



18^{ème}

ÉCOLE INTER-ORGANISMES

QUALITÉ ET RESPONSABILITÉ SOCIÉTALE

EN RECHERCHE ET EN ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR

du 14 au 16 Septembre 2020

Les cahiers de laboratoire électroniques

Alain RIVET et Henri VALEINS, CNRS Grenoble et Bordeaux/réseau QeR

Les données de la recherche

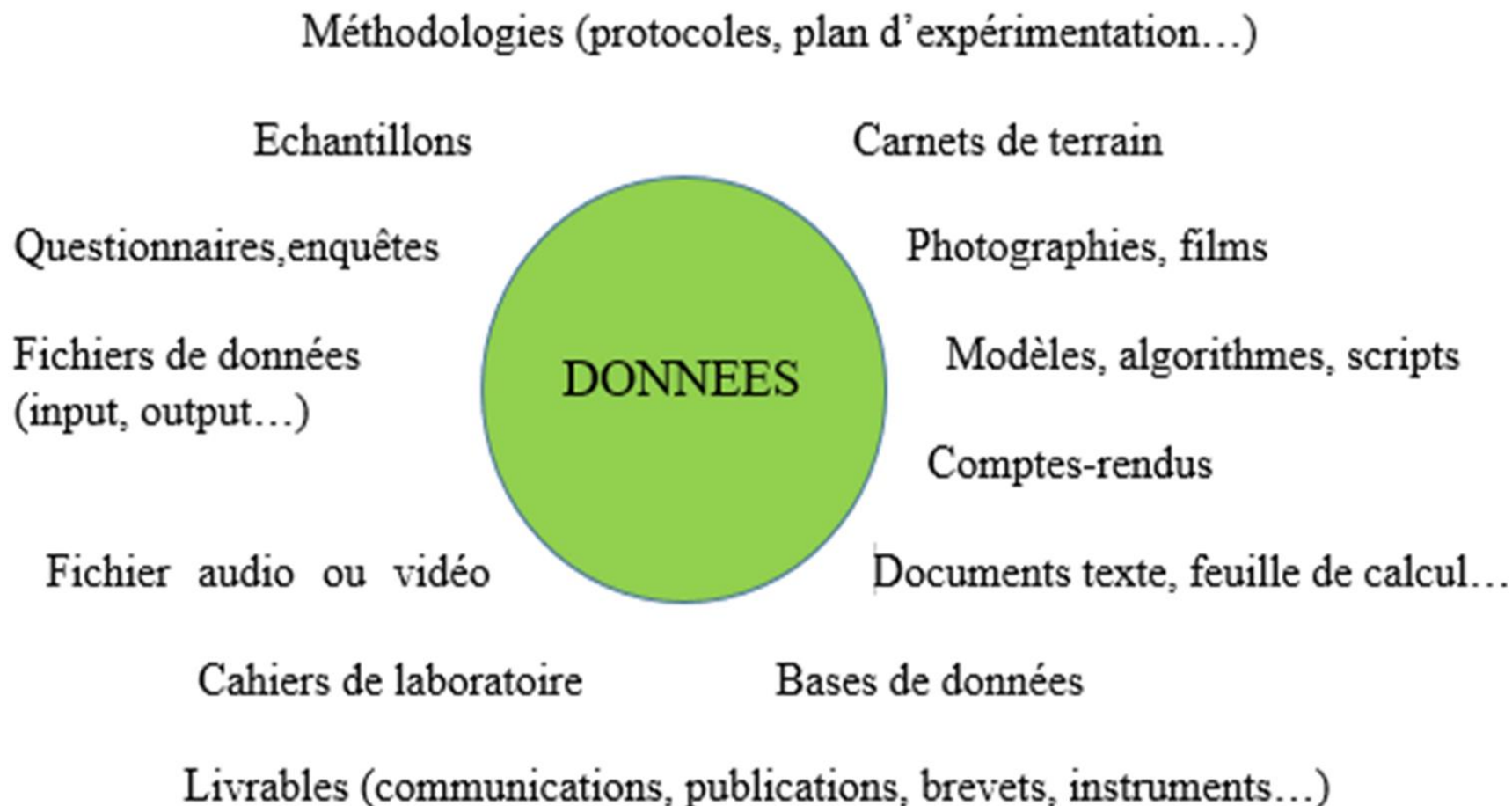
Le cahier de laboratoire papier

Le cahier de laboratoire électronique

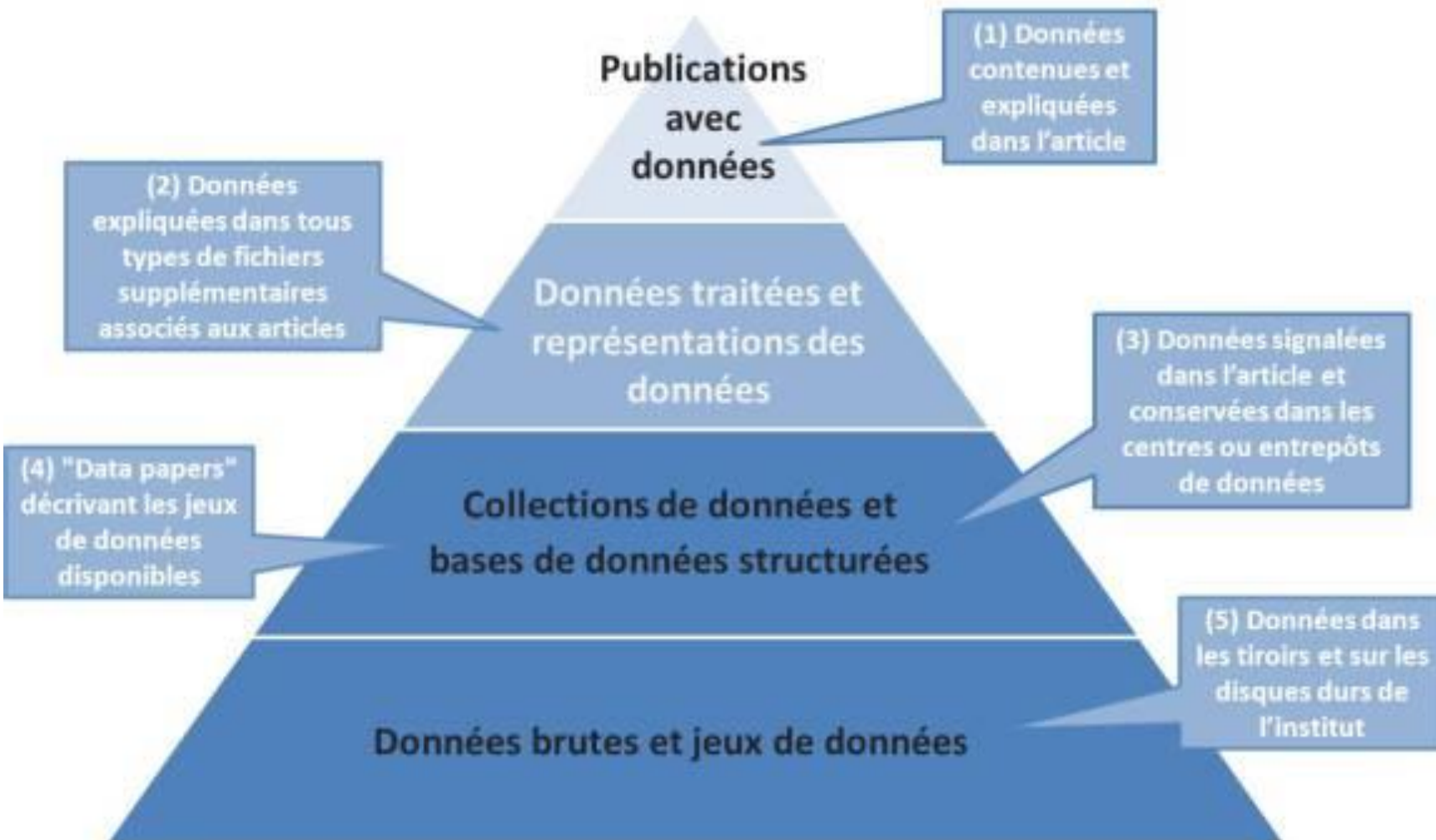
Atelier pratique

Les expérimentations en cours

Les données de la recherche



La pyramide de publications des données



Tutoriel Form@doc (Schéma adapté de Report on integration of data and publications. Opportunities for Data Exchange (Reilly S. et al., 2011))

Charte française de déontologie des métiers de la recherche

Janvier 2015 (ratifications au 13 juin 2019)

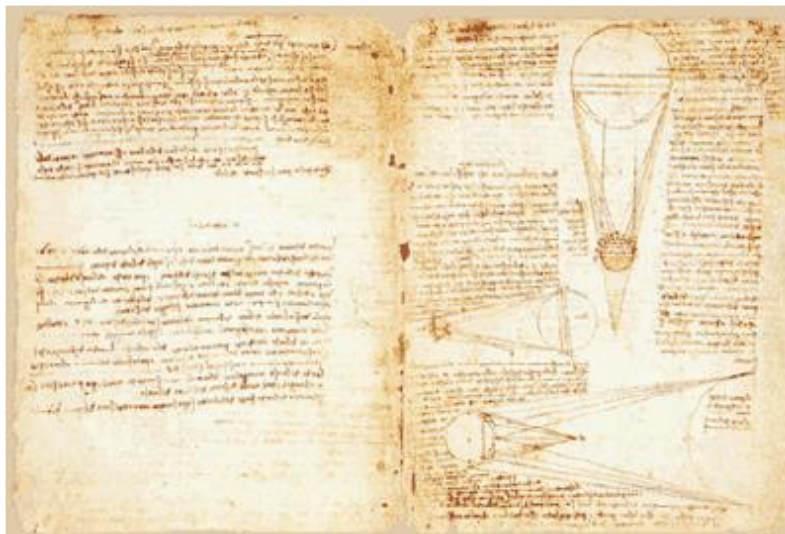


« La description détaillée du protocole de recherche dans le cadre des cahiers de laboratoire, -ou de tout autre support, doit permettre la traçabilité des travaux expérimentaux »

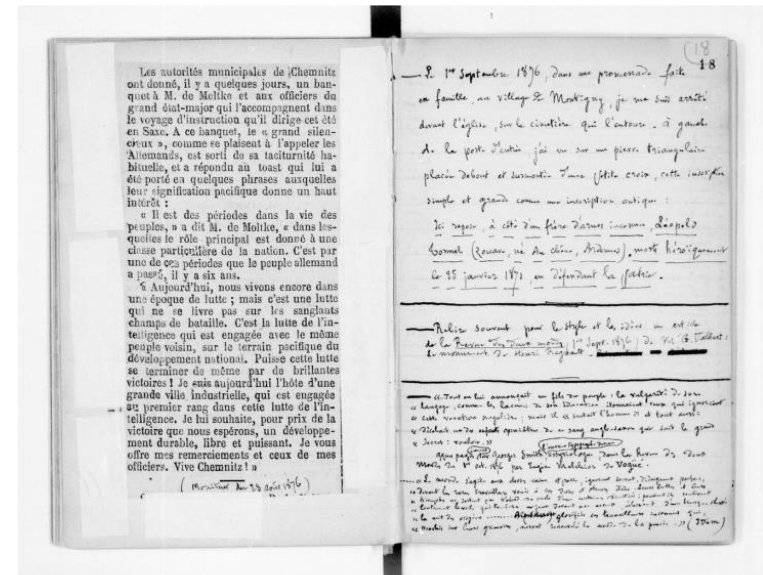
« Tous les résultats bruts (qui appartiennent à l'institution) ainsi que l'analyse des résultats doivent être conservés de façon à permettre leur vérification. »

La cahier de laboratoire papier

Outil essentiel de tout temps pour les inventeurs et chercheurs



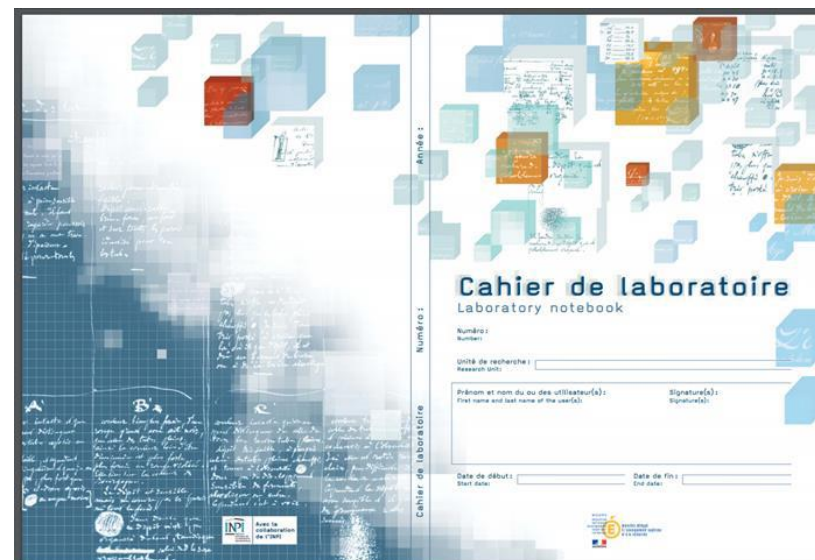
**De Vinci, 1506-1508
1876**



Source gallica.bnf.fr / Bibliothèque nationale de France

Pasteur,

2007 : cahier de laboratoire National à l'initiative du ministère délégué à l'enseignement supérieur et la recherche



- Outil en lien avec les préconisations du MENESR sur la Propriété Intellectuelle (charte)
- Renforcer l'esprit d'appartenance à la recherche publique française
- Donner une image d'excellence et de confiance de la recherche française

Partie interactive avec la salle

- **A quels objectifs répondent les cahiers de laboratoire ?**
- **Quelles sont selon vous les limites liées à leur utilisation?**

Garantir la traçabilité des recherches

- **Valoriser et publier les données dans les meilleurs journaux**
- **Pérenniser et transmettre les savoirs et savoir-faire**
- **Capitaliser et communiquer les connaissances scientifiques**
- **Assurer une continuité des projets**

Assurer la protection des recherches menées

- **Attester de la qualité et de la véracité des données**
- **Servir d'éléments de preuve à l'antériorité et la propriété des données**
- **Justifier la qualité d'inventivité**

Que les cahiers soient remplis

- Pratiques à utiliser avec le moins de contraintes possibles
- Les distribuer et sensibiliser les utilisateurs

Qu'ils soient adaptés à la relecture

- Contenu détaillé
- Bonnes pratiques pour la lisibilité
- Données associées
- Faciliter les recherches

Conservés dans les meilleures conditions

- Préserver l'intégrité
- Les recenser au fil des années

Sa structure libre

Sa relecture

La difficulté pour rechercher, partager et diffuser l'information

La complexité pour insérer de formats numériques

Son suivi et sa conservation

MoS₂ Page 41-Book 1-References 18 November 1922

Spectral photograph # 189 MoS₂ (001) vs. CaCl₂ (100) Rh tube. Natural cleavage sheet.

n	θ	line	λ	d 001	I
1	2°36	Rh	5153 Å	6.020	4
1	2°55	Rh	4121	6.070	1
1	3°3	Rh	445	6.090	5
2	5°45	Rh	1002	6.103	02
2	6°1	Rh	1047	6.130	01
3	7°39	Rh	1321	6.110	2
3	7°35	Rh	1501	6.150	5
3	9°3	Rh	1573	6.120	3
4	10°16	Rh	1772	6.130	3
4	11°31	Rh	1946	6.140	7
4	12°7	Rh	2097	6.130	5
5	12°52	Rh	2227	6.135	1
5	14°9	Rh	2501	6.2	2
5	15°3	Rh	2597	6.2	1
6	15°15	Rh	3132	6.2	01

Average, excluding first three (small θ), and last two (very faint) for d 001 = 6.131 Å, n=1 for first line.

In measuring the film, measured values of θ for CaCl₂ were compared with the computed values (d 100 = 3.028 Å) and a correction curve made.

Note that, as the critical absorption for K series for Mo is .6184, Rh α, ordinarily not very strong, is the strongest line, so Rh α is filtered out strongly.

Intensity
 n=1, I=1 n=2, I=.02 n=3, I=.5 Small
 n=4, I=.7 n=5, I=.2 n=6, I=.01

Transmission spectra # 192 MoS₂ 11 to (001) Rh tube Same specimen.

Horizontal spectrum	λ	θ	λ	d	Average
1 Rh	2.015	1°24	6.42	2.745	2.740 Å
1 Rh	2.305	1°58	6.29	2.710	
1 Rh	2.390	1°56	6.43	2.758	2.746
2 Rh	5.13	2°10	15.95	2.746	

+30°

1 Rh	3.625	1°56	9.58	1.978	Average 1.976 Å
1 Rh	4.145	2°30	11.15	1.971	
1 Rh	4.360	2°34	11.47	1.970	

-30°

1 Rh	3.71	2°32	10.11	1.950	Faint lines
1 Rh	4.125	2°38	11.34	1.92	
1 Rh	4.465	2°44	12.2	1.915	

In the direction along the H or I axes, d = $\frac{a}{2}$
 Halfway between, d = $\frac{a\sqrt{2}}{2}$
 Ratio is 1.732. $\frac{2.740}{1.576} = 1.738$

So the horizontal spots on 191 and 192 are between H and I axes.
 a = 2.215 Å c = 6.131 or some multiples of these values.
 Volume of this unit = 55 Å³.
 MoS₂ MW = 160 p = 4.70 ∴ Volume per molecule 55.1 Å³, so there is one molecule in each unit of this size.

La cahier de laboratoire électronique

Avantages

- **le partage de l'information avec un rattachement des données brutes**
- **une recherche d'informations facilitée**
- **une datation assurée des expériences par l'horodatage**

Inconvénients

- **Pérennisation des formats et supports (sauf .pdf)**
- **Hébergement des données**

Le cahier de laboratoire électronique n'est pas une stricte réplique informatique du cahier papier :

- **la gestion des connaissances**
- **le travail collaboratif**
- **Un accès distant**
- **le management des équipes et des projets**
- **la traçabilité des expériences**

Présentation d'elabFTW

- **Intérêt de l'outil**
- **Fonctionnement du cahier**

Travail à partir d'une publication scientifique

- **Identifier les informations importantes du document qui devaient être intégrées au cahier de laboratoire électronique**
- **Comment structurer les données**

Exemple de restitution

Un cahier de laboratoire électronique gratuit et open source

Conçu par des chercheurs, pour des chercheurs, dans un souci de convivialité

Développé par un ingénieur de l'Institut Curie, Nicolas Carpi.

Site officiel: <https://www.elabftw.net/>

Code: <https://github.com/elabftw/elabftw>

Libre:

- **Open-source avec une licence AGPL. Vous avez la liberté de le modifier, de voir comment il fonctionne et même de redistribuer vos modifications !**

Sécurisé:

- **Un cryptage fort, de bonnes pratiques et une base de code moderne offrent la meilleure sécurité pour vos données. Le seul ELN avec une note A + sur l'Observatoire de Mozilla.**

Horodatage:

- **Horodatage des expériences conforme à la RFC 3161 (pour la propriété intellectuelle).**

Gestion de l'inventaire:

- **Stockez des réactifs, des protocoles, des plasmides, des lignées cellulaires, des souris ou tout ce que vous voulez, vous pouvez tout personnaliser!**

Fonctionnalités pour les utilisateurs

- ✓ **Peut s'adapter à tout type de laboratoire / entreprise (chimie, biologie, physique, astronomie, startup de technologie profonde, etc.)**
- ✓ **Horodater légalement vos expériences**
- ✓ **Exporter au format PDF, ZIP, CSV, JSON**
- ✓ **Dessinez directement avec votre souris**
- ✓ **Utilisez des modèles pour vos expériences**
- ✓ **Ajoutez des étapes à vos protocoles ou expériences**
- ✓ **Téléchargez tout type de fichiers, intégrez des images dans le texte**
- ✓ **Dessinez des molécules avec Chemdoodle**
- ✓ **Hautement personnalisable: vous pouvez modifier les couleurs, la liste des statuts, la liste des types d'éléments, etc.**
- ✓ **TODO list**

Contexte:

Dans un laboratoire d'IRM qui travaille sur le développement de séquence d'acquisition.

Nous sommes organisés en mode projet.

Le projet MP2RAGE_CS_BRUKER a abouti à la publication de l'article suivant:

« Compressed-Sensing MP2RAGE sequence: application to the detection of brain metastases in mice at 7T »

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/mrm.27438>

- **Développement d'une séquence quantification T1 basée sur la méthode MP2RAGE**
- **Accélération avec une méthode compressed-sensing (CS) :**
<https://doi.org/10.1002/mrm.21391>
- **Application sur modèle de métastase sur la souris**

1. Quels sont les paramètres nécessaires pour assurer la traçabilité des mes expériences ?

2. Comment sont classées mes données ?

3. Quelles métadonnées faut-il associer ?

Les expérimentations en cours

Diverses solutions étudiées

- **iLabber d'Accelrys (devenu BIOVIA Notebook Cloud)**
- **LabArchive**
- **LabCollector d'AgileBio**
- **Labguru de Biodata**
- **GoLims de GoInformatic**
- **Slims de Genohm**
- **Hivebench de Shazino (racheté par Elsevier)**
- **eCat de ResearchSpace**
- **eLabFTW (solution open source)**

Expérimentation entre 2015 et 2017 sur 33 labos
Appel offres fin 2017 et déploiement de Labguru
fin 2018

Solution commerciale

Solution adaptée à la biologie, cahier par projet

Bilan après environ 1 année :

- **Sur les 350 structures de l'INSERM, presque la moitié ont lancé la démarche**
- **400 cahiers ouverts et 2300 utilisateurs**

Conduite du changement

- **Réunion de lancement**
- **Implication de la hiérarchie**
- **Formation et le suivi des utilisateurs**
- **Mise en place d'une communauté d'utilisateurs.**



Dispositif d'ACCompagnement sur les DATA en physique et en chimie

- **Accompagnement à la rédaction de plans de gestion de données**
- **Déploiement d'un projet-pilote sur les cahiers de laboratoire électroniques**
- **Mise en place d'animations scientifiques (data lunch)**
- **Actions de formation sur la gestion des données**
- **Réflexion sur la publication de résultats négatifs**

<https://www.dataacc.org/bonnes-pratiques/utiliser-un-cahier-de-laboratoire-numerique/>

2 solutions Opensource

- **Chemotion**
- **ElabFTW**

5 solutions commerciales

- **Mbook (Mestrelab, Espagne)**
- **eNovalys (Novalix, France)**
- **LabCollector (Agilbio, France, USA)**
- **FindMolecule (FindMolecule, Canada)**
- **Research Space (Research Space, UK)**

Le CNRS lance une réflexion sur la mise en place de cahiers de laboratoires électroniques en alternative au cahier de laboratoire national (format papier)

GT national sur les cahiers de laboratoire électroniques à la demande des DGDR et DGDS du CNRS

1ère réunion le 29 mai 2020

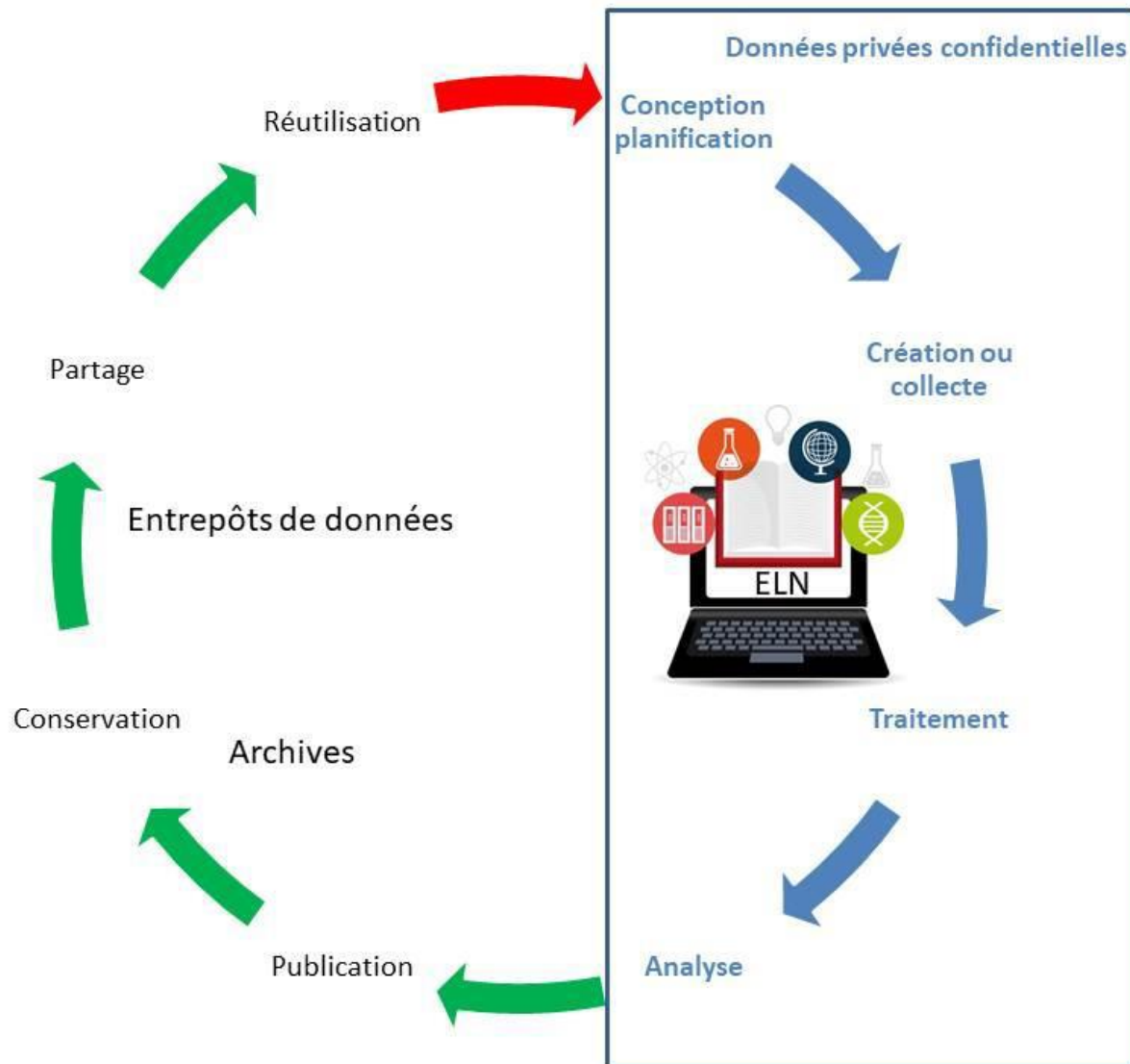
- Faire un état des lieux des outils déjà utilisés**
- Tester les solutions identifiées**
- Répondre aux problématiques de sécurité et d'hébergement des données**
- Proposer une note de recommandations d'outils sécurisés et un cahier des charges**

Réalisation d'une enquête sous Limesurvey (07/2020)

Réponses par institut

INC	232
INP	73
INSB	474
INS2I	20
INSIS	87
INSHS	33
INEE	64
IN2P3	13
INSU	75
INSMI	1
Total	1073

Cycle de vie



Vous avez la parole !