

Sommaire

Documentation Chemaztech.....	1
Introduction.....	3
Fonctionnalités.....	3
Installation.....	5
Installation basique.....	5
Serveur LAMP.....	5
OpenBabel.....	5
MyChem.....	6
JRE.....	6
Installation de la librairie OASA, libcairo et python.....	6
Installation des modules.....	8
TCPDF.....	8
PHPEXcel.....	8
Installation de ChemAZTech.....	8
Suite de l'installation et de la configuration depuis la version 0.6.....	10
Suite de l'installation pour une version antérieure à la 0.6.....	11
Configuration.....	12
config.php.....	12
TCPDF et PHPEXcel : activation et chemin d'accès.....	12
config_ldap.php.....	13
Premier accès.....	13
PHPIDS.....	13
Serveur Web et PHP.....	14
php.ini.....	14
Suhosin.....	14
Utilisation.....	16
Aperçu rapide : utilisation quotidienne pour un chimiste.....	16
Ajout, dessin, modification.....	16
Visibilité et coopération.....	17
Export.....	17
Visualisation.....	17
Mise en place de connexions entre les molécules.....	17
Changement d'informations personnelles.....	18
Généralités, schémas globaux et détails de fonctionnement.....	19
Les droits.....	19
Administrateur.....	19
Utilisateur actif.....	19
Utilisateur temporaire.....	20
Visiteurs.....	20
Les groupes.....	20
Les produits.....	21
Rajout d'un produit.....	21
Modification de produit.....	26
Suppression d'un produit.....	26

Recherche et consultation.....	27
Recherche de produit.....	27
Visualisation des structures.....	28
Gestion des lieux de stockage et produits commerciaux.....	29
Gestion des lieux.....	29
Gestion des produits commerciaux.....	30
Maintenance.....	32
Problèmes fréquents.....	36
Arborescence.....	36
- Problème lié à MyChem.....	36
- Problème lié à Jmol/JChemPaint.....	36
- Problème de la librairie OASA.....	37
- Problème lié à TCPDF.....	37
- A propos de PHPIDS.....	37
Conclusion.....	38
Notes et références.....	39
Annexes.....	40

Introduction

A l'heure actuelle, à l'exception de quelques rares produits, les outils informatiques pour la chimie se cantonnent souvent à un usage « utilisateur ».

Le but de ce logiciel est de fournir une chimiothèque, un outil collaboratif pour gérer tous les produits d'un laboratoire aisément, à partir d'un simple navigateur.

Le projet est entièrement libre, sous licence CeCill, la forme française de la très célèbre GNU GPL.

L'outil est basé sur PHP, MySQL, mais aussi d'autres outils, plus spécifiques à la chimie :

- OpenBabel,
- MyChem,
- JchemPaint,
- Jmol,
- libcairo

Enfin, un peu de python et des outils d'extraction XLS(X)/PDF viennent compléter le tout.

Il faut avouer que cette liste est longue, mais c'est le prix à payer pour avoir un usage totalement libre avec une suite relativement complète pour une utilisation en environnement professionnel.

Fonctionnalités

- Gérer vos produits chimiques ou ceux de tout un laboratoire (avec leurs structures, leurs propriétés, les lieux de stockage, les références, les numéros de manipulation...),
- Dessinez, éditez vos structures avec JchemPaint,
- Visualisez vos molécules en 3D avec JMol, en 2D avec JchemPaint (java) ou avec la librairie python OASA (sous forme d'images PNG),
- Recherches par sous-structures ou par similitudes avec MyChem,
- Calculs automatisés des propriétés, du code Smiles, Inchi avec MyChem,
- Importez des molécules depuis un fichier MOL, CDX ou toute une base sous forme de fichier SDF,
- Extractions CSV, XLS(X), exports PDF/PNG...,
- Gérer utilisateurs et Groupes,
- Gérer les lieux de stockage,
- Gérer les produits commerciaux.

NB Important : L'affichage d'images par la librairie « libcairo » est parfois erroné. L'affichage en java, quant à lui, est juste, mais plus long à générer. J'attends avec impatience une mise à jour de cette librairie.

Utilisation avancée pour calcul intensif

Depuis quelques versions plus récentes, j'évoque aussi la possibilité d'utiliser un cluster en parallèle pour faire du calcul intensif sur des molécules. Sur ce point, je vous conseille d'être un brin développeur, car ce n'est pas totalement aisé.

De mon côté, je donne la possibilité d'envoyer une molécule à un cluster de calcul dans un répertoire particulier (ciblotheque) qui se charge ensuite de faire le nécessaire. Cela se fait au travers de la page visu3D.php du répertoire jmol/mol en fonction de la configuration générale que vous avez donné dans config/config.php.

Il est également envisageable de faire le contraire : exporter manuellement toute la base pour faire du criblage virtuel *in silico*, mais là encore il vaut mieux s'y connaître un peu. Le script *sdf_correct.py* peut vous aider dans cette démarche en remplaçant, dans un fichier SDF (exporté de la base au préalable), les noms des molécules par les numéros de manipulation.

Installation

L'installation est ce qui demande le plus d'efforts, comme pour de nombreux logiciels... En réalité, il ne s'agit pas d'une installation mais de plusieurs installations pour arriver à un système fonctionnel. C'est, je pense, un des principaux défauts de l'application.

Il faut commencer par installer un serveur LAMP à jour, c'est-à-dire, un serveur linux qui contient les dernières versions de MySQL, PHP et Apache. Il faut ensuite installer et configurer le JRE de java sun, puis OpenBabel, puis MyChem et enfin, la librairie libcairo (accompagné de python).

Avec ça, vous serez presque prêt : l'export XLS et PDF nécessite l'installation de fichiers à la racine du serveur web.

PHPExcel : <http://phpexcel.codeplex.com/>

TCPDF : <http://www.tcpdf.org/>

Installation basique

Serveur LAMP

Je considère que si vous vous lancez dans l'installation de mon logiciel, vous savez installer un serveur Web de type LAMP, voir mieux, vous en avez déjà un.

Avec un OS linux debian ~like :

```
$sudo apt-get install apache2 apache2-doc mysql-server php5 libapache2-mod-php5 php5-mysql phpmyadmin
```

Sachez également qu'Ubuntu propose aussi une version serveur avec une installation LAMP automatisée. Vous pouvez faire la même chose si vous utilisez un autre gestionnaire de paquet qu'*apt*, comme *yum* ou *urpmi*...

```
#yum install httpd mysql mysql-server php phpmyadmin
```

NB : PHPMyAdmin n'est pas obligatoire mais reste très utile au cas où vous devriez naviguer dans la base de données.

NB2 : Vérifiez les noms de paquet; Ces derniers changent parfois lors des changements de version.

Normalement, l'installation propose de configurer le serveur Apache et la base MySQL dans la foulée. Mémorisez le mot de passe *root* que vous mettez à votre base MySQL.

OpenBabel

OpenBabel est (également) généralement présent dans les gestionnaires de paquet comme *synaptic* ou *apt*. Vérifiez toutefois que c'est, au minimum, la version 2.2.0.

```
#apt-get install openbabel
```

Sinon, vous pouvez l'installer à partir des sources (*configure, make, make install...*) :
<http://openbabel.org/wiki/Install>

MyChem

Pour MyChem, on arrive sûrement à l'étape la plus délicate; Son installation n'est pas forcément des plus aisée...

Je vous conseille de lire la documentation associée :

<http://mychem.sourceforge.net/doc/apas03.html>

En cas de soucis de compilation, pensez à vérifier votre version de gcc et g++, et passez en mode *verbeux*.

```
#make VERBOSE=1
```

Remarque :

Chemaztech utilise de nombreuses fonctions issues de MyChem. Si celui-ci n'est pas installé correctement, l'application ne servira qu'à faire de la gestion et ne pourra calculer aucune propriété chimique et ne permettra pas la recherche par sous-structure ni celle par similitude.

Sans OpenBabel, MyChem ne peut pas fonctionner. De plus, OpenBabel est utilisé directement en dur par un ou deux scripts (notamment pour la conversion de fichier CDX en MOL), même si j'ai limité au maximum son usage, y préférant MyChem.

JRE

Il suffit de suivre les indications de Sun :

http://java.com/fr/download/help/linux_install.xml

Normalement, le JDK n'est pas nécessaire.

Installation de la librairie OASA, libcairo et python

```
#aptitude install python-central avec libcairo et python-cairo
```

Les sources de la librairie OASA sont disponibles sur le site Web de BKChem :

http://bkchem.zirael.org/oasa_en.html

La librairie OASA nécessite au préalable une version de python 2.3 au minimum. Je cite, d'après la documentation d'install :

```
#python setup.py install
#python
>>>import oasa
>>>exit()
```

Logiquement votre système est maintenant capable de générer des images SVG, PNG ou des fichiers PDF depuis une molécule, grâce à des scripts en python.

Installation des modules

TCPDF

Sans ce module, la génération de fichiers PDF ne sera pas fonctionnelle. Il suffit de suivre ce qui est indiqué ici :

http://www.tecnick.com/public/code/cp_dpage.php?aiocp_dp=tcpdf_installation

Pour résumer, il faut mettre les fichiers dans un répertoire à la racine de votre serveur Web. Il faut ensuite éditer le fichier de configuration : `config/tcpdf_config.php`

Vérifiez ensuite que l'utilisateur *Apache* peut y accéder avec des droits en 644 :

```
#chmod -R 644 <nom_du_répertoire>
```

PHPExcel

Le module PHPExcel permet l'export de fichier XLS et XLSX depuis des scripts PHP. Si vous ne l'installez pas sur votre serveur, vous pourrez uniquement faire des exports CSV (ce qui implique une absence d'image). Le principal contributeur du site qui héberge PHPExcel, *codeplex*, n'est autre que Microsoft (notez cependant que la licence est du type LGPL !). L'installation n'est pas plus compliquée que pour Tcpdf. Toutefois, la version 5.2 de PHP est nécessaire et vous devez disposer des modules PHP suivants (et ils doivent être activés !) :

- php_zip
- php_xml
- php_gd2

Cf : <http://phpexcel.codeplex.com/wikipage?title=Requirements&referringTitle=Home>

Vous devez ensuite créer un répertoire qui hébergera les données du répertoire « *Classes* », ou copiez directement *Classes* à la racine de votre serveur Web.

L'utilisateur *Apache*, là encore, doit disposer logiquement de droits suffisants sur ce répertoire (au moins lecture et exécution...).

Installation de ChemAzTech

L'installation de l'application en elle-même est très simple : il suffit de décompresser l'archive à la racine de votre serveur Web puis de donner les droits adéquats à l'utilisateur Apache sur le répertoire et enfin d'exécuter les fichiers SQL du répertoire « config » afin de construire la base de données.


```
#cd $DOCUMENT_ROOT (ex : cd /var/www )
#tar -xzvf chimiotheque.tar.gz
#chown -R apache_user chimiotheque
Sous debian, apache_user = « www-data »
```

Logiquement, cela suffit; Au pire, vérifiez les droits et rajoutez-en si besoin. Les répertoires *import*, *export*, *zip*, *pdf/** et *jmol/mol* doivent être accessibles en écriture.

```
#chmod -R ug+rx chimiotheque
#chmod -R u+w chimiotheque
```

Suite de l'installation et de la configuration depuis la version 0.6

Cet aparté explique comment configurer et installer la suite du logiciel depuis cette version. Si vous disposez d'une version plus ancienne, merci d'ignorer ce passage et de passer à la suite.

Rendez-vous sur la page suivante de votre logiciel :

[http://\[lieu d'installation de ChemAzTech\]/config/install.php](http://[lieu d'installation de ChemAzTech]/config/install.php)

Suivez la procédure jusqu'au bout et vous aurez une installation basique fonctionnelle. Vous pouvez également configurer une authentification sur un serveur LDAP et définir le statut des utilisateurs qui se connecteront par ce biais (simple utilisateur ou utilisateur temporaire =>La nuance est expliquée ici : Utilisation > Généralités et schémas globaux de fonctionnement > I] Les droits).

Une fois l'installation terminée, connectez-vous en admin pour configurer la suite (voir « configuration » > « Premier accès » pour plus de détails.) :

login >

utilisateur : admin

mot de passe : admin

Puis rendez-vous dans « Administration »/ « Administrative Tasks » > « configurer les options de ChemAzTech »/ « Configure chemaztech options ». pour finaliser la configuration du logiciel.

Certaines options nécessitent toutefois d'éditer directement le fichier de configuration sur le serveur pour des raisons de sécurité. Je recommande de lire la partie « configuration » suivante de cette documentation pour l'accès aux modules, les options avancées et la configuration de votre fichier *PHP.INI*, de *Suhosin* et de *PHPIDS*.

Suite de l'installation pour une version antérieure à la 0.6

Enfin, exécutez les scripts SQL situés dans le répertoire config.

Le fichier *chimiotheque*Struct.sql* contient la structure de la base classique. En cas de mise à jour, exécutez *update*.sql* correspondant à votre numéro de version.

Pour l'exécuter :

```
#mysql < *your_file*.sql
```

Configuration

config.php

Si vous disposez d'une version récente (≥ 0.6) et que vous avez installé votre logiciel en passant par [http://\[lieu d'installation de ChemAzTech\]/config/install.php](http://[lieu d'installation de ChemAzTech]/config/install.php), merci d'ignorer ce paragraphe et passez directement à « TCPDF et PHPEXcel : activation et chemin d'accès » (plus bas dans cette page).

J'ai essayé de concentrer tout dans le fichier *config.php* (et *config_ldap.php*) du répertoire *config*.

Les premières lignes concernent les informations d'accès à la base :

```
$host = "";  
$db = "";  
$user = "";  
$pass = "";
```

Normalement, `$db` = « chimiotheque », à moins que vous n'avez modifié le nom de cette dernière. `$host` = « localhost » dans la grande majorité des cas (si MySQL est installé en local). Enfin, pour l'utilisateur et le mot de passe, il faut en créer un (dans PHPMyAdmin, par exemple) et lui donner tous les droits sur la base *chimiotheque*. C'est l'installation classique d'une application de type LAMP. Si vous n'utilisez pas PHPMyAdmin, vous pouvez toujours essayer ça :

```
# mysql -u root -p  
mysql> grant all privileges on chimiotheque.* to  
your_chimiotheque_user@localhost identified by  
'your_password_for_chimiotheque_db';
```

TCPDF et PHPEXcel : activation et chemin d'accès

La suite de la configuration du fichier correspond aux deux modules : respectivement TCPDF puis PHPEXcel. Vous devez les activer pour que ces derniers soient pris en compte par l'application en définissant les variables `$phpexcel` et `$tcpdf` à la valeur « 1 ». Inversement pour les désactiver, mettez ces valeurs à « 0 ». Il vous faut aussi définir les chemins d'accès vers les répertoires de ces modules à **partir du répertoire d'installation de ChemAzTech**. Par exemple, si le répertoire de PHPEXcel se nomme *Classes* à la racine du serveur Web (`$DOCUMENT_ROOT`), le chemin d'accès relatif à PHPEXcel sera « ../Classes/ » (et non pas « ../../Classes/ »).

```
$tcpdf = 1;  
$tcpdf_path = "../tcpdf/";  
$phpexcel = 1;  
$phpexcel_path = "../Classes/";
```

L'instruction suivante concerne la déclaration d'adresse mail pour le gestionnaire de produits. Ce dernier est alerté si un produit est vide (quantité = 0).

Enfin, la fin du fichier concerne la configuration avancée pour des tests automatisés vers un cluster de calcul par exemple (*voir le topo à ce sujet en introduction*).

config_ldap.php

Ce fichier contient, comme son nom l'indique, les informations de connexions à un serveur LDAP pour authentifier vos utilisateurs. Depuis la version 0.6, vous pouvez modifier directement vos informations de configuration directement depuis le panneau d'administration du logiciel dans « configurer les options de ChemAzTech ». Si vous préférez le modifier directement sur votre serveur, le fichier reste suffisamment commenté pour mettre directement vos options. Vous pouvez également définir le statut des utilisateurs qui se connecteront par ce biais (simple utilisateur ou utilisateur temporaire =>La nuance est expliquée ici : Utilisation > Généralités et schémas globaux de fonctionnement > I] Les droits).

Premier accès

Pour vous connecter, il vous suffit d'aller dans Login(out) ou (Dé)Connexion (dépend de votre variable de session « lang » (qui peut être changée depuis la page d'accueil/homepage)), en haut, et de rentrer le nom d'utilisateur et le mot de passe par défaut :

-- [Homepage](#) -- [Login\(out\)](#) -- [Subscription](#) -- [Administratives tasks](#) -- [About](#) --

-- [Accueil](#) -- [\(Dé\)Connexion](#) -- [Inscription](#) -- [Administration](#) -- [À propos](#) --

Utilisateur : admin

Mot de passe : admin

Je vous recommande fortement de changer ce mot de passe lors de la première connexion en allant dans « Administration » (si fr)/ « Administrative task » (si en), puis « modifier mes informations personnelles ».

PHPIDS

Si vous constatez des messages "Danger detected Bye Bye", il faut modifier le seuil de détection de PHPIDS. A ce sujet, merci de voir la section « Problèmes fréquents » > « A propos de PHPIDS ».

PHPIDS, couplé à *HTMLpurifier* permet d'éviter les tentatives d'intrusions par PHP. Un score trop bas (= seuil de sécurité élevé) ne permet pas d'utiliser correctement le logiciel, en particulier si vous avez un grand nombre de molécules.¹

¹ Le score PHPIDS détecté augmente en fonction du nombre de variables passées. Même si le niveau de danger est noté à 5 par variable (ce qui correspond à un niveau de danger relativement faible), mais que vous avez 300 variables à passer à la page suivante (par exemple *via* le script *choix.php* qui permet de choisir les molécules à traiter suite à une recherche), le score de la page sera le total de toutes les variables (300*5)...

Serveur Web et PHP

Même si je considère que vous êtes censé savoir faire ça, je dois apporter quelques précisions, en particulier à propos des erreurs liées aux temps d'exécution trop longs des scripts PHP ou bien des limites liées à la taille des fichiers...

php.ini

Les limites de *php.ini* sont, par défaut, beaucoup trop faibles. En effet, si vous souhaitez envoyer au serveur un fichier CDX de 3Mo, ou bien importer un fichier de molécule SDF de 7Mo, il faut que ce dernier soit modifié :

Sous debian :

```
# vim /etc/php5/apache2/php.ini
```

```
output_buffering = 4096
max_execution_time = 1000 ; Maximum execution time of each
script, in seconds
max_input_time = 600 ; Maximum amount of time each script may spend
parsing request data
memory_limit = 1024M ; Maximum amount of memory a script may
consume (128MB)
register_globals = On
post_max_size = 256M
enable_dl = On
upload_max_filesize = 16M
default_socket_timeout = 600
auto_detect_line_endings = On
extension=mysql.so
extension=gd.so
extension=fileinfo.so
mysql.connect_timeout = 600
gd.jpeg_ignore_warning = 0
```

Ci-dessus, j'ai noté toutes les valeurs par défaut que j'ai modifié. Toutes ne sont pas présentement utiles. Les valeurs qui nous intéressent sont **upload_max_filesize**, **max_execution_time**, **post_max_size** et **memory_limit**. Ici, j'ai mis des valeurs importantes, étant donné les quantités de données à traiter et la taille des fichiers que je devais importer, mais rien ne vous oblige à mettre des valeurs aussi grandes. Les noms des variables, sont, je pense, assez parlant pour comprendre de quoi il s'agit...

Pour plus de détails, voir de ce côté : <http://php.net/manual/fr/ini.core.php>

Suhosin

A noter que vous pouvez avoir des problèmes de limites identiques avec le module de sécurité PHP *suhosin* :

Sous Debian :

```
#vim /etc/php5/apache2/conf.d/suhosin.ini
```

Dé-commentez et initialisez les valeurs suivantes :

```
suhosin.post.max_totalname_length = 10000
suhosin.post.max_value_length = 65000
suhosin.post.max_vars = 10000
suhosin.request.max_totalname_length = 10000
suhosin.request.max_value_length = 65000
suhosin.request.max_vars = 10000
suhosin.cookie.max_totalname_length = 10000
suhosin.cookie.max_value_length = 10000
suhosin.cookie.max_vars = 10000
```

Après ça, *suhosin* ne devrait plus poser aucun problème...

Aperçu rapide : utilisation quotidienne pour un chimiste.

L'utilisateur « chimiste » a souvent besoin de dessiner des structures de produits chimiques et de gérer les données associées : les propriétés des produits chimiques qu'il conçoit, leur lieu de stockage...

Ajout, dessin, modification

ChemAzTech permet aisément de répondre à ce problème par des outils d'import, de dessin en java (JChemPaint) et des « *fiches produits* ». Les possibilités d'ajout de produits chimiques sont multiples, tout comme leur modification (voir schémas plus loin).

Les champs obligatoires pour l'ajout d'un produit sont :

- Le numéro de manipulation,
- La formule brute,
- La date,
- Le lieu de stockage si le produit est en stock.

L'import de données (au format MOL ou CDX pour un simple utilisateur) et le mode dessin permettent de pré-remplir certains champs.

Ajout :

Accueil > Cliquez ici pour rajouter un produit

Accueil > Cliquez ici pour rajouter un produit (forme pré-remplie par envoi de fichier)

Accueil > Mode dessin

Modification

Accueil > Rechercher puis afficher/modifier un produit > *rentrez vos critères pour retrouver le produit à modifier* > *choisissez le produit à modifier*

Accueil > Consulter les produits > *choisissez le produit à modifier*

Enfin, le chimiste peut modifier la structure d'un produit en cliquant sur « modifier » en dessous de l'image de la structure générée. Cette méthode permet aussi au chimiste de générer un nouveau produit en se basant sur la précédente structure (c'est, en quelque sorte, un dupliquer/modifier).

Visibilité et coopération

Un chimiste pourra, grâce à ChemAzTech, travailler soit de manière totalement individuelle, soit de manière collaborative, si l'administrateur l'a, au préalable, inséré dans un groupe. Il pourra alors éventuellement modifier les produits des autres membres du groupe. Toutefois, le chimiste, peut décréter que son produit restera invisible pour les autres membres du groupe dans la fiche produit. Il peut également choisir de laisser son produit disponible pour la Chimiothèque Nationale (CN) ou non.

Export

Administration > Extractions personnalisées de vos produits.

Le chimiste peut ici exporter tous ses produits, soit sous forme de fichier excel (avec les structures sous forme d'image PNG), soit sous forme de fichier ZIP avec toutes les structures (sous forme d'image PNG) ou bien encore sous forme de fichier CSV avec toutes les propriétés de ses produits.

Le chimiste peut aussi exporter directement un fichier PDF depuis la *fiche produit*, qui récapitule les données du produit (à condition que l'administrateur ai validé le module *tcpdf*).

Enfin, le chimiste peut aussi récupérer directement la structure d'une molécule directement depuis la fiche d'un produit (si cette dernière dispose d'une structure) en cliquant sur « [structure] ». Celle-ci est au format MOL.

Visualisation

Deux modes de visualisation sont possibles. Depuis le mode consultation, visu2D et visu3D ou bien la même chose depuis une fiche produit. Pour la visualisation 2D depuis la fiche produit, il faut cliquer sur l'image pour avoir l'affichage java.

Pour l'affichage 3D, ChemAzTech utilise JMol. JMol nous permet également de faire des captures d'écran des images 3D.

Mise en place de connexions entre les molécules

Il est possible de faire en sorte que les molécules soient liées entre elles. 3 types de relations sont possibles :

- Père / Fils
- Ressemble à
- Similaire à

Pour cela, il suffit de modifier une fiche produit (quand le produit a déjà été enregistré dans la base) en cliquant en haut de celle-ci « Ajouter une relation avec une molécule » / « Add a connection to another molecule ». Cela vous renvoie vers le formulaire de recherche. Choisissez ensuite votre deuxième molécule à connecter (un seul choix possible).

Remarque : attention, vous ne pouvez faire de recherche par sous-structure/similitude en procédant de la sorte. En effet, le passage au mode dessin fait perdre les informations de connexion avec la première molécule. Pour cette raison, un nouvel onglet s'ouvrira pour que vous fassiez votre recherche. Il vous suffira ensuite de revenir dans le premier onglet et de rentrer votre code *smiles* recherché.

Changement d'informations personnelles

Il est possible de changer de mot de passe ou vos coordonnées :

Administration > Modifier mes informations personnelles.

Généralités, schémas globaux et détails de fonctionnement

Les droits

Il y a plusieurs niveaux de gestion et de droits :

- Visiteur
- Utilisateur temporaire
- Utilisateur actif
- Administrateur
- Groupe

De plus, la visibilité de chaque produit peut être clairement définie.

Administrateur

- L'administrateur doit faire le nécessaire pour déléguer la gestion de la base (exemple : profil chimiothécaire). En effet, il est possible de transformer des utilisateurs en administrateurs. Ces derniers peuvent tout faire, hormis supprimer l'administrateur d'origine.

Un administrateur peut faire toutes les tâches classiques d'un utilisateur, à l'exception de la génération automatique dans un fichier zip des structures en image. Cela sert exclusivement à l'utilisateur qui veut récupérer toutes ses structures; En effet, lors d'une extraction en fichier texte CSV, compatible avec les logiciels tableurs, aucune image ne peut être insérée.

Toutefois, depuis la version 0.53 les exports en fichier excel avec insertion des structures sous forme d'image sont possibles (pour cela, passez par le mode recherche !).

Mais un administrateur peut aussi :

- Consulter tous les produits, en rajouter, en supprimer, en modifier,
- Gérer les utilisateurs et les groupes d'utilisateurs,
- Gérer les lieux de stockage,
- Gérer les informations comptables/fournisseur,
- Importer une base sous forme de fichier texte SDF,
- Supprimer les produits temporaires mal enregistrés (non valides),
- Faire le ménage des fichiers stockés dans le répertoire jmol/mol/,
- Synchroniser les données molaires, générer les smiles/mol de tous les produits en base,
- Récupérer une concaténation de toutes les structures sous forme de smiles ou de fichier SDF (plusieurs types d'extractions SDF disponibles par défaut),
- Changer le propriétaire d'un produit (depuis le mode recherche).

Si vous souhaitez faire en sorte qu'un utilisateur aie accès à tous les produits sans droit d'administration (ex : chimiothécaire), il est possible de créer un groupe qui a accès en consultation et en modification à tous les produits (et éventuellement suppression).

Utilisateur actif

Un utilisateur actif est un utilisateur temporaire "activé" par un administrateur. Ce dernier peut faire partie d'un groupe d'utilisateur pour partager ses produits et consulter les produits des autres

membres du groupe. Il peut également se voir transformer lui-même ultérieurement en administrateur, selon les bons vouloir de ce dernier.

Utilisateur temporaire

- Par défaut, lorsque un utilisateur s'inscrit, il est enregistré comme utilisateur temporaire. Ce dernier n'a pas le droit de modifier un produit et n'a pas accès aux produits qu'il vient de rentrer. Pour que ce dernier puisse modifier, consulter des produits et qu'il puisse faire partie d'un groupe ou soit administrateur, il faut avant tout activer son compte. Sinon, rien ne vous oblige à le transformer en utilisateur "actif".

Visiteurs

- N'importe qui peut rajouter un produit, alors que pour consulter la base de données, il faut être connecté. Par conséquent, pour accéder aux données rentrées, l'utilisateur devra s'inscrire avec le même nom qu'il a utilisé pour enregistrer son produit. Il deviendra alors un utilisateur temporaire (voir ci-dessus).

Les groupes

Il est possible de créer plusieurs groupes d'utilisateurs, disposant de droits différents dont les utilisateurs hériteront :

- Lecture des produits du groupe (*),
- Lecture et modification des produits du groupe (*),
- Lecture/modification/suppression des produits du groupe (*),
- Lecture et modification de tous les produits de la base,
- Lecture/modification/suppression de tous les produits de la base.

(*) Dans ces trois cas, l'utilisateur doit rendre sa molécule au moins visible pour le groupe.

Les deux derniers groupes possèdent des droits bien plus conséquents que les autres; Ils ont accès à plus de possibilités d'extractions que de simples utilisateurs, peuvent accéder à des listings sur les lieux de stockage, les produits commerciaux... Les utilisateurs du dernier groupe peuvent même créer de nouveaux lieux de stockage, rajouter des produits commerciaux...

Par rapport au dernier groupe, un administrateur peut, en plus, gérer les groupes et les utilisateurs, importer un listing de molécules au format SDF, synchroniser les informations de la base, configurer les options du logiciel et nettoyer le dossier de stockage des molécules.

Remarque :

Afin de supprimer un utilisateur d'un groupe, il suffit de l'insérer dans un groupe vide.

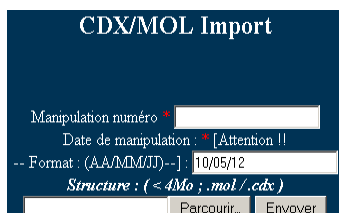
PS : Pour modifier les droits associés à un groupe, ne pas oublier de rentrer le nouveau nom de groupe associé, puis de valider, sinon, la modification ne sera pas effective.

Les produits

Rajout d'un produit

Un utilisateur peut rentrer un produit de plusieurs manières :

1/- Soit avec un système qui permet de pré-remplir certains champs : « formulaire simplifié avec envoi de fichier MOL ou CDX »²



2/- Soit directement par le formulaire classique.³

² La méthode citée en premier nécessite d'envoyer la structure du produit chimique sous forme de fichier cdx (ChemDraw) ou directement en mol.

³ La seconde méthode n'oblige pas à insérer la structure. Il est possible de rentrer à la place une simple image png ou rien du tout. Toutefois, la visualisation 3D de la structure sera impossible, tout comme tous les calculs réalisés par MyChem, et aucune information complémentaire ne sera stockée en base.

Rajout d'un produit
Les champs avec étoile sont obligatoires !

Votre nom : * admin		
Manipulation numéro : *	Date de manipulation : * [Attention !! -- Format : (AA/MM/JJ)--] : 10/05/12	Référence (code base, code cahier...) :
LE PRODUIT		
Formule brute * :	Peptide Sequence (Groupes de 3 lettres) :	
Masse molaire monoisotopique (xxxxx,xxxx) :	Masse molaire moyenne (xxxxx,xx) :	
Numéro du lot :		
Quantité :	Rendement :	Pureté HPLC :
RT HPLC :	M+H :	
RMN 1H : <input type="checkbox"/>	RMN 13C : <input type="checkbox"/>	DEPT : <input type="checkbox"/>
Commentaires ou précisions sur RMN :		
Précisions RMN		
Pouvoir rotatoire :	HRMS :	Analyse élémentaire :
Aspect : <input type="text"/>		
Commentaires :		
Vos commentaires ici.		
Historique et suivi biologique :		
Historique et tests biologiques.		
STOCKAGE :		
Est-ce en stock ? *		
<input checked="" type="radio"/> Oui -> Merci de préciser le lieu : <input type="text"/>		<input type="radio"/> Non
ENVOIS DE FICHIERS		
Structure : (< 4Mo valide : mol, cdx autorisé : png (aucun traitement possible))	PDF RMN : (< 4Mo) <input type="text"/> Parcourir...	PDF LCMS : (< 4Mo) <input type="text"/> Parcourir...
Définissez le niveau de visibilité de votre produit <input type="radio"/> Utilisateur (juste vous).	<input checked="" type="radio"/> Votre groupe de travail	<input type="radio"/> Tout le laboratoire.
<i>Les droits de modifications seront limités à vous-même, aux administrateurs/chimiothécaires de la base et à votre groupe de travail si vous l'y autorisez et que ce dernier a les droits suffisants.</i>		
Lors d'un export vous pouvez choisir que votre produit soit <input checked="" type="radio"/> Disponible pour la Chimiothèque Nationale.		<input type="radio"/> Non disponible pour la Chimiothèque Nationale.
<i>Un export SDF pour la CN nécessite que certains champs soient remplis : numéro de manip (identifiant), la structure (fichier mol ou cdx) et la quantité (= nulle dans le cas contraire).</i>		
<input type="button" value="Ajouter à la base"/>		

Illustration 1: Formulaire de rajout classique

Dans la forme pré-remplie par l'envoi de fichier MOL/CDX, la formule brute et la masse molaire sont déjà complétées. La structure est également présente (mais pas forcément visible tout de suite).

3/- Soit directement à partir du mode dessin.

JChemPaint

File Edit View Atom Bond Tools Templates Help

CDK 5/12/10, 14:37

```

7 7 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
1.2167 1.4333 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.5157 0.6833 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
2.5157 -0.8167 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.2167 -1.5667 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.0824 -0.8167 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-0.0824 0.6833 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.3814 1.4333 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1 2 2 0 0 0 0
2 3 1 0 0 0 0
3 4 2 0 0 0 0
4 5 1 0 0 0 0
5 6 2 0 0 0 0
6 1 1 0 0 0 0
6 7 1 0 0 0 0
M END

```

Manipulation numéro :

Date :

-- Format : (AA/MM/JJ)-- :

OR - OU

Illustration 2: Mode dessin

Une fois votre molécule dessinée dans la partie gauche, il faut cliquer sur « Get Output » dans la partie droite, puis rentrer un numéro de manipulation et enfin « Enregistrer ce produit ». La date affichée est, par défaut, la date du jour (*sous la forme AA/MM/JJ*).

Il est également possible d'enregistrer un nouveau produit à partir d'un produit déjà existant en se rendant sur la fiche produit, puis **en cliquant sur « modifier » en dessous de l'image de la structure**.

On se retrouve alors en mode « édition et enregistrement de structure » grâce à JChemPaint. Sur la partie droite vous pouvez soit modifier le produit soit en enregistrer un nouveau; Pour un nouveau produit, il vous faudra absolument **rentrer un nouveau numéro de manipulation**.

Modification de produit

L'utilisateur, selon les droits associés à son groupe, pourra, ou non, modifier les produits des autres membres du groupe.

Si ce dernier est actif, il pourra, au minimum, modifier ses propres produits et toutes les propriétés associées.

Pour cela, il faut qu'il retrouve le produit voulu en passant par le mode recherche ou le mode consultation (voir page suivante), puis qu'il se rende sur sa fiche. Ensuite, un bouton en bas indique « modifier ». Seul le champ « numéro de manipulation » n'est pas modifiable.

En cliquant sur « modifier » en dessous de la structure dans la fiche d'un produit, l'utilisateur peut directement éditer cette dernière au travers du mode dessin. Il faut ensuite que ce dernier, une fois sa structure dessinée, clique sur « Get Output » puis « modifier ce produit ».

Il faut faire de même pour les produits commerciaux.

Suppression d'un produit

A condition d'avoir les droits nécessaires, il suffit de cliquer sur « supprimer » / « delete » soit en bas d'une fiche produit ou directement depuis le mode consultation.

Recherche et consultation

Recherche de produit

Deux possibilités existent pour retrouver un produit : "consulter la base" et "rechercher/modifier un produit", depuis la page d'accueil.

La recherche de produit est plus précise. Il est possible de faire une recherche par sous-structure ou par similitudes en passant par le mode dessin.

Recherche par Nom du chimiste (qui ?) :	Recherche par lieu de stockage :	
<input type="text" value="admin"/> Mathieu Tito BlaPNG	<input type="text" value="ENSCM frigo2"/> FrigoMumu	
Recherche par numéro de manipulation :	<u>Recherche par sous-structure :</u>	
<input type="text"/>	<input type="text"/>	
	Recherche sous-structure <input checked="" type="radio"/> Ou recherche de structures similaires <input type="radio"/>	
	RESULT SCORE (min 0 <=> max 1; Default : 0,8) <input type="text"/>	
Recherche par séquence peptidique (par 3 lettres) :		
<input type="text"/>		
Chercher dans les produits commerciaux : <input type="checkbox"/>	Recherche par formule brute :	
	<input type="text"/>	
Chercher dans les produits publics : <input type="checkbox"/>	Recherche par lot : <input type="text"/>	
Recherche par date de manipulation : (pour ce type de recherche, le mois et l'année sont obligatoires)		
Année	Mois	Jour - facultatif
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>
Choisissez votre action :		
<input type="text" value="Afficher et/ou modifier des produits"/>		
<input type="button" value="Ok"/>		

Illustration 6: Mode recherche : « Rechercher puis afficher/modifier un produit »

Toutefois la recherche standard n'offre pas la possibilité de supprimer un produit (contrairement au mode consultation).

De plus, la consultation des produits des autres utilisateurs du même groupe est impossible par ce système (contrairement au mode consultation).

Filtrer par utilisateur : —Toute monde— Nombre de molécules 10 Commercial N OK

13 produits au total

suite > Fin <

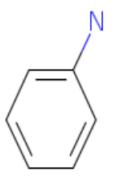

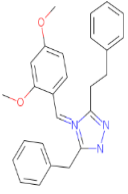
	Qui	Manipulation numéro	Formule brute	Date	Code cahier	Peptide Sequence	Lieu	Quantité	Masse molaire monoisotopique	Masse molaire moyenne	Pureté HPLC	Commentaires	Structure
 Supprimer	admin	test Kiet	C6H7N	2010-05-12	a_renseigner	0	ENSCM figo2	2 mg?	93.0578	93.1265	90	test Kiet	Voir 3D [La génération 3D est longue > à plusieurs minutes (5 -> 10)] Voir 2D
 Supprimer	admin	testamuga8	C18H32	2010-03-01	a_renseigner	0	0	a_renseigner	248.2504	248.4467	a_renseigner	Vos commentaires ici	Voir 3D [La génération 3D est longue > à plusieurs minutes (5 -> 10)] Voir 2D
 Supprimer	admin	testo:dz3000	C26H27N3O2	2009-11-20	to_complete	0	0	to_complete	413.2103	413.5115	to_complete	Your comments here	Voir 3D [La génération 3D est longue > à plusieurs minutes (5 -> 10)] Voir 2D

Illustration 7: Mode consultation

Seul un administrateur et les utilisateurs des groupes (accès à tout en lecture/modification(/suppression)) pourront, dans tous les cas, faire une recherche sur l'ensemble de la base.

La consultation permet de voir d'un coup d'œil des informations précises sur un ensemble de produits dont celles des autres utilisateurs du groupe s'ils ont choisi de partager leurs produits.

Visualisation des structures

Les structures peuvent être :

- soit visualisées en 2D (en java (par l'applet JChemPaint du CDK) ou sous forme d'image SVG par défaut (par la librairie OASA))
- soit visualisées en 3D grâce à JMol.

Pour accéder à ces modes de visualisation il faut soit, accéder à la fiche produit (« Voir 3D » est en bas de la fiche), soit passer par le mode consultation « Voir 2D » ou « Voir 3D » (sur la droite de la page).

Gestion des lieux de stockage et produits commerciaux

Gestion des lieux

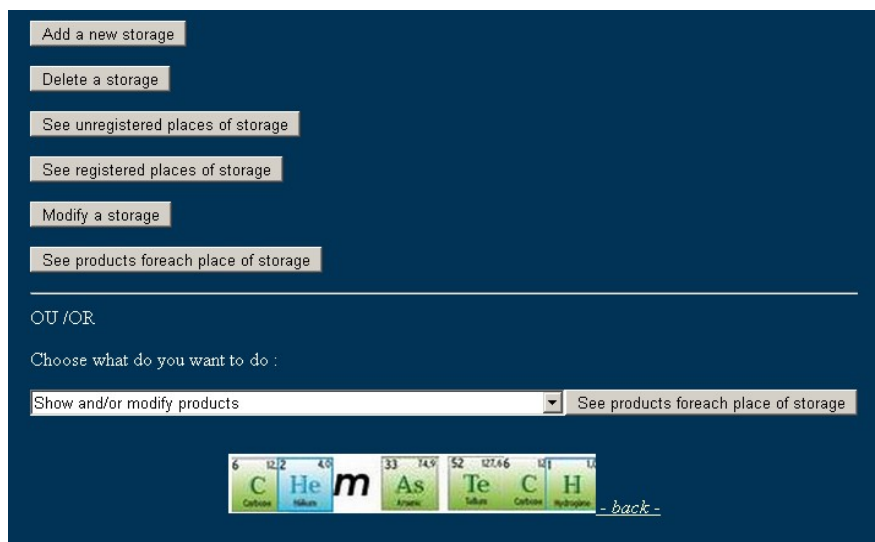


Illustration 8: Gestion des lieux

Ci-dessus, vous pouvez voir un aperçu de l'éventail des possibilités offertes à un administrateur ou quelqu'un membre du groupe « modify all ».

Administration > Gérer les lieux de stockage

Quand vous rentrez un nouveau lieu, de nombreuses questions vous sont posées afin de proposer au gestionnaire de produits commerciaux un lieu de stockage adéquat. Cela permet, notamment, de gérer partiellement les produits dangereux. Ainsi la toxicité d'un produit, sa température ou bien encore son côté inflammable, voire sa taille (etc...) sont pris en compte. Ensuite, lors du rajout d'un produit commercial les pictogrammes apparaissent dans la fiche produit.

Dans « voir les produits pour chaque lieu de stockage », si la quantité d'un produit arrive à 0, alors la quantité du produit, 0, dans ce listing apparait en rouge. Un mail est aussi envoyé au gestionnaire des produits si l'adresse de destination de ce dernier a été renseigné (et que la fonction PHP mail fonctionne sur le serveur).

Administration > Configurer les options de ChemAzTech

Le rajout d'un nouveau lieu permet également aux utilisateurs de choisir parmi ceux-ci lors de l'ajout d'un nouveau produit standard. Dans le cas contraire, si l'utilisateur choisit de mettre un autre lieu de stockage et que ce dernier n'est pas connu du gestionnaire de produit, alors ce dernier pourra se rendre dans le système de gestion des lieux puis « voir les lieux de stockage non enregistrés » / « see unregistered place of storage ».

Enfin des fonctions avancées sont disponibles pour les lieux de stockage, telles que « modifier le propriétaire pour un ensemble de produits ». Vous pouvez également faire plusieurs type d'extractions.

Gestion des produits commerciaux

ChemAzTech ne propose pas de vrai gestion comptable à proprement parlé. Toutefois, cela peut aider un gestionnaire à savoir quel chimiste à commander quoi et en quelle quantité. C'est plus un outil de suivi qu'autre chose.

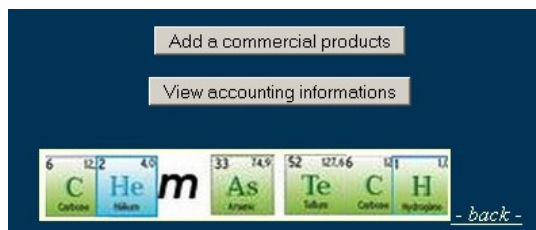


Illustration 9: Gestion et suivi des infos commerciales

Vous pouvez voir ci-dessous qu'il n'y a pas beaucoup d'options. Comme prévu, vous pouvez voir ci-dessous que de nombreuses informations sont demandées pour gérer au mieux les lieux de stockage et la dangerosité des produits.

Illustration 10: Rajout d'un produit commercial - étape 1

« Voir les informations comptables » affiche un tableau qui récapitule les produits commerciaux achetés, rentrés dans la base. Les champs suivants sont disponibles :

- Fournisseur
- Référence du produit fournisseur
- Désignation
- Quantité (nombre de flacons)
- Prix
- Prix Total
- Chimiste client
- Nom du Produit
- Numéro CAS
- Conditionnement
- Pureté

Maintenance

Par défaut, tout est stocké en base, hormis les fichiers CDX qui sont de simples fichiers binaires inutilisables s'ils n'étaient pas convertis par OpenBabel en MOL.

Toutefois, une fois que les images, les smiles, les PDF, les ZIP (lors des extractions), les MOL et les MOL2 (pour la 3D) sont générés, ils sont stockés sous forme de fichier dans le répertoire jmol/mol.

Par conséquent, le répertoire JMol/mol contient presque tous les fichiers des produits rentrés. C'est un endroit souvent truffé de fichiers [presque inutiles] : ils servent souvent pour le "cache" du serveur (par exemple, un fichier MOL2 est particulièrement long à générer depuis un smiles ou mol selon les performances de la machine).

Ainsi, il n'est pas idiot de vouloir tout supprimer dans ce répertoire, à l'exception des quelques scripts présents (.php .py .sh) et des fichiers CDX. Cependant, attention, les images sans structure d'origine, au format PNG, sont également présentes dans ce dossier; Si vous les supprimez, ces images ne pourront pas être régénérées !

Pour ces raisons, l'administrateur dispose d'une interface pour contrôler et l'aider à supprimer les fichiers présents dans le répertoire par « *Opérations de nettoyage* » de l'interface d'administration. Les fichiers utilisés directement pour les structures apparaissent de couleurs différentes.

L'administrateur peut également supprimer tous les produits appartenant à un utilisateur donné en passant par :

Interface d'administration > Opérations de nettoyage > Supprimer tous les produits appartenant à un utilisateur donné

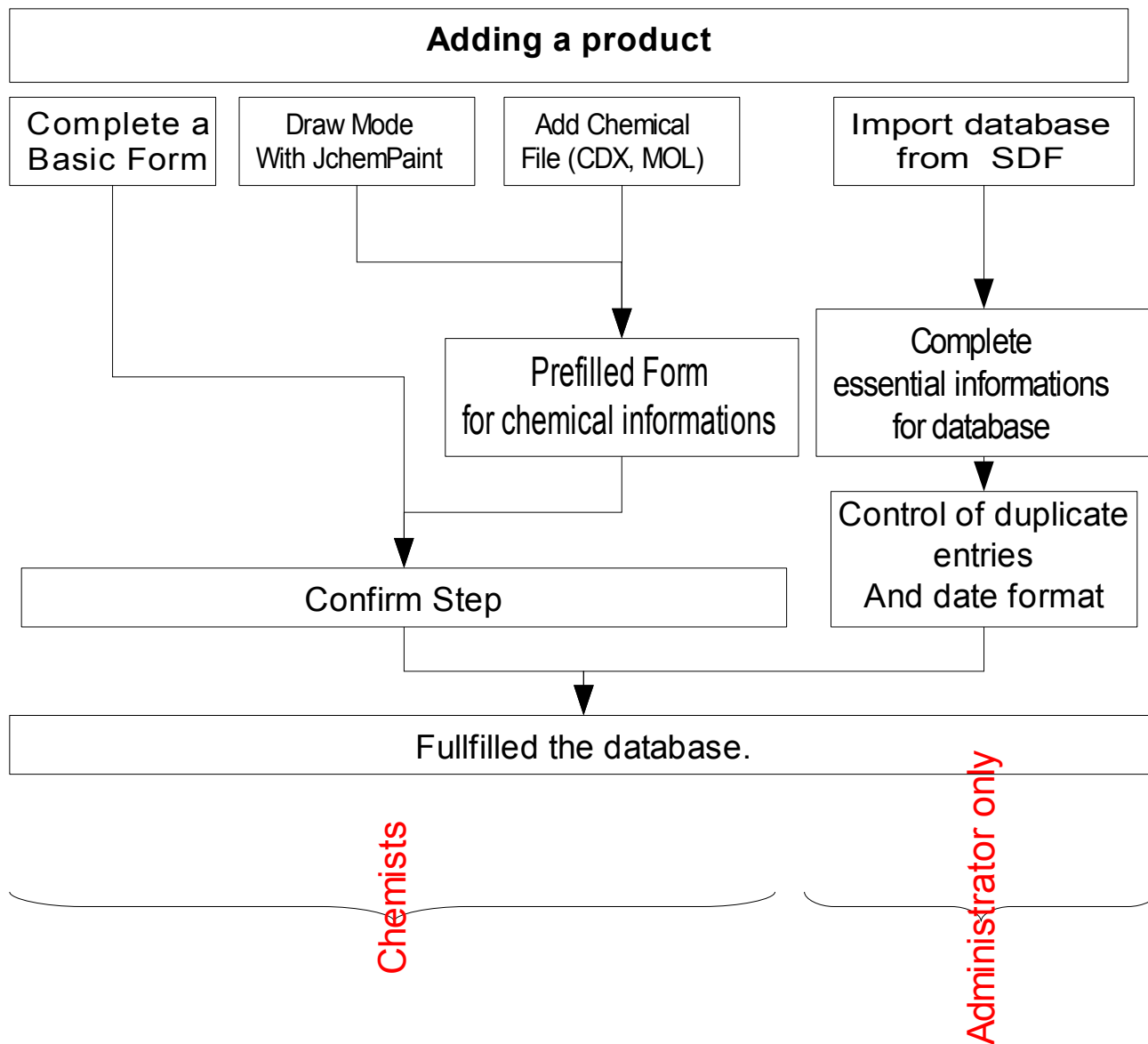
Il ne faut pas se tromper dans le nom d'utilisateur, sinon cela ne fonctionnera pas. Ensuite une confirmation est nécessaire, comme pour les produits temporaires (nom d'utilisateur « *temp_easy_add* »).

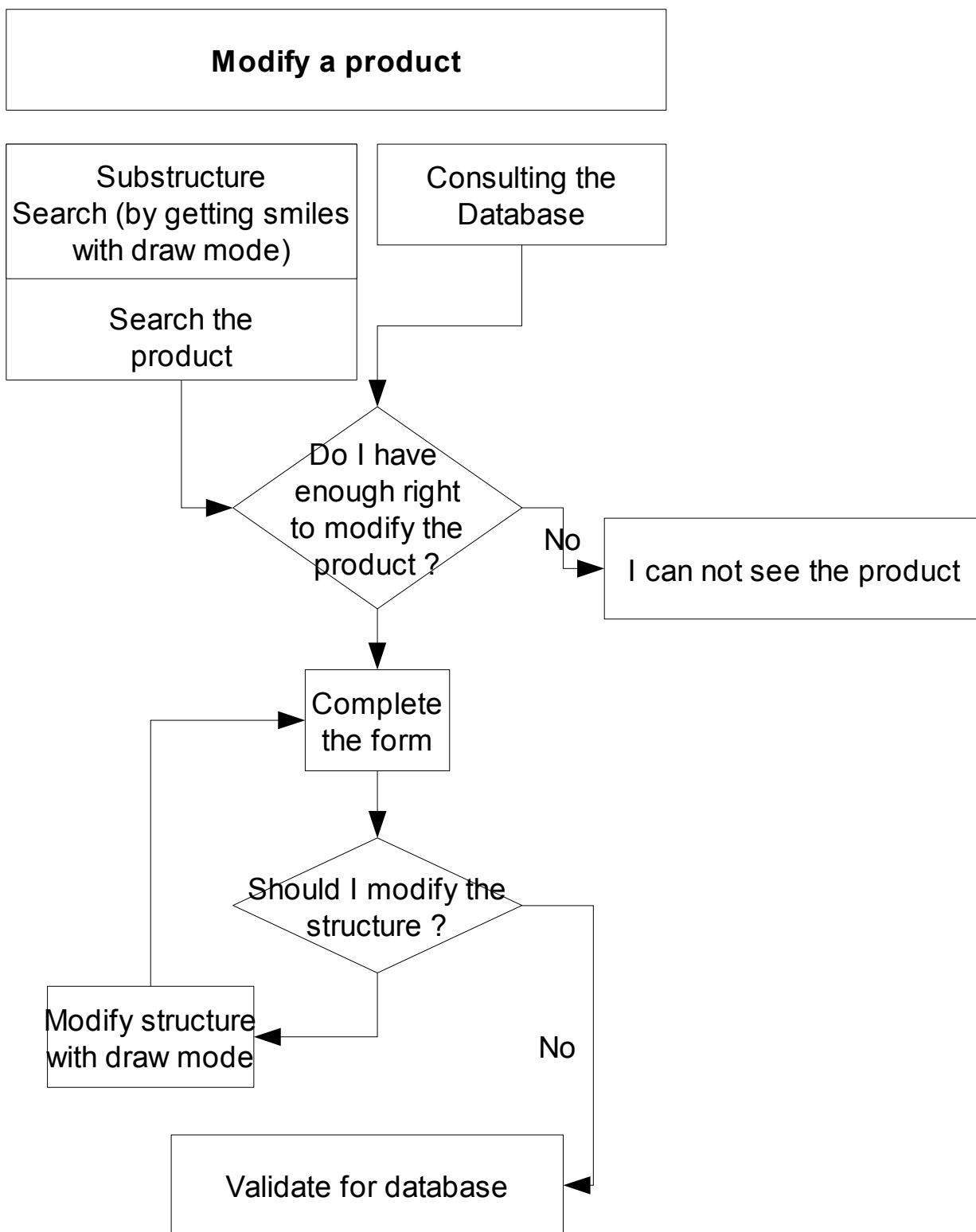


The screenshot shows a dark blue web interface. At the top, it asks 'Vous avez besoin de supprimer tous les produits d'un chimiste ?' with a '...ok' link. Below this is a form with the label 'Entrez son nom :' followed by a text input field and an 'ok' button. At the bottom of the interface is the 'Chem Tech.' logo, which includes a small icon of a chemical flask.

Illustration 11: Suppression de tous les produits d'un chimiste en particulier

J'ai laissé les quelques documents suivants en anglais; Cependant, je pense qu'ils restent parfaitement compréhensibles.





	Add a product	See my products	Search/modify my products	Delete my products	See other group members products	Modify other group members products	Delete other group members products	See/Modify all products	See/Modify/Delete all products, users and groups	See commercial products	Modify commercial products	Manage place of storage
Visitor	Y	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N	N
Temporary user	Y	Y	Y	N	N	N	N	N	N	Y	N	N
Active user <i>No group</i>	Y	Y	Y	Y	N	N	N	N	N	Y	N	N
<i>Member of group "Read Only"</i>	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	N	N	Y	N	N
<i>Member of group "Read and modify"</i>	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	N	Y	N	N
<i>Member of group "Read/Modify/Delete"</i>	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	N	N
<i>Member of group "Read/Modify all"</i>	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	Y	N	Y	N	N
<i>Member of group "Read/Modify/Delete all"</i>	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y
Administrator	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y

Arborescence

L'arborescence des répertoires est importante, les molécules doivent se trouver dans "jmol/mol", sinon, JMol ne fonctionnera pas; Plusieurs scripts nécessaires au bon fonctionnement de l'application s'y trouvent également.

APACHE DOCUMENT ROOT

```
> tcpdf
> PHPExcel
> chemaztech
  ->> config
  ->> core
  ->> export
  ->> formulaires
  ->> fpdi
  ->> gestion
  ->> img
  ->> import
  ->> include
  ->> jchempaint
  ->> jmol
    ->>> mol
    ->>> ...
  ->> maintenance
  ->> pdf
  ->> zip
  ...
```

- Problème lié à MyChem

Vérifiez que vos clés étrangères sont correctes avec 'delete cascade' (voir doc. MyChem).

L'utilisation de MyChem nécessite également la création de fonctions MySQL supplémentaires (voir doc MyChem).

---> <http://mychem.sourceforge.net/>

- Problème lié à Jmol/JChemPaint

Si JMol est absent du package récupéré (par exemple *via* le SVN), installez jmol dans le répertoire du même nom. Faire de même pour JChemPaint si JChemPaint est absent du répertoire jchempaint. Récupérez également jmol_snapshot afin de capturer des images des vues 3D, à mettre également dans le répertoire jmol, en prenant soin de modifier les chemins.

- Problème de la librairie OASA

Exemple : génération d'image qui ne fonctionne pas, PDF impossible à générer...

En cas de problème avec la librairie OASA, réinstallez python-central avec libcairo et python-cairo. Supprimez le répertoire *build* du répertoire d'OASA puis réinstallez-le. Réessayez de régénérer une image à partir d'une molécule (`./mol2png.py fichier.mol fichier.png`) dans `jmol/mol/`

- Problème lié à TCPDF

TCPDF contient la configuration de vos fichiers PDF générés. Le dossier de TCPDF doit se trouver à la racine de votre serveur Web. Pour changer la config, rendez-vous dans le répertoire `tcpdf/config/` et éditez le fichier `tcpdf_config.php`

- A propos de PHPIDS

La valeur par défaut de `phpids` dans le fichier `head` (`include/head.php`) est initialisée à 75. Vous pouvez la modifier (c'est même recommandé).

C'est la ligne :

```
if (!$result->isEmpty() && ( $result->getImpact() > 75 ) )
```

Seuil de sécurité pour `phpids` :

20 - très haute sécurité

35 - moyennement haut

50 - moyen

75 - moyennement bas (valeur par défaut)

100 - très bas

250 - très très bas (en cas de problème, en particulier si vous voyez "Danger detected Bye Bye"- équivaut presque à la désactivation de `phpids`.)

En fait, si vous avez une grande quantité de produits, vous devrez baisser le niveau de sécurité en augmentant le score car même si chaque variable nous donne un score de danger faible, le total est calculé pour toute les variables d'une page...

Conclusion

ChemAzTech répond à la problématique du manque de logiciel libre en chimie (notamment pour le côté *base de données*) par l'ajout de multiples briques *OpenSource*.

Cela peut poser quelques difficultés d'installation et des problèmes de création d'image PNG à partir des structures. En effet, la librairie en python utilisée est fonctionnelle mais génère des erreurs sur les grosses molécules (bouclent sur elles-mêmes). Cela dit, l'affichage 2D en SVG ou en java par JChemPaint et JMol (pour la 3D) est lui, totalement opérationnel.

Le développement de ChemAzTech reste donc lié étroitement à celui des autres logiciels *OpenSource* utilisés (même si une brique peut être remplacée par une autre si une alternative pertinente existe). Si JMol et JChemPaint ou bien encore OpenBabel sont très aboutis, ce n'est pas le cas de tous. Un environnement professionnel exige des briques logicielles opérationnelles et performantes. J'ose espérer qu'avec le temps, nous atteindrons ce niveau de réalisation.

De mon côté, j'espère bénéficier des avantages de l'*OpenSource* avec la participation accrue d'autres développeurs, testeurs, utilisateurs, ou toute autre forme d'aide (traduction, documentation...), même si le logiciel touche une communauté relativement restreinte.

Notes et références

OpenSource : http://en.wikipedia.org/wiki/Open_source
ChemiSQL : <http://chemdb.sourceforge.net/wiki/index.php/>
MyChem : <http://mychem.sourceforge.net/>
OrChem : <http://orchem.sourceforge.net/>
pgchem : <http://pgfoundry.org/projects/pgchem/>
MDL : <http://www.symyx.com/>
ChemAxon : <http://www.chemaxon.com/>
libcairo : <http://www.cairographics.org/>
OpenBabel : http://openbabel.org/wiki/Main_Page
JchemPaint : <http://sourceforge.net/apps/mediawiki/cdk/index.php?title=JChemPaint>
CDK : http://sourceforge.net/apps/mediawiki/cdk/index.php?title=Main_Page
Jmol : <http://jmol.sourceforge.net/>
GNU GPL v2 license : <http://www.gnu.org/licenses/old-licenses/gpl-2.0.html>
SMILES : <http://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>
OBMol object : <http://openbabel.org/wiki/OBMol>
MySQL : <http://www.mysql.com/>
TCPDF : http://www.tecnick.com/public/code/cp_dpage.php?aiocp_dp=tcpdf
FPDI : <http://www.setasign.de/products/pdf-php-solutions/fpdi/>
PHPEXcel : <http://phpexcel.codeplex.com/>

Annexes

Base de données de la version 0.55 (ce n'est pas un vrai schéma *Meurise*, c'est un peu artisanal, mais ça donne une idée) :

