

Normes & Standards dans le domaine scientifique lié à la chimie

mercredi 25 septembre 2024 16:10

Normes de données et d'interopérabilité :

1. FAIR Data Principles :
 - a. Findable (Trouvable)
 - b. Accessible
 - c. Interoperable (Interopérable)
 - d. Reusable (Réutilisable)
- Ce sont des principes pour la gestion et la publication de données dans des domaines scientifiques, garantissant que les données peuvent être facilement trouvées, partagées et réutilisées.

Open Science Framework (OSF) :

- Un standard pour organiser, stocker et partager des recherches scientifiques de manière transparente, garantissant l'accessibilité des données.

CDISC (Clinical Data Interchange Standards Consortium)

- Utilisé principalement dans le domaine biomédical, CDISC définit les standards pour l'interchange de données cliniques entre chercheurs, laboratoires et organisations.

HDF5 (Hierarchical Data Format) :

- Un format de fichier pour stocker des données scientifiques volumineuses et complexes, souvent utilisé dans la recherche en physique, chimie, et biologie computationnelle.

Sources :

Voici les sources avec les liens complets :

1. Normes de données et d'interopérabilité :

- FAIR Data Principles : <https://www.go-fair.org/fair-principles/>
- Open Science Framework (OSF) : <https://osf.io/>
- CDISC (Clinical Data Interchange Standards Consortium) : <https://www.cdisc.org/>
- HDF5 (Hierarchical Data Format) : <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>

2. Normes de développement de logiciels scientifiques :

- IEEE Standards for Software Development : <https://standards.ieee.org/>
- ISO/IEC 12207 : <https://www.iso.org/standard/63712.html>

3. Normes de documentation et de publication :

- reStructuredText (reST) : <https://docutils.sourceforge.io/rst.html>
- Markdown : <https://daringfireball.net/projects/markdown/>
- JATS (Journal Article Tag Suite) : <https://jats.nlm.nih.gov/>

4. Normes pour la modélisation et la simulation :

- SBML (Systems Biology Markup Language) : <http://sbml.org/>
- CellML : <https://www.cellml.org/>
- BPMN (Business Process Model and Notation) : <https://www.omg.org/spec/BPMN/2.0/>

5. Normes en calcul intensif et superordinateurs :

- MPI (Message Passing Interface) : <https://www.mpi-forum.org/>
- OpenMP (Open Multi-Processing) : <https://www.openmp.org/>

6. Normes de reproductibilité scientifique :

- DataCite : <https://datacite.org/>

Nomenclature IUPAC :

La nomenclature IUPAC fournit un ensemble de règles pour nommer les composés chimiques de manière systématique. Elle est utilisée pour garantir que chaque composé a un nom unique et reconnu internationalement.

SMILES :

Un format de notation qui permet de représenter une structure moléculaire sous forme de chaîne de caractères. SMILES est largement utilisé pour les bases de données chimiques et les logiciels de modélisation.

Exemple : La molécule d'éthanol : CC(O)C

InChI (International Chemical Identifier) :

Un identifiant textuel normalisé qui permet de représenter des structures chimiques de manière unique. InChI est conçu pour améliorer l'interopérabilité entre différentes bases de données.

CAS Registry Number (Chemical Abstracts Service) :

Un numéro unique attribué à chaque substance chimique enregistrée dans la base de données de la CAS. Ces numéros sont souvent utilisés pour identifier les substances dans la littérature scientifique et les bases de données.

Exemple : Le numéro CAS de l'éthanol est 64-17-5

Uniquement utilisation dans le cadre de cour académique ou de recherches.

Si une notion d'argent/ de vente apparaît, alors elle sort du cadre d'utilisation académique et est soumise aux normes pour les conditions commerciales.

De nombreux outils open source sont disponibles sous des licences qui permettent une utilisation académique sans frais, mais certaines peuvent restreindre l'utilisation commerciale. Assure-toi de lire attentivement les termes de la licence.

Il est conseillé de citer les outils utilisés, même open source pour garantir une transparence.