Plan upravljanja istraživačkim podacima

| Opće informacije | | |
| --- | --- | --- |
|  | Ime i prezime predlagatelja | Antonio Prlj |
|  | Matična organizacija | Institut Ruđer Bošković |
|  | Naziv projekta | Hibridno modeliranje pobuđenih stanja u novim molekularnim materijalima: od optičkih svojstava do dinamike ekscitona |
|  | Upravitelj podacima | Antonio Prlj  Antonio.Prlj@irb.hr |
| 1. | Prikupljanje podataka i dokumentacija | |
|  | Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka) | Projekt je u potpunosti računalnog karaktera te se oslanja na atomističke simulacije korištenjem široko dostupnih komercijalnih ili besplatnih računalnih paketa za teorijsku kemiju (Orca, Gaussian, Turbomole, Gromacs, Plumed, Amber itd). Ključni input i output podaci koje planiramo pohranjivati su u tekstualnom formatu. Osim ključnih sirovih podataka pohranjivati ćemo i publikacije u pdf formatu. Opseg podataka bi mogao biti reda veličine 100GB. |
|  | Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka) | Računalni programi koje koristimo stvaraju output podatke (molekulske geometrije, energije, svojstva, parametre itd.) koji su uobičajeni u području računalne kemije. Podaci će se obrađivati prikladnim metodama statističke analize. Podaci će biti organizirani po različitim projektima (publikacijama), a različiti aspekti projekta biti će tematski odijeljeni te pohranjeni u zasebnim direktorijima. |
|  | 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) | Ključni detalji kako koristiti podatke biti će evidentni iz same publikacije te “Supporting information” dokumenta. Ukoliko je struktura podataka kompleksna, uz pohranjene podatke kreirati ćemo “readme” tekstualne dokumente kako bi olakšali interpretaciju 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 pohranjuju informirani o tome i jesu li dali privolu? Kojim ćete se metodama koristiti u svrhu zaštite osjetljivih podataka (GDPR - posebne kategorije osobnih podataka)? | Nećemo dijeliti nikakve osjetljive i osobne podatke te nećemo kršiti etička načela. |
|  | 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? | Podaci koje kreiramo imati će sigurnosnu kopiju (backup) čime se minimizira potencijalni rizik gubitka podataka. Nećemo generirati osjetljive podatke. |
|  | 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? | Projekt nije usmjeren prema patentiranju rezultata istraživanja. Podatke će se moći koristiti nakon što su publicirani. Podaci će biti pod licencom Creative Commons CC0. Za pitanja intelektualnog vlasništva slijedimo preporuke Instituta Ruđer Bošković. |
| 3. | Pohrana i čuvanje podataka | |
|  | Kako će podaci biti pohranjeni i kako će biti napravljena sigurnosna kopija podataka (*backup*) tijekom istraživanja? Koji su kapaciteti čuvanja podataka kojim raspolažete? Kojim se procedurama koristite za sigurnosnu kopiju (*backup*)? | Podaci će biti pohranjeni na računalnim resursima Zavoda za fizičku kemiju te Zavoda za teorijsku fiziku instituta Ruđer Bošković. Sigurnosnu kopiju napravit ćemo na radnim računalima glavnog istraživača. Kapaciteti čuvanja podataka su oko 10 TB. |
|  | Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati? | Podaci će se čuvati u izvornom obliku koji omogućuje potpunu reprodukciju znanstvene publikacije. |
| 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? | Potencijalni korisnici doznati će za podatke iz znanstvenih publikacija. Ukoliko se ne radi o podacima koje je trivijalno reproducirati iz objavljenog rada, ili su već dostupni u “Supporting Information” dokumentu, podatke ćemo automatski pohraniti na sustavu Fulir Data (repozitoriju Instituta Ruđer Bošković). Po upitu ćemo podijeliti sve podatke koje posjedujemo. |
|  | Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja. | Ne generiramo nikakve podatke s ograničenjima. |
|  | Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima *FAIR-a*. | 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)](https://repozitorij.srce.unizg.hr/islandora/object/srce:327)