

Les rouages de Wims pour la chimie

Soumis par Khaznadar Georges
21-10-2007
Dernière mise à jour : 22-10-2007

Wims dispose de deux façons pour créer les exercices : le système OEF et le système Modtool. L'un et l'autre mettent en jeu un langage interprété (en fait un module réalisé en OEF sera compilé vers une structure Modtool, qui est interprétée par le moteur de Wims).

Le moteur de Wims ne possède pas de "savoir chimique", pas plus que de "savoir mathématique". Il s'appuie sur des programmes, gros ou petits, qui sont spécialisés dans un domaine particulier, et font leur travail aussi bien que possible. Pour la chimie, Wims utilise actuellement le programme Chemeq, qui existe empaqueté dans des distributions telles que Debian et Ubuntu.

Voici quelques caractéristiques de Chemeq, qui peuvent donner des idées aux auteurs d'exercices et de cours pour Wims :

- Chemeq sait donner une typographie correcte pour une molécule (même complexe), ce qui permet le rendu par `\instex`.
 - Chemeq sait vérifier si une équation-bilan est équilibrée ou non.
 - Chemeq sait déterminer si deux équations chimiques écrites "en ligne" sont équivalentes ou non. Par exemple, les deux équations suivantes sont équivalentes : $2\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$
 - $\text{H}_2 + 1/2\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$
 - Chemeq sait combiner deux équations, en les additionnant (ou en les soustrayant membre à membre). Exemple : `echo "H+ + e- -> 1/2H2_g # Li_s -> Li+ + e-" | chemeq -n` donnera : $\text{H}^+_{\text{aq}} + \text{Li}_s \rightarrow 1/2 \text{H}_{2\text{g}} + \text{Li}^+_{\text{aq}}$
 - Le cas échéant, si des potentiels redox standard ou des constantes d'équilibre sont données, Chemeq en fait un calcul consistant
 - Chemeq peut calculer la masse molaire d'une molécule.
- Comment utilise Chemeq dans Wims :

La commande Chemeq reconnaît les variables d'environnement `w_chemeq_input` et `w_chemeq_option`, ce qui permet la communication entre Chemeq et Wims. Une bonne façon d'apprendre à les manier consiste à s'authentifier comme développeur de modules à part entière (Modtool), de visiter un module de chimie et d'en importer la source dans sa propre zone de développement. Ensuite, il suffit de copier certaines portions ainsi que la licence du module l'autorise.

On peut aussi gagner du temps, et surtout arriver à travailler en langage OEF, en utilisant les scripts de type Slib. Il existe plusieurs scripts, dans la catégorie chemistry, qui fonctionnent à l'aide de Chemeq.

Les scripts suivants peuvent être utiles :

- `chemistry/chemeq_compare` : pour déterminer si deux équations chimiques sont identiques
- `chemistry/chemeq_equilibrium` : un script pour analyser l'équilibrage d'une réaction chimique. Il permet un affichage sous forme de table HTML des coefficients et moléculaires de l'équation bilan.
- `chemistry/chemeq_mass` : un script pour calculer la masse molaire d'une molécule. Les valeurs de masses utilisées sont celles du Handbook of Physics and Chemistry
- `chemistry/chemeq_tex` : un script pour créer la présentation typographique correcte d'une molécule, en TeX.

La documentation complète sur les scripts Slib est disponible dans la documentation technique en anglais de Wims.

N'hésitez pas à contacter Georges Khaznadar georgesk@ofset.org au sujet de Chemeq : de nombreuses améliorations ont été apportées suite à des suggestions d'utilisateurs, principalement d'utilisateurs de Wims.