

ENS-Lyon <elodie [point] goy [arobase] ens-lyon.fr>

<elodie [point] gov [arobase] ens-lvon.fr>

Table des matières

Introduction Pourquoi Chimithèque Concepts Ce que Chimithèque est Ce que Chimithèque n'est pas Aspects techniques Limites connues **Documentation**

Ouelques notes Je ne sais pas où les mettre. :)

Introduction

Pour conclure

Bienvenu sur le site du projet "Chimithèque", une application de gestion de produits chimiques développée par l'ENS-Lyon

Cette documentation est écrite en Docbook en Français et Anglais. Nous avons utilisé des applications et systèmes Open Source comme Debian, Linux Mint, Inkscape et VLC pour le fun!:)

Pourquoi Chimithèque

Nous avions besoin d'une méthode globale pour gérer les produits chimiques des différents départements et laboratoires de l'ENS pour:

- · améliorer la sécurité avec un inventaire précis et global des produits chimiques stockés dans toutes l'école
- réduire le gaspillage en encourageant les gestionnaires de produits à rechercher dans Chimithèque si un produit peut être emprunter à un autre département avant d'en commander un nouveau

Concepts

"Chimithèque" utilise les notions suivantes:

- organisation (typiquement l'école, l'université)
- entité (un département, un laboratoire...): l'organisation a une ou plusieurs entités
- entrepôt (un réfrigérateur, une étagère...): une entité a un ou plusieurs entrepôts
- utilisateur (un enseignant, un étudiant...): un utilisateur appartient a une ou plusieurs entités et possède des droits dans l'application fiche produit: carte d'identité du produit (contient le numéro CAS, les noms, formules chimiques, phrases de risque...), la fiche produit
- est saisie une et une seule fois dans l'application par un utilisateur possédant les droits requis. Les fiches produits sont visibles par tous les utilisateurs. Elles peuvent être modifiées mais les modifications sont conservées
- fiche stockage: association entre une fiche produit et un entrepôt. Pour stocker un produit dans une de ses entités, un utilisateur doit saisir une fiche stockage contenant des informations comme le volume ou le poids à stocker, l'entrepôt, le nombre d'éléments et bien sur le nom du produit. Comme les fiches produit, les fiches stockage peuvent être modifiées et les modifications sont conservées.

Ce que Chimithèque est

- une application pour accéder aux informations de sécurité de vos produits chimiques
- une application pour gérer les stocks the vos produits chimiques
 une application pour rechercher des produits chimiques avec différents critères

Ce que Chimithèque n'est pas

- une base de données de tous les produits chimiques existants dans le monde: l'application est fournie avec X fiches produit (pour X voir sur la page principale) et ces fiches peuvent être échangées grâce à une fonctionnalité d'import/export
- · une application immédiatement connectable a des appareils comme de scanners à code barre ou d'autres applications

Aspects techniques

"Chimithèque" est développée en Python avec le framework web2py. Il s'installe sous Linux mais devrait être installable sous Windows (non couvert par cette documentation). Une base de données PostGreSQL/MySQL/SQLite (d'autres bases de données sont possibles mais n'ont pas été testées) et un serveur SMTP sont requis. L'application est disponible en anglais et en français mais peut être traduite dans n'importe qu'elle autre langue.

Limites connues

 il est actuellement impossible de créer des entités hiérarchiques. Cette fonctionnalité nécessiterait de repenser la politique de permissions

Documentation

Documentation d'installation

Cette documentation traite de l'installation sous Linux (Debian latest stable) avec Apache2



Note

N'hésitez pas à nous faire par de vos installations sous d'autres plateformes comme par exemple CentOS

Versions de Chimithèque

Sur la page de téléchargement vous trouverez différents fichiers:

- des fichiers chimitheque_{version}_{date}.tar.gz . Ce sont les différentes versions de Chimithèque.
- un fichier chimitheque_stable.tar.gz, qui est juste un lien symbolique vers la dernière version stable.
- un fichier chimitheque_testing.tar.gz . Ce fichier est la version la plus récente de Chimithèque, actuellement testée à l'ENS.

Pré-requis

- serveur Linux avec 1GO de disque et 1VCPU (pour les systèmes virtualisés)
- apache2-mpm-event et libapache2-mod-wsgi
 - serveur de base de données PostGreSQL/MySQL, PostGreSQL version 8.4 ou supérieure, MySQL version 5 ou supérieure
- serveur SMTP
- Python 2.7 ou plus, python-beaker, python-ldap, python-levenshtein, python-ldap (optionnel), python-psycopg2 (pour une base PostgreSQL, ou la librairie requise pour d'autres bases de données),



"Chimithèque" devrait fonctionner avec d'autres bases de données comme Oracle, MSSQL, FireBird, DB2, Informix, Ingres. L'application a été testée avec succès avec PostgreSQL, MySQL et SQLite.

Organisation des répertoires

L'installation se décompose en:

- un répertoire source: /usr/local/src/chimitheque src par exemple
- un répertoire de déploiement: /var/www/chimitheque par exemple

Étapes d'installation

- installation des dépendances
- installation de "Chimithèque'
- installation du serveur PostGreSQL (optionnel si vous avez déjà un serveur de bases de données)
- · installation du serveur Apache2

Étape 1: installation des dépendances

Vous êtes connectés en tant que root. python 2.7 est installé par défaut.

bash\$ aptitude install python-psycopg2 python-ldap python-beaker python-levenshtein unzip rsync

Étape 2: installation de l'application

Étape A

Récupération du paquet "Chimithèque" dans la section téléchargement.

```
bash$ cd /usr/local/src
bash$ wget http://chimitheque.ens-lyon.fr/download/chimitheque_stable.tar.gz
bash$ tar zxvf chimitheque_stable.tar.gz
bash$ mv web2py chimitheque_src
```

Étape B

Choix d'un nom d'instance - exemple: prod. Copie du fichier chimitheque_sample.properties en chimitheque_[instance].properties

```
bash$ cd /usr/local/src/chimitheque_src/applications/chimitheque
bash$ cp chimitheque sample.properties chimitheque prod.properties
```

Étape C

Édition du fichier chimitheque_[instance].properties . Il est documenté.

Création du répertoire de déploiement spécifié dans la variable CHIMITHEQUE_PATH.

```
bash$ mkdir -p /var/www/chimitheque
```

Étape D

Déploiement avec la commande deploy [instance].

```
bash$ cd /usr/local/src/chimitheque src/applications/chimitheque
bash$ ./chimitheque deploy prod
```

Étape 3: Installation du serveur PostGreSQL

Étape A

Installation des paquets. C'est la version 8.4.

```
bash$ aptitude install postgresql postgresql-client
```

Étape B

Configuration du serveur. Nous n'utilisons PAS de cluster dédié pour simplifier l'installation.

Choisissez un nom d'utilisateur de base de données. Doit être identique à la variable SKEL_DBUSERNAME. Nous utiliserons le nom chimitheque user

Ajouter à la fin du fichier /etc/postgresql/8.4/main/pg_hba.conf:

```
127.0.0.1/32
chimitheque user
```



(i) Astuce

Nous autorisons l'utilisateur [chimitheque_user] a se connecter à la base de données depuis [localhost avec un mot de passe (md5).

Redémarrage du serveur:

```
bash$ /etc/init.d/postgresql restart
```

Étape C

Initialisation de la base de données chimitheque

```
bash$ su - postgres
postares$ psal -p 5432
\verb|postgres$| CREATE USER chimitheque\_user WITH PASSWORD 'chimitheque\_password' SUPERUSER;
postgres$ CREATE DATABASE chimitheque OWNER chimitheque_user;
postgres$ GRANT ALL PRIVILEGES ON DATABASE chimitheque TO chimitheque_user;
```

- line 3: chimitheque_user = SKEL_DBUSERNAME
- line 3: chimitheque_password = SKEL_DBPASSWORD
 line 4: chimitheque = SKEL_DBNAME

Étape 4-b: Installation de Apache2

Installation du package:

```
bash$ aptitude install apache2-mpm-event libapache2-mod-wsgi
```



Avertissement

N'utilisez PAS "apache2-mpm-worker", vous pourriez rencontrer des problèmes de performances.

Activation des modules:

```
bash$ a2enmod ssl # only for HTTPS use
bash$ a2enmod wsgi
bash$ a2enmod deflate
bash$ a2enmod expires
```

Création du nouveau site (merci de regarder les commentaires dans le fichier):

bash\$ vim /etc/apache2/site-available/chimitheque

```
<VirtualHost *:443>
# change your servername here
ServerName chimitheque.ens-lyon.fr
# remove the following line if you do not use SSL and change the 443 port in the virtualhost to 80
SSLEngine on
SSLCertificateFile /etc/ssl/certs/chimitheque.ens-lyon.fr.pem
SSLCertificateKeyFile /etc/ssl/private/chimitheque.ens-lyon.fr.key
WSGIDaemonProcess web2py user=www-data group=www-data \
display-name=%{GROUP} inactivity-timeout=120 maximum-requests=500 processes=5 threads=1
WSGIProcessGroup web2py
SetOutputFilter DEFLATE
AddOutputFilterByType DEFLATE text/html text/plain text/xhtml text/css text/javascript application/x-javascript
```

```
ExpiresActive On
# 1 month
ExpiresByType image/ico A2592000
ExpiresByType image/png A2592000
# 5 days
ExpiresByType text/javascript A432000
ExpiresByType text/css A4320000
ExpiresByType application/x-javascript A432000
# change /var/www/chimitheque by your CHIMITHEQUE_PATH variable
WSGIScriptAlias / /var/www/chimitheque/wsgihandler.py
# change /var/www/chimitheque by your CHIMITHEQUE_PATH variable
<Directory /var/www/chimitheque>
AllowOverride None
Order Allow.Denv
Deny from all
<Files wsgihandler.py>
Allow from all
</Files>
</Directory>
# change /var/www/chimitheque by your CHIMITHEQUE_PATH variable
AliasMatch ^/([^/]+)/static/(.*) \
/var/www/chimitheque/applications/$1/static/$2
# change /var/www/chimitheque by your CHIMITHEQUE_PATH variable
<Directory /var/www/chimitheque/applications/*/static/>
ExpiresDefault "access plus 7 days"
Order Allow, Deny
Allow from all
</Directory>
<LocationMatch ^/([^/]+)/appadmin>
Deny from all
</LocationMatch>
CustomLog /var/log/apache2/access.log common
ErrorLog /var/log/apache2/error.log
</VirtualHost>
```

Activation du site:

bash\$ a2ensite chimitheque

Étape 5: Démarrage des services

Apache2:

bash\$ /etc/init.d/apache2 restart

Vous pouvez aussi tester sans Apache, l'application sera joignable à l'adresse [http(s)://urldechimitheque:8000/chimitheque]:

bash\$ /var/www/chimitheque/web2py.py -a a_password -i 0.0.0.0

/var/www/chimitheque est votre CHIMITHEQUE_PATH.

Étape 6: Première connexion

Allez à l'adresse: [http(s)://urldechimitheque/chimitheque]

Utilisez les identifiant/mot de passe suivants:

admin@admin.fr

Cliquez ensuite sur le lien mot de passe (en haut de l'écran) pour changer le mot de passe administrateur.

Étape 7: Importation de la base de données et création du premier utilisateur

Allez dans le menu outils > outils système > gérer la base de données et importer la base de données de produits. Téléchargez le fichier de base de données de produits et envoyez le. Une fois le chargement terminé le nombre de fiches produits et mis à jour (dans le coin supérieur droit).

Vous devez maintenant créer un premier utilisateur avec des privilèges administrateur. Cet utilisateur créera ensuite d'autres utilisateurs et entités. Il s'agit souvent d'un ingénieur chimiste ou d'une personne en charge de la gestion des produits chimiques dans votre établissement. Allez dans le menu outils > gérer les utilisateurs/entrepôts/entités et cliquez sur créer utilisateur. Cochez la case

chimitheque fr.html

est admin, et renseignez les champs requis. Un email est envoyé au nouvel utilisateur après la soumission du formulaire pour qu'il puisse initialiser son mot de passe.

migration de la version 0.2 à la version 0.3

Une conversion de métadonnées de la base de données est nécessaire pour migrer de la version 0.2 à 0.3.

Installez la nouvelle version comme spécifié à l'étape 2 mais avant de lancer la commande ./chimitheque deploy prod exécutez la commande ./chimitheque -c migrate-to-03 -i prod -o no-check-dependencies

Mettre à jour Chimithèque

- avant la version 0.3, répétez la procédure décrite à l'étape 2 avec le nouveau package.
- depuis la version 0.3 utilisez la commande ./chimitheque -c update -i prod -o update-stable et ensuite ./chimitheque -c deploy -i prod).

En cas de problème

Vérifiez que le répertoire /var/www/chimitheque | appartient bien à | www-data | (installation Apache2) ou | uwsgi:uwsgi (installation Nginx + Uwsgi).

Vérifiez que Apache2 mod-python n'est pas installé (seulement pour l'installation Apache2).

Vérifiez que votre serveur de base de données est joignable avec la commande telnet db_base_ip db_base_port.

Vérifiez que votre utilisateur de base de données dans notre chaîne de connexion [SKEL_DBCONNECTION] peut se connecter avec son mot de passe.

Guide d'utilisation

Présentation générale



- 1. Gestion de profil utilisateur: changement de mot de passe et déconnexion
- 2. Utilisateurs connectés, console système, nombre de fiches produit de l'application
- 3. Recherche avancée
- 4. Langue de l'application
 5. Menu principal (éléments affichés en fonction des privilèges)

Résultats de recherche



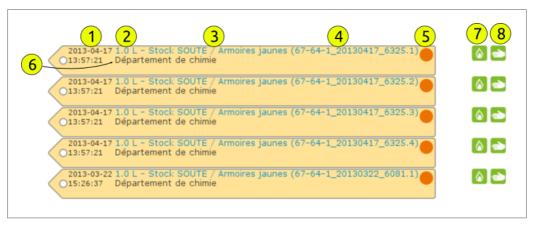
- 1. Nombre de résultats par page
- 2. Page courante, nombre de résultats
- 3. Recherche actuelle
- 4. Paginateur
- 5. Résultats sous la forme:
 - numéro de ligne
 - or cione: produit stocké dans une de mes entités, produit non stocké dans une de mes entités mais présent dans l'organisation
 - nom du produit
 - indication CMR, catégorie de CMR
 - formule brute
- 6. export HTML/CSV

Détails d'un produit



- 1. Fiche produit
- 2. Stocker le produit dans mon entité
- 3. Afficher les stocks de ce produit dans mon entité
- 4. Afficher les points de contact des autres entité stockant ce produit
- 5. Stocks
- 6. Editer les stocks min et max (pour information, ne génère aucune alerte)
- 7. Stock courant: dans l'entité Σ : avec les sous entités

Stockages



- 1. Date de création du stockage
- 2. Volume ou poids

- 3. Nom de l'entrepôt
- 4. Code barre
- 5. Couleur de l'entrepôt
- 6. Nom de l'entité
- 7. Marquer ce stockage pour destruction (ne supprime pas le stockage)
- 8. Emprunter ce stockage

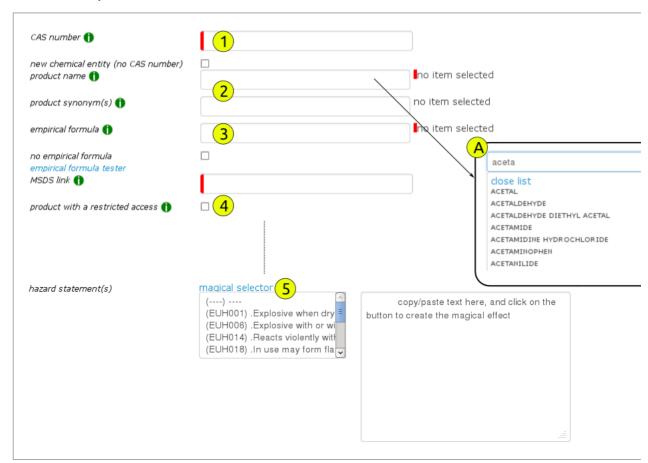


Emprunter un stockage: si vous prenez une bouteille sur une étagère, marquez là comme "empruntée" pour informer les autres utilisateurs.



Marquer un produit pour destruction: les produits périmés peuvent être marqués en attendant leur

Création de fiche produit



1. Numéro CAS

- Le couple "numéro CAS/spécificité" doit être unique.
- Vous pouvez saisir deux produits avec le même numéro CAS mais deux spécificités différentes (exemple:).
- L'application affichera automatiquement les produits avec le même numéro CAS.
 L'application vérifiera automatiquement que le <u>format</u> du numéro CAS est correct.
- 2. Nom et synonymes du produit
 - Vous pouvez entrer seulement un nom mais plusieurs synonymes.
 - Une liste déroulante (A) affiche les entrées existantes. Vous pouvez en sélectionner une ou utiliser l'icône 🗲 pour en insérer une nouvelle.
 - Peuvent être saisis avec la syntaxe stereochimie@nom_de_produit. exemple: (1S,2R,5S)-(+)-MENTHOL peut être saisi (1S,2R,5S)-(+)@MENTHOL Avec cette méthode les produits peuvent être listés par ordre alphabétique selon le nom du produit seulement. Dans notre exemple (+) @MENTHOL sera avec les produits "M" et non en début de liste (les parenthèses sont toujours en début de liste).

```
26-671 MANGANESE(II) ACETATE C4H6MnO4 (CMR!)
27-672 MANGANESE(IV) OXIDE | MANGANESE DIOXIDE MnO2
28-347 MELATONIN | N-ACETYL-5-METHOXYTRYPTAMINE C13H16N2O2
29-819 MELITTIN C131H229N39O31 6
30-775 (1S,2R,5S)-(+)-MENTHOL | (+)-MENTHOL | (1S,2R,5S)-2-ISOPROPYL-5-METHYLCYCLOHEXANOL C10H200
31-594 (1R,2S,5R)-(-)-MENTHOL | (-)-MENTHOL | (1R,2S,5R)-2-ISOPROPYL-5-METHYLCYCLOHEXANOL | 5-METHYL-
2-(1-METHYLETHYL)CYCLOHEXANOL C10H20O
32-397 MENTHONE | 5-METHYL-2-(1-METHYLETHYL)CYCLOHEXANONE | 2-ISOPROPYL-5-METHYLCYCLOHEXANONE C10H180
33-496 (1S)-(+)-MENTHYL CHLOROFORMATE C11H19ClO2
34-435 (1R)-(-)-MENTHYL CHLOROFORMATE | (-)-MENTHYL CHLOROFORMATE C11H19ClO2
```

Le @ magique en action.

- 3. Formule brute doit respecter les règles suivantes:
 - Les atomes doivent appartenir aux tableau de classification périodique des éléments chimiques.
 - Les sels et composés hydratés doivent être saisis sous la forme AgCl04.xH20 (saisir un point et non une virgule comme séparateur)
 - Utilisez une virgule (et non un point) pour les nombres décimaux.

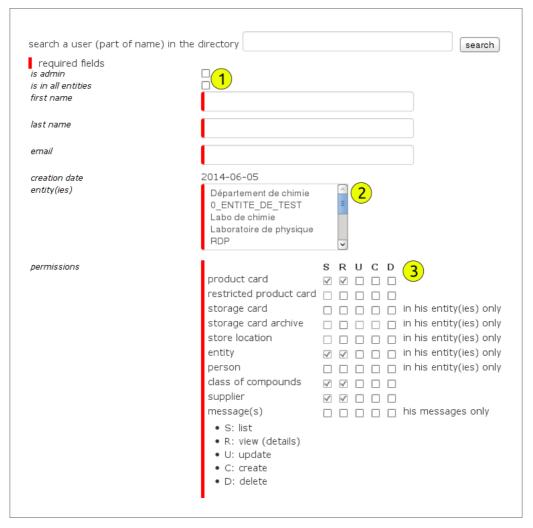
chimitheque fr.html

- Les nombres pour les isotopes doivent être précédés du signe
- Les atomes seront automatiquement triés: C, H et les autres atomes par ordre alphabétique.
- Certains composés n'ont pas de formule brute. Dans ce cas cocher la case "pas de formule brute"
- 4. Accès restreint: vous pouvez restreindre l'accès à certains produits. Seules les personnes avec le privilège voir les fiches produit restreintes pourront rechercher et voir ces produits.
- 5. Vous pouvez sélectionner plus d'une phrase de danger/précaution en maintenant la touche CTRL enfoncée et en sélectionnant les phrase avec la souris. Une méthode plus rapide consiste à utiliser le sélecteur magique. Vous pouvez copier/coller des phrases entières directement depuis le site d'un fournisseur (et cliquer sur le bouton faire la magie! "). Le sélecteur est assez intelligent pour accepter des phrase de la forme (Acrylamide depuis le site Acros Organic):

H340: May cause genetic defects H350: May cause cancer H361f: Suspected of damaging fertility H317: May cause an allergic skin reaction H302: Harmful if swallowed H319: Causes serious eye irritation May cause damage to organs through prolonged or repeated exposure H373:

Notez que les codes des phrases (H302, P301+P312) DOIVENT suivre la nomenclature officielle.

Création d'utilisateurs



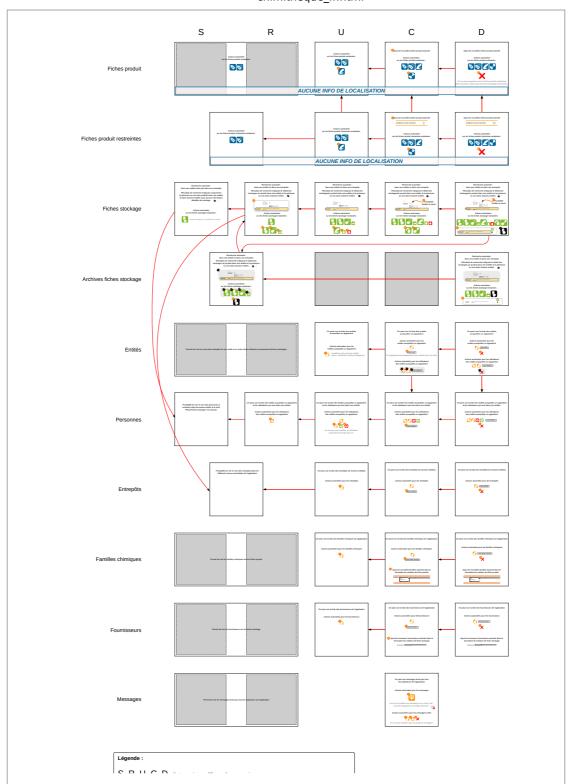
- est admin: l'utilisateur aura tous les privilèges et appartiendra à toutes les entités
 - est dans toutes les entités: l'utilisateur appartiendra à toutes les entités

(i) Astuce

Les agents de securité peuvent avoir un profil où ils appartiennent à toutes les entités mais avec des privilèges limités. Celà leur permet d'avoir un aperçu des stocks dans l'organisation mais sans pouvoir les modifier.

- 2. entité(s): gardez la touche ctrl enfoncée pour sélectionner plusieurs entités
- 3. permissions:
 - S, R, U, C, D: lister, voir, modifier, créer, supprimer
 - Les permissions sont liés: l'application va automatiquement sélectionner les permissions liés
 - Des permissions sont positionnés par défaut: exemple: R fiche produit

Dépendances entre permissions



Pour conclure

Nous espérons que vous aimerez utiliser "Chimithèque". Si vous rencontrez des difficultés à installer ou utiliser cette application, si vous trouvez des erreurs ou si vous avez des idées pour l'améliorer merci de nous contacter. Bien sûr nous ne pouvons pas développer des fonctionnalités spécifiques mais celles qui peuvent intéresser la communauté seront prises en compte.

Quelques notes... Je ne sais pas où les mettre. :)

Pourquoi "Chimithèque" est développée en Python? : Parce que c'est le meilleur langage! ;) Non, Nous aurions pu choisir Java, Php ou n'importe quel autre language. J'utilise Python pour l'administration système tous les jours et je voulais tester Python comme langage de développement Web.

Pourquoi "Chimithèque" est développée avec le framework Web2py ? : Car c'est le m... Oups ! J'ai étudié 4 frameworks (Pylon, Jango, Zope and Web2py). Ils sont tous de bons frameworks, mais étant donné mes propres connaissances Web2py était celui qui avait le temps d'apprentissage le plus court.

Pourquoi Maître Yoda est il vert ? : Et bien... Nous ne savons pas encore.