

Logiciels libres : ça bouge, en chimie

Georges Khaznadar
professeur de sciences physiques
au lycée Jean Bart – Dunkerque
`georges.khaznadar@ac-lille.fr`

18 septembre 2011

La *mobilité*, l'*adaptabilité* sont les fils conducteurs, pour trois sujets différents présentés ici, tous en rapport avec des *logiciels libres* :

- des exercices de chimie dont le contenu est toujours dynamique ;
- des visionneuses de structures moléculaires « qui bougent » ;
- des logiciels libres de chimie, que des étudiants, des professeurs et des chercheurs améliorent régulièrement.

Le point commun aux logiciels libres est qu'ils peuvent être diffusés aux étudiants sans arrière-pensée ni risque légal.

De plus, leur coût reste maîtrisé, et l'expertise nécessaire à leur maîtrise s'acquiert d'autant plus facilement que la plupart d'entre eux sont créés et maintenus par des universitaires, qui acceptent volontiers d'échanger leur savoir-faire dans le cadre académique, à l'occasion de séminaires, de conférences.

1 Des exercices de chimie dont le contenu « bouge » à chaque essai

Tous les étudiants ne comprennent pas une méthode ou une règle générale après qu'on leur ait présenté deux exemples, puis donné cinq exercices. Souvent, la certitude d'avoir compris ne vient qu'après un grand nombre d'essais et d'erreurs. Là, l'enseignant ne peut pas satisfaire tout un groupe d'étudiants à la fois : quand les uns commenceront à s'ennuyer, d'autres auront encore

besoin de revoir la même notion. C'est alors qu'un usage raisonné des ordinateurs permet de gagner en efficacité pédagogique.

1.1 Wims, pour fournir des exercices de chimie

Le service web Wims¹ permet de donner aux étudiants des exercices dont les contenus sont variables et tirés au hasard. Créer des exercices nouveaux est possible à des enseignants après une formation courte.

La méthode de création d'exercices fait appel à un langage de *très haut niveau*, OEF (Open Exercise Format), dont les objets primitifs ne sont pas des entiers ou des chaînes de caractères, mais sont : l'énoncé, les réponses et leurs types d'analyses, le feedback etc.

Ce langage dispose d'une grande variété de « roulettes » aléatoires qui permettent de changer à la volée les énoncés servis aux étudiants. Comme Wims permet d'insérer des objets L^AT_EX arbitraires, qui sont mis en forme et affichés à la volée sous formes d'images², il est facile de présenter des énoncés avec une typographie pertinente.

1.2 Créer un grand espace de questionnement avec une petite base de données

Quand on doit interroger sur un corpus de données où il y a peu de règles, il n'est pas facile de créer un grand espace de questionnement : pour N données dans la base, on ne peut poser que N questions.

Cependant, plusieurs domaines en chimie obéissent à des règles systématiques, comme les réactions acido-basiques, les réactions d'oxydo-réduction. Dans ces deux cas, il est possible de prendre deux demi-réactions distinctes dans une base de données, et d'en faire un réaction à étudier. Ainsi, avec N données dans la base de données, on peut créer $N(N-1)$ questions distinctes, ce qui est déjà beaucoup plus productif : par exemple, avec **33** demi-réactions dans la base, on peut générer plus de **1000** questions distinctes.

1. service WIMS : voir <http://wimsedu.info/>, <http://wims.auto.u-psud.fr/wims/>

2. Les textes alternatifs associés aux images de formules, dans le service web, sont leur source en L^AT_EX ; ainsi, des étudiants aveugles formés à ce logiciel savent les lire.

1.2.1 Chemeq, pour traiter automatiquement une base de données de demi-réactions acido-basiques

Il suffit de disposer d'une base de données dont les lignes ressemblent à ceci : ... **CH3CO2H -> ; CH3CO2^- + H+** ... **H2O -> HO- + H+** ...

Toutes les demi-réactions sont écrites avec une syntaxe des plus simples, et ordonnées dans l'ordre des constantes d'acidité décroissantes. Une telle base de données sera efficacement exploitée par le programme **chemeq**³, qui sait analyser cette syntaxe et faire des calculs chimiques sur les bilans qu'il en déduit.

Essayons : voici quelques lignes de code très simple, utilisables avec Windows, Mac ou Linux, sitôt que les programmes nécessaires sont installés :

```
r1="C2H4O2 -> C2H3O2^- + H+"
r2="H2O -> HO- + H+"
echo $r1 | chemeq -l
C.2H.4O.2\,\rightarrow\C.2H.3O.2^-\\,+\\,H^+
echo $r2 | chemeq -l
H.2O\\,\rightarrow\\,HO^-\\,+\\,H^+
echo "$r1 ~ $r2" | chemeq -l
C.2H.4O.2\\,+\\,HO^-\\,\rightarrow\C.2H.3O.2^-\\,+\\,H.2O
```

Les lignes en **caractères gras** sont les commandes, les lignes en **caractères normaux** sont les résultats des commandes quand il y en a. Les utilisateurs expérimentés auront remarqué que les résultats des commandes ne sont autres que les sources en \LaTeX des écritures chimiques suivantes :

3. Le paquet logiciel Chemeq : voir <http://packages.debian.org/fr/squeeze/chemeq>, <http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/chemeq>

Commande à invoquer	Code \LaTeX	Résultat typographié
echo \$r1 chemeq -l	$C_2H_4O_2 \backslash \rightarrow$ $\backslash, C_2H_3O_2^-$ $\backslash, + \backslash, H^+$	$C_2H_4O_2 \rightarrow C_2H_3O_2^- + H^+$
echo \$r2 chemeq -l	$H_2O \backslash, \rightarrow$ $\backslash, HO^- \backslash, + \backslash, H^+$	$H_2O \rightarrow HO^- + H^+$
echo "\$r1 ~ \$r2" chemeq -l	$C_2H_4O_2 \backslash, + \backslash, HO^-$ \backslash, \rightarrow $\backslash, C_2H_3O_2^-$ $\backslash, + \backslash, H_2O$	$C_2H_4O_2 + HO^- \rightarrow C_2H_3O_2^- + H_2O$

La commande **chemeq -l** permet d'analyser une phrase et de produire du \LaTeX , et une autre programme transforme ensuite le code \LaTeX en une équation bien écrite. Il ne reste plus, pour l'auteur qui veut générer une équation-bilan qu'à faire trois choses :

1. mettre une demi-équation dans la variable **r1**
2. mettre l'autre demi-équation dans la variable **r2**
3. « soustraire » **r1** et **r2**, par la syntaxe "**\$r1 ~ \$r2**"

1.2.2 Chemeq, pour traiter automatiquement une base de données de demi-réactions d'oxydo-réduction

Voici un exemple de traitement similaire, pour l'exemple classique de l'oxydation des ions fer II par le permanganate en milieu acide. On définit :

- **r1="Fe³⁺ + e⁻ -> Fe²⁺"**
- **r2="MnO₄⁻ + 8H⁺ + 5e⁻ -> Mn²⁺ + 4H₂O"**

Commande pour créer le code \LaTeX	Résultat typographié
echo \$r1 chemeq -l	$Fe^{3+} + e^- \rightarrow Fe^{2+}$
echo \$r2 chemeq -l	$MnO_4^- + 8H^+ + 5e^- \rightarrow Mn^{2+} + 4H_2O$
echo "\$r2 ~ 5*\$r1" chemeq -l	$5Fe^{2+} + 8H^+ + MnO_4^- \rightarrow 5Fe^{3+} + 4H_2O + Mn^{2+}$

1.3 Chemeq est déjà intégré dans le service Wims

Les commandes qui ont été présentées ci-dessus sont valides pour la syntaxe de la ligne de commande d'un interpréteur de commande tel que **bash**, **tcsh**, etc.

Comme le programme **chemeq** est déjà intégré au service web interactif Wims, il est possible d'utiliser la même logique à l'intérieur des exercices créés en langage OEF, à quelques variantes syntaxiques près. Voici un liens hypertexte vers une série d'exemples d'exercices interactifs qui utilisent ce type de questionnement :

<http://wims.auto.u-psud.fr/wims/wims.cgi?session=demo&cmd=new&module=H5/chemistry/redox.fr&exo=redox1>

2 Des modèles moléculaires « qui bougent »

Les étudiants doivent, un jour au moins, *tenir* des modèles moléculaires faits de tiges et de billes dans leurs mains : la mémoire tactile est très importante. Cependant, les modèles moléculaires en matière plastique n'ont pas tous les avantages pédagogiques :

- on n'en modifie pas aisément les couleurs pour exprimer des idées particulières (par exemple une polarisation électrique) ;
- si les degrés de liberté en vibration, en rotation peuvent être suggérés, ce n'est que grossièrement ;
- ils sont des objets macroscopiques qui font oublier le mouvement brownien ;
- ça revient cher de construire de grands modèles.

Quelques logiciels libres permettent de travailler vite et bien avec des modèles moléculaires. Ce qu'on perd en sensation tactile, on le gagne en richesse de l'information :

Logiciel	Licence	Création de modèles	Mesures sur les modèles	Scénarios et animations	Dynamique moléculaire en direct
Avogadro	GPL version 2	oui	oui	non	???
Ghchemical	GPL version 2+	oui	oui	non	oui
Pymol	Libre (voir les termes particuliers)	???	oui	oui	non

2.1 Pour une poignée de femtosecondes

Le tableau ci-dessus signale trois logiciels libres complémentaires.

- Avogadro⁴, très confortable pour manipuler les modèles moléculaires, pour les construire et les mesurer après relaxation ;
- Ghchemical⁵, qui donne à voir immédiatement une simulation en dynamique moléculaire, pour quelques femtosecondes, une molécule ou un groupe de molécules (avec des conditions de périodicité)
- Pymol⁶, qui est doté d'un puissant langage de script et permet de construire des scénarios et des animations.

À ces trois-là, on peut ajouter Jmol, une applette en langage Java qui peut fonctionner dans un navigateur web compétent :

- Jmol⁷ permet de créer des scénarios et des animations.

On peut noter que le système Wims autorise l'usage interactif de Jmol pour certains **types de réponse**, où est analysée la capacité d'un étudiant à distinguer telle ou telle partie d'une molécule dans un modèle tridimensionnel.

4. Le paquet logiciel Avogadro : voir <http://packages.debian.org/fr/squeeze/avogadro>, <http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/avogadro>

5. Le paquet logiciel Ghchemical : voir <http://packages.debian.org/fr/squeeze/ghchemical>, <http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/ghchemical>

6. Le paquet logiciel Pymol : voir <http://packages.debian.org/fr/squeeze/pymol>, <http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/pymol>

7. Le paquet logiciel Pymol : voir <http://jmol.sourceforge.net/>

2.2 Des bibliothèques de molécules pour l'enseignant

Le logiciel libre OpenBabel⁸ permet des interconversions diverses et variées entre plusieurs dizaines de formats différents qui décrivent des structures moléculaires et/ou cristallines. Il mérite bien la référence à la légende de la tour de Babel, et permet d'accéder à des bibliothèques de structures moléculaires très diverses.

De nombreuses bibliothèques de données publiques en ligne existent avec le format PDB (Protein Data Bank), qui est bien sûr interprété par chacun des logiciels cités plus haut. On remarquera aussi, pour les besoins des cours élémentaires, une collection de structures moléculaires publiées par Jérôme Pansanel : - Le logiciel libre Chemical-structures⁹ permet la présentation très commode de plus de 500 structures chimiques, bien classées en plusieurs langues, et l'installation de ce logiciel dans un serveur web¹⁰ offre de nombreuses facilités : visualisation 3D avec Jmol, conversion à la volée vers divers formats avec OpenBabel.

3 Encore plus de ressources pour les chimistes, sous licences libres

Un grand nombre de logiciels libres ont été réalisés par des chimistes, pour des chimistes. La qualité est au rendez-vous.

Dans une université, c'est important que les étudiants aient accès aux codes sources et puissent participer aux progrès : seuls les logiciels libres permettent « que ça bouge », de cette façon-là.

Visitez le projet **DebianScience/Chemistry**¹¹ il recense plusieurs dizaines de logiciels libres, qu'on peut installer en quelques minutes sans frais sur des machines à l'abri des virus (système basé sur GNU/Linux).

8. Le paquet logiciel Openbabel : voir
<http://packages.debian.org/fr/squeeze/openbabel>,
<http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/openbabel>

9. Le paquet logiciel Chemical-structures : voir
<http://packages.debian.org/fr/wheezy/chemical-structures>,
<http://packages.ubuntu.com/fr/source/natty/chemical-structures>

10. Chemical-structures, intégration dans un serveur web du lycée de l'auteur :
http://pedago.lyceejeanbart.fr/chemical-structures/index_fr.html

11. Wiki du projet DebianScience/Chemistry :
<http://wiki.debian.org/DebianScience/Chemistry>