

Plan upravljanja istraživačkim podacima - PhInMol

Došlić, Nađa

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2022**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:241:454103>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-02-23**



Repository / Repozitorij:

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

PLAN UPRAVLJANJA ISTRAŽIVAČKIM PODACIMA (PUP)

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Nađa Došlić
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković
	Naziv projekta	Fotoinducirani procesi u molekulama: susret teorije i eksperimenta
	Upravitelj podacima	Nađa Došlić (najda.doslic@irb.hr)
1.	Prikupljanje podataka i dokumentacija	
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite formate, vrste i opseg svih podataka s kojima ćete raditi, a ne samo krajnji skup podataka koji će biti rezultat istraživanja)	Podatci će se generirati numeričkim simulacijama fotokemijskih procesa. To će uglavnom uključivati simulacije neadijabatske dinamike koje će generirati putanje koje će se spremati u formatu h5md (na temelju hdf5). Spektroskopske opservable izračunate duž ovih putanja bit će spremljeni u csv formatu. Otprilike 50 putanja bit će generirano za svaki simulacijski problem s očekivanom pohranom od ~1 MB po putanji što daje ukupno 0,05 GB podataka.
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete, načine organiziranja podataka te alate i instrumente kojima ćete se koristiti za prikupljanje i obradu)	Podatci će se generirati korištenjem kombinacije komercijalnog softvera (za izračune elektroničke strukture) i softvera koji je razvila istraživačka skupina (za simulacije neadijabatske dinamike i za izračun spektroskopskih opažaja). Većina softvera uspješno je korištena u prethodnim studijama i dobro je testirana. Sav novi softver razvijen tijekom projekta bit će temeljito testiran prije pokretanja proračuna proizvodnje za nove sustave izvođenjem proračuna na malim sustavima gdje su očekivani rezultati poznati.
	Koju ćete dokumentaciju i metapodatke izraditi osim podataka? (dokumentacija mora sadržavati informacije i standarde potrebne korisnicima kako bi mogli samostalno čitati i interpretirati podatke u budućnosti, primjerice, kodne knjige, <i>ReadMe</i> datoteke i sl.)	Kontrola verzija (git) koristit će se tijekom razvoja koda i svi će kodovi biti dostupni putem mrežnih repozitorija zajedno s <i>ReadMe</i> datotekama s uputama o pokretanju kodova. Generirani podatci uvijek će biti popraćeni metapodacima s detaljima o kodovima korištenim za proizvodnju podataka.
2.	Pravna i sigurnosna pitanja	

	Jeste li ograničeni sporazumom o povjerljivosti? Imate li potrebna dopuštenja za prikupljanje, obradu, čuvanje i dijeljenje podataka? Jesu li osobe čiji se podaci obrađuju informirani o tome i jesu li dali privolu? Kojim ćete se metodama koristiti u svrhu zaštite osjetljivih podataka (GDPR - posebne kategorije osobnih podataka, navesti metode anonimizacije podataka)?	Nikakvi povjerljivi ili osjetljivi podatci neće se generirati niti koristiti tijekom projekta.
	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?	Tijekom projekta neće se generirati niti koristiti osjetljivi podatci. Generirani podatci bit će pohranjeni lokalno i povremeno će biti javno dostupni putem online repozitorija kada se dijelovi istraživanja završe.
	Kako ćete upravljati zaštitom autorskih prava i drugog 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 predloženo istraživanje rezultirati patentima. Generirani podatci neće biti ograničeni i bit će objavljeni pod licencom Creative Commons CC0. Sav softver razvijen tijekom projekta bit će objavljen pod licencom MIT ili GPLv3.
3.	Pohrana i čuvanje podataka	
	Kako će radne verzije podataka biti pohranjene tijekom projekta? Kako će se napraviti sigurnosne kopije tih podataka (<i>backup</i>)? Koja je očekivana količina podataka koja će se prikupiti i čuvati tijekom projekta (izraženo u MB/GB/TB)?	Tijekom projekta podatci će biti pohranjeni lokalno. Svi strojevi na kojima će se pohranjivati podatci povezani su s namjenskim backup serverom koji svake noći stvara backup. Dijelovi izračuna koji zahtijevaju najviše pohranjivanja bit će elektronske valne funkcije izračunate u svakom koraku proračuna dinamike. Oni će biti pohranjeni tijekom dijelova istraživanja (u iznosu do 1 TB u bilo kojem trenutku), ali neće biti pohranjeni dugoročno. Umjesto toga, samo podatci potrebni za jednostavno ponovno izračunavanje valnih funkcija bit će pohranjeni nakon projekta.
	Kako će se završne verzije podataka dugotrajno pohraniti i čuvati (i nakon završetka projekta)? U kojim će se formatima čuvati podaci? Koja je očekivana količina podataka koja će se trajno pohraniti (izraženo u MB/GB/TB)?	Povremeno će se podatci iz završenih dijelova istraživanja spremati na Zenodo (https://zenodo.org/). Svi generirani podatci bit će pohranjeni u formatima uobičajenim za polje, kao što su h5md, xyz ili molder. Očekuje se da će nakon projekta biti pohranjeno ukupno 10 GB.
4.	Dijeljenje i ponovna uporaba podataka	

Kako i gdje će se podaci dijeliti? Koji repozitorij će se koristiti za dijeljenje podataka? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?	Podatci će se dijeliti na platformi Zenodo (https://zenodo.org/), a ključni podaci bit će uključeni kao dopunski materijal publikacija. Kodovi će biti objavljeni na GitHubu. Sve publikacije povezane s istraživanjem uključivat će izjavu o dostupnosti podataka koja će zainteresirane čitatelje usmjeriti na podatke.
Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	Neće biti ograničenja za korištenje podataka.
Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Zenodo je u skladu s načelima FAIR-a
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).	Zenodo administrira neprofitna organizacija