

NTK

50°6'14.083"N, 14°23'26.365"E
Národní technická knihovna
National Library of Technology



**Czech Academic and Research
Discovery Services
CARDS**

Koncept Národního metadatového adresáře a související služby

Šimek, Černoahlávková (petra.cernoahlavkova@techlib.cz)

Kick-off EOSC-CZ

12. 4. 2023



Spolufinancováno
Evropskou unií

**MS
MT**
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



- Základní pojmy
- Odborné metodické pracoviště pro metadatovou podporu
- Národní centrum pro perzistentní identifikátory

- NMA - David Antoš

- PNG a centrální vyhledávač – Jan Pokorný

NTK

50°6'14.083"N, 14°23'26.365"E
Národní technická knihovna
National Library of Technology



Czech Academic and Research
Discovery Services
CARDS

OS II
Tematické/oborové
rezpozitáře

OS I
Národní rezpozitářová
platforma



Spolufinancováno
Evropskou unií



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



- Informační systém, který umožňuje vkládání, bezpečné uložení, identifikaci, správu, vyhledávání a přístup k digitálním objektům (digitálnímu obsahu)
- Digitální obsah – z praktických účelů dělíme na dokumenty a data → dokumentové a datové repozitáře
- Vkládání – ruční nebo z jiného systému
- Bezpečné uložení – jistota, že uložený obsah nebude degradován
- Identifikace – objekt dostane perzistentní identifikátor / url, které platí „navěky“
- Správa – přístupová práva, možnost smazat objekt (ve výjimečných případech). Digitální objekt může být privátní (embargo) s tím, že v budoucnosti může dojít k jeho zveřejnění
- Přístup – se znalostí perzistentního identifikátoru/url lze objekt kdykoliv získat

Repozitář

Digitální repozitář Univerzity Karlovy

🏠 Digitální repozitář UK / 3. lékařská fakulta / Kvalifikační práce / Zobrazit záznam

Těžké komunitní pneumonie: charakteristika nemocných a spolehlivost skórovacích systémů

Severe community-acquired pneumonia: Patient characteristics and reliability of the scoring systems

dizertační práce (OBHÁJENO)



Zobrazit/otevřít

- 📄 Text práce (1.193Mb)
- 📄 Abstrakt (100.2Kb)
- 📄 Abstrakt (anglicky) (86.88Kb)
- 📄 Autoreferát (365.1Kb)
- 📄 Posudek vedoucího (1.089Mb)

Autor

Bartoš, Hynek

Vedoucí práce

Džupová, Olga

Oponent práce

Kieslichová, Eva
Rožnovský, Luděk

Fakulta / součást

3. lékařská fakulta

Obor

Preventivní medicína a epidemiologie

Katedra / ústav / klinika

Klinika infekčních nemocí 3. LF UK a FNB

Datum obhajoby

zenodo

Search

Upload Communities

Log in Sign up

June 1, 2020

Dataset Open Access

COVID 19 SARS COV2 targets and small molecule data including insilico analysis

Girinath G. Pillai; Ambili Unni; Vijay Kamath

Welcome to the repository for the COVID-19 research data.

Corresponding Author: Girinath G. Pillai and few experts

Co-authors: Team of experts, scholars and students

To join dedicated Slack Discussion : https://join.slack.com/t/nyroindia/shared_invite/zt-eyes216c-QZzEK_G5tNKjebvV21PA

We commit to conduct research analysis and all the findings and data will be open and anyone can use or help us improve the data.

The parameters for checkpoints are:

A) Pharmacophore Modelling - i) generate pharmacophore reference maps from XRay crystal geometry, ii) Generate all possible conformers of the dataset molecules for screening.

B) Virtual Screening - i) highest docking score within the dataset, ii) lowest clashes (interligand or intraligand), iii) interactions with key amino acid residues based on literature reports, PROSITE server and pocket finding algorithm like DoGSite or CASTp iv) optimal LE values and v) satisfactory interactions between small molecules and amino acids.

C) Selection - i) binding affinity range predictions, lowest among the dataset, ii) free binding energy calculation considering desolvation terms, lowest among the dataset and iii) torsion analysis - coverage of bonds in CSD database.

D) Optimization - i) pharmacokinetic properties to be generated from selected hits and an optimal balance of properties to be considered for candidate selection criteria.

E) For novel lead molecules - i) chemical space exploration on building blocks could be carried out, ii) on-demand synthesis and procurement.

If you prefer you could always cite <https://github.com/giribio/COVID19>

Feel free to create any issues in Github or feel free to contact me via Slack for any queries.

Thanks and let us fight against COVID-19 in all possible ways.

Preview

COVID19-v0.11.zip

- giribio-COVID19-dc40053
 - .github
 - ISSUE_TEMPLATE
 - bug_report.md 834 Bytes
 - feature_request.md 595 Bytes
 - LICENSE 7.0 kB
 - MLmodel
 - README.md 473 Bytes
 - README.md 1.8 kB
 - _config.yml 28 Bytes
 - dockrepurp
 - README.md 776 Bytes
 - molecules
 - README.md 804 Bytes
 - proteins
 - README.md 1.7 kB
 - bindingAA_6LU7.txt 527 Bytes

907

views

15

downloads

[See more details...](#)

Available in

GitHub

Indexed in

OpenAIRE

Publication date:

June 1, 2020

DOI:

DOI [10.5281/zenodo.3872006](https://doi.org/10.5281/zenodo.3872006)

Keyword(s):

github covid corona insilico cadd
drug discovery

Related identifiers:

Supplement to

<https://github.com/giribio/COVID19/tree/v0.11>

Communities:

Coronavirus Disease Research
Community - COVID-19
Zenodo

License (for files):

[Other \(Open\)](#)

Versions

Version v0.11 Jun 1, 2020
[10.5281/zenodo.3872006](https://doi.org/10.5281/zenodo.3872006)

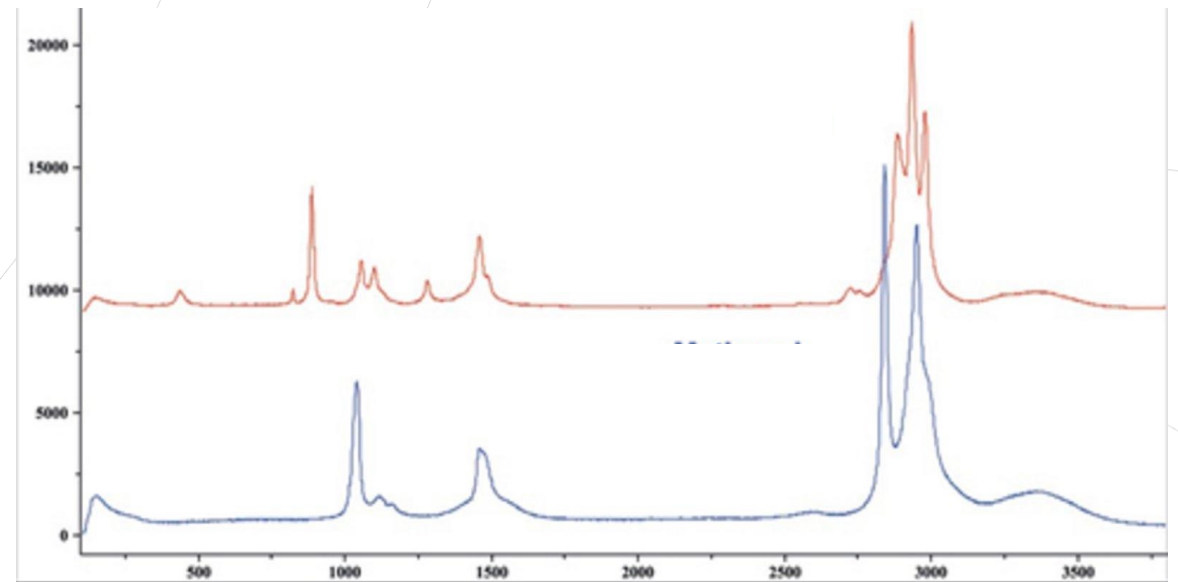
Cite all versions? You can cite all versions by using the DOI [10.5281/zenodo.3872005](https://doi.org/10.5281/zenodo.3872005). This DOI represents all versions, and will always resolve to the latest one. [Read more.](#)

Share

Cite as

Jak vyhledávat v repozitáři?

- Dokumentové repozitáře – poměrně jednoduché, nástroje pro indexaci textu máme
- Datové repozitáře – jak vyhledat následující datový objekt?
- Řešení: extra metadata, automaticky extrahované nebo vložené člověkem



Source: <https://www.horiba.com/>

Repozitář

Digitální repozitář Univerzity Karlovy

🏠 Digitální repozitář UK / 3. lékařská fakulta / Kvalifikační práce / Zobrazit záznam

Těžké komunitní pneumonie: charakteristika nemocných a spolehlivost skórovacích systémů

Severe community-acquired pneumonia: Patient characteristics and reliability of the scoring systems

dizertační práce (OBHÁJENO)



Autor

Bartoš, Hynek

Vedoucí práce

Džupová, Olga

Oponent práce

Kieslichová, Eva
Rožnovský, Luděk

Fakulta / součást

3. lékařská fakulta

Obor

Preventivní medicína a epidemiologie

Katedra / ústav / klinika

Klinika infekčních nemocí 3. LF UK a FNB

Datum obhajoby

Zobrazit/otevřít

📄 Text práce (1.193Mb)

📄 Abstrakt (100.2Kb)

📄 Abstrakt (anglicky) (86.88Kb)

📄 Autoreferát (365.1Kb)

📄 Posudek vedoucího (1.089Mb)

metadata

NOAA Global Surface Temperature Dataset, Version 4.0

NOAAGlobalTemp v4.0



Annual Mean
Anomaly Time
Series and Trends
for 1995-2014:
Version 4.0.0 versus
Version 3.5.4

The NOAA Global Surface Temperature Dataset (NOAAGlobalTemp) is derived from two independent analyses: the Extended Reconstructed Sea Surface Temperature (ERSST) analysis and the land surface temperature (LST) analysis using the Global Historical Climatology Network (GHCN) temperature database. The data is merged into a monthly global surface temperature dataset dating back from 1880 to the present, updated monthly, in gridded (5 degree x 5 degree) and time series formats. This data set is used in climate monitoring assessments of near-surface temperatures on a global scale. The

[Show more...](#)

Dataset Citation

Dataset Identifiers

ISO 19115-2 Metadata

[Access](#) [Time & Location](#) [Documentation](#) [Description](#) [Credit](#) [Keywords](#) [Constraints](#) [Lineage](#)

Time Period	1871-01 to Present (time interval: 1-month)
Spatial Bounding Box Coordinates	West: -180.0 East: 180.0 South: -90.0 North: 90.0
Spatial Coverage Map	

Metadatový model

- Definuje, jaká metadata mají být spojena s digitálním objektem (třeba autor, čas, geografická lokace, typ přístroje, na kterém byla data naměřena)
- Definuje, která metadata jsou povinná a jakých mohou nabývat hodnot
- Umožňuje jejich validaci
- Zaručuje vyhledatelnost a strojovou zpracovatelnost záznamů



NOAA Global Surface Temperature Dataset, Version 4.0

NOAAGlobalTemp v4.0



Annual Mean
Anomaly Time
Series and Trends
for 1995-2014:
Version 4.0.0 versus
Version 3.5.4

The NOAA Global Surface Temperature Dataset (NOAAGlobalTemp) is derived from two independent analyses: the Extended Reconstructed Sea Surface Temperature (ERSST) analysis and the land surface temperature (LST) analysis using the Global Historical Climatology Network (GHCN) temperature database. The data is merged into a monthly global surface temperature dataset dating back from 1880 to the present, updated monthly, in gridded (5 degree x 5 degree) and time series formats. This data set is used in climate monitoring assessments of near-surface temperatures on a global scale. The

[Show more...](#)

Dataset Citation
Dataset Identifiers
ISO 19115-2 Metadata

[Access](#) [Time & Location](#) [Documentation](#) [Description](#) [Credit](#) [Keywords](#) [Constraints](#) [Lineage](#)

Time Period	1871-01 to Present (time interval: 1-month)
Spatial Bounding Box Coordinates	West: -180.0 East: 180.0 South: -90.0 North: 90.0
Spatial Coverage Map	

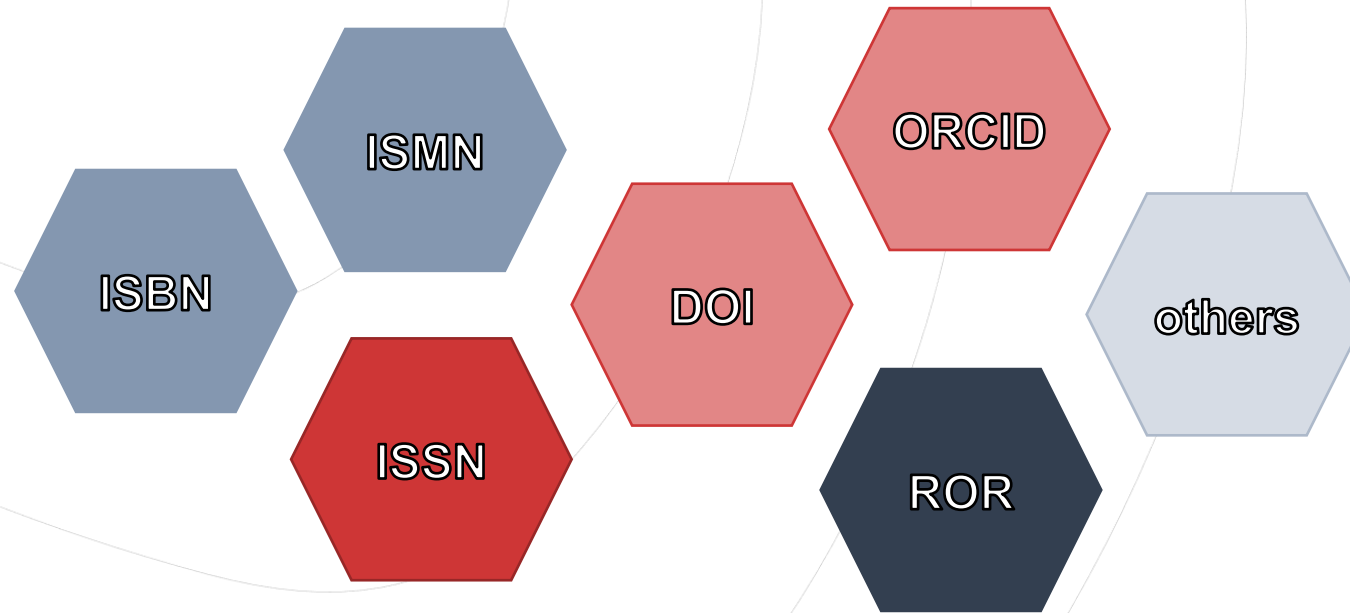
- Odborné metodické pracoviště pro metadatovou podporu
- Národní centrum pro perzistentní identifikátory
 - ORCID, DOI, ISSN, ROR
- PNG a centrální vyhledávač

- Poskytuje metodickou podporu pro datové repozitáře v ČR
- Definuje základní metadatový model pro popis výzkumných dat
 - Nutný pro napojení repozitáře do NMA a dalších repozitářů
 - Vychází z existujících mezinárodních standardů
- Spolupracuje s vědními obory a zaručuje, že metadatové modely v datových repozitářích jsou vzájemně konzistentní, je zajištěna interoperabilita a kompatibilita s FAIR principy
- Poskytuje testování, konzultace, podporu při implementaci metadatových modelů v konkrétních repozitářích
- Odpovídá za pilotní provoz a další rozvoj Národního katalogu repozitářů

Národní katalog repozitářů

- registr poskytující přehled o existujících repozitářích a jejich parametrech
 - evidence metadatových schémat, slovníků a ontologií v repozitářích
- znalostní báze, dokumentace k repozitářům
- adresář zdrojů pro NMA
 - adresář/dtb relevantních zdrojů, ze kterých by se měla indexovat metadata do NMA
- podklad pro práci metadatové podpory při CARDS
- technické informace k možnostem harvestování

Národní centrum pro perzistentní identifikátory: 2023



- Metodická podpora práce s PIDs (NTK)
- Finanční podpora na členské poplatky ORCID a DataCite (NTK)
- Technická podpora (e-Infra)

Národní centrum pro perzistentní identifikátory

- Národní centrum ORCID
 - 21 institucí
 - Začátek 1. 6. 2023
 - orcid@techlib.cz
 - Pokud vaše instituce není zapojena a ráda by, kontaktujte nás
- Národní centrum DOI (DataCite)
 - 7 institucí
 - Začátek 1. 6. 2023
 - V rámci členství v DataCite lze přidělovat kromě DOI i IGSN (International Generic Sample Number)
 - doi@techlib.cz
 - Pokud vaše instituce není zapojena a ráda by, kontaktujte nás
- ROR
 - Většina českých institucí by jej měla již mít, včetně poskytovatelů financí
- Časem i další identifikátory