboratoires accrédités selon les normes d'essai et d'étalonnage ISO 17025:2017 et ISO 15189:2012^{18,19}, qui stipulent des exigences en matière de gestion des informations de laboratoire, ou pour ceux qui souhaitent se conformer aux normes générales de tenue de dossiers électroniques telles que le Code of Federal Regulations Title 21 Part 11²⁰. Les facteurs de motivation et les exigences d'un groupe de recherche peuvent ne pas être les mêmes que ceux des autres groupes de la même institution d'accueil, il faut donc veiller à identifier les priorités des différentes parties prenantes avant de sélectionner un produit particulier.

Les ELN récupèrent le temps des chercheurs et permettent de meilleures pratiques de recherche, en échange d'un coût financier. Les ELN améliorent la qualité de vie par rapport aux cahiers papier. Dans les environnements où les ELN ont été mis en œuvre, la facilité avec laquelle les informations peuvent être recherchées et partagées est considérée comme l'un des principaux avantages^{15,21}. La figure 2 illustre différentes manières de partager des informations via un ELN.

Rendre les entrées ELN visibles pour plusieurs utilisateurs est souvent simple à réaliser dans le logiciel. Les équipes de projet peuvent accéder instantanément aux données expérimentales pertinentes de différents chercheurs, facilitant ainsi la gestion de projet. Les superviseurs peuvent à distance

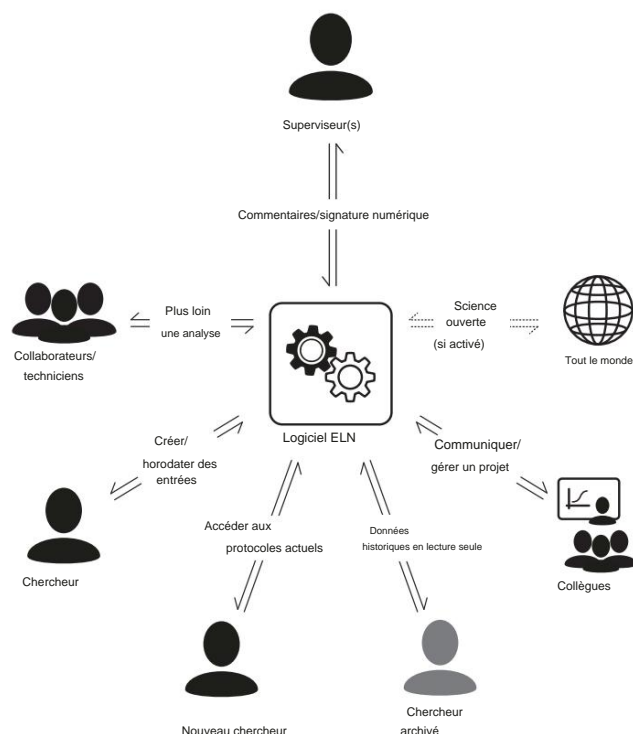


Fig. 2 | Exemples de flux d'informations possibles entre différents utilisateurs, par l'intermédiaire d'un ELN. Les chercheurs peuvent créer et sécuriser des entrées, partager des informations avec des collègues et des collaborateurs et accéder aux dossiers des anciens membres de l'équipe. Le degré de partage est dicté par la politique locale, les fonctionnalités logicielles et la configuration.

fournir des commentaires sans accès physique à un bloc-notes et ajouter des signatures numériques pour vérifier les entrées. Les collaborateurs peuvent être géographiquement séparés, travaillant dans des laboratoires séparés dans plusieurs pays. De même, les chercheurs peuvent accéder à leurs dossiers depuis plusieurs endroits, par exemple depuis différents laboratoires ou depuis leur domicile. Cela peut être un avantage lorsque l'accès physique aux installations est restreint, comme on l'a vu lors de la pandémie de maladie à coronavirus 2019 (COVID-19). Il réduit également le besoin de transporter des cahiers de laboratoire physiques entre les sites, réduisant ainsi le risque de contamination croisée et de perte de données.

Les entrées du bloc-notes peuvent être archivées in situ au fur et à mesure que les membres de l'équipe partent, tout en permettant aux étudiants et au personnel entrants d'y accéder instantanément. La possibilité de rechercher rapidement dans tout le contenu disponible permet aux chercheurs de filtrer et d'accéder aux entrées ELN pertinents pour leur propre travail^{13,21}. Lorsque les utilisateurs quittent une organisation, si cela est autorisé, un ELN leur permet de créer des copies de leurs entrées pour référence future. Cela peut permettre un accès rapide aux idées de recherche antérieures et en cours au fur et à mesure qu'un chercheur progresse dans sa carrière. Stocker et conserver physiquement des données numériques sur de longues périodes est plus efficace en termes d'espace et de temps que d'essayer de stocker des cahiers papier.

Le tableau 1 illustre comment les différences entre l'interaction avec les cahiers de laboratoire papier et électroniques sont finalement un choix entre le temps et l'argent. Les cahiers papier peuvent être un support peu coûteux, mais l'exécution d'actions triviales avec un ELN (par exemple, la recherche, le partage et la sauvegarde des données) prend du temps

Tableau 1 | Diverses interactions avec les cahiers de laboratoire, comparant leur facilité entre le papier et les supports électroniques

Interaction	Cahier papier	Carnet électronique
Ajouter des entrées à un bloc-notes	Trivial dans la plupart des environnements	Délai initial pour se connecter au système; puis rapide Les saisies physiques peuvent être difficiles dans certains environnements de laboratoire (par exemple, lorsque vous portez un équipement de protection individuelle)
Incorporer des illustrations dessinées à la main, des équations ou des structures chimiques	Banal; peut être dessiné directement dans l'ordinateur portable Cela peut être difficile sans matériel approprié (par exemple, un stylet) et ELN compatible. Certains ELN intègrent des éditeurs d'équations/structures spécialisés	
Incorporer du contenu non textuel généré par ordinateur (par exemple, des photographies numériques, des captures d'écran et des extraits de code)	Nécessite une impression, suivie d'un collage dans un cahier	Banal; peut être intégré en ligne avec du texte ou joint en tant que fichier
Recherche parmi les entrées	Long; dépend d'un index construit par l'utilisateur	Rapide, consultable par mot-clé, heure, utilisateur, balises de métadonnées, etc.
Réorganisation des entrées	Impossible; limité à l'ordre chronologique; difficile lorsque vous entreprenez plusieurs expériences simultanées	Dynamique; instantanément capable de trier et de présenter les entrées en fonction des métadonnées
Utiliser des modèles et des liens vers des informations communes sur l'équipement/les réactifs ou des procédures opératoires standard	Imprimer et coller des documents dans un cahier ou s'appuyer sur une référence écrite—chronophage et statique	Les modèles, les détails de l'équipement/des réactifs ou les procédures d'exploitation standard peuvent être conservés dans une base de données centrale et liés dynamiquement directement à une ou plusieurs entrées
Lecture des entrées (intelligibilité et accessibilité)	Dépend de l'utilisateur pour écrire des notes claires et intelligibles Accessibilité limitée	Normalise la saisie sous forme de texte dactylographié Possibilité d'améliorer l'accessibilité en utilisant un logiciel d'écriture manuscrite et/ou de reconnaissance vocale
Tenue d'un dossier légal	Facilité par la signature et la co-signature des pages du bloc-notes, ainsi que le stockage sécurisé du bloc-notes	Facilité par les signatures numériques/horodatage et un régime de sauvegarde robuste
Partage d'entrées de bloc-notes	Prend beaucoup de temps, impliquant la numérisation et l'envoi d'entrées pertinentes; ou courez le risque de perdre votre ordinateur portable	Banal; une hiérarchie d'autorisations peut être établie pour une entrée donnée L'accès aux données peut être fourni instantanément, dans le monde entier si nécessaire
Sauvegarde des blocs-notes	Prend beaucoup de temps pour numériser un bloc-notes entier	Trivial; les données peuvent être automatiquement copiées sur plusieurs emplacements sur une base définie par l'utilisateur
Réparer les dommages accidentels à un ordinateur portable	Pas cher pour remplacer un ordinateur portable Les données peuvent être irrécupérables	Coûteux pour remplacer le matériel informatique Pour les architectures client-serveur, les données sont conservées séparément de l'appareil
Stockage physique des cahiers	Au fil du temps, les besoins en espace peuvent être importants pour les grands laboratoires	Stockage au niveau de l'institution possible sur un seul serveur, avec la possibilité d'externaliser le stockage vers un centre de données
Accéder aux entrées archivées ou historiques	Temps intensive	Un ELN avec une fonction d'exportation de données appropriée peut faciliter la création d'archives numériques rapidement accessibles/recherchables
Utilisation d'un ordinateur portable dans un environnement contrôlé (par exemple, salles blanches et laboratoires de confinement)	Des cahiers spécialisés peuvent être nécessaires; le cahier doit rester dans le laboratoire	Les ELN peuvent fournir un accès transparent à l'intérieur et à l'extérieur d'un environnement contrôlé, en supposant que des dispositifs d'accès appropriés sont fournis
Interopérabilité avec d'autres systèmes de laboratoire (par exemple, bases de données de mesure/d'inventaire/d'approvisionnement)	Référence statique manuelle	Possibilité d'incorporer des liens automatisés/directs en utilisant des identifiants persistants et des interfaces de programmation d'applications; dépendant du support ELN
Partage des entrées en tant que données de recherche ouvertes/science ouverte	Consommateur de temps selon les autres problèmes de partage	Prise en charge intégrée avec certains ELN

chère. À l'inverse, la plupart des ELN sont relativement coûteux à mettre en œuvre et à entretenir, par rapport aux cahiers papier, mais offrent des fonctionnalités bien plus importantes à un coût de temps beaucoup plus faible pour le chercheur. Des actions telles que la recherche, la réorganisation, le partage et l'archivage peuvent être extrêmement rapides par rapport aux carnets de notes papier. Selon la mise en œuvre, les ELN peuvent introduire un délai pour les utilisateurs car ils nécessitent l'acquisition

matériel et s'authentifiant dans le logiciel avant de pouvoir effectuer une entrée dans le carnet de notes. La mesure dans laquelle il s'agit d'un problème dépend du matériel (une tablette moderne peut se réveiller et se déverrouiller en 1 s) et du logiciel (l'authentification biométrique peut offrir des connexions rapides, ou, plus communément, la politique locale peut dicter combien de temps les sessions utilisateur restent actives ou forcer la réauthentification).

L'environnement d'exploitation affecte à la fois les ordinateurs portables papier et électroniques. Les laboratoires qui contiennent une certaine forme de environnement protégé (par exemple, salles blanches ou laboratoires de confinement biologique) peut avoir des restrictions sur le mouvement des articles à l'intérieur et à l'extérieur de l'espace. Les cahiers papier et le matériel informatique peuvent être contaminés dans le laboratoire. Un ELN peut aider à atténuer ces problèmes en autorisant l'accès aux ordinateurs portables via des appareils qui restent à l'intérieur de l'environnement protégé. Cependant, cela nécessite une planification préalable des exigences matérielles.

Lorsque l'on considère n'importe quel système ELN, les avantages de permettre de consacrer plus de temps à la recherche et d'améliorer le transfert de connaissances et la reproductibilité expérimentale sont mis en balance avec les coûts financiers. Il est important de savoir qui supportera ces coûts. Par exemple, compter sur les utilisateurs pour qu'ils fournissent leur propre appareil informatique pour accéder à un ELN transfère effectivement ce coût sur le chercheur. Cela peut amener les gens à rejeter l'adoption de l'ELN et désavantager les chercheurs sans appareils existants, comme le montrent les études sur les technologies d'apprentissage en ligne de premier cycle^{22,23}. Si un laboratoire dispose déjà d'un nombre suffisant de postes de travail connectés au réseau, alors ce coût peut être nul ; sinon, il peut constituer une part importante du coût global de mise en œuvre (un facteur qui n'est inclus dans aucun prix de fournisseur de logiciels).

Un ELN est généralement une combinaison d'une interface utilisateur, d'une base de données centralisée et d'un magasin de fichiers. La figure 3 illustre une vue simplifiée d'une architecture ELN couramment adoptée (bien que de nombreuses approches différentes soient possibles)^{11,24–27}. Les entrées de bloc-notes peuvent être stockées dans une base de données relationnelle avec des fichiers joints dans un magasin de fichiers, le logiciel ELN facilitant l'accès utilisateur et définissant comment les entrées de bloc-notes peuvent être écrites et lues. Le logiciel peut être accessible via un navigateur Web ou, dans certains cas, via une application personnalisée écrite pour une plate-forme spécifique (par exemple, des applications de système d'exploitation de bureau ou mobiles). Les ELN basés sur des applications peuvent entraîner des problèmes de compatibilité dans les environnements de recherche universitaire qui comportent généralement une gamme variée de systèmes d'exploitation²⁸. Selon la mise en œuvre, les composants ELN distincts peuvent être des serveurs distincts²⁷, dans des emplacements physiques différents. Ce changement conceptuel majeur par rapport aux cahiers papier apporte à la fois des opportunités et des défis. Bien que la technologie sous-jacente soit idéalement invisible pour l'utilisateur final, le choix de l'ELN peut influencer la disponibilité de différentes fonctionnalités. Par exemple, la plupart des ELN sont mal adaptés au stockage de gros volumes de données brutes (que ce soit du point de vue des performances ou du coût). Un serveur ELN hébergé localement peut rapidement manquer d'espace de stockage physique s'il n'est pas correctement provisionné. Un serveur hébergé dans le cloud peut rapidement entraîner des coûts d'hébergement importants à mesure que les besoins en stockage et en bande passante augmentent. Même avec ces restrictions, la quantité d'informations pouvant être stockées est supérieure à ce qui est possible avec les cahiers papier, qui ne peuvent stocker que de petites quantités de données.

Les données sensibles (par exemple, les informations sur les patients ou commercialement sensibles) peuvent relever de l'institution locale ou des réglementations légales en matière de protection des données (par exemple, GDPR 2016/67929, qui dicte le traitement et la sauvegarde des données personnelles au sein de l'Union européenne). Cela peut limiter la physique

localisation et transfert de données, à l'exclusion de l'utilisation d'ELN hors site qui utilisent une infrastructure internationale basée sur le cloud³⁰.

Les ELN hébergés localement peuvent fournir un meilleur contrôle sur la sécurité des données en limitant l'accès aux ordinateurs portables aux utilisateurs à l'intérieur d'un réseau institutionnel (c'est-à-dire que les dispositifs d'accès doivent être physiquement sur place ou connectés au réseau interne à distance, par exemple, en utilisant un réseau privé virtuel).

L'intégrité des données peut être améliorée en utilisant le contrôle de version et l'horodatage. La possibilité de créer des entrées de bloc-notes immuables qui ne peuvent pas être supprimées ou modifiées après la création est essentielle pour l'intégrité académique et juridique. Les cahiers papier mettent généralement cela en œuvre par le biais de règles et de procédures (par exemple, en interdisant la suppression de pages et les entrées de signature et de contre-signature). Tous les ELN ne traitent pas ce problème, ce qui exclut à nouveau l'utilisation de certains produits. Par exemple, les logiciels généraux de prise de notes, tels que Microsoft OneNote et Evernote, n'incluent généralement pas de fonctionnalités permettant de signer numériquement ou d'horodater les entrées, des solutions de contournement telles que la signature des fichiers exportés étant requises^{28,31}. Le niveau de vérification requis dépend à la fois des exigences réglementaires et des normes de cahiers de laboratoire acceptées localement. Par exemple, il peut être suffisant de s'appuyer sur des fonctionnalités logicielles définies par l'administrateur, telles que la capacité d'un superviseur à verrouiller les entrées du bloc-notes pour empêcher qu'elles ne soient modifiées ou pour désactiver la suppression d'entrées. De nombreux packages ELN incluent un mécanisme de suivi des versions, qui enregistre la manière dont un document est édité au fil du temps, ce qui peut dissuader de modifier les entrées après coup. Il s'agit d'une différence conceptuelle entre les cahiers papier et électroniques. Dans un cahier papier, les entrées sont instantanément enregistrées (en supposant qu'une certaine forme d'encre indélébile soit utilisée). Dans un bloc-notes électronique, il existe généralement une durée limitée pendant laquelle le texte saisi ou un autre contenu reste malléable avant d'être enregistré sur le serveur. Cette période peut aller de quelques secondes à quelques minutes, le serveur créant des versions intermédiaires de l'entrée, ou une période plus longue jusqu'à ce que l'entrée soit verrouillée ou finalisée par certains moyens techniques.

Une gestion excessive des versions peut augmenter considérablement les besoins en stockage et les coûts de fonctionnement globaux; par conséquent, la politique locale est nécessaire pour déterminer un compromis approprié pour la période de temps entre la réalisation d'une entrée et une certaine forme de versionnement et finalement de finalisation.

Si la vérification de la provenance des entrées de bloc-notes est essentielle, l'ELN doit intégrer des technologies conformes aux normes reconnues pour l'horodatage de confiance, telles que RFC 3161³² ou ANSI X9.95-2016³³.

L'horodatage de confiance utilise une organisation tierce audité (généralement un fournisseur commercial) pour signer numériquement et horodater un fichier. Un algorithme de hachage cryptographique est appliqué à un fichier numérique (par exemple, un fichier au format de document portable qui correspond à une entrée de bloc-notes).

L'algorithme génère un fichier contenant un hachage (une représentation mathématiquement unique des données d'origine). Ce hachage ne peut pas facilement être rétro-conçu pour recréer les données d'origine et peut donc être transmis en toute sécurité à l'autorité d'horodatage de confiance via Internet. L'autorité signe et horodate numériquement le hachage, générant ainsi un troisième fichier (un jeton d'horodatage). Ce jeton est renvoyé au logiciel ELN et stocké à côté du portable d'origine

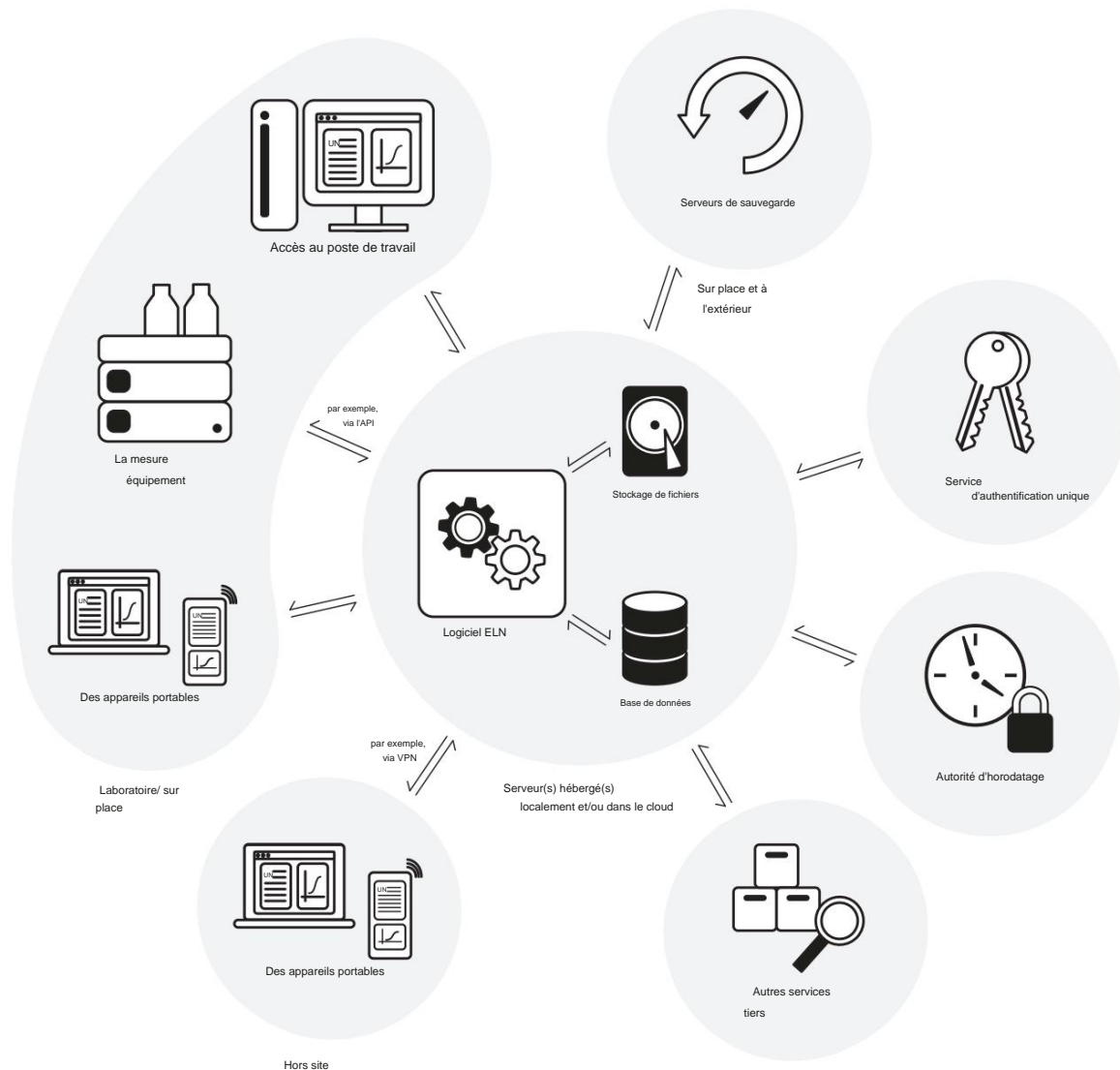


Fig. 3 | Illustration simplifiée d'une architecture ELN couramment utilisée. Les utilisateurs interagissent avec le logiciel ELN via des postes de travail et/ou des appareils mobiles, avec un accès hors site possible via des technologies telles que les réseaux privés virtuels (VPN) ou en exposant l'ELN à Internet au sens large (ce dernier introduisant des problèmes de sécurité supplémentaires). Le matériel expérimental peut interagir directement avec le serveur ELN (par exemple, via une interface de programmation d'application (API)). Le logiciel, la base de données et le stockage de fichiers ELN peuvent coexister sur le même serveur physique ou fonctionner sur un matériel distinct. Le serveur peut être exécuté en tant qu'installation locale dans une institution ou dans le cadre d'un produit hébergé sur le cloud du fournisseur de logiciels. Les exigences supplémentaires incluent les serveurs de sauvegarde, qui doivent être géographiquement séparés de l'ELN (et doivent être constitués de plusieurs couches de redondance). Les services tiers incluent l'accès à des serveurs d'authentification unique (pour faciliter une meilleure expérience utilisateur), des autorités d'horodatage tierces de confiance (pour la signature numérique indépendante des entrées de bloc-notes) ou d'autres systèmes de laboratoire (tels que des systèmes de gestion des stocks de laboratoire).

fichier de format de document. Toute modification du fichier d'origine invalidera le jeton, car le recalcul du hachage du fichier modifié entraînera une valeur différente de la valeur con

tenus dans le jeton signé numériquement. Le processus permet de vérifier le contenu d'un fichier numérique à un moment donné.

Bien que techniquement complexe, ce processus est généralement réalisé de manière invisible pour l'utilisateur.

Bien que l'horodatage de confiance intègre le concept de signatures numériques, il ajoute l'avantage supplémentaire de vérifier non seulement l'identité du signataire, mais également l'heure à laquelle une entrée a été horodatée. Concrètement, une politique locale est nécessaire pour s'assurer que les utilisateurs horodatent régulièrement leurs entrées de carnet de notes, car la date et l'heure de l'horodatage sont

enregistré, pas l'instant où une expérience a été menée.

Les procédures d'archivage des données doivent garantir que le fichier horodaté et le jeton d'horodatage sont correctement conservés.

Les ELN open source et commerciaux ont des coûts et des avantages différents. Dans notre enquête, les ELN commerciaux ont été observés comme étant beaucoup plus répandus que les ELN open source (147 contre 24 produits identifiés). Le tableau 2 compare les approches commerciales et open source. Bien que le SaaS soit un modèle de licence largement adopté (par exemple, les abonnements institutionnels à Microsoft Office 365 ou Google Workspace), les ELN SaaS peuvent être d'un coût prohibitif

Tableau 2 | Comparaison des fonctionnalités ELN pour les solutions open source et commerciales (notez qu'il s'agit d'une comparaison généralisée - tous les produits ELN n'offrent pas les mêmes niveaux de fonctionnalité)

Caractéristique	Open source	Commercial
Facilité de déploiement	Nécessite que le client ait des connaissances et/ou du matériel pour mettre en œuvre	Disponible "prêt à l'emploi"
Assistance disponible	Communauté de contributeurs en ligne/peut ou non avoir un support limité pour les développeurs	Dépend de l'entreprise, peut proposer des sessions de formation, des webinaires, etc. Soit automatique par le fournisseur (par exemple, des sauvegardes
Sauvegarde de données	Auto-organisé - flexible et contrôle total; nécessite une surveillance et une vérification continues	automatisées basées sur le cloud) ou auto-organisé Non, ou faible, coût initial du logiciel Aucun coût du matériel du serveur (si le cloud est hébergé par le fournisseur)
Coûts initiaux	Aucun coût de logiciel Frais de matériel serveur (et/ou location de serveur cloud privé) Mise à disposition de dispositifs d'accès aux utilisateurs Coût en temps pour la formation des utilisateurs et la migration Coût en temps pour mettre en place et intégrer les installations institutionnelles existantes	Mise à disposition de dispositifs d'accès aux utilisateurs Coût en temps pour la formation des utilisateurs et la migration Coût en temps pour mettre en place et intégrer les installations institutionnelles existantes
Frais courants	Aucun coût d'abonnement en cours Aucun coût supplémentaire par utilisateur supplémentaire (en supposant la capacité disponible du serveur) Coût de maintenance périodique du matériel (par exemple, remplacement des serveurs ou augmentation de la capacité de stockage) Coût en temps pour la maintenance régulière du système Si vous utilisez un serveur cloud privé, coût de location continu Coût en temps pour la formation de chaque nouvel utilisateur supplémentaire Coût en temps pour la formation et le maintien du personnel de support pour l'infrastructure ELN	Frais d'abonnement en cours par mois/année et/ou par utilisateur En règle générale, chaque utilisateur supplémentaire augmente les coûts L'augmentation des données utilisateur peut entraîner des coûts d'abonnement supplémentaires Pas de frais de matériel/maintenance en cours comme inclus dans les frais - - Coût en temps pour la formation de chaque nouvel utilisateur supplémentaire -
Développement continu	S'appuyer sur la communauté open source pour continuer à maintenir le logiciel (par exemple, en publiant des correctifs pour les vulnérabilités de sécurité ou le développement de nouvelles fonctionnalités) Les utilisateurs peuvent directement suggérer et implémenter de nouvelles fonctionnalités	Mises à jour logicielles (sécurité et nouvelles fonctionnalités) normalement fournies dans le cadre de l'abonnement Développement de nouvelles fonctionnalités en fonction des priorités de l'entreprise
Sécurité logicielle	La base de code publique permet d'interroger de nombreuses parties, identifiant rapidement les problèmes de sécurité	La base de code privée limite la portée des tiers pour identifier les problèmes de sécurité; dépendant de l'entreprise pour mettre en œuvre rapidement les correctifs
Stratégie externe	Accès gratuit à toutes les entrées et tous les fichiers du carnet Fonction d'exportation intégrée ou création de méthodes personnalisées pour extraire les données	En cas de défaillance de l'entreprise, risque que les données soient piégées/inaccessibles sur les serveurs de l'entreprise Dépend du logiciel pour fournir des solutions d'exportation appropriées - certains peuvent restreindre les formats de fichiers ou la préservation de certaines fonctionnalités ou éléments, entraînant un risque de verrouillage des données
Stockage de données	Contrôle complet de l'emplacement et de l'accessibilité des données stockées	Dépendant du produit; certains peuvent offrir la conformité à des réglementations spécifiques

pour les groupes de recherche individuels en raison de la tarification par utilisateur, des coûts de stockage de fichiers en constante augmentation et d'un abonnement indéfini requis pour maintenir l'accès. En 2017, Kanza et al. ont rapporté que, dans une enquête auprès de 169 utilisateurs participant à une étude pilote ELN, les budgets financiers limités et le temps nécessaire pour mettre en œuvre un ELN étaient des préoccupations majeures¹⁴. De même, bien que les ELN open source puissent avoir des coûts financiers initiaux et continus relativement faibles, leur fonctionnement et leur maintenance nécessitent du temps et peuvent nécessiter l'achat de matériel serveur. Les exigences relativement modestes pour de nombreux ELN open source permettent de réutiliser l'ancien matériel informatique pour qu'il agisse comme un serveur ELN, ce qui contribue à réduire ce coût. Les coûts peuvent évoluer avec la taille du déploiement ; par exemple, les licences commerciales à l'échelle de site peuvent

être négociés à des tarifs préférentiels plutôt qu'au prix par utilisateur disponible pour les groupes de recherche individuels³⁴. La mise en œuvre d'un ELN open source à l'échelle institutionnelle peut tirer parti de l'infrastructure de serveur préexistante et du soutien des départements des technologies de l'information et de la communication. Certains fournisseurs commerciaux proposent des tarifs gratuits ou réduits pour les utilisateurs universitaires¹⁴.

Les ELN open source ont l'avantage de permettre non seulement l'archivage des données, mais également le logiciel sous-jacent lui-même. Des technologies telles que la virtualisation et la conteneurisation présentent des voies réalisables pour préserver l'environnement d'exploitation de l'ELN pour un accès futur, au-delà de l'obsolescence logicielle et matérielle. Par exemple, si le matériel que la base de code ait été

Un logiciel ELN open source correctement archivé peut être ressuscité en tant que machine virtuelle dans un système d'exploitation moderne, pour permettre l'accès et l'exportation de fichiers historiques. Cela peut aider à faciliter l'interopérabilité future des fichiers en fournissant un accès facile au logiciel d'origine. La base de code ouverte signifie également que les formats et les normes de données sont pleinement exposés, facilitant le développement futur d'outils pour analyser ou extraire des données. Lorsque vous évaluez un ELN hébergé par un tiers, réfléchissez à ce qu'il adviendra des entrées de bloc-notes lorsque le produit sera arrêté. Certains projets open source (tels que l'Open Science Framework)³⁵ peuvent inclure des plans d'urgence et des fonds pour assurer la préservation continue des données de recherche. Si un ELN fournit des fonctions d'exportation de données, celles-ci doivent être testées pour confirmer qu'elles fournissent le niveau de fonctionnalité requis. Pour les ELN commerciaux, il convient de s'assurer que les contrats des fournisseurs incluent les conditions nécessaires pour faciliter l'exportation des données.

Les ELN ne sont pas une solution à une mauvaise gestion des données. Les ELN ne résolvent pas le défi du stockage systématique des données brutes et ne sont qu'une partie d'une stratégie holistique de gestion des données. La mise en œuvre réussie d'un ELN nécessite une réflexion sur les pratiques actuelles pour déterminer comment un laboratoire traite et stocke les informations^{36,37}. Comme pour les carnets papier, une politique, une formation et une application sont nécessaires pour garantir que les utilisateurs enregistrent des entrées de carnet opportunes, utiles et complètes. Les nouveaux utilisateurs ont besoin d'une formation pour comprendre le but et les attentes de l'utilisation des cahiers de laboratoire au sein d'une organisation donnée. Une politique définissant comment, quand et par qui les ordinateurs portables sont surveillés définit les attentes. Une procédure d'offboarding doit être mise en œuvre pour garantir que les données des utilisateurs sortants sont correctement archivées.

Les procédures pour relier les données brutes, les entrées des cahiers de laboratoire, les données analysées et les données de publication doivent être clairement définies et appliquées. Les données doivent être stockées sur des groupes centralisés ou des serveurs spécifiques à la mesure ou des référentiels accessibles au public, avec des sauvegardes redondantes. Des identifiants persistants tels que les identifiants d'objets numériques peuvent être utilisés pour aider à relier les ressources, les entrées ELN agissant comme des documents centralisés qui se connectent à plusieurs fichiers et données³⁶. Certains ELN génèrent déjà des identifiants uniques pour chaque entrée de carnet²⁴. Pour aider à vérifier l'intégrité des données stockées en externe, les ELN peuvent être utilisés pour enregistrer les hachages cryptographiques des fichiers de données.

Certains ELN comportent des interfaces de programmation d'application qui permettent à d'autres logiciels de lire et d'écrire directement des entrées de bloc-notes²⁴. Par exemple, un utilisateur effectuant une expérience contrôlée par ordinateur pourrait permettre à cet équipement d'enregistrer directement les détails de l'expérience ou du processus, ce qui pourrait rationaliser les mesures de routine. Laboratoires avec un travail bien défini

les flux, tels que la microscopie électronique³⁸ ou l'analyse génétique²⁷, peuvent bénéficier d'ELN spécialisés qui intègrent des entrées de bloc-notes dans le flux de travail de saisie de données ou qui ont été conçus avec l'intégration d'équipement comme objectif principal.

Les ELN performants reconnaissent les besoins de leurs utilisateurs. Dans un environnement de recherche universitaire, le temps et l'argent sont précieux. Idéalement, s'ils sont adoptés, les ELN pour le laboratoire de recherche universitaire devraient être mis en œuvre au niveau institutionnel, en exploitant l'infrastructure TIC existante, et

avec un engagement suffisant pour un soutien continu afin d'encourager l'adoption³⁹. Bien qu'il existe une poignée d'enquêtes et d'études universitaires sur la mise en œuvre de l'ELN^{14,39,40}, le niveau de réussite rapporté varie, ce qui suggère qu'un engagement attentif des utilisateurs, le choix des produits et une assistance continue sont essentiels à un déploiement réussi.

Surtout, la mise en œuvre d'un ELN ne devrait pas introduire de charge nette pour l'utilisateur. Si les utilisateurs ne peuvent pas ou ne veulent pas utiliser les fonctionnalités permettant de gagner du temps, l'adoption d'un ELN peut finalement être un obstacle. Par exemple, pour un chercheur qui dessine régulièrement des structures chimiques ou écrit des équations dans son cahier, la plupart des ELN non spécialisés seront moins pratiques que le papier³⁹, et l'introduction d'un ELN peut être indésirable¹⁶. Le manque de support pour des systèmes tels que LaTeX peut être un obstacle à l'adoption dans des disciplines spécifiques⁴¹. Reconnaître les besoins d'un éventail souvent diversifié de chercheurs est essentiel avant de prendre des décisions sur le choix d'un logiciel et d'une approche.

Des essais internes d'un petit nombre de produits, des compromis convenus conjointement ou l'intégration d'intégrations avec des solutions spécialisées, telles que des ELN capables de gérer des structures chimiques⁴², peuvent être nécessaires. De simples facteurs d'infrastructure, tels qu'un Wi-Fi peu fiable^{7,14,23}, un espace de paillasse insuffisant pour placer un ordinateur portable¹⁴ ou le manque d'accès à du matériel et des logiciels à jour dans le laboratoire, peuvent également avoir un effet négatif sur les utilisateurs³⁹. La culture répandue des cahiers de laboratoire universitaires privés et personnels devrait être reconnue, une étude de l'ELN notant que les chercheurs se sentaient gênés lorsqu'ils devaient partager leur cahier avec des collègues⁴³.

La formation des utilisateurs devrait être reconnue comme une charge de temps supplémentaire, les chercheurs étant déjà censés maîtriser une large gamme de logiciels⁴⁴. De même, de nombreux laboratoires utilisent déjà des systèmes de gestion des informations de laboratoire pour la gestion des stocks, la réservation des équipements et l'approvisionnement. L'introduction d'un autre système autonome peut aller à l'encontre des avantages temporels de la numérisation et de l'intégration⁴⁵. La mise en œuvre d'un ELN est l'occasion de réfléchir et de consolider les pratiques existantes, de nombreux ELN incorporant des composants de type système de gestion des informations de laboratoire. De même, s'il est prévu que l'ELN s'intègre à des éléments matériels spécifiques, on ne peut pas supposer que le logiciel fonctionnera de manière transparente; ainsi, l'intégration du système doit être testée avant le déploiement, et les ressources appropriées doivent être allouées pour maintenir l'intégration.

À ce jour, aucune étude itudinale pluriannuelle n'a été publiée sur la mise en œuvre de l'ELN dans les environnements universitaires. Par conséquent, il est important de prendre en compte les problèmes des utilisateurs qui peuvent apparaître sur des échelles de temps plus longues. Par exemple, déterminer comment les futurs chercheurs seront informés des dossiers existants si l'auteur original (ou le superviseur de l'auteur) a quitté l'établissement. Les personnes qui faciliteront les demandes d'accès aux dossiers existants des nouveaux utilisateurs doivent être identifiées. Investir dans la formation des utilisateurs dès le départ devrait permettre à des tiers de localiser efficacement ces enregistrements à l'avenir (c'est-à-dire qu'une notation et des métadonnées suffisantes sont saisies au point d'entrée). Les établissements universitaires peuvent tirer parti de l'expertise interne existante des bibliothécaires universitaires, des gestionnaires de données de recherche,

Encadré 1 | Étude de cas de mise en œuvre d'un ELN open-source Depuis 2018,

les auteurs utilisent eLabFTW comme ELN²⁴. Les critères d'identification d'un ELN approprié se sont concentrés sur l'accueil de scientifiques de plusieurs disciplines (par exemple, les biologistes cellulaires, les chimistes synthétiques et les ingénieurs) et la gamme correspondante d'environnements de laboratoire.

Une grande partie de la recherche est appliquée, de sorte qu'une intégration fiable de l'horodatage a été considérée comme essentielle pour la protection de la propriété intellectuelle.

Avec un grand nombre d'utilisateurs actifs à tout moment, le système devait évoluer de manière abordable, avec un accès persistant et prêt à long terme aux données utilisateur archivées.

Le grand nombre d'utilisateurs signifiait que les coûts d'abonnement par utilisateur prévus pour les produits commerciaux étaient considérables. Ce coût potentiel combiné à nos autres critères nous a conduit à sélectionner le logiciel open-source eLabFTW après un essai réussi de 6 mois avant un déploiement plus large. Le serveur s'exécute localement derrière un pare-feu institutionnel sur un matériel modeste réutilisé. La période d'essai a permis de développer une politique ELN locale. Aucun utilisateur n'est obligé d'utiliser l'ELN, les membres existants du laboratoire peuvent passer au système et les nouveaux membres ont le choix entre des cahiers électroniques ou papier. Cependant, les utilisateurs ne peuvent pas utiliser les deux types simultanément, pour éviter la fragmentation des données. Tous les nouveaux utilisateurs passent par un processus d'intégration et de formation. La conformité à la politique est vérifiée périodiquement pour s'assurer que les utilisateurs horodatent leurs entrées (eLabFTW fournit des statistiques au niveau du serveur et de l'utilisateur pour faciliter cela).

Les coûts financiers comprenaient l'achat d'une alimentation sans interruption (~ 300 £), un périphérique de stockage en réseau (~ 190 £); un composant d'une stratégie de sauvegarde multisite) et un abonnement à l'autorité d'horodatage de confiance tierce (~ 70 £ / an). Les coûts indirects comprenaient le temps d'un chercheur pour agir en tant qu'administrateur système pour installer et configurer le serveur (en tirant parti de l'expertise existante au sein du groupe), le soutien du personnel TIC de l'établissement pour soutenir la configuration et l'intégration avec les services institutionnels existants et le coût en temps de organiser une initiation et une formation régulières des utilisateurs. Les frais courants comprennent l'administration du serveur (~3 h/mois, effectuée en interne par des chercheurs seniors au sein du groupe de recherche) et la formation (~3 h/mois).

Après environ 2,5 ans, environ 60% des membres actuels du laboratoire ont des comptes ELN actifs. Pour l'anecdote, l'intégration de nouveaux étudiants et membres du personnel à leur arrivée dans le groupe semble minimiser les inconvénients liés à l'adoption d'un ELN, car ils développent leurs nouveaux flux de travail en même temps qu'ils apprennent à utiliser le système, ainsi qu'à s'adapter aux normes et protocoles plus larges du groupe autour de la gestion et de la communication des données de recherche.

Les défis ont inclus des bogues logiciels occasionnels, nécessitant une solution de contournement jusqu'à ce qu'une mise à jour soit disponible. Une poignée de problèmes liés au réseau et à l'alimentation ont entraîné un temps d'arrêt total d'environ 3 jours sur une période de 3 ans. La formation continue des utilisateurs comprend des rappels sur l'importance des entrées d'horodatage. La nature générique des entrées de bloc-notes a présenté certains défis aux informaticiens, où les blocs-notes de calcul sont limités aux pièces jointes au sein de l'ELN, une solution peu élégante pour ceux qui ont l'habitude de travailler avec des systèmes de contrôle de version tels que Git.

Comprendre comment les nouveaux utilisateurs utilisent l'ELN est un défi permanent. Nous avons constaté que l'utilisation d'un canal de communication dédié dans Microsoft Teams a facilité ce processus. À long terme, l'ELN dépend d'avoir des chercheurs suffisamment qualifiés capables d'administrer le système (l'un des coûts d'une solution open source).

Les avantages incluent la possibilité de partager facilement les entrées des cahiers de laboratoire entre les utilisateurs, par exemple, le partage de protocole au sein d'un même projet et la fourniture aux nouveaux étudiants et chercheurs d'un accès direct au travail des anciens membres du groupe. Cela a inclus pendant la pandémie de COVID-19, où les utilisateurs peuvent accéder à l'ELN depuis leur domicile. Les étudiants peuvent partager des entrées de cahier directement et à distance avec des chercheurs seniors, ce qui signifie qu'ils peuvent recevoir efficacement des conseils, encore une fois utiles dans une période où l'accès au laboratoire a été restreint. Il a été observé que depuis l'introduction de l'ELN, la base d'utilisateurs a augmenté spontanément avec la prise de conscience du système.

administrateurs système et archivistes pour aider à élaborer des politiques viables à long terme. Le défi général de la préservation et de l'accès à long terme des données numériques existe dans toute grande organisation (par exemple, la préservation des e-mails), donc tirer parti des bonnes pratiques existantes peut faciliter le déploiement.

L'encadré 1 décrit notre propre expérience de mise en œuvre d'un ELN open source, illustrant certains des points abordés dans l'article. Les choix faits découlaient d'un ensemble spécifique de circonstances propres à notre groupe de recherche; par conséquent, cela ne doit pas être considéré comme une prescription de la meilleure approche pour mettre en œuvre un ELN, mais plutôt comme une réflexion sur ce que nous avons appris.

Les ELN sont l'occasion d'examiner la philosophie plus large de la recherche en laboratoire universitaire. Avec précaution, les ELN peuvent être utilisés pour soutenir la capture d'informations, les rendant plus cohérentes, accessibles et utilisables pour les générations actuelles et futures de scientifiques. La mise en œuvre d'un ELN offre l'occasion d'examiner comment les entrées de cahiers numérisées peuvent aider à relever certains des défis plus larges de la recherche universitaire. Par exemple, certains ELN répondent aux aspects de la science ouverte^{46,47}, leur permettant d'être configurés pour partager des données en dehors des organisations, soutenant des initiatives telles que les principes de données FAIR (une proposition selon laquelle les données scientifiques doivent être trouvables, accessibles, interopérables et réutilisables)⁴⁸. De même, l'intégration des ELN aux référentiels institutionnels peut offrir de nouvelles opportunités pour relever le défi de la gestion des données de recherche, comme les efforts de l'Université d'Édimbourg pour

permettre aux utilisateurs de déposer directement des données dans un référentiel institutionnel via leur interface ELN⁴⁹.

L'adoption d'un ELN soustrait l'utilisateur à la technologie de stockage sous-jacente du bloc-notes, permettant ainsi la mise en œuvre d'un large éventail d'autres approches, différentes de celle illustrée à la Fig. 3. Plutôt que d'utiliser une base de données privée d'entrées de bloc-notes, un ELN pourrait mettre en œuvre un magasin d'enregistrement décentralisé et distribué publiquement, en utilisant des technologies telles que la chaîne de blocs et la mise en réseau peer-to-peer⁵⁰, pour faciliter la responsabilisation ou réduire la dépendance à un seul référentiel pour le stockage de données à long terme. Par exemple, le projet de recherche bloxberg est une blockchain exploitée par un consortium universitaire⁵¹ qui a été intégré de manière indépendante dans l'ELN eLabFTW²⁴.

Les hachages cryptographiques des entrées de bloc-notes peuvent être horodatés et enregistrés sur un registre accessible au public, distribué sur le réseau du consortium, éliminant ainsi le besoin d'une seule autorité d'horodatage tierce de confiance. En effet, la vérification de l'intégrité des entrées des cahiers (ou autres données scientifiques) est répartie entre les membres du consortium.

Étant donné que les ELN fournissent la principale interface avec les données de recherche, il est possible d'examiner comment ils peuvent s'intégrer aux approches informatiques qui visent à tirer automatiquement des informations sur les données. Cela pourrait inclure l'intégration d'un ELN avec des technologies sémantiques informatiques¹⁶, qui permettent de déduire automatiquement le sens du langage humain. Cela permettrait de dériver automatiquement les métadonnées de recherche, ce qui faciliterait les efforts de recherche, ou de créer des informations automatisées en reliant les données pertinentes entre elles⁴⁵. Alternativement, un

L'ELN pourrait être intégré aux ontologies et bases de données existantes définies par la communauté pour des disciplines spécifiques. Dans ce scénario, l'ELN agirait à la fois comme une forme de validation des entrées, garantissant que les données sont saisies conformément aux normes communautaires, et comme un mécanisme facilitant l'accès aux données sous-jacentes pour faciliter les méta-analyses à grande échelle.

En résumé, pour les chercheurs et les institutions qui envisagent de mettre en œuvre un ELN, une compréhension nuancée de la culture de laboratoire est nécessaire pour faciliter un déploiement respectueux et finalement soutenu par l'utilisateur. Les barrières à l'entrée doivent être soigneusement gérées car elles peuvent créer des fractures technologiques au sein de la communauté universitaire, diluant les avantages des ELN. Une mise en œuvre réussie de l'ELN doit être considérée comme un engagement continu pour garantir que les besoins des différents utilisateurs continuent d'être satisfaits. Étant donné que la durée de vie médiane actuelle des progiciels ELN est de 7 ans, il est de la plus haute importance de disposer d'un soutien institutionnel continu suffisant pour maximiser la valeur pour les chercheurs et atténuer les risques, permettant la continuité lorsque des modifications logicielles sont nécessaires. Avec un examen attentif, la mise en œuvre réussie d'un ELN ouvre la voie à un développement et à un transfert de connaissances accrus au sein de la recherche universitaire.

Disponibilité des

données Les données brutes, contenant les noms de produits, les fabricants, les dates estimées de sortie et de disparition et les références Web correspondantes pour étayer ces estimations, ainsi que le livre R Note utilisé pour générer les chiffres et une version interactive de la figure 1, sont accessibles au public. à partir d'un référentiel de données (Zenodo) : <https://doi.org/10.5281/zenodo.501272952>. L'analyse a utilisé divers progiciels R53–57.

Références

- White, K. Publications Output : Tendances américaines et comparaisons internationales <https://ncses.nsf.gov/pubs/nsb20206/> (Fondation nationale des sciences, 2019).
- Waldo, WH & Barnett, EH Un ordinateur électronique comme assistant de recherche. *Ing. ind. Chim.* 50, 1641-1643 (1958).
- Borman, SA Logiciel scientifique. *Anal. Chim.* 57, 983A–994A (1985).
- Gilbert, WA RS/1 : un cahier de laboratoire électronique. *BioScience* 35, 588-590 (1985).
- Schapiro, M., The Open Lab Notebook Consortium & Harding, R. *J. Cahiers de laboratoire ouverts : bons pour la science, bons pour la société, bons pour les scientifiques.* *F1000Rés.* 8, 87 (2019).
- Williamson, AE et al. Découverte de médicaments open source : composés antipaludiques très puissants dérivés des *Tres Cantos Arylpyrroles*. *ACS Cent. Sci.* 2, 687–701 (2016).
- Adams, R. et al. Blocs-notes numériques—outils de productivité pour les chercheurs—matériel événementiel. Zenodo <https://zenodo.org/record/1247390#.YYCSD73MJNO> (2018).
- Downie, A. Cahiers de laboratoire électroniques - pour les utilisateurs potentiels <https://www.gurdon.cam.ac.uk/institute-life/computing/elnguidance> (Institut Gurdon, 2020).
- Douglas, S. Fournisseur ELN https://www.limswiki.org/index.php/ELN_vendor (LIMSWiki, 2021).
- École de médecine de Harvard. Cahiers de laboratoire électroniques <https://data.management.hms.harvard.edu/electronic-lab-notebooks> (2021). Au moment de la rédaction, il s'agit d'une grille de comparaison complète et régulièrement entretenue de plus de 30 produits ELN, présentés d'un point de vue académique.
- Institut Ritt, S. & Paul Scherrer. Démo Linux ELOG <https://elog.psi.ch/eglogs/Linux%20Demo/> (2021).
- Textco BioSoftware. *Gene Inspector* (GI), Electronic Laboratory Notebook, Sequence Analysis Software <http://www.textco.com/gene-inspector.php> (2021).
- Dessy, R. Cahiers de laboratoire électroniques. *Anal. Chim.* 67, 428A–433A (1995).
- Kanza, S. et al. Cahiers de laboratoire électroniques : peuvent-ils remplacer le papier ? *J. Cheminform.* 9, 31 (2017). Une étude complète et équilibrée sur la mise en œuvre des ELN dans un cadre universitaire, explorant les obstacles à l'entrée et à l'adoption.
- Butler, D. Une nouvelle feuille. *Nature* 436, 20-21 (2005).
- Kanza, S., Gibbins, N. & Frey, JG Trop de balises gâchent les métadonnées : enquêter sur la gestion des connaissances de la recherche scientifique avec les technologies du web sémantique. *J. Cheminform.* 11, 23 (2019).
- Fowler, J. et al. Expérience avec le système de carnet virtuel : abstraction en hypertexte. dans *CSCW '94: Actes de la conférence ACM de 1994 sur le travail coopératif assisté par ordinateur* 133–143 (Association for Computing Machinery, 1994). Un rapport sur les expériences d'un système ELN relativement ancien datant de 1994 qui (dans la description technique) met en évidence des leçons clés, telles que le défi d'essayer d'appliquer un système uniforme à des groupes hétérogènes d'universitaires.
- Institut britannique de normalisation. BS EN ISO 15189:2012y: Laboratoires médicaux. Exigences de qualité et de compétence (BSI, 2012).
- Institut britannique de normalisation. BS EN ISO/IEC 17025:2017y: Exigences générales relatives à la compétence des laboratoires d'essais et d'étalonnage (BSI, 2017).
- Food and Drug Administration des États-Unis. Code des règlements fédéraux Titre 21 Partie 11. Code des règlements fédéraux vol. 21 (2021).
- Gorry, GA Un cahier virtuel pour les groupes de travail biomédicaux. *Taureau. Avec. Libr. Assoc.* 76, 256-267 (1988).
- Hansen, JD & Reich, J. Démocratiser l'éducation ? Examiner les modèles d'accès et d'utilisation dans les cours en ligne ouverts à tous. *Sciences* 350, 1245-1248 (2015).
- Bromfield Lee, D. Mise en œuvre et perceptions des étudiants sur Google Docs en tant que cahier de laboratoire électronique en chimie organique. *J. Chem. Éduc.* 95, 1102-1111 (2018).
- CARPI, N., Minges, A. & Piel, M. eLabFTWy: un cahier de laboratoire open source pour les laboratoires de recherche. *J. Logiciel Open Source.* 2, 146 (2017).
- Trémoilhac, P. et al. Chemotion ELN : un cahier de laboratoire électronique Open Source pour les chimistes universitaires. *J. Cheminform.* 9, 54 (2017).
- Shipman, FM, Chaney, RJ & Gorry, GA Hypertexte distribué pour la recherche collaborative : le système de cahier virtuel. dans *HYPertext '89: Actes de la deuxième conférence annuelle de l'ACM sur l'hypertexte* 129–135 (Association for Computing Machinery, 1989).
- Bauch, A. et al. openBISy: un cadre flexible pour la gestion et l'analyse de données complexes dans la recherche en biologie. *BMC Bioinforma.* 12, 468 (2011).
- Guerrero, S. et al. Analyse et mise en place d'un cahier de laboratoire électronique dans un institut de recherche biomédicale. *PLoS One* 11, e0160428 (2016).
- Union européenne. Règlement (UE) 2016/679 du Parlement européen et du Conseil du 27 avril 2016 relatif à la protection des personnes physiques à l'égard du traitement des données à caractère personnel et à la libre circulation de ces données, et abrogeant la directive 95/46/CE (Règlement général sur la protection des données). À l'arrêt. *J.Eur. Union* 59, 2016/679 (2016).
- Collège impérial de Londres. Gestion des données sensibles <http://www.imperial.ac.uk/research-and-innovation/support-for-staff/scholarly-communication/research-data-management/data-storage-and-security/> storage -sensitive-and-personal-data/ (2021).

31. Gotthardt, M. The LabOMator: A Flexible Electronic Lab Notebook (ELN) with Microsoft OneNote <http://lab-o-mator.blogspot.com/2015/06/a-flexible-electronic-lab-notebook-eln.html> (2015).
32. Adams, C., Cain, P., Pinkas, D. & Zuccherato, R. Internet X.509 Public Key Infrastructure Time-Stamp Protocol (TSP) <https://tools.ietf.org/html/rfc3161> (2001).
33. Institut national américain des normes. ANSI X9.95-2016—Gestion et sécurité de l'horodatage de confiance. (Comité de normalisation accrédité X9, 2016).
34. Université d'Oxford. En savoir plus sur les cahiers de laboratoire électroniques <https://help.it.ox.ac.uk/research/eln/moreaboutelns> (2018).
35. Foster, ED & Deardorff, A. Open Science Framework (OSF). *J. Med. Libr. Assoc.* 105, 203–206 (2017).
36. Gerlach, B., Untucht, C. & Stefan, A. Cahiers de laboratoire électroniques et assistants de conception expérimentale. en bonnes pratiques de recherche en pharmacologie non clinique et en biomédecine (eds. Bepalov, A., et al.) 257–275 (Springer, 2020).
37. Brown, C. Cahiers de laboratoire électroniques : Solutions pour la recherche sans papier <https://researchdata.jiscinvolve.org/wp/2017/01/18/elnl/> (Jisc, 2017).
38. Rees, I., Langley, E., Chiu, W. & Ludtke, SJ EMEN2^y: une base de données orientée objet et un cahier de laboratoire électronique. *Microsc. Micro-anal.* 19, 1–10 (2013).
39. Vaas, LAI et al. Cahiers de laboratoire électroniques en partenariat public-privé. *PeerJ Comput. Sci.* 2, e83 (2016).
40. Dirnagl, U. & Przesdzing, I. Un guide de poche sur les cahiers de laboratoire électroniques dans les sciences de la vie universitaires. *F1000Rés.* 5, 2 (2016).
41. Magid, A. Est-ce que ça vaut le coup ? Mise en œuvre d'un logiciel de cahier de notes de laboratoire électronique au sein de la communauté STEM d'une université américaine aux Émirats arabes unis. en 2018 ASEE Annual Conference & Exposition (American Society for Engineering Education, 2018).
42. Kotov, S., Tremouilhac, P., Jung, N. & Bråse, S. Chemotion-ELN partie 2 : adaptation d'un éditeur embarqué Ketcher à des applications de recherche avancées. *J. Cheminform.* 10, 38 (2018).
43. Neylon, C. Open Notebook Science : perspectives d'un débutant. *Nat. Préc.* <https://doi.org/10.1038/npre.2007.1130.1> (2007).
44. Lysakowski, R. L'avantage CENB. *Nat. Biotechnol.* 13, 347–348 (1995).
45. Talbott, T., Peterson, M., Schwidder, J. & Myers, JD Adaptation du cahier de laboratoire électronique à l'ère sémantique. dans Actes du Symposium international 2005 sur les technologies et systèmes collaboratifs, 2005 136–143 (2005).
46. Switters, J. & Osimo, D. Ordinateurs portables de laboratoire électroniques (ELN) en tant que catalyseurs clés de la science ouverte^y: étude de cas Open Science Monitor (Union européenne, 2019).
47. Consortium FOSTER. Qu'est-ce que la science ouverte ? Zenodo https://zenodo.org/record/2629946#.YC-6i2OnxTY_ (2018).
48. Wilkinson, MD et al. Les principes directeurs FAIR pour la gestion et l'intendance des données scientifiques. *Sci. Données* 3, 160018 (2016).
49. Macdonald, S. & Macneil, R. Intégration de services pour améliorer la gestion des données de recherche^y: étude de cas sur le cahier de laboratoire électronique RSpace. *Int. Chiffre J. Curation* 10, 163-172 (2015).
Une étude de cas illustrant comment les ELN peuvent être intégrés directement à un référentiel de données universitaire, permettant aux utilisateurs de déposer des données via l'ELN pour se conformer à une politique RDM.
50. Bartling, S. Blockchain pour la science et la création de connaissances <https://www.blockchainforscience.com/2017/02/23/blockchain-for-open-science-the-living-document/> (Blockchain pour la science, 2017).
51. Kleinfurber, F., Vengadasalam, S. & Lawton, J. bloxberg, L'infrastructure de recherche fiable, Livre blanc 1.1 <https://bloxberg.org/> (2020).
52. Higgins, SG, Nogiwa-Valdez, AA & Stevens, MM
Données de recherche à l'appui des «Considérations pour la mise en œuvre de cahiers de laboratoire électroniques dans un environnement de recherche universitaire». Zenodo <https://zenodo.org/record/5012729#.YYHSer3MJN0> (2021).
53. Équipe de base R. R^y: Un langage et un environnement pour le calcul statistique (R Foundation for Statistical Computing, 2020).
54. Wickham, H. et al. Bienvenue dans le Tidyverse. *J. Open Source Logiciel* 4, 1686 (2019).
55. Müller, K. ici : Un moyen plus simple de trouver vos fichiers <https://CRAN.R-project.org/package=ici> (2020).
56. Sievert, C. Visualisation de données interactive basée sur le Web avec R, plotly et shiny (Chapman et Hall/CRC, 2020).
57. Vaidyanathan, R. et al. htmlwidgets^y: Widgets HTML pour R <https://CRAN.R-project.org/package=htmlwidgets> (2020).
58. Bowman, S., Pfeiffer, N. & Pfeiffer, N. Exemple de projet de démonstration^y: Oxydation de l'hydroxyméthylfurfural sur des catalyseurs métalliques supportés <https://osf.io/xj7a3/> (2019).
59. Rubacha, M., Rattan, AK & Hosselet, SC Un examen des cahiers de laboratoire électroniques disponibles sur le marché aujourd'hui. *J. Assoc. Laboratoire Autom.* 16, 90–98 (2011).

Remerciements SGH reconnaît

le soutien d'un prix Cancer Research UK (C71717/A30035).

SGH, AAN-V. et MMS reconnaissent le soutien d'un Wellcome Trust Senior Investigator Award (098411/Z/12/Z). MMS reconnaît le soutien de la plate-forme britannique de médecine régénérative "Matériaux acellulaires/intelligents - Architecture 3D" (MR/R015651/1). MMS reconnaît le soutien de la Royal Academy of Engineering dans le cadre du programme Chairs in Emerging Technologies (CIET2021/94). Les auteurs remercient les commentaires et les suggestions des examinateurs et de l'équipe éditoriale, qui ont contribué à améliorer la qualité et l'étendue du manuscrit.

Contributions des auteurs SGH

et AAN-V. écrit le manuscrit. MMS a supervisé le travail et édité le manuscrit.

Intérêts concurrents SGH et

AAN-V. sont les administrateurs système du Stevens Group ELN, qui utilise le progiciel open source eLabFTW. SGH a fourni des commentaires via des forums publics au développeur d'eLabFTW.

Informations supplémentaires

Informations supplémentaires La version en ligne contient des informations supplémentaires disponibles sur <https://doi.org/10.1038/s41596-021-00645-8>.

La correspondance et les demandes de matériel doivent être adressées à Molly M. Stevens.

Informations sur l'examen par les pairs Nature Protocols remercie Laurence Brown, Michael Gotthardt, Rachel J. Harding et Samantha Kanza pour leur contribution à l'examen par les pairs de ce travail.

Les informations sur les réimpressions et les autorisations sont disponibles sur www.nature.com/reprints.

Note de l'éditeur Springer Nature reste neutre en ce qui concerne les revendications juridictionnelles dans les cartes publiées et les affiliations institutionnelles.

Reçu^y: 2 mars 2021^y; Accepté^y: 7 octobre 2021^y;
Mise en ligne : 14 janvier 2022