

Logiciels libres : ça bouge, en chimie / Free Software: dynamics for chemistry

Georges Khaznadar, professeur de sciences physiques au lycée Jean Bart – Dunkerque

georges.khaznadar@ac-lille.fr, georgesk@debian.org

Résumé : La mobilité, l'adaptabilité sont les fils conducteurs, pour trois sujets différents présentés ici, tous en rapport avec des logiciels libres : un serveur d'exercices de chimie ; des visionneuses de molécules ; divers logiciels libres de chimie régulièrement améliorés dans le monde académique.

Summary: mobility, ability for tuning are connecting threads for three subjects presented here, each one linked with free software: a server for chemistry exercises; molecule viewers; various free software for chemistry regularly improved by academic contributors.

Mots-clés, keywords : logiciel libre, chimie, enseignement, formation / free software, chemistry, education, training.

Un serveur d'exercices de chimie « qui bouge »

Le service web **Wims**¹ 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 sont : énoncé, réponses, types d'analyses de réponses, méthodes de feedback, etc. Comme Wims permet d'insérer des objets *LaTeX* il est facile de présenter les formules avec une *typographie pertinente*.

Wims intègre depuis quelques années un analyseur de syntaxe chimique nommé **Chemeq**, qui permet les choses suivantes : lecture et reconnaissance de formules chimiques au clavier, combinaison et calculs basés sur les formules de chimie, rendu en *LaTeX* des formules.

Voici des exemples de ce que *chemeq* peut faire pour un enseignant de chimie :

- l'étudiant tape « $C_2H_4O_2 \rightarrow C_2H_3O_2^- + H^+$ », *chemeq* sait typographier : $C_2H_4O_2 \rightarrow C_2H_3O_2^- + H^+$
- Wims prend dans une base de données, les demi-réactions suivantes : $r1="Fe^{3+} + e^- \rightarrow Fe^{2+}"$ et $r2="MnO_4^- + 8H^+ + 5e^- \rightarrow Mn^{2+} + 4H_2O"$, puis forme (avec l'aide des nombres d'électrons que *chemeq* sait extraire), la formule spéciale $r2 \sim 5 * r1$; *chemeq* sait interpréter cette formule de la façon suivante :
 $5 Fe^{2+} + 8 H^+ + MnO_4^- \rightarrow 5 Fe^{3+} + 4 H_2O + Mn^{2+}$. **Conséquence** : si la base de données contient 33 demi-réactions d'oxydo-réduction, Wims saura *proposer aléatoirement plus de 1000 questions* différentes dans des exercices.
- Chemeq* sait reconnaître que $2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$ et $H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O$ signifient la même réaction chimique, il est intégré dans Wims comme un des systèmes possibles d'analyse de réponses.

En 2011, on trouve quelques dizaines d'exercices pour l'enseignement de la chimie dans les services Wims, et les outils de développement permettent d'en créer de nouveaux aisément. Chaque exercice autorise des centaines de variantes.

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 : on n'en modifie pas les couleurs ; ils ont un peu seulement les degrés de liberté en vibration et en rotation ; ils sont macroscopiques et font oublier le mouvement brownien ; on ne construit pas de très grands modèles.

Dès le collège, ça vaut la peine d'utiliser des visionneuses de molécules, que chacun peut installer facilement et sans souci légal (leurs licences sont libres !). On recommandera les logiciels **Ghchemical**, **Avogadro**, **Pymol** : ils sont complémentaires.

Logiciel	Licence	Création de modèles	Mesures sur les modèles	Scénarios et animations	Dynamique moléculaire en direct
Avogadro	GPL-2	OUI	oui	non	???
Ghchemical	GPL-2+	oui	oui	non	OUI
Pymol	Libre ²	???	oui	OUI	non

Ces 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.

À ces trois logiciels, on ajoutera l'applette **Jmol**, qui est aussi distribuée sous licence libre. Son intérêt principal est d'intégrer dans les pages web une visionneuse interactive, qui fonctionne grâce au langage Java.

Depuis peu, le serveur Wims autorise l'usage interactif de Jmol pour *certain types de réponse*, où est analysée la capacité d'un étudiant à reconnaître et qualifier telle ou telle partie d'une molécule, dans un modèle tridimensionnel.

¹WIMS : voir <http://wimsedu.info/>, <http://wims.auto.u-psud.fr/wims/>. Wims a été écrit par GANG Xiao, professeur de mathématiques à l'Université de Nice ; ce serveur est diffusé sous licence libre GPL-2, il est maintenu par plusieurs contributeurs sur le site web de SourceSup. Il vient en 2011 en version 4.0, avec quelques dizaines de milliers d'exercices divers.

² Pour la licence de Pymol : voir le texte de la licence particulière. Les caractéristiques des logiciels libres sont présentes.

Des bibliothèques de molécules pour l'enseignant

Les bibliothèques de molécules sont nombreuses, cependant toutes ne sont pas faciles à prendre en main par des débutants. Jérôme Pansanel a publié sous licence libre (GPL-2) un service nommé Chemical-structures, qui s'intègre facilement dans les sites web. Il offre aujourd'hui plus de 500 structures chimiques, bien classées en accessibles plusieurs langues. Il est très facile de récupérer ces molécules au format CML (ce qui provoque l'ouverture immédiate de la visionneuse Avogadro si celle-ci est bien installée), ou à un vingtaine d'autres formats courants, grâce au convertisseur **OpenBabel** qui sait collaborer avec Chemical Structures.

Trouver d'autres ressources libres, pour les chimistes

Les noms cités ci-dessus (Wims, Chemeq, Avogadro, Ghemical, Pymol, Jmol, Chemical-structures, Openbabel) se déclinent très bien en mots-clés pour les moteurs de recherche. Pensez seulement à ajouter le mot « download » ou encore « télécharger » dans votre requête : les liens pertinents apparaîtront aussitôt en tête de liste. Dans le doute, vérifiez toujours les informations de licence avant de distribuer aux étudiants.

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**³ il recense plusieurs dizaines de logiciels libres, qu'on peut installer en quelques minutes sans frais, principalement sur des machines à l'abri des virus (système basé sur **GNU/Linux**). Plusieurs des logiciels recensés par ce projet peuvent aussi être installés sous **Windows**[®].

³Voyez le wiki du projet *DebianScience/Chemistry* : <http://wiki.debian.org/DebianScience/Chemistry>. À ce propos, l'auteur a le statut de *Debian Developer* et maintient de nombreux paquets logiciels pour cette distribution. Si vous souhaitez que *votre* logiciel soit diffusé dans les distributions Debian et Ubuntu, prenez contact !