

Plan upravljanja istraživačkim podacima za projekt "Povećanje prostorne i vremenske skale modeliranja materijala iz prvih principa pomoću strojnog učenja"

Lončarić, Ivor

Other document types / Ostale vrste dokumenata

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:241:604459>

Rights / Prava: [Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International/Imenovanje-Nekomercijalno-Bez prerada 4.0 međunarodna](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2023-09-22**



Repository / Repozitorij:

[Fulir DATA - Ruđer Bošković Institute Research Data Repository](#)

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Ivor Lončarić
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković
	Naziv projekta	Povećanje prostorne i vremenske skale modeliranja materijala iz prvih principa pomoću strojnog učenja
	Upravitelj podacima	Ivor Lončarić ivor.loncaric@irb.hr
1. Prikupljanje podataka i dokumentacija		
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	Stvarat ćemo podatke izračuna teorijom funkcionala gustoće koristeći široko rasprostranjene računalne kodove VASP i Quantum Espresso. Ovi programi stvaraju tekstualne podatke o strukturi materijala, energiji sustava, silama na atome i slično u standardnim formatima u računalnoj fizici materijala. Također ćemo stvarati strojno naučene modele koji su također u standardnim tekstualnim formatima. Očekivana veličina svih ovih podataka je 100 GB.
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	Podaci u standardnom formatu koje stvaraju računalni kodovi koji se koriste u projektu sadrže sve potrebne informacije o podacima. U znanstvenom području postoje "parseri" koji omogućavaju jednostavno pretraživanje podataka po željenom kriteriju pa nije potrebna posebna organizacija podataka nego se spremaju po redoslijedu stvaranja.
	Koju ćete dokumentaciju i metapodatke ustupiti osim podataka? (navedite koje su informacije potrebne korisnicima kako bi mogli čitati i interpretirati podatke u budućnosti te koji će se standardi koristiti pri tumačenju podataka)	Podaci u standardnom formatu već sadrže sve potrebne metapodatke i informacije kako bi potencijalni korisnici mogli čitati, interpretirati i koristiti podatke.
2. Pravna i sigurnosna pitanja		
	Jeste li ograničeni sporazumom o povjerljivosti? Imate li potrebna	Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela.

	dopuštenja za prikupljanje, obradu, čuvanje i dijeljenje podataka? Jesu li osobe čiji se podaci pohranjuju informirani o tome i jesu li dali privolu? Kojim ćete se metodama koristiti u svrhu zaštite osjetljivih podataka (GDPR - posebne kategorije osobnih podataka)?	
	Kako će se regulirati pristup podacima i njihova sigurnost? Koji su potencijalni rizici koje treba uzeti u obzir? Kako ćete osigurati sigurnost pohrane osjetljivih podataka?	U projektu se neće generirati osjetljivi podaci te nema rizika.
	Kako ćete upravljati zaštitom autorskih prava i intelektualnog vlasništva? Tko će biti vlasnik podataka? Koje će se licencije primjenjivati na podatke? Koja će se ograničenja primjenjivati na ponovnu uporabu osobnih podataka?	Ne očekuje se da će rezultat istraživanja dovesti do patenta. Podaci se mogu slobodno koristiti nakon objave. Koristit će se licenca Creative Commons Attribution 4.0 International (.CC BY 4.0)
3.	Pohrana i čuvanje podataka	
	Kako će podaci biti pohranjeni i kako će biti napravljena sigurnosna kopija podataka (<i>backup</i>) tijekom istraživanja? Koji su kapaciteti čuvanja podataka kojim raspolazete? Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju (<i>backup</i>)?	Podaci se generiraju i spremaju na računalnom klasteru Zavoda za teorijsku fiziku koji je opremljen RAID 10 diskovima kako bi se osigurali podaci. Dodatno podaci se automatski pohranjuju i na nezavisnom računalu glavnog istraživača. Kapacitet pohrane je 10 TB.
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U	Nakon objave podaci će se čuvati u repozitoriju u standardnim formatima za izračune u računalnoj fizici materijala.

	kojim će se formatima čuvati?	
4.	Dijeljenje i ponovna uporaba podataka	
	Kako i gdje će se podaci dijeliti? Na kojem repozitoriju planirate dijeliti podatke? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?	U znanstvenom području ovog projekta postoje specijalizirani repozitoriji poput https://archive.materialscloud.org/about ili https://nomad-lab.eu/ koji prihvaćaju podatke o izračunima sa svim potrebnim metapodacima pa će se taj dio podataka podijeliti na taj način. Svi ostali podaci će se objaviti na Zenodo. Potencijalni korisnici će doznati za podatke na način da će podaci biti citirani u publikacijama kao i slobodnim pretraživanjem specijaliziranih repozitorija.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	Nema ograničenja.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Potvrđujem.
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji održava neprofitna organizacija (ako ne, objasnite zašto ne možete dijeliti podatke na digitalnom repozitoriju koji nije komercijalan).	Potvrđujem.

Ref:

[1] Celjak, D., Dorotić Malič, I., Matijević, M., Poljak, Lj., Posavec K. i Turk, I.: „Istraživački podaci - što s njima?“ [Istraživački podaci - što s njima? : priručnik o upravljanju istraživačkim podacima | Digitalni repozitorij Srca \(unizg.hr\)](#)