



Physikalische Chemie, Universität Rostock

**Vorlesung: Forschungsdatenmanagement  
im Sommersemester 2024**

Dr. habil. Till Biskup

— Glossar zu Vorlesung 20: „Elektronisches Laborbuch“ —

---

*Hinweis: Die nachfolgend genannten Begriffe und Definitionen erheben keinen Anspruch auf formale Korrektheit, sondern dienen lediglich dem besseren Verständnis der in der Vorlesung behandelten Themen und sind im jeweiligen Kontext zu sehen. Mehrfache, voneinander abweichende Definitionen in unterschiedlichen Kontexten sind daher möglich. Fremdsprachige Begriffe werden nach Möglichkeit übersetzt, erscheinen aber ggf. unter ihrem ursprünglichen Namen in der Liste. Verweise auf andere Begriffe innerhalb des Glossars sind durch das vorangestellte Symbol ↑ gekennzeichnet.*

**API** *application programming interface*, Programmierschnittstelle oder genauer ↑Schnittstelle zur Anwendungsprogrammierung

**Auszeichnungssprache** *markup language* maschinenlesbare Sprache für die Gliederung und Formatierung von Texten und anderen Daten. Der bekannteste Vertreter ist die *Hypertext Markup Language* (HTML), die Kernsprache des World Wide Webs.

**Datenbank** *database* (DB) auch Datenbanksystem genannt; System zur elektronischen Datenverwaltung. Die wesentliche Aufgabe einer Datenbank besteht darin, große Datenmengen effizient, widerspruchsfrei und dauerhaft zu speichern und benötigte Teilmengen in unterschiedlichen, bedarfsgerechten Darstellungsformen für Benutzer und Anwendungsprogramme bereitzustellen. Eine Datenbank besteht aus zwei Teilen: der Verwaltungssoftware (Datenbankmanagementsystem, DBMS), und der Menge der zu verwaltenden Daten, der Datenbank (DB) im engeren Sinn. Die Verwaltungssoftware organisiert intern die strukturierte Speicherung der Daten und kontrolliert alle lesenden und schreibenden Zugriffe auf die Datenbank. Zur Abfrage und Verwaltung der Daten bietet ein Datenbanksystem eine Datenbanksprache (eine eigenständige Programmiersprache, häufig

SQL) an.

**Datensicherung** *backup*, Kopieren von Daten in der Absicht, diese im Fall eines Datenverlustes zurückkopieren zu können, entsprechend eine elementare Maßnahme zur Datensicherheit. Setzt eine sinnvolle Strategie zur langfristigen Absicherung sowohl gegen Verlust als auch gegen (ungewollte und oft zufällige) Veränderung voraus. Genauso entscheidend wie eine gute Strategie und regelmäßige Datensicherung ist dabei, die erzeugten Sicherungskopien regelmäßig auf korrekte Funktion überprüfen.

**DokuWiki** freie, quelloffene ↑Wiki-Software, die in PHP geschrieben ist, eine hierarchische Organisation der Inhalte erlaubt und als Textdateien mit zugehörigen Medien direkt in einer Verzeichnisstruktur abbildet. Der Verzicht auf eine Datenbank und die Verwendung des Dateisystems macht DokuWiki sehr flexibel und robust.

**elektronisches Laborbuch** ELN, digitale Variante des klassischen Laborbuchs. Mitunter wird sehr viel mehr unter diesem Begriff zusammengefasst, bis hin zu ↑Repositorium für Rohdaten, ↑Katalog, Projektplanungswerkzeugen, Proben- und Geräteverwaltung, was aber mehr Probleme aufwirft als hilft. Für eine Diskussion vgl. [1]. Vgl. ↑Laborbuch

**ELN** ↑elektronisches Laborbuch

**Erkenntnis** Aneignung des Sinngehalts von erlebten bzw. erfahrenen Sachverhalten, Zuständen oder Vorgängen, Ergebnis des Vorgangs des Erkennens. Erkenntnis beinhaltet immer eine auf die Erfahrung gestützte Beurteilung und setzt notwendiger Weise ein Subjekt voraus, das erkennt. Neue Erkenntnisse, die von innerer und äußerer Erfahrung unabhängig sind, sind immer Ergebnis einer schöpferischen Phantasie. Bei der Erkenntnis stehen sich Subjekt und Objekt als Erkennendes und Erkanntes gegenüber. Die Erkenntnis führt zu einem Abbild des Objekts im Subjekt. Die grundsätzliche Unvollständigkeit dieses Abbilds ist die Triebkraft hinter dem Erkenntnisgewinn und letztlich der ↑Wissenschaft. Vgl. [2]; wesentliche Beiträge zur Erkenntnistheorie und ihrer Anwendung auf die Naturwissenschaft kommen von Kant [3, 4].

**Forschungsdaten** zunächst einmal Daten, die im Zuge wissenschaftlicher Vorhaben im Rahmen von Forschung z.B. durch Digitalisierung, Quellenforschungen, Experimente, Messungen, Erhebungen oder Befragungen entstehen. Forschungsdaten im weiteren Sinn umfassen darüber hinaus (physische) Objekte und Werkzeuge (z.B. Fragebögen, Software und Simulationen). Forschungsdaten können grundsätzlich analog oder digital vorliegen. Sie sind Ausgangspunkt der (empirischen) Wissenschaft.

**Forschungsdatenmanagement** Umgang mit ↑Forschungsdaten über ihren gesamten Lebenszyklus hinweg mit dem Fokus auf ↑Nachvollziehbarkeit und Nachnutzbarkeit; wird meist auf die digitale Welt bezogen, ist letztlich aber nichts anderes als sauberes wissenschaftliches Arbeiten; notwendige, aber nicht hinreichende Bedingung für den wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn.

**hinreichend** mathematisches Konzept, das eine Bedingung beschreibt, deren Erfüllung ausreicht, um ein gegebenes Ziel zu erreichen. Vgl. ↑notwendig

**Infrastruktur** personelle, sachliche und finanzielle

Ausstattung, um ein angestrebtes Ziel zu erreichen.

**intellektuelle Beherrschbarkeit** *intellectual manageability*, nach Edsger Dijkstra [5] das Hauptziel der Softwaretechnik (*software engineering*) – und letztlich des Projektmanagements. Unterschiedliche Lösungsansätze für ein Problem sind unterschiedlich gut intellektuell beherrschbar. Entsprechend ist die intellektuelle Beherrschbarkeit das zentrale Kriterium für die Entscheidung, welche Lösung für ein Problem bevorzugt wird.

**Katalog** Werkzeug zum Auffinden und Erschließen von Forschungsdaten. ↑Forschungsdaten können mit Hilfe eines Datenkatalogs gesucht, gefunden und erschlossen werden. Ein Datenkatalog enthält vergleichbar zu einem Bibliothekskatalog verschiedene ↑Metadaten, die die Grundlage für die Suche und Filterung darstellen, aber nicht (notwendigerweise) die ↑Forschungsdaten selbst – im Falle der Bibliothek die Bücher. Typischerweise bieten auch ↑Repositorien grundständige Katalogfunktionen, so dass die Unterscheidung zwischen Katalog und Repitorium in der Praxis mitunter verschwimmt. Ein Katalog als Sammlung von ↑Metadaten zu bestimmten Objekten erweist sich insbesondere dann als sinnvoll, wenn die Menge der Objekte eine gewisse Schwelle überschreitet, die ein Auffinden und Abrufen über die einzelnen Objekte selbst unmöglich macht oder zumindest massiv erschwert.

**Konsistenz** hier: logische Widerspruchsfreiheit; Zusammenhang der Gedankenführung

**Laborbuch** auch: Laborjournal, primäres Dokumentationswerkzeug in den empirischen Wissenschaften, meist gebundenes Buch mit durchnummerierten Seiten. Typische Inhalte sind Ideen, Planungen, Notizen während der Durchführung von Experimenten und zuweilen Ergebnisse. Für Details inkl. evtl. rechtlicher Aspekte vgl. u.a. [6, 7]. Vgl. ↑elektronisches Laborbuch

**Markup** vgl. ↑Auszeichnungssprache

**Metadaten** wörtlich „Daten über Daten“, Informationen zu den numerischen Daten, notwendige Voraussetzung für eine sinnvolle Verarbeitung der Daten im Kontext eines ↑Systems zur Datenverarbeitung und für ↑nachvollziehbare Wissenschaft.

**Modularisierung** Aufteilung der Gesamtaufgabe in kleinere Abschnitte. Die Aufteilung wird so lange fortgesetzt, bis die Lösung für den aktuellen Abschnitt unmittelbar in Form von Quellcode offensichtlich ist. Setzt die Definition von ↑Schnittstellen voraus.

**Modularität** Eigenschaft eines Systems, aus lauter separaten, durch ↑Schnittstellen miteinander verbundenen Teilen zu bestehen. I.d.R. Folge der ↑Modularisierung und einzig erfolgversprechende Strategie für die ↑intellektuelle Beherrschbarkeit komplexer Systeme.

**nachvollziehbare Wissenschaft** *reproducible science*, seit der Etablierung rechnergestützter Datenauswertung eigentlich nie mehr erreicht, aber für die Wissenschaft konstituierender Aspekt, dass sich Ergebnisse und Auswertungen unabhängig nachvollziehen lassen, weil alle dazu notwendigen Aspekte vollständig und ausreichend beschrieben wurden (↑Nachvollziehbarkeit). Motivation für die Vorlesung, deren Ziel es ist, die Hörer mit Konzepten vertraut zu machen, die letztlich eine ernstzunehmende nachvollziehbare Wissenschaft ermöglichen. Die ↑Nachvollziehbarkeit geht dabei weit über ↑Replizierbarkeit und ↑Reproduzierbarkeit hinaus.

**Nachvollziehbarkeit** zentraler Aspekt der ↑Wissenschaft und der wissenschaftlichen Methode, die die Intersubjektivität ihrer Aussagen ermöglicht. Setzt in der Regel eine ↑hinreichende Beschreibung (und Dokumentation) der einzelnen Schritte voraus, die von einem gegebenen Ausgangspunkt zu einem (neuen) Ergebnis oder auch einer Erkenntnis kommt.

**notwendig** mathematisches Konzept, das eine Bedingung beschreibt, die zwar erfüllt sein muss, um ein bestimmtes Ergebnis zu bekommen, aber für die Erfüllung nicht ausreicht. Vgl. ↑hinreichend

**Plausibilität** (kontextabhängiges) Beurteilungskriterium: etwas ist plausibel, wenn es möglich und wahrscheinlich erscheint.

**Qualitätskontrolle** Überprüfung der Qualität von Dingen oder Prozessen anhand vorher festgelegter Kriterien. Allgemeine Kriterien sind ↑Konsistenz und ↑Plausibilität. Wenn sich die Kriterien formal definieren und die relevanten Charakteristika der zu überprüfenden Dinge oder Prozesse ohne direkte menschliche Interaktion bestimmen lassen, ist eine Automatisierung möglich. Vgl. ↑Qualitätssicherung

**Qualitätssicherung** Sicherstellung der Qualität von Dingen oder Prozessen. Vgl. ↑Qualitätskontrolle

**Replizierbarkeit** *replicability*, unabhängige Wiederholbarkeit der (Roh-)Datenerhebung, meist in Form von Experimenten und Beobachtungen, entsprechend nicht in jedem Fall durchführbar. Vgl. ↑Reproduzierbarkeit, ↑Robustheit, ↑Verallgemeinerbarkeit.

**Repositorium** Publikationsplattform (u.a.) für ↑Forschungsdaten. Repositorien sind Publikationsplattformen (u.a.) für Forschungsdaten. Als IT-Dienst werden sie i.d.R. von Institutionen, Organisationen oder Firmen bereitgestellt und speichern die Forschungsdaten i.d.R. langfristig, dokumentieren die Forschungsdaten mit ↑Metadaten, regeln den Zugang (inkl. ↑Lizenz) zu den Forschungsdaten und vergeben einen ↑PID. Die dort publizierten Forschungsdaten sind meist über eine Metadatenuche und -filterung für Nutzerinnen und Nutzer auffindbar und erschließbar (Datenkatalog). Vgl. ↑Katalog

**Reproduzierbarkeit** *reproducibility*, vollständige Wiederholbarkeit einer beschriebenen Datenverarbeitung und -Analyse. Ausgangspunkt sind existierende Daten, entsprechend sollte sie in jedem Fall möglich sein. Vgl. ↑Replizierbarkeit.

**Robustheit** *robustness*, im Kontext der Datenverarbeitung die Tatsache, dass unterschiedliche, unabhängige Analysen derselben Daten zum gleichen Ergebnis führen. Vgl.

↑Reproduzierbarkeit, ↑Replizierbarkeit, ↑Verallgemeinerbarkeit

**Schema** formales Modell der Struktur von Daten bzw. Informationen

**Schlüssel-Wert-Paar** Kombination einer benannten Variable und ihres zugewiesenen Wertes. Wird häufig in Datenstrukturen abgelegt, die dann über den Schlüssel einen Zugriff auf den damit assoziierten Wert erlauben. Grundlegender Baustein der ↑Schemata von ↑Metadaten.

**Schnittstelle** der Teil eines Systems, der der Kommunikation und dem Austausch z.B. von Information dient. Systeme werden von außen als abgeschlossen (*black box*) betrachtet und kommunizieren ausschließlich über ihre Schnittstelle(n). Die explizite Definition, Dokumentation und Implementation von Schnittstellen sind wesentliche Voraussetzungen für ↑modulare ↑Systemarchitekturen. Schnittstellen ermöglichen die ↑Trennung der Belange. Oft genug stimmen Schnittstellen in Systemen mit Organisationsgrenzen beteiligter Gruppen überein [8]. In jedem Fall ist es essentiell, mit Systemen nur über deren Schnittstellen zu kommunizieren und *keine* Annahmen über die innere Organisation dieser Systeme zu treffen.

**Semantik** 1. Bedeutung bzw. Inhalt eines Wortes, Satzes oder Textes; 2. Teilgebiet der Linguistik, dessen Untersuchungsobjekt die Bedeutung sprachlicher Zeichen und Zeichenfolgen ist.

**semantische Information** Bedeutungsebene einer Information (vgl. ↑Semantik).

**semantisches Verständnis** Verständnis der ↑semantischen Information, also der Bedeutung bzw. des Inhaltes. Im Kontext von Auswertungsroutinen kann durch aussagekräftige Namensgebung der Schlüssel (Felder) eines ↑assoziativen Datenfeldes, in dem die ↑Metadaten abgelegt sind, eine entsprechende Ausdruckstärke des Quellcodes erreicht werden. Außerdem „weiß“ die Auswertungsroutine dann immer, was sich in einem gewissen Feld

verbirgt (z.B. Größe und Einheit für die Achsenbeschriftung).

**System zur Datenverarbeitung** hier: Gesamtsystem für wissenschaftliche Datenverarbeitung von der Datenaufnahme bis zur fertigen Publikation, das alle Aspekte umfasst und das ↑nachvollziehbare Wissenschaft möglich macht und gewährleistet. Definitiv ein größeres Projekt, das nicht nur eine ↑monolithische Anwendung umfasst, sondern viele Aspekte darüber hinaus. Setzt entsprechende ↑Infrastruktur und in der Umsetzung der einzelnen Komponenten sauberen Code und eine solide Softwarearchitektur voraus.

**Transparenz** über die ↑Nachvollziehbarkeit hinausgehendes Konzept, das die Wege der Entscheidungsfindung inklusive verworfener oder nicht beschrittener Alternativen nach bestem Wissen und Gewissen umfassend dokumentiert. Von R. Feynman [9] als essentiell für die Wissenschaftlichkeit hervorgehoben.

**Trennung der Belange** *separation of concerns*, grundlegendes Prinzip für ↑Modularisierung, nach Edsger Dijkstra [10] die einzig effektive Möglichkeit, seine Gedanken zu ordnen, indem man sich auf einen Aspekt eines ↑komplexen Problems fokussiert, ohne dabei zu vergessen, dass es lediglich ein Teilaspekt ist.

**Verallgemeinerbarkeit** auch: Generalisierbarkeit, *generalisability*, im Kontext der Datenverarbeitung die Tatsache, dass sowohl unabhängig erhobene Daten als auch voneinander unabhängige Analysemethoden zum gleichen Ergebnis führen. Baustein zur unabhängigen Bestätigung wissenschaftlicher Hypothesen. Vgl. ↑Reproduzierbarkeit, ↑Replizierbarkeit, ↑Robustheit

**Wiki** Website, deren Inhalte Besucher nicht nur lesen, sondern auch direkt im Webbrowser bearbeiten und ändern können. Das Ziel ist häufig, Erfahrung und Wissen gemeinschaftlich zu sammeln und in für die Zielgruppe verständlicher Form zu dokumentieren. Das prominenteste Beispiel ist die Wikipedia. Eines

der ersten Wikis wurde von Ward Cunningham 1995 entwickelt [11]. Vgl. ↑DokuWiki.

**Wissenschaft** Auf den Erkenntnisgewinn ausgerichtete, systematisches menschliches Unterfangen, das in der Regel eine Reihe von Kri-

terien erfüllt bzw. erfüllen sollte: Unabhängigkeit vom Beobachtenden bzw. Durchführenden, gegründet auf den Erkenntnissen früherer Generationen, sowie überprüfbar, nachvollziehbar und ggf. reproduzierbar. Für Einführungen vgl. u.a. [12, 13].

## Literatur

- [1] Mirjam Schröder und Till Biskup. Lablnform ELN: A lightweight and flexible electronic laboratory notebook for academic research based on the open-source software DokuWiki. *ChemRxiv* (2023). DOI: 10.26434/chemrxiv-2023-2tvct.
- [2] Heinrich Schmidt. *Philosophisches Wörterbuch*. 22. Aufl. Neu bearbeitet von Georgi Schischkoff. Stuttgart: Kröner, 1991.
- [3] Immanuel Kant. *Kritik der reinen Vernunft*. Herausgegeben von Wilhelm Weischedel. Frankfurt am Main: Suhrkamp, 1974.
- [4] Immanuel Kant. *Metaphysische Anfangsgründe der Naturwissenschaft*. Mit einer Einleitung herausgegeben von Konstantin Pollok. Hamburg: Felix Meiner Verlag, 1997.
- [5] Edsger W. Dijkstra. The humble programmer. *Communications of the ACM* 15 (1972), S. 859–865.
- [6] Howard M. Kanare. *Writing the Laboratory Notebook*. Washington, D.C.: American Chemical Society, 1985.
- [7] Hans F. Ebel, Claus Bliefert und William E. Russey. *The Art of Scientific Writing*. Weinheim: Wiley-VCH, 2004.
- [8] Melvin E. Conway. How do committees invent? *Datamation* 14.4 (1968), S. 28–31.
- [9] Richard P. Feynman. Cargo cult science. *Engineering and Science* 37.7 (1974), S. 10–13. URL: <https://resolver.caltech.edu/CaltechES:37.7.CargoCult>.
- [10] Edsger W. Dijkstra. „On the Role of Scientific Thought (EWD447)“. In: *Selected Writings on Computing: A Personal Perspective*. New York: Springer-Verlag, 1982, S. 60–66.
- [11] Bo Leuf und Ward Cunningham. *The Wiki Way. Quick Collaboration on the Web*. Upper Saddle River, NJ: Addison-Wesley, 2001.
- [12] Alan F. Chalmers. *What is this thing called Science?* Third edition. Berkshire, UK: Open University Press, 1999.
- [13] Hans Poser. *Wissenschaftstheorie*. Stuttgart: Reclam, 2001.