

Plan upravljanja istraživačkim podacima - LIGHT-N-RING

Šakić, Davor

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:163:011384>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-06-30**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Pharmacy and Biochemistry University of Zagreb](#)



Plan upravljanja istraživačkim podacima – LIGHT-N-RING

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	Davor Šakić
	Matična organizacija	Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet
	Naziv projekta	LIGHT-N-RING Svjetlošću pogonjena funkcionalizacija nereaktivnih pozicija korištenjem oksidacijske aminacije
	Upravitelj podacima	Davor Šakić (dsakic@pharma.hr)
1.	Prikupljanje podataka i dokumentacija	
	Koje ćete podatke prikupljati, obrađivati, stvarati ili se ponovno njima koristiti? (navedite format, vrstu i opseg podataka)	Podaci prikupljeni istraživanjem mogu se svrstati u tri kategorije: 1. Kvantno-kemijski podaci (koordinate .xyz, energije i frekvencije .g98.out, površine .cube) 2. MS, NMR i EPR spektri (.jdx, JCAMP-DX, .pdf, .dsc, .dta, .fid) 3. UV/Vis, fluorescentni, Raman i IR spektri (tablice, .pdf, .jdx) Procjenjujemo da će za 1. kategoriju biti potrebno otprilike 1 TB, za 2. kategoriju 1 GB. Za 3. kategoriju će također biti potrebno 1 GB prostora.
	Kako će se podaci prikupljati, obrađivati ili stvarati? (ukratko navedite metodologiju i procese osiguranja kvalitete te načine organiziranja podataka)	Koordinate će biti spremljene u .xyz i .sdf formatu. Mapa konvencije o imenovanju: PROJEKT -> RADNI PAKET -> GRUPA (spojeva) -> SPOJ Konvencija imenovanja podmapa: QC, UVVis, NMR, EPR, MS, IR Datoteke konvencije imenovanja: COMPOUND_METHOD_CONFORMER_VERSION Dodatni opis u vidu .html i .txt 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)	Završni rukopis (prije predaje za objavljivanje); Autori i afilijacije; Bibliografija; Kratak opis podataka pohranjenih u repozitoriju, metode i procedure; Opis konvencija korištenih za generiranje podataka; Vodič kroz relevantne podatke; Verziranje; Licenca JDX, .DTA/.DSC preglednik HTML5 preglednik s JSmol/3Dmol.js

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>Neće se pojaviti nikakva etička pitanja zbog neuporabe bioloških uzoraka i neuporabe spojeva u daljnjim biološkim testiranjima.</p> <p>U ovom projektu podaci imaju isključivu upotrebu samo dok se ne dijele putem objave u znanstvenom časopisu. Nikakav dogovor o dijeljenju podatak neće biti potreban.</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>Lokalni podaci pohranjuju se na RAID-1, koji se sastoji od točne kopije (ili zrcala) skupa podataka na dva diska na samom klasteru sw.pharma.hr.</p> <p>Svaki dan lokalni podaci se pohranjuju na vanjski mrežni disk (NAS), kojem je dodijeljena zasebna IP adresa i druga pristupna šifra. Tim podacima moći će se pristupiti i u slučaju katastrofalnog zastoja u radu klastera sw.pharma.hr. Pristup lokalnim podacima ostvaruje se putem registriranih korisnika istraživačkog tima na klasteru sw.pharma.hr. Sigurnosno kopiranje podataka vršit će se jednom mjesečno na lokalni tvrdi disk, povezan s klasterom samo tijekom sigurnosnog kopiranja. Lokalni tvrdi disk bit će smješten na udaljenoj lokaciji u slučaju bilo kakve ugroze klastera (potres/požar).</p> <p>Podaci, nakon obrade i neposredno uz predaju znanstvenog članka na objavu u znanstvenom časopisu, bit će objavljeni u digitalnom repozitoriju.</p> <p>Pristup i sigurnost digitalnih repozitorija isključiva je odgovornost korištenih digitalnih repozitorija.</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>Podaci su u vlasništvu autora, prema ustanovi zaposlenja (Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet) i ustanovi koja financira istraživanje (Hrvatska zaklada za znanost - HZZZ).</p> <p>Ne postoje ograničenja za ponovnu upotrebu podataka.</p> <p>Dijeljenje potpunih podataka bit će odgođeno do objave znanstvenog članka.</p> <p>Odabrana licenca je:</p> <p>CC BY 4.0</p> <p>CC BY je otvorena licenca koja dopušta široku ponovnu upotrebu, uključujući komercijalnu upotrebu, ali zahtijeva da krajnji korisnik mora navesti odgovarajuću zaslugu ako koristi kod ili podatke. Ova licenca je Preporučena za maksimalno širenje i korištenje licenciranih materijala.</p> <p>Pod licencom CC BY krajnji korisnici slobodni su:</p> <p>Dijeljenje — kopiranje i redistribuiranje materijala u bilo kojem mediju ili formatu</p>

		<p>Prilagođavanje — transformacija i prilagodba materijal za bilo koju svrhu, čak i komercijalnu, sve dok je zaslužen autor prikladno citiran.</p> <p>Ova je licenca prihvatljiva za slobodna kulturna djela. Davatelj licence ne može opozvati ove slobode sve dok nositelj licence slijedi uvjete licence.</p> <p>Pod sljedećim uvjetima:</p> <p>Atribucija — Krajnji korisnik mora navesti odgovarajuću zaslugu, dati poveznicu na licencu i navesti ako i koje promjene su napravljene. Krajnji korisnik to može učiniti na bilo koji razuman način, ali ne na bilo koji način sugerira da davatelj licence podupire primatelja licence ili njihovu upotrebu.</p> <p>Nema dodatnih ograničenja — Krajnji korisnik ne smije primjenjivati pravne uvjete ili tehnološke mjere koje zakonski ograničiti druge da rade sve što licenca dopušta.</p>
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>Lokalno skladištenje tijekom projektne godine. Periodična objava na web stranici projekta (https://sw.pharma.hr/light-n-ring/).</p> <p>Besplatni digitalni repozitoriji: https://dabar.srce.hr i https://zenodo.org</p> <p>Za programe i skripte: https://github.com</p> <p>Sigurnosna kopija podataka je 90 dana nakon završetka projektnog razdoblja ili ako je rukopis objavljen. Najmanje jednom godišnje.</p> <p>Oporavak podataka bit će iz digitalnih repozitorija.</p>
	Koji je vaš plan čuvanja podataka? U kojim će se formatima čuvati?	<p>Koordinate svih izračunatih vrsta potrebne za rekreaciju/ponovno izračunavanje objavljenih rezultata. Korišteni formati: .xyz, .sdf, .mol. Pretraživanje kroz SMILES i kemijsku formulu. - dugoročno skladištenje</p> <p>Formatirane datoteke kontrolnih točaka s distribucijom elektrona. - kratkotrajno skladištenje</p> <p>Spektri u .csv i .jdx formatu podataka. - dugoročno skladištenje (digitalni repozitorij) https://cenapt.pharm.uic.edu/tutorials/NMRdataSharing_DATAVERSE_Protocol-6.pdf</p> <p>Korištenje besplatnih dugoročnih repozitorija. Vrijeme za pripremu podataka za dijeljenje i dugotrajno čuvanje je tokom trajanja projekta.</p>
4.	Dijeljenje i ponovna uporaba podataka	
	Kako i gdje će se podaci dijeliti? Na kojem repozitoriju planirate dijeliti	<p>Podaci će prvo biti dostupni putem datoteke s popratnim informacijama (SI) koja prati objavljeni članak. Ova SI datoteka imat će referencu i put do digitalnih repozitorija gdje će se pohraniti dodatni podaci. SI datoteke su dostupne besplatno na web stranici izdavača časopisa. Podaci se dijele s licencom CC BY 4.0. Izravan zahtjev će biti usmjereni na odgovarajuće digitalne repozitorije. Potpuni podaci bit će dostupni čim članak bude prihvaćen. To</p>

	podatke? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?	bit će povezan s DOI-jem znanstvenog članka i dodatno url-om i digitalnim identifikacijskim brojem iz digitalnog repozitorija. Ponovna uporaba podataka dopuštena je pod licencom CC BY 4.0, s referencama na autore uključenih podataka.
	Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.	
	Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i> .	Odabrani digitalni repozitoriji Zenodoo i Dabar udovoljavaju uvjetima i načelima FAIR.
	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).	Digitalni repozitorij Zenodoo održava CERN i OpenAIRE, uz podršku projekata EU, te je po svojoj definiciji neprofitna organizacija. Digitalni repozitorij Dabar održava Sveučilišni računalni centar – SRCE.

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 \(unizg.hr\)](#)