

Plan upravljanja istraživačkim podacima - BenzpHSens

Vianello, Robert

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:241:010729>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2025-01-08**



Repository / Repozitorij:

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

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	dr. sc. Robert Vianello
	Matična organizacija	Institut Ruđer Bošković, Zagreb
	Naziv projekta	Dizajn, sinteza i računalna analiza novih optičkih kemijskih pH osjetilnih derivata benzazola (BenzpHSens)
	Upravitelj podacima	dr. sc. Robert Vianello, robert.vianello@irb.hr
1.	Prikupljanje podataka i dokumentacija	
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	<p>Prikupljeni podaci, u računalnom dijelu, uključuju <i>output</i> datoteke kvantno-mehaničkih izračuna, trajektorije molekulske-dinamičkih simulacije te tekstualne datoteke sa zapisom prostornih koordinata ispitivanih protein-ligand kompleksa nakon <i>docking</i> analize, dok u eksperimentalnom dijelu uključuju spektroskopske podatke. Svi navedeni primarni podaci obrađivat će se putem internih skripti ili programa za vizualizaciju, a njihovo pohranjivanje na čvrstim diskovima računala te backup rješenjima članova projektnog tima, omogućit će njihovo ponovno korištenje. Format i tipičan volumen generiranih podataka je sljedeći:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Kvantno-mehanički izračuni optimizacije i frekvencijske analize: .log ekstenzije; volumen ≈ 5 MB po sustavu; očekivani ukupni opseg ≈ 10 GB • Kvantno-mehanički izračuni energije kroz QM/MM ONIOM pristup: .log ekstenzije; volumen ≈ 700 MB po sustavu; očekivani ukupni opseg ≈ 500 GB • Molekulske-dinamičke trajektorije protein-ligand kompleksa: .mdcrd, .dat, .prmtop ekstenzije; volumen ≈ 200-300 GB po sustavu; očekivani ukupni opseg ≈ 20 TB • <i>Docking</i> analiza: .dat, .txt ekstenzije; volumen ≈ 100 KB po sustavu; očekivani ukupni opseg ≈ 100 MB • Spektroskopski podaci: .csv, .opus, .tiff ekstenzije; volumen ≈ 100 KB po sustavu; očekivani ukupni opseg ≈ 1 GB <p>Ostali izvedeni podaci (grafički i tablični prikazi) ne bi trebali premašiti 10 GB, a između ostalog uključuju podatke u proračunskim tablicama (.csv ili .xlsx) te podatke u slobodnim tekstualnim dokumentima (.txt, .docx, .pdf).</p>
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	<p>Svi primarni podaci prikupljaju se tijekom sprovođenja računalnih simulacija i eksperimentalnih analiza na čvrste diskove na računalima na kojima se ti postupci odvijaju. Pri tome se unaprijed dogovorenim i pažljivo strukturiranim diskovnim prostorom na odgovarajuće direktorije i poddirektorije, omogućuje lakše snalaženje u generiranim podacima. Navedeno je dodatno osigurano pravilnim odabirom naziva pojedinih fajlova i dokumenata iz kojih je jasno moguće utvrditi o kojem ispitivanom sustavu se radi te koja je primijenjena metodologija. Svi dobiveni podaci obrađivat će se u svojim matičnim poddirektorijima čime se izbjegava mogućnost prepisivanja ili nehotičnog gubitka podataka. Štoviše, svakom članu projektnog tima na raspolaganju je samo određeni osobni prostor na zajedničkom čvrstom disku, kojem pristupa sa svojim pristupnim podacima (korisničko ime i lozinka), čime je u potpunosti izbjegnuto prepisivanje i gubitak podataka među članovima projektnog tima.</p>

		<p>Za svaku sprovedenu računalnu simulaciju ili spektroskopsku analizu, neobrađeni podaci s metapodacima svakog ispitivanog sustava, analiza i grafički prikaz podataka bit će spremljeni u odgovarajući poddirektorij u mapi naše istraživačke grupe na računalo svakog člana projektnog tima te na zajednički vanjski disk. To će omogućiti svim članovima naše istraživačke skupine snalaženje u dobivenim podacima te dodati kontekstualnu vrijednost skupu podataka za buduću ponovnu upotrebu.</p>
	<p>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)</p>	<p>Neobrađeni podaci i primarni <i>output</i> dokumenti spremat će se u datoteke s gore navedenim ekstenzijama te kao podaci u odgovarajućim potprogramima MS OFFICE programskog paketa (Word, Excell, PowerPoint, itd.) Datoteke i skupovi podataka bit će imenovani informacijama uključujući odabranu računalno/eksperimentalnu metodologiju te naziv ispitivanog kemijskog sustava. Podaci će biti klasificirani i pohranjeni u zasebne poddirektorije, prema unaprijed određenom sustavu organizacije za svakog člana projektnog tima i svaki potprojekt. Formati u kojima se prikupljaju podaci standardizirani su za svaku metodu i nisu potrebni dodatne upute kako bi korisnici mogli uspješno koristiti podatke. U kontekstu upravljanja podacima, metapodaci tvorit će podskup podataka koji objašnjava svrhu, podrijetlo, opis, vremensku referencu, stvaratelja podataka, uvjete pristupa i uporabe zbirke podataka.</p>
2.	Pravna i sigurnosna pitanja	
	<p>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)?</p>	<p>Ovaj projekt je fundamentalne prirode, za koji dostupnost generiranih podataka ne sadrži elemente povjerljivosti niti je ograničena sporazumom o povjerljivosti. Pored toga, generirani podaci ne trebaju dopuštenje za obradu, pohranjivanje ili dijeljenje, jer se ustupaju na korištenje zainteresiranoj javnosti nakon objave odgovarajućeg znanstvenog rada. U skladu s time, realizacija ovog projekta ne uključuje prikupljanje niti pohranjivanje osobnih podataka te Opća uredba o zaštiti podataka (GDPR) nije primijenjiva na ovaj projekt. Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela.</p>
	<p>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?</p>	<p>Dobiveni podaci bit će pohranjeni na osobnim ili pristupnim računalima svakog člana projektnog tima te vanjskom čvrstom disku grupe. Pristup svakom od računala zaštićen je pristupnim podacima za prijavu (korisničko ime i lozinka), a pristup vanjskom disku ograničen je samo na osobe uključene u projekt. Rizik kvara hardvera umanjen je redovitim sigurnosnim kopiranjem podataka na dodatne vanjske čvrste diskove. Projektom nije predviđeno generiranje osjetljivih podatke pa nisu planirane dodatne mjere za takvo pohranjivanje.</p>

	<p>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?</p>	<p>Prema internim pravilnicima matične ustanove, intelektualno vlasništvo nastalo ovim projektom pripada Institutu Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska. Obzirom na naše dosadašnje iskustvo u realizaciji sličnih projekata bliskih predloženim temama te činjenicu da se radi o fundamentalnom projektu računalno/eksperimentalne prirode, ne očekujemo pojavljivanje elemenata zaštite autorskog prava i drugih oblika intelektualnog vlasništva. No, u slučaju da se za to ukaže prilika, Ured za intelektualno vlasništvo IRB-a obradit će sve pronalaskeske koji generiraju intelektualno vlasništvo ili su relevantni za komercijalnu primjenu. Institut Ruđer Bošković neprofitna je organizacija, a njegov Ured za intelektualno vlasništvo usmjeren je na pitanja vezana uz prijenos tehnologije, koja članovima projektnog tima IRB-u pruža podršku vezanu uz ove aspekte projekta.</p>
<p>3. Pohrana i čuvanje podataka</p>		
	<p>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>)?</p>	<p>Svi digitalni podaci pohranjuju su te redovito sigurnosno kopiraju na računalima svakog člana projektnog tima, pri čemu je svako osobno ili pristupno računalo zaštićeno pristupnim podacima (korisničko ime i lozinka). Osim toga, svi digitalni podaci pohranjuju se automatki skriptama 1-2 puta mjesečno na vanjski čvrsti disk grupe, čime se osigurava trajnost te omogućuje ponovno korištenje dobivenih primarnih podataka. Ovisno o tijeku napretka projekta, kapacitet vanjskog čvrstog diska će se po potrebi proširiti. Količina očekivanih podataka navedena je u poglavlju 1. ovog dokumenta.</p>
	<p>Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?</p>	<p>Podatke ćemo čuvati trajno. Tablične podatke čuvat ćemo u CSV obliku, a tekstualne u DOCX (Office Open XML) te PDF obliku.</p>
<p>4. Dijeljenje i ponovna uporaba podataka</p>		
	<p>Kako i gdje će se podaci dijeliti? Na kojem repozitoriju planirate dijeliti podatke? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?</p>	<p>Podaci će biti dostupni zainteresiranoj javnosti nakon objavljivanja odgovarajućeg znanstvenog rada online putem na odgovarajućoj web stranici izdavača predmetnog časopisa, što predstavlja direktnu poveznicu za zainteresirane strane i potencijalne korisnike. Institut Ruđer Bošković ima vlastiti javno dostupni repozitorij otvorenih istraživačkih podataka za svoje zaposlenike pod nazivom FULIR Data koji je pod stalnim održavanjem od strane zaposlenika Centra za znanstvene informacije IRB-a te dostupan putem web-adrese https://data.fulir.irb.hr.</p> <p>U slučaju potrebe, generirane metapodatke objavljenih skupova podataka bit će moguće deponirati i u sklopu globalnih akademskih online web-sučelja, primjerice poput OpenAIRE portala (https://www.openaire.eu).</p>
	<p>Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.</p>	<p>Dobiveni podaci bit će javno dostupni u trenutku objavljivanja odgovarajućeg znanstvenog rada. Obzirom na svu dosadašnju praksu i iskustvo u objavljivanju znanstvenih radova u predmetnom području, ne očekujemo da će generirani podaci zahtijevati bilo kakva dodatna ograničenja na njihovo korištenje.</p>

	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Potvrđujemo da je digitalni repozitorij u skladu s <i>FAIR</i> načelima.
	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).	Potvrđujemo da je digitalni repozitorij održavan od strane neprofitne organizacije, Instituta Ruđer Bošković u Zagrebu.