

APPRENTISSAGE DE LA PROGRAMMATION APPLICATION EN CHIMIE

V. VIOSSAT, A. DEREIGNE, F. BROSSET

Un enseignement d'informatique a été mis en place en maîtrise de Chimie à l'Université Pierre et Marie Curie en 1992. Les différents objectifs fixés peuvent être résumés de la façon suivante :

- acquérir les concepts et les méthodes de la programmation,
- résoudre un problème chimique en langage informatique,
- réviser des notions de chimie,
- faire un lien entre un programme et un logiciel (base de données),
- faire l'apprentissage d'une base de données,

sachant que le temps de l'enseignement d'informatique est réduit en premier cycle (30h en Deug B ,75h en Deug A) et inexistant en licence de chimie.

L'enseignement de la programmation pose différents problèmes (1, 2, 3) ; parmi ceux ci, on rencontre des confusions entre différentes instructions ainsi qu'une mauvaise catégorisation de ces instructions par rapport aux concepts fondamentaux(4) ; de nombreux autres auteurs soulignent les mêmes difficultés dans la compréhension des concepts informatiques tels que la répétition (5), la structure conditionnelle (6) et la notion de variable (7). De plus, il est reconnu que lorsqu'on présente un complément de connaissances, l'assimilation a plus de chance de succès si celles-ci ont été présentées dans un enseignement antérieur.

L'apprentissage de la programmation se fait en langage Pascal et le but recherché est la création d'un fichier contenant les éléments du tableau périodique. Le fichier étant créé, le programme est complété par les différentes opérations existantes dans les bases de données.

CHOIX DES EXERCICES ET DES DONNÉES

Le nombre d'informations pour chaque élément a été réduit, l'objectif principal étant l'écriture d'un fichier identique à une base de données. Certains exercices proposés permettent de déduire d'autres informations pour les éléments à partir de quelques unes de leurs caractéristiques. Parfois, ces mêmes exercices sont repris pour une autre application du cours avant la construction de la base de données.

Les informations introduites (numéro atomique, symbole, nombre d'isotopes, masses et abondances isotopiques) permettent d'initialiser le fichier ; mais la structure de ce fichier est plus complexe et se présente de la façon suivante :

- numéro atomique,
- symbole,
- nombre d'isotopes, masses et abondances isotopiques,
- masse atomique,
- configuration électronique (période, nombre d'électrons de la couche de valence).

On remarque ainsi que la masse atomique et la configuration ne sont pas incluses dans les données initiales. Aussi les premiers exercices portent sur :

- le calcul de la masse atomique à partir des données des isotopes,
- la détermination de la période, du nombre d'électrons de valence (sous-couches s et p) à partir du numéro atomique.

Ils sont ensuite repris et introduits dans des sous-programmes afin d'obtenir un ensemble bien structuré.

Au cours de l'élaboration du programme, les étudiants ont appliqué les règles de remplissage des couches et sous-couches. La notion de sous-couche d n'a pas été introduite, car nous nous sommes limités à l'élément calcium.

A l'aide de cette structure de données, il est facile de construire un fichier des éléments et d'introduire les différentes opérations existantes dans les bases de données :

- détermination du symbole d'un élément pour un nombre atomique donné et vice-versa,

- liste de tous les éléments appartenant à un groupe donné et recherche de la colonne correspondante des alcalins, des halogènes ou des gaz rares,
- détermination de la charge des ions d'un élément ayant par exemple la structure stable du gaz rare le plus voisin,
- affichage du tableau périodique complet.

Parmi toutes les représentations (arbre généalogique avec l'hydrogène comme racine (8), modèle en spirale (9)...), nous avons retenu la plus classique.

Ces différentes opérations concernant le tableau périodique se retrouvent également dans divers logiciels (10-14) et bases de données (15,16).

CONTENU DU COURS D'INFORMATIQUE

Au début de notre enseignement, nous avons présenté des généralités sur la structure interne des ordinateurs et le système d'exploitation UNIX. Le contenu du cours de programmation a été le suivant :

- déclarations : * types simples et structurés (tableau, article, fichier),
 - * variables,
 - * sous programmes (fonction, procédure),
- instructions : * affectation,
 - * entrée/sortie,
 - * décision,
 - * répétition.

Il nous a paru essentiel d'insister sur la notion de programmation structurée (modulaire) en utilisant des fonctions et des procédures. De même, il a été très important d'expliquer les différences entre le langage Pascal et le langage de commande du système d'exploitation, ainsi qu'entre les programmes source (Pascal) et objet (binaire) seul exécutable, créé par le compilateur. Il est un fait évident que pour une majorité d'étudiants, le compilateur a pour seule fonction la reconnaissance des erreurs de syntaxe dans le programme source (4).

CONDITIONS DE TRAVAIL

Cet enseignement présenté aux 220 étudiants de la maîtrise de chimie a duré 15 heures et a été réparti sur cinq semaines. Etant donné la durée limitée de celui-ci, il nous a semblé important de faire un choix sur un sujet donné et d'assurer une progression effective des exercices et des problèmes.

Pour les travaux pratiques, les consoles ont été connectées en réseau à une machine IBM RISC SYSTEM 6000 utilisant le système d'exploitation UNIX et le compilateur IBM AIX XL Pascal. Ce langage permet une approche structurée du problème à traiter (choix des variables, découpages successifs du problème en sous-problèmes).

CONCLUSION

Les connaissances de chimie et l'apprentissage de la programmation ont permis aux étudiants la création d'une base de données contenant les éléments du tableau périodique. Les différents objectifs visés ont été atteints. Les étudiants de maîtrise de chimie ont pu traiter un problème par l'informatique et découvrir le système UNIX implanté sur la plupart des gros systèmes. Cet enseignement a permis également de mettre en évidence la notion générale d'arborescence (type article, structure du système Unix, logiciels...).

D'autres applications peuvent également être envisagées (résolution d'un problème chimique différent, utilisation d'une base de données existante...).

Il faut également reconnaître que des difficultés importantes sont apparues dès le début de cet enseignement (hétérogénéité des groupes, confusions entre les différentes instructions Pascal au regard des concepts fondamentaux (4)). Ces difficultés ont été en partie rapidement résolues.

Il est important de mentionner que le bilan général nous paraît très positif. A la fin de cet enseignement, une enquête effectuée auprès des étudiants a montré le grand intérêt de l'informatique dans l'enseignement de la chimie. Ainsi, certains d'entre eux ont choisi un module d'informatique pour terminer leur maîtrise de chimie.

V. VIOSSAT, A. DEREIGNE, F. BROSSET

Université P. et M. Curie - Maîtrise de Chimie

Bâtiment F - Boîte courrier 65 - 4, Place Jussieu - 75005 Paris

BIBLIOGRAPHIE

1. ARSAC J. : *Les bases de la programmation*, Dunod, 1983.
2. BENEJAM J.P., POC-PAGET M.M. : Journées de la SPECIF, Besançon, 1988, 125.
3. BENEJAM J.P., DURAND T. : *Actes de la troisième rencontre francophone de didactique de l'informatique*, Sion, 1992, 141.
4. BRILHAULT Y, DUBOUÉ M. : *Environnement Interactif d'apprentissage avec ordinateur*, Ed. Eyrolles, Paris, 1993,103.
5. DAGDILESIS V., BALACHEFF N., CAPONNI B. : Aster N°11, Informatique, regards didactiques, INRP, 1990, 11, 45.
6. ROGALSKI J., HÉ Y. : *European Journal of Psychology of Education*, 1989, 4, 1, 71.
7. SAMURCAY R. : *The concept of variable in programming : its meaning and use in problem solving by novice programmers*, 1989, 161 (Ed. Soloway & J.C. Spohrer).
8. ELSWORTH J.F. : *Educ. Chem.*, 1989, 110.
9. STRONG F.C. : *J. Chem. Educ.*, 1985, 62, 456
10. KOTZ J.C : *J. Chem. Educ.*, 1989, 66, 9, 750.
11. BANKS A.J. : *J. Chem. Educ. : Software*, 1989, 1C(1), 19.
12. ROSE M. : *J. Chem. Educ. : Software*, 1989, 2A(2), 13, 29, 35.
13. FARRIS M. : *J. Chem. Educ.*, 1989, 66, 9, 756.
14. CABROL-BASS D., LUFT R., MOORE J. : Deuxièmes Journées EIAO de Cachan, Ed. ENS Cachan, 1991, 141.
15. HODSON D. : *Educ. Chem.*, 1991,78.
16. CATRIN F., SAROUL M. : *Bulletin EPI (Enseignement Public et Informatique)*, 1993, 69, 145.