

Plan upravljanja istraživačkim podacima

Đaković, Marijana

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2022**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:217:137860>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-07-16**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



Plan upravljanja istraživačkim podacima

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Marijana Đaković
	Matična organizacija	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu
	Naziv projekta	IP-2019-04-1242, Od oblika do funkcije: Fleksibilni kristalni materijali s kontroliranim mehaničkim odzivom
	Upravitelj podacima	Marijana Đaković, e-mail: mdjakovic@chem.pmf.hr
1. Prikupljanje podataka i dokumentacija		
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	<p>Podaci prikupljeni istraživanjem mogu se svrstati u nekoliko kategorija:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. rezultati pretrage kristalografske baze podataka 2. parametri reakcija za sintezu produkata (popis reaktanata, omjeri reaktanata, reakcijski uvjeti, itd.) 3. opća i spektroskopska karakterizacija priređenih spojeva 4. strukturna karakterizacija priređenih spojeva 5. ispitivanje, evaluacija i kvantifikacija mehaničkih svojstava kristala priređenih spojeva 6. rezultati dobiveni molekulskim modeliranjem <p>Podaci u kategoriji 1 bit će dokumentirani u tekstualne datoteke (cif format). Podaci u kategoriji 1 zauzet će do 1 MB po strukturi.</p> <p>Podaci u kategoriji 2 bit će dokumentirani u laboratorijskim dnevnicima (tekstualne/pdf datoteke).</p> <p>Svi podaci dobivenim u kategorijama 3, 4 i 5 bit će pohranjeni u digitalnom obliku u formatu dobivenom izravno s instrumenta, odnosno konvertirani u odgovarajući tekstualni format.</p> <p>Spektroskopski podaci (sp, ASC), podaci difrakcije rendgenskog zračenja na polikristalnom uzorku (rd, xy, xrdml, csv, dat), difrakcije rendgenskog zračenja u monokristalom uzorku (rodhypix, hypix, hkl, ins, res, cif) bit će pohranjeni u navedenim formatima.</p> <p>Podaci difrakcije u monokristalu koji će biti snimani na sinkrotronima bit će pohranjeni u formatima specifičnim za pojedini <i>beamline</i> (načelno: cbf, h5, esperanto, cif formati, ali i dr.).</p> <p>Podaci u kategoriji 4 pohranjivat će se u formatima: TG/DTA (tad, txt, csv, dat, ascii), DSC (ngb-sdg, txt, csv, dat, ascii).</p> <p>Podaci u kategoriji 5 bit će pohranjeni u sljedećim formatima: za slike (bmp, jpg, jpeg, tiff, png, gif), odnosno za videe (wmv, mp4, avi, gif, mov, mpeg, mpg, mkv), te za podatke mikroskopije atomskih sila (spm, txt) te će se po potrebi konvertirati u druge formate.</p>

		<p>Za kategorije 3. i 4. bit će potrebno oko 20 MB prostora po kategoriji za sve podatke vezane uz opću karakterizaciju uzorka, 1-2 GB prostora za podatke vezane uz difrakciju rentgenskog zračenja u jediničnom kristalu prikupljene na institucijskom difraktometru, te 5-50 GB prostora po uzorku za podatke prikupljene na sinkrotronima.</p> <p>Procjenjujemo da će za kategoriju 5 biti potrebno do 100 MB prostora po uzorku kristala za ispitivanje, evaluaciju i kvantifikaciju, a do 1 GB po uzorku kristala za AFM mjerenja.</p> <p>Podaci dobiveni molekulskim modeliranjem (kategorija 6) obuhvatit će ulazne i izlazne tekstualne datoteke za program Gaussian com, log, fchk, cube. Za program CRYSTAL17 pohranit će se tekstualne datoteke (d12, out, gui, f98, hessopt, optinfo, elainfo, SCFLOG, xyz, runlog), odnosno binarne datoteke (f20, f9). Tekstualne datoteke bit će vizualizirane adekvatnim grafičkim programima (GaussView, Chem3D, VESTA) te konvertirane u grafičku datoteku (tiff, png ili jpeg). Obrađeni računalni podaci snimit će se u izvornim formatima datoteka pomoću programa Excel, PowerPoint i Word. Za ovu kategoriju očekuje se da zauzme oko 200 GB.</p>
	<p>Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)</p>	<p>Opažanja tijekom izvođenja kemijskih reakcija, odnosno kristalizacija upisuju se ručno u laboratorijske dnevničke pa skeniraju, ili se upisuju direktno u elektroničke datoteke.</p> <p>Podaci IR spektroskopskih mjerenja prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnom programu <i>Perkin Elmer Spectrum IR</i>.</p> <p>Difrakcijski podaci prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnim programima (<i>Data Collector</i>, <i>CrysAlisPRO</i>). Sinkrotronski podaci konvertiraju se u odgovarajući format za obradu podataka programom <i>CrysAlisPRO</i>.</p> <p>Podaci termičke analize prikupljaju se s instrumenata koji ih generira i obrađuje u matičnim Programima: <i>Star/Star Evaluation software</i>, <i>TA60</i> za TG/DTA, te DSC analize u programu <i>Proteus 80</i>.</p> <p>Podaci vezani uz ispitivanje, evaluaciju i kvantifikaciju mehaničkih svojstava, a generirani korištenjem mikroskopa <i>Dino-Lite Edge Digital Microscope</i> (model AM4815ZT ili model AM7915MZTL), prikupljaju se softverom <i>DinoCapture</i> te se u istom softveru i obrađuju. Sa svakom mikroskopskom slikom pohranit će se i nekoliko metapodataka (povećanje, rezolucija) čime se omogućuje lakša usporedba svih prikupljenih podataka unutar radne grupe te ponavljanje mjerenja.</p> <p>Podaci AFM mjerenja prikupljaju se pomoću programa <i>NanoScope software</i> te se obrađuju u programu <i>NanoScope Analysis</i>.</p> <p>Rezultati molekulskog modeliranja bit će generirani na računalnim serverima u sklopu matične institucije i/ili na računalnom kasteru <i>Isabella</i> u matičnim programima, npr. Gaussian16, CRYSTAL17, itd. Numerički podaci bit će ekstrahirani iz programa za vizualizaciju ili pomoću skripti koje će se izvesti u operativnom sustavu <i>Linux</i> te naknadno obrađeni u programu <i>Excel</i>.</p> <p>Podaci će biti zapisani u sustavno imenovane datoteke i mape koji će u imenu sadržavati jedinstvenu oznaku spoja, kraticu korištene metode te eksperimentalne/računske uvjete.</p>

		Reducirani skupovi podataka bit će pohranjeni na središnjem laboratorijskom računalu te na stolnim računalima istraživača. Konačni rezultati bit će zapisani tablično ili grafički u <i>Word</i> ili <i>PowerPoint</i> datoteke.
	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)	Nakon objavljivanja publikacije, reducirani skup podataka bit će pohranjen u mapu nazvanoj prema referenci publikacije. Podaci će biti hijerarhijski grupirani u podmape nazvane prema prethodno dogovorenoj konvenciji (naziv provedene eksperimentalne ili računalne procedure, npr. IR, PXRD, TGA, itd., jedinstvena oznaka spoja i tamo gdje je potrebno dodatno objašnjenje, npr. 298 K za temperaturu na kojoj je proveden eksperiment, itd.). Dokumenti s dodatnim objašnjenjima bit će pridruženi eksperimentalnim i teorijskim podacima tamo gdje je potrebno. U mapi će biti dostupan dokument (tekstualna, Word i/ili PowerPoint datoteka) u kojem se opisuje korištena metodologija i program kojim su podaci prikupljeni, odnosno dalje analizirani, identifikacija istraživača i datum provedenog istraživanja.
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)?	Pri izvedbi ovog projekta neće se kršiti etička načela. U sklopu projekta nije planirano prikupljanje ni obrada osjetljivih osobnih podataka. Podatke (sinteze i eksperimentalna mjerenja) generirat će istraživači na projektu sukladno važećem radnom planu u skladu s postojećim licencama za rad na odgovarajućim uređajima i s odgovarajućim programima.
	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 će se pohraniti u centraliziranom sustavu u sklopu Microsoft Office 365 usluge koja je omogućena akademskim institucijama. U sklopu usluge omogućen je pristup na oblak <i>OneDrive</i> uz prijavu pomoću AAI@EduHr elektroničkog identiteta. Dodatno, stolna računala istraživača i središnja laboratorijska računala zaštićena su lozinkama.
	Kako ćete upravljati zaštitom autorskih prava i intelektualnog vlasništva? Tko će biti vlasnik podataka? Koje će se licencije	Ne očekujemo da će rezultat istraživanja dovesti do patenta. Ostali problemi intelektualnog vlasništva rješavat će se sukladno preporukama matične institucije. Rezultati istraživanja bit će objavljeni u znanstvenim časopisima, a autorska prava bit će regulirana sukladno pravilima izdavača.

	primjenjivati na podatke? Koja će se ograničenja primjenjivati na ponovnu uporabu osobnih podataka?	
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>)?	<p>Laboratorijski dnevnici čuvaju se u istraživačkom laboratoriju glavnog istraživača.</p> <p>Podaci računalnih istraživanja bit će pohranjeni na serveru s kojeg će se redovito raditi sigurnosne kopije na još jedno udaljeno stolno računalo, na vanjski disk i bit će provedena stalna sinkronizacija podataka na <i>OneDrive</i> računalni oblak (1 TB).</p> <p>Ostali elektronički podaci pohranjuju se na stolnom računalu glavnog istraživača koji na tjednoj bazi izrađuje sigurnosne kopije na vanjskom disku. Podaci će biti trenutno sinkronizirani na <i>OneDrive</i> računalnom oblaku (1 TB) te dodatno na prijenosno računalo glavnog istraživača.</p>
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	<p>Sirovi podaci će se čuvati barem 10 godina nakon isteka projekta arhivirani na serveru za pohranu podataka u laboratoriju glavnog istraživača. Reducirani skup podataka (izlazne tekstualne datoteke: <i>csv</i>, <i>txt</i>; <i>Excel</i>, <i>Word</i>, <i>PowerPoint</i> zadane formate i <i>pdf</i>) ćemo čuvati trajno u institucijskom repozitoriju.</p> <p>Rezultati istraživanja koji su dio istraživačkih projekata studenata (doktorske disertacije, diplomski radovi, radovi za rektorovu nagradu) bit će pohranjeni na nacionalnoj infrastrukturi Digitalni akademski arhivi i repozitoriji — Dabar u obliku pdf datoteka.</p>
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?	<p>Konačnu verziju skupa podataka voditelj projekta podijelit će putem institucijskog repozitorija PMF-a u nacionalnom sustavu Dabar gdje će biti pohranjene i publikacije i ostala projektna dokumentacija. Institucijski repozitorij u sustavu Dabar odabrali smo jer podržava FAIR principe: skupovima dodjeljuje trajni identifikator URN:NBN, osigurava vidljivost podataka putem OpenAIRE portala i Google Scholar a te tražilice dabar.srce.hr, a ujedno doprinosi vidljivosti i transparentnosti rada PMF-a.</p> <p>Konačni kristalografski podaci bit će pohranjeni u kristalografskoj bazi podataka, <i>Cambridge Crystallographic Database</i> (CSD) pod dodijeljenim CCDC brojem odnosno referentnim kodom.</p>
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	Podaci neophodni za bilo koju publikaciju bit će dostupni u trenutku objavljivanja. Svi neobjavljeni podaci pohranit će se u repozitoriju na 12 mjeseci od završetka projekta.

	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Koristit će se Digitalni akademski arhivi i repozitoriji – Dabar koji omogućava pohranu svih objekata u skladu s FAIR 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).	Koristit će se Digitalni akademski arhivi i repozitoriji – Dabar koji omogućava pohranu svih objekata u skladu s FAIR načelima.

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 \(unizg.hr\)](#)