



Tableau comparatif des cahiers de laboratoire électroniques

Datacc.org

Typologie réalisée dans le cadre du projet Datacc'
porté par les BU de Lyon 1 et de Grenoble - **2020**

ELN	Chemotion (open source)	eLabFTW (open source)	Mbook	eNovoIys	LabCollector	FindMolecule	Research Space
Général							
Société	Karlsruhe Institute of Technology (Allemagne)	Porté à l'origine par l'Institut Curie Adressé à Delatlabot aujourd'hui (entreprise FI)	Mestrelab (Espagne)	NovAIX (France)	AgileBio (France, Paris, USA (San Diego))	FindMolecule Inc. (Sherbrooke, Québec)	Research Space (Edinburgh, UK)
Domaine d'application	Chimie	Général	Chimie	Chimie	Général, mais modules adaptés pour la chimie et autres disciplines (possible aussi de créer des modules)	Chimie et biologie	Général - Bio, microbio, bio cellulaires, sciences bio-médicales
Plateforme	Client web (l'ouvre avec un navigateur)	Client web Plusieurs solutions :	Client web	Client web	Client web	Client web	Client web
Hébergement appli / stockage des données	Local	Installation locale et hébergement local sur notre serveur Hébergement et maintenance externes par Delatlabot (principale du SaaS) Données hébergées dans un centre le plus proche de l'utilisateur Pour la France : serveur DWI, à Paris Solution "Hybride" où l'on stocke chez nous et mises à jour faites à distance Également possible d'installer le logiciel sur une machine et donner l'accès à d'autres utilisateurs via un VPN	AWS (Amazon Web Services) en Irlande	Cloud, Europe du Nord Déploiement en local possible, mais plus cher	Cloud, Europe du Nord Déploiement en local possible, mais plus cher	Sur leurs serveurs (appareillement serveurs Français Orange) Possible de choisir un AWS dans un pays de notre choix si demande Séparation "in house" : installation en local, accès via navigateur, et maintenance à distance (plus cher)	Local Cloud AWS/Google/Azure ou sur cloud de notre choix (pour la version entreprise)
Capacité de stockage	Sans limite (car local)	Sans limite (car local) mais possible de restreindre via le sys-admin 50 Go hébergement par le fournisseur	4 Go par utilisateur (cloud)	Sans limite de stockage			Sans limite
Compatibilité	Windows, Mac, Linux, Android, iOS	Windows, Mac, Linux, Android, iOS	Web, donc avec tous systèmes	Web, donc avec tous systèmes	Web, donc avec tous systèmes	Web, donc avec tous systèmes	Web, donc avec tous systèmes
Orientation Université / industrie	Universités	Les deux, mais plutôt Universités	Les deux	Les deux	Les deux	Les deux	Les deux
Fonctionnalités							
Organisation du cahier	Fonctionne avec des collections (représentent les cahiers) Plusieurs projets possibles à l'intérieur d'une collection	Le cahier peut héberger plusieurs équipes d'une même institution Organisation en projets et équipes Utilisation des tags plutôt que des dossiers pour les projets : plus efficace Apparence du cahier personnalisable lors de l'écriture d'une expérience, possible d'autocompléter des mots avec des objets existants dans le cahier	S'organise hiérarchiquement comme suit : - projet - réaction - expérience	Par projet	1) Cahier (nombre infini de cahiers) 2) Expérience (nb infini) 3) Page (nb infini) : et qui on démontre réellement les processus Possible d'ajouter et d'attribuer des tâches Possible de créer beaucoup de champs personnalisés		On peut organiser le cahier par thème ou par projet Possible de créer des pages d'associations et d'y joindre des documents (données, graphiques, protocoles...)
Duplication des expériences	Oui	Utilisation de templates pour les expériences/protocoles Possible de dupliquer les expériences	Oui	Oui	Oui Possibilité de les dupliquer et créer des templates Pas possible de créer un template à partir d'une expérience	Possible	Oui, avec des templates
Gestion des stocks	Possible d'ajouter des réactifs à la main et de dessiner leur structure	Fonctionne avec le principe des "items" (on peut créer ce que l'on souhaite, mais le logiciel ne contrôle pas ce qui est créé) "réactifs, protocoles, plasmides, ligands cellulaires, souris..."	Base de données configurable pour stocker les échantillons Base de données de composés intégrée avec des feuilles de sécurité	Oui : appareil, produit, suivi des échantillons, commandes...	Inventory des équipements, échantillons, composés : possible de les localiser dans le labo et de leur assigner des propriétaires Gestion des risques et de la sécurité pour certains produits Accès les vendeurs de produits et leurs prix (depot Storage Accessories, Sigma Aldrich, VWR, life Technologies) et possible de rajouter des vendeurs Pas des commandes	Oui : suivi des commandes, gestion produits, trace des produits dangereux Possible de rentrer un numéro CAS pour retenir les structures	Non
Scan codes barres	Code barre et QR code générés pour chaque réactif	Non	Non	A venir en 2020	Oui	Oui	Oui
Attachement de fichiers	Possible de gérer des fichiers textes, des données ou des images Possible d'attacher des fichiers supplémentaires	Attachement de n'importe quel type de fichier à une expérience Possible d'intégrer et éditer des images Possible d'ajouter des liens, pour renvoyer vers des données par ex (par contre elles n'aura aucun moyen de savoir si les données ont été modifiées)	Possible de joindre n'importe quel type de fichier	Possibilité de joindre des fichiers (tout format) à FELN	Possible d'attacher des fichiers à FELN Liens vers des données	Attachement de fichiers en version payante Images en version payante	Documents Office, images...
Fonction de recherche	Par numéros CAS, label, libellé, opératoire Par structure et sous-structure également	Basique ChemoDoodle + possible de dessiner directement autre chose que des molécules (mais ne remplace pas un vrai outil comme ChemDraw)	Recherche basique (texte, date, auteur) Par structure et sous-structure	Complète, et recherche par structure et sous-structure	Arborescence, 1 ou mot, sous-chaine Appareillement possible aussi de rechercher via sous-structure	Oui avancée et recherche par structure et sous-structure	Oui, recherche par sous-structure possible
Dessin de molécules	Éditeur de structures dérivé de Sketcher (open source)		Oui, avec Marvin JS	Oui, avec Marvin JS	Diagram designer pour les réactions chimiques et schémas d'expériences	Oui avec ChemDraw, possible de copier-coller des dessins depuis ChemDraw	Marvin JS
Workflow	Non DagNet (IBM) Possible de créer et planifier des réactions (sélectionner les réactifs et rentrer les quantités) Cadre pour écrire une description de ces réactions Base de données de molécules indexée selon FinChikley Différenciation entre les échantillons et les molécules (notamment avec des bases de données différentes) Calculs des quantités réalisés automatiquement SDF (single lang. On)	Non	Oui, workflow adapté à la chimie (projets, réactions, expériences)	Oui, workflow adapté à la chimie (projets, réactions, expériences)	Oui, workflow natif, possible de définir des workflows spécifiques à des expériences		Oui
Autres outils pour la chimie							
Authentification utilisateur		Authentification SAML2	Pas de SSO	Oui	LDAP, CAS SAML2	Pas possible pour le moment, sera ajouté dans les mois à venir	Possibilité de s'identifier par LDAP
Gestion des rôles et des droits	Différents niveaux de permission et d'accès	Administrateur gère les droits des équipes	Group Manager Project Manager Bench Chemist Administrator Guest Niveaux de permission en fonction	Oui (utilisateurs simples, supers utilisateurs, gestion lecture/écriture des projets, gestion des managers de l'entreprise)	Définition des rôles, présence d'un super-administrateur Rôles : utilisateur, admin, cahier, administrateur Permission en fonction des rôles	Possible d'enfermer des accès à certains utilisateurs Possible de donner des accès à certains utilisateurs (notamment PubChem pour les fiches/gestion des stocks)	Oui, on peut créer des groupes et assigner des droits Administrateur pour gérer les groupes (équivalent en version entreprise) "Lab group" et "community group" On peut appartenir à plusieurs groupes
Travail collaboratif	Pour une collaboration interne (partage de collection)	Possible de réserver des salles, des appareils, des machines... Apparaîtra sur le calendrier	Oui	Oui au niveau des projets, dans le labo et avec des laboratoires partenaires. Mais chaque expérience est individuelle et ne peut pas être modifiée par une autre personne que son propriétaire	Possible, très fin Partage des ressources possibles au sein d'un même labo	Oui, possible de partager des projets et expériences (version payante)	Oui, édition des documents/protocoles collaborative Accès aux documents modifiables selon les droits des utilisateurs
Tableaux de bords / analyses		Statistiques d'utilisation du cahier	Oui (analyse de données avec Mbook) Rapports automatisés en PDF	Oui	Tableaux de bords avec les workflows Pas de cahiers en général Architecture modulaire : 13 modules de base, possible d'ajouter des modules (dont ELN et modules de chimie) Possible de désactiver les modules qu'on n'utilise pas (pour plus de visibilité) Outils de gestion de projet (Gantt, PERT)		
Intégrations logiciels / modules supplémentaires	Possible d'associer un compte Zotero	Possible de demander des développements spécifiques via demande GitHub	Marvin JS (dessin de molécules)	Marvin JS (dessin de molécules)	Oui avec PubMed 1er trimestre 2020 : lien sera possible avec PubChem depuis ELN	Utilisent différentes sources pour alimenter leur outil (notamment PubChem pour les fiches/gestion des stocks)	Lien avec les bases de données institutionnelles (voir avec le support + équipement en version entreprise)
Lien avec bases de données externes	Onglet Sci finder lors de la manipulation d'un réactif Bouton pour accéder à PubChem pour chaque réactif dans la base (possible de mettre en ligne les molécules de FELN directement sur PubChem)	N'existe pas actuellement, mais à été demandé sur GitHub (aucun moyen de savoir quand cela sera réalisé cependant)	Travaillement actuellement à l'incorporation de bases de données externes (PubChem, MolEcules...)	Présence de fiches de sécurité pour chaque produit Aucun (car "jamais sûrs que entrepris vont rester longtemp") Techniquement possible, pourrions le rajouter mais pas pour tout de suite	Lien avec PubMed 1er trimestre 2020 : lien sera possible avec PubChem depuis ELN	Utilisent différentes sources pour alimenter leur outil (notamment PubChem pour les fiches/gestion des stocks)	Lien avec les bases de données institutionnelles (voir avec le support + équipement en version entreprise)
Lien avec entrepôts de données	Lien avec Chemotion-repository	Non	Non	Possible à la demande, "il n'y a pas de routines ouvertes aux utilisateurs car il y a toujours un traitement des données à faire au préalable"	Retour de la correspondante LabCollector pas explicite Possible d'importer un csv ou csv-ike Des structures chimiques peuvent être importées via un fichier SDF Pas possible d'importer une expérience selon Intra	Pas cette option pour le moment	Diigo, Datawena, Figshare... Et possibilité d'archiver l'ORCID avec le dépôt des données Possibilité d'importer des protocoles depuis Protocols.io (plateforme de partage de protocoles)
Import	Csv, ZIP, import des templates pour les expériences ZIP, Excel pour la base de données des stocks		Possible d'importer depuis ChemDraw	2 formats - lisible par l'homme : PDF, texte (toutes les infos présentes dans FELN) - lisible par machine : fichier structure (Structure Data Format)			
Export	Fonctions d'export en format Excel et SDF	ZIP (1 dossier par expérience, 1 PDF par exp + les fichiers joints aux expériences)	Pour le moment, export en format PDF Travailleur sur l'API en XML horizon 2020	Non	Format : 1 PDF contenant les éléments, 1 ZIP contenant le PDF D'autres formats seront disponibles dans les versions à venir API diplo (REST), mais pas sur FELN API, possible de restaurer une version Chaque module a l'option de versioning	Possible de télécharger ses données en format Excel + et autres + Exporter ses expériences	ZIP contenant des fichiers HTML ou XML Exporter en PDF ou format Word
API	Disponible sur GitHub	REST + permet d'accéder informatiquement aux expériences (en JSON)	Non	Travailleur sur l'API pour pouvoir incorporer des bases de données externes	Non		Oui
Versioning			Appareillement pas	Oui, permet d'avoir un historique des modifications	Oui, permet d'avoir un historique des modifications		
Sécurité							
Signature électronique	Appareillement aucune	Oui + horodatage	Oui (witnessing and approval)	Oui	Oui (attention, dépend de la licence)	Oui, contre-signature également (version payante)	Oui, fonctionnalité de témoignage
Sauvegardes	Sauvegardes tous les jours + base de données dupliquée avec l'infrastructure IT de l'institution	Possibilité de récupérer en cas de problèmes Sauvegardes manuelles, mais possible de les automatiser	Automatiques	Automatique journalière, tout le système est sauvegardé de façon hebdomadaire Possibilité de revenir à l'état du serveur à la minute près (uniquement en cas de problème important -> ce n'est pas encore arrivé)	Manuellement ou automatiquement (via le « manager Windows »)	Automatiques	Peuvent être réalisées manuellement et planifiées
Normes respectées	Non indiquées	RFC 3161 Code of Federal Regulations Title 21, paragraphe 11 FEPA HIPAA FSMA	Non indiquées	CFR 21 part 11	21 CFR Part 11, Annex 11, GSP	21 CFR Part 11	21 CFR Part 11
Autres		Encrytage des données (TLSv1.2) Qualité du code, scan du code pour bonnes pratiques HTTPS Possible d'interdire à des utilisateurs de supprimer des expériences	Lien entre le stock produit et le cahier de laboratoire (journalisation automatique des produits de l'inventaire en fonction de l'utilisation dans le cahier labo) Affichage des risques directement dans le cahier	Audit interne Pas de dispositif de fermeture des comptes Possible de clôturer une expérience (elle sera non modifiable ensuite et horodatée) et d'ajouter un erratum/lés commentaires	Cryptage à l'aide de TLS 1.2, de pare-feu et de stockage certifié SSAE 16 Audit trail et d'ajouter un erratum/lés commentaires		HTTPS Accès au serveur protégé uniquement aux personnes autorisées Audits Hors assignés aux documents signés pour assurer l'intégrité
Modèle économique							
Coût	Gratuit (open source)	Gratuit (open source) 1995 € / an si hébergé par Delatlabot (sans limite d'utilisateurs)	Cloud : 10 € par utilisateur par mois In-house : idem + 2000 €/an pour les mises à jour du logiciel et le support (pour plus de 20 utilisateurs) le 800 € jusqu'à 20 utilisateurs	"Pas plus cher que le prix du marché"	Licence par utilisateur par mois possible (prix non indiqué) Licence perpétuelle : environ 3000 € pour 5 utilisateurs (plus la maintenance) Prix varie en fonction du nombre d'utilisateurs	Gratuit pour Universités (pas toutes les fonctionnalités) 99 € / utilisateur / an pour version payante	RSpace Community (moins de fonctions) : gratuit individuellement et pour les petits groupes RSpace Enterprise (outil complet) : tarif préférentiel de 100\$/utilisateur/an pour les Universités
Essai gratuit	Connexion à une version web depuis le site Chemotion	Compte demo accessible directement depuis le site Documentation https://fisc.elabftw.net/ 499 € / an pour support par Delatlabot (support par email) Développeur très réactif	45 jours, essai cloud : juste à effectuer l'accès en ligne en s'inscrivant (limité à 10 utilisateurs) Tous complets Peuvent aider à la migration depuis un autre ELN Maintenance et mises à jour automatiques	Oui, sur quelques mois (du moment qu'on n'entre pas en mode production) Pas de guide utilisateur (appareillement n'en ont jamais eu besoin) Vidéos tuto vont être disponibles Tous réactifs aux mails et demandes d'aide	30 jours d'essai gratuit renouvelable avec suivi technique (email, chat, appels...) Compter 20 % de plus dans le prix pour support et maintenance (sauf si les données sont sur leur cloud)	Oui, besoin de s'inscrire	Possibilité de demander une démo en live
Support	In person training, user-oriented training, administrator oriented training, general presentation in seminars, and YouTube videos						Moins à jour automatiques Support diapo (pas sûr pour version gratuite)
Autres							
References utilisateurs (non-exhaustif)	Karlsruhe Institute of Technology (références non indiquées)	Institut Curie (utilisé par tout le monde) INRS Cardiff University Hannover Medical School Helmholtz Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH Indian Institute of Science, Bangalore Indian Institute of Technology, Delhi Intérêt manifesté récemment par l'ENS en chimie (vue d'Ulm) Institut Jacques Monod et le Collège de France	Université d'Orford Proveapham - Provence Technologies Group Université de Manchester University of Groningen	ESPCI ParisTech Institut Charles Sadron Strasbourg Institut Curie Ecole Polytechnique Paris-Saclay Université Paris Sud Environ 200 clients	Inra CNRS Université de Nantes Institut Pasteur Harvard	Université de Bordeaux Université de Montréal NuChem Therapeutics Inc. Janssen	Université de Genève Baylor College of Medicine Juelich The University of Edinburgh
Site web	https://elabmotion.net/	https://www.elabftw.net/	https://mestrelab.com/software/mbook/ https://www.mestrelab.com/pdf/indoc/mbook/2018-mbook-leaflet.pdf	http://www.esnovoyls.com/book	https://labcollector.com/	https://findmolecule.com/fr/arenez-le-contrôle-de-votre-labo/	https://www.researchspace.com/enterpage/
Code disponible sur :	https://github.com/ComRiz/chemotion_FLN	https://github.com/ComRiz/chemotion_FLN https://www.immali.org/index.php/ElabFTW	https://github.com/ComRiz/chemotion_FLN https://datamanagement.hms.harvard.edu/electronic-lab-notebooks-elabftw	https://datamanagement.hms.harvard.edu/electronic-lab-notebooks-elabftw	https://datamanagement.hms.harvard.edu/electronic-lab-notebooks-elabftw		
Remarques complémentaires		Cahier traduit en 17 langues					