

Plan upravljanja istraživačkim podacima za projekt "Razvoj polimera s otiskom molekula za primjenu u analizi farmaceutika i tijekom naprednih postupaka obrade voda" (HRZZ-IP-2022-10-4400)

Mutavdžić Pavlović, Dragana; Tolić Čop, Kristina

Data management plan / Plan upravljanja istraživačkim podacima

Publication year / Godina izdavanja: **2023**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:149:290110>

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

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



Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Chemical Engineering and
Technology University of Zagreb](#)



PLAN UPRAVLJANJA ISTRAŽIVAČKIM PODACIMA (PUP)

Opće informacije		
	Ime i prezime predlagatelja	prof. dr. sc. Dragana Mutavdžić Pavlović
	Matična organizacija	Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije Sveučilišta u Zagrebu
	Naziv projekta	Razvoj polimera s otiskom molekula za primjenu u analizi farmaceutika i tijekom naprednih postupaka obrade voda
	Upravitelj podacima	prof. dr. sc. Dragana Mutavdžić Pavlović
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)	<p>Tijekom projekta generirat će se šest različitih vrsta neobrađenih podataka:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Podaci o radnim uvjetima razvijenih kromatografskih metoda 2. Podaci računalnih istraživanja 3. Karakterizacija novih MIP-ova 4. Podaci o radnim uvjetima ekstrakcije čvrstom fazom (SPE) korištenjem razvijenih MIP-ova 5. Podaci o radnim uvjetima AOP reaktora korištenjem razvijenih MIP-ova 6. Podaci spektrometrije masa za identifikaciju produkata transformacije <ol style="list-style-type: none"> 1. Podaci o radnim uvjetima optimiranih analitičkih metoda biti će pohranjeni kao .pdf datoteke. Očekivana veličina podataka je 2-3 MB. 2. Izlazi računalnih eksperimenata, kao što su parametri modela, ulazni podaci i rezultirajući afiniteti vezanja pohranit će se u .txt, .json i .csv datoteke na https://www.srce.unizg.hr/puh kao i u javni repozitorij Zenodo. 3. Generirati će se neobrađeni podaci o strukturi i svojstvima novih MIP-ova: FTIR spektri, Raman spektri, TEM/SEM mikrofotografije, EDXs, AFM mikrofotografije, XRDs i XPSs podaci, BET analiza, DRS i VSM spektri, DTA dijagrami, TGA dijagrami, DSC dijagrami, i elementarni sastav (C, N, O, itd.). Podaci će biti u obliku .pdf dokumenta. Očekivana veličina podataka je 200 MB. 4. Podaci o optimalnim radnim uvjetima SPE postupka bit će pohranjeni kao .pdf datoteke. Očekivana veličina podataka je 2-3 MB. 5. Fizikalno-kemijski i podaci o radnim uvjetima AOP reaktora (brzine protoka, temperatura, redoks potencijal, CNP analitika u svim strujama reaktora) bit će u obliku excel tablica (.xlsx). Učinkovitosti uklanjanja ispitivanih spojeva bit će u obliku excel tablica (popis spojeva, tip vode, postupak obrade, učinkovitosti uklanjanja i korištene analitičke metode itd.). Očekivana veličina podataka je 4 -5 MB. 6. Neobrađeni podaci predloženih transformacijskih produkata bit će u obliku popisa i pohranjeni kao datoteke s vrijednostima odvojenim zarezima (.csv). Popratna dokumentacija bit će dostavljena kao .pdf datoteka. Očekivana veličina podataka je 200 MB.
	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)	<ol style="list-style-type: none"> 1. Razvijene kromatografske metode bit će validirane određivanjem izvedbenih karakteristika (selektivnost, linearnost, istinitost, preciznost, granice detekcije i kvantifikacije), čime će se potvrditi njihova primjenjivost za analizu odabranih farmaceutika u uzorcima vode. Rezultati provjere bit će pohranjeni u .pdf formatu i bit će imenovani prema metodi kako slijedi: MIPdePharma_method_scientist_GGGGMMDD.pdf. 2. Izlazi modela računalnih eksperimenata bit će pohranjeni kao .txt, .json i .csv datoteke, tj. parametri_GGGGMMDD.json, rezultati_GGGGMMDD.csv i rezultati_GGGGMMDD.txt. 3. Rezultati će biti pohranjeni u obliku .pdf dokumenta i bit će imenovani prema MIP-u koji se koristi kako slijedi: MIPdePharma_MIP_scientist_GGGGMMDD.xlsx. 4. Dosljednost podataka procijenit će se usporedbom ponovljenih mjerenja. Konačno, cijela analitička metoda (SPE-

		<p>HPLC) bit će validirana kao što je opisano u 1. Rezultati validacije bit će pohranjeni u .pdf formatu i bit će imenovani prema SPE-HPLC metodi kako slijedi: MIPdePharma_SPE_HPLCmethod_scientist_GGGGMMDD.pdf.</p> <p>5. Dosljednost podataka procijenit će se usporedbom ponovljenih mjerenja. Kvaliteta analitičkih podataka bit će osigurana analizom kontrolnih uzoraka i slijepog uzorka uz svaku seriju uzoraka. Rezultati će biti pohranjeni u obliku tablica (.xlsx) i bit će imenovani prema postupku obrade kako slijedi: MIPdePharma_treatmentproces_scientist_GGGGMMDD.xlsx.</p> <p>6. Identifikacija transformacijskih produkata bit će zapisana u standardu Kraljevskog kemijskog društva u .pdf datotekama i bit će imenovana prema broju transformacijskog produkta kako slijedi: MIPdePharma_TP-xx_scientist_GGGGMMDD.pdf</p>
	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.)	<p>Metapodaci će opisati eksperimente, kako su podaci prikupljeni, gdje i kada. Pravila imenovanja i ključne riječi bit će u skladu s definicijama pojmova koji se odnose na kemijsku analizu i spektrometriju masa (IUPAC preporuke 2013., http://dx.doi.org/10.1351/PAC-REC-06-04-06).</p> <p>Dokumenti i mape će biti imenovani prema konvenciji imenovanja istraživačkih podataka koju će sudionici projekta dogovoriti odmah na početku provedbe projekta, a prema preporukama danim u priručniku Istraživački podaci - što s njima?: Priručnik o upravljanju istraživačkim podacima (https://www.srce.unizg.hr/files/srce/docs/suradnja/RDA/istrazivacki-podaci-prirucnik_20200924_1.pdf).</p> <p>Konvencija imenovanja bit će opisana u datoteci <i>ReadMe</i>.</p>
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)?	Provedbom ovog projekta neće se 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 će se obrađivati i njima upravljati u zaštićenom okruženju.
	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?	Rezultati projekta bit će objavljeni u znanstvenim časopisima pod licencom otvorenog pristupa <i>Creative Commons Attribution 4.0 International</i> (CC BY 4.0). S obzirom da nam je cilj omogućiti što veću dostupnost podataka, dio podataka objavit ćemo i pod licencom <i>Creative Commons 1.0 Universal</i> (CC0 1.0).
3.	Pohrana i čuvanje podataka	

<p>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)?</p>	<p>Podaci će biti pohranjeni na tri mjesta. Za pohranu podataka koristit će se Puh — Pohrana i upravljanje podacima (https://www.srce.unizg.hr/puh), usluga Srca. Na ovaj način osigurat će se pouzdana pohrana podataka (svakodnevna automatizirana izrada sigurnosne kopije podataka) kao i razmjena podataka između članova istraživačkog tima projekta. Osim toga, glavni istraživač će mjesečno praviti sigurnosne kopije s računala na vanjski disk. Također, svaki će istraživač biti odgovoran za čuvanje vlastitih sirovih podataka na vlastitom računalu i izradu njihove sigurnosne kopije na vanjskom disku.</p>
<p>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)?</p>	<p>Na kraju projekta podaci će biti pohranjeni u repozitorij Zenodo (https://zenodo.org/). Gdje je to moguće, pohranit ćemo datoteke u otvorenim arhivskim formatima, na primjer, word dokumenti će se pretvoriti u PDF, excel datoteke će se pretvoriti u CSV format. Gdje je prikladno, također ćemo uključiti informacije o korištenom softveru i broju njegove verzije. Očekivana količina podataka je 3 – 4 GB.</p>
<p>4. Dijeljenje i ponovna uporaba podataka</p>	
<p>Kako i gdje će se podaci dijeliti? Koji repozitorij će se koristiti za dijeljenje podataka? Kako će potencijalni korisnici doznati za podatke?</p>	<p>Konačnu verziju skupa podataka glavni će istraživač podijeliti putem institucionalnog repozitorija Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije uspostavljenog u nacionalnom sustavu Dabar (https://repozitorij.fkit.unizg.hr/en) gdje će se pohraniti objavljene publikacije i ostala projektna dokumentacija. Osim Dabara, konačni skup podataka i projektna dokumentacija dijelit će se i putem Zenoda. Zenodo je odabran zbog međunarodnih istraživača uključenih u projekt MIPdePharma. Podaci će biti objavljeni pod licencom CC0. I Dabar i Zenodo osiguravaju vidljivost podataka putem OpenAIRE portala.</p>
<p>Ako postoje podaci koji se ne smiju dijeliti (prijavitelji vezani zakonskim, etičkim, autorskim pravila, povjerljivošću i sl.), pojasnite razloge ograničenja.</p>	<p>Podaci koji će se koristiti za objavu bit će dostupni u trenutku objave. Svi neobjavljeni podaci bit će pohranjeni u repozitoriju 24 mjeseca od završetka projekta.</p>
<p>Potvrdite da ćete se koristiti digitalnim repozitorijem koji je u skladu s načelima <i>FAIR-a</i>.</p>	<p>Oba odabrana digitalna repozitorija, Dabar i Zenodo, podržavaju FAIR principe. (Dabar: https://dabar.srce.hr/en/dabar, Zenodo: https://about.zenodo.org/principles/).</p>
<p>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).</p>	<p>Dabra održava SRCE – Računski centar Sveučilišta u Zagrebu (https://dabar.srce.hr/en/dabar), javna ustanova. Zenodo održava CERN (https://about.zenodo.org/infrastructure/).</p>