

Nouveaux plugins d'évaluation pour la Chimie : Tiny molstructures, reacsimilarity

Louis Plyer ~ Céline Pervès

Travail conjoint

- Laboratoire de chemo informatique - Université de Strasbourg
 - Gilles Marcou - chef de projet / maître de conférence
 - Louis Plyer - développeur, thésard
- Direction du Numérique - Université de Strasbourg
 - Céline Pervès expertise, accompagnement et développement

Les plugins de Chemoinformatique

Plugins développés précédemment



Molsimilarity

- type de question
- réponse sous forme de dessin de molécule
- serveur d'évaluation comparant molécules proposées avec la réponse attendue
 - Note : réel entre 0 et 1



Molstructure

- Outil éditeur atto pour créer des images de molécules
- via l'éditeur atto Moodle

Nouveaux plugins

-  Reacsimilarity
 - Type de question comme molsimilarity mais avec des réactions chimiques
-  Tiny Molstructure
 - Outil éditeur tiny pour créer des images de molécules

Plugin éditeur Tiny Molstructure



Tiny Molstructure

- Insérer des dessins de structures chimiques
 - Dans les éditeurs de texte Moodle
- Basé sur la librairie ChemDoodle
- Migration atto → tiny
- Nouvelles fonctionnalités (en cours de finition)
- Migration YUI → full ES6
 - ⇒ Compatible avec les prochaines version de Moodle

Tiny Molstructure - Démo - Créer une molécule

The screenshot shows a Moodle course page in a Mozilla Firefox browser. The URL is <https://moodle-dephy.app.unistra.fr/course/view.php?id=4>. The page title is "Modifier le cours : Chimie". The navigation menu includes "test", "Accueil", "Tableau de bord", "Mes cours", and "Administration du site". The user is logged in as "AU". The page is in "Mode d'édition" (Edit mode). The main content area shows three sections, each with a "Ajouter une section" header and a "+ Ajouter une activité ou ressource" button. The sections are: "Molstructure", "Section 3", and "Section 4". A video player is overlaid at the bottom of the page, showing a play button, a progress bar at 0:00 / 0:48, and volume and full-screen controls.

Tiny Molstructure - Démo - Charger une molécule

The screenshot displays a Moodle course page for 'Chimie'. The page title is 'Ajout Zone texte et média à Molstructure'. Under the 'Général' section, there is a 'Texte' field with a TinyMCE editor. The editor toolbar includes options for 'Modifier', 'Afficher', 'Insérer', 'Format', 'Outils', 'Tableau', and 'Aide'. The text area is currently empty, showing '0 mots' and the 'tiny' logo. The video player interface at the bottom shows a play button, a progress bar at 0:00 / 0:57, and a volume icon.

Tiny Molstructure - Évolutions

- Mise à jour librairie ChemDoodle
- Représentation Molécules 3D

Tiny Molstructure - Démonstration

new39plf Accueil Tableau de bord Mes cours Administration du site Aide Moodle Plus Mode d'édition

▼ Généralités Tout replier

[+](#) Ajouter une activité ou ressource

Ajouter une section

▼ Section 1 Tout replier

[+](#) Ajouter une activité ou ressource

Ajouter une section

▼ Section 2 Tout replier

[+](#) Ajouter une activité ou ressource

0:00 / 0:58

Tiny Molstructure - Un Mojito

The screenshot shows a Moodle course page titled "Mojito time". The page displays three ball-and-stick molecular models, each with its name to the right:

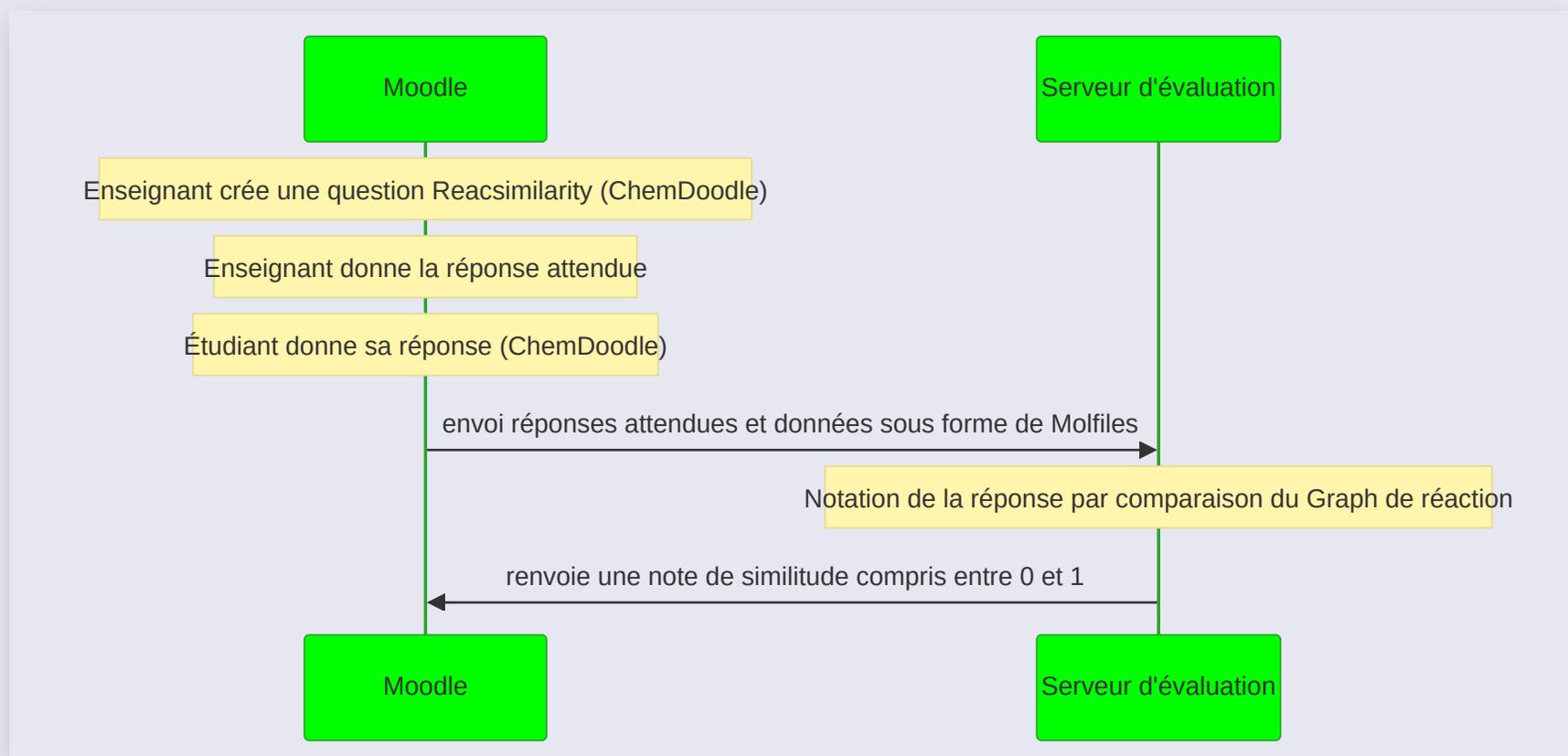
- Menthol**: CC1=C(C(C1)O)C(C)C
- Ethanol**: CCO
- Acide citrique**: OC(CC(=O)O)C(=O)O

The interface includes a navigation menu at the top with "new39plf", "Accueil", "Tableau de bord", "Mes cours", "Administration du site", and "Aide Moodle". A "Mode d'édition" toggle is visible in the top right. A question mark icon is located in the bottom right corner of the content area.

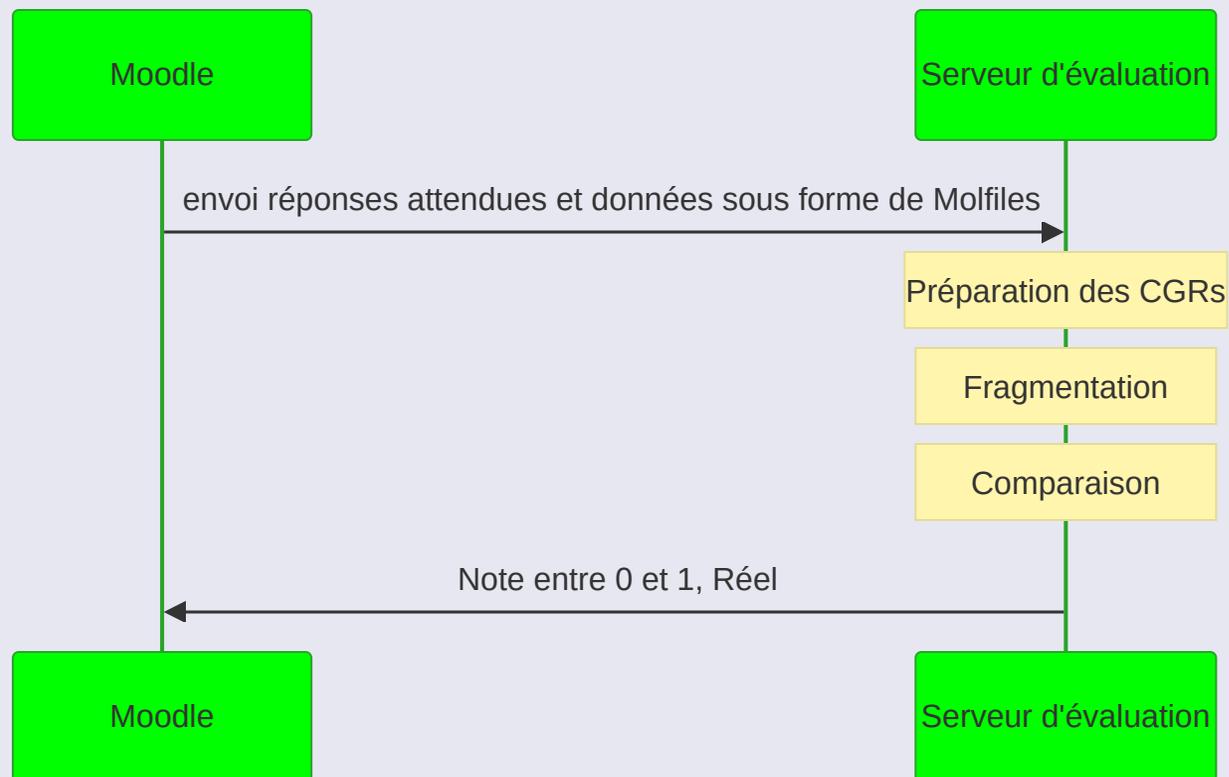
ReacSimilarity



Reacsimilarity - Principe



Reacsimilarity - Le serveur d'évaluation

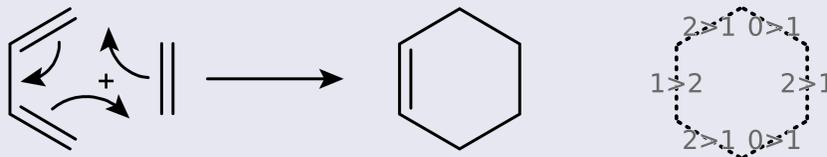


Molfiles

- Format de fichier de description de structures chimiques
 - Liste atomes
 - Types de liaisons
 - Coordonnées spatiales 2D/3D
 - Attributs associés aux atomes et liaisons
 - Attributs associés à la structure entière (e.g charge)

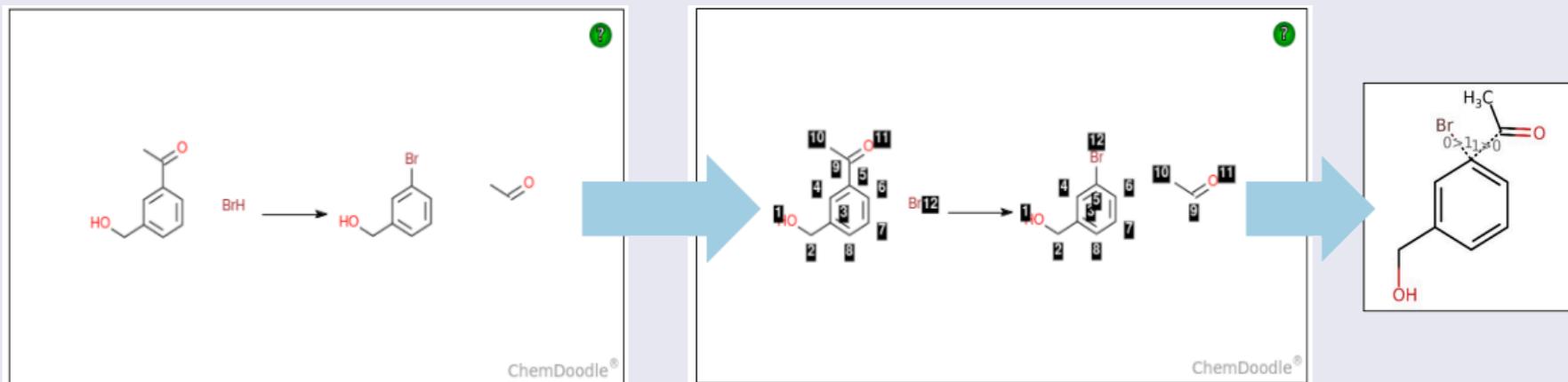
CGRs

- Condensed graph of reaction (CGR)
 - CGR = pseudomolécule
 - \Rightarrow Méthodes de chemoinformatiques applicables



Reacsimilarity - Construction d'une CGR

- Atom mapping: nécessaire pour relier les graphes des réactifs et des produits
- Attribue un identifiant unique aux atomes des réactifs et des produits.
- Permet de trouver l'environnement d'un atome de produit dans les atomes des réactifs
- Déterminer les changements dans le graph
- Si l'environnement a changé, liaisons et/ou atomes dynamiques.



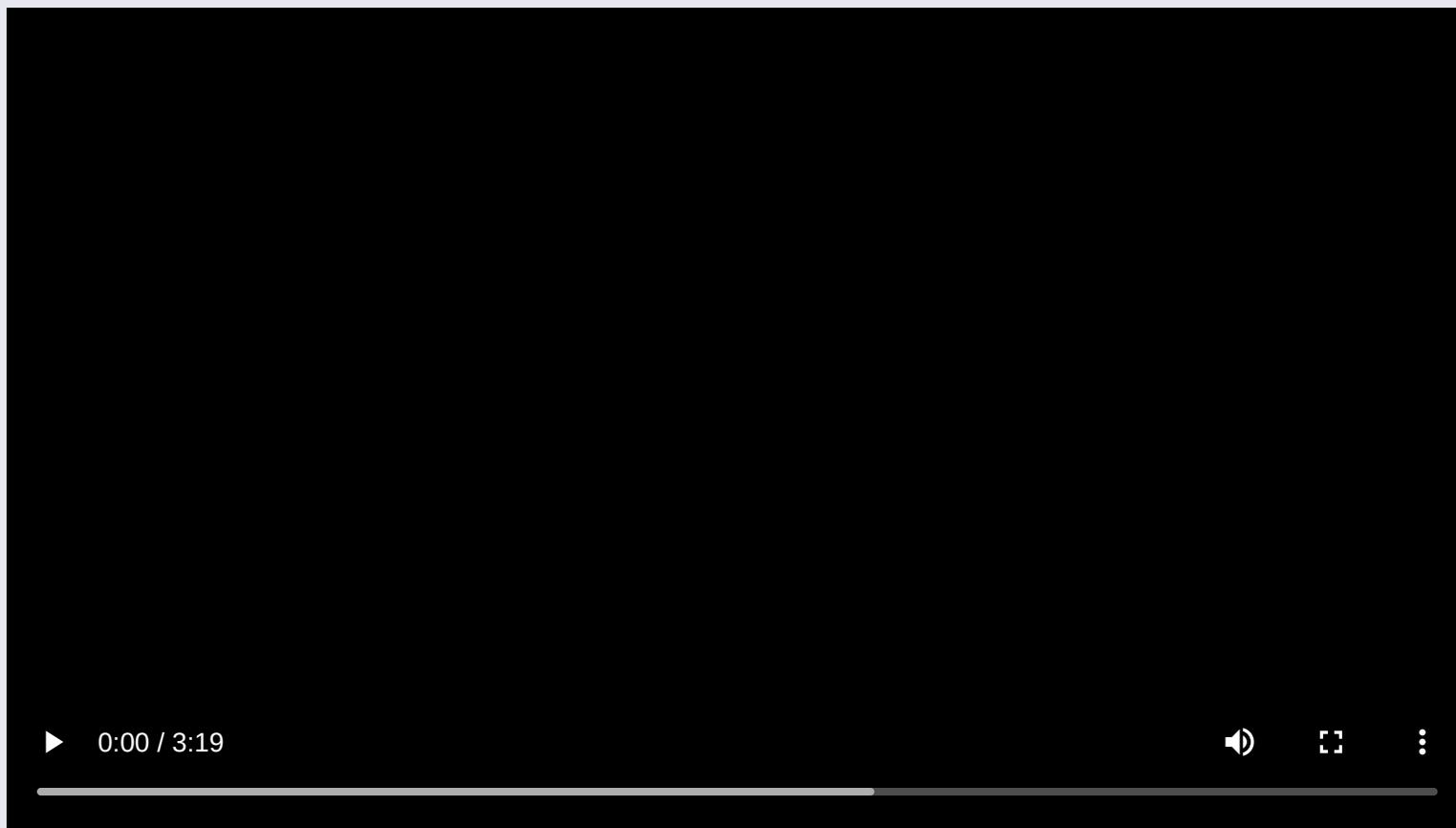
Reacsimilarity - Options de notation

- Threshold
 - valeur à partir de laquelle la note est acceptée
 - en dessous la note sera de 0
- Alpha
 - Permet de définir la sévérité de la notation & *[Math Processing Error]*
- Stéréochimie
 - Définit si la stéréochimie est prise en compte

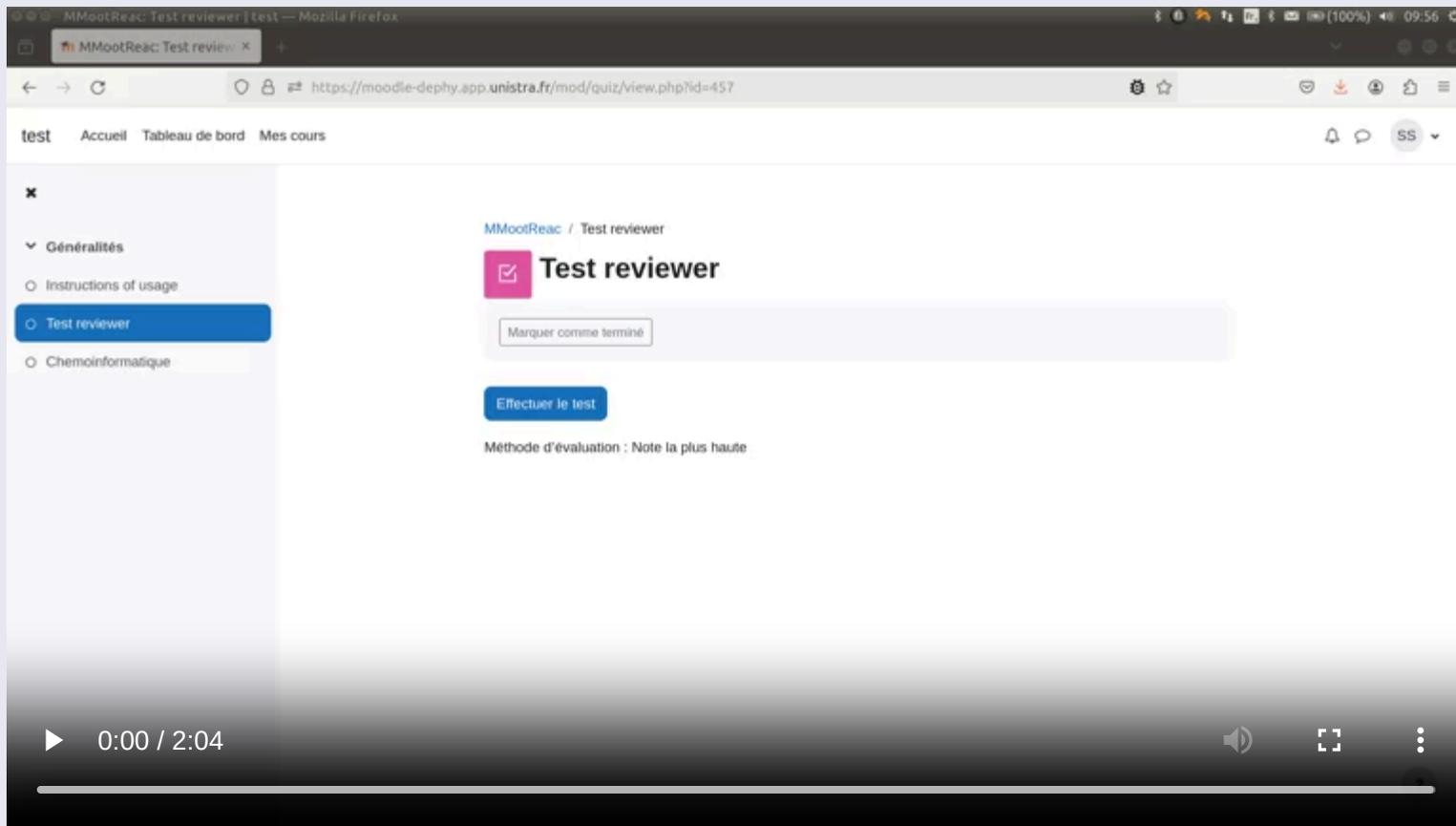
Reacsimilarity - Démo Enseignant

The screenshot displays a Moodle quiz page for 'Chemoinformatique'. The page title is 'MMootRec / Chemoinformatique' and the quiz is labeled 'TEST'. The navigation menu includes 'Test', 'Paramètres', 'Questions', 'Résultats', 'Banque de questions', and 'Plus'. A 'Marquer comme terminé' button is visible at the top. Below it is an 'Ajouter question' button. The evaluation method is set to 'Note la plus haute'. A yellow message box states 'Aucune question n'a encore été ajoutée'. A 'Retour au cours' button is located at the bottom. The video player interface at the bottom shows a play button, a progress bar at 0:00 / 2:18, and volume and full-screen controls.

Reacsimilarity - Démo Enseignant



Reacsimilarity - Démo Étudiant



The screenshot shows a web browser window displaying a Moodle quiz page. The browser's address bar shows the URL: <https://moodle-dephy.app.unistra.fr/mod/quiz/view.php?id=457>. The page title is "test". The navigation menu includes "Accueil", "Tableau de bord", and "Mes cours". A sidebar on the left contains a menu with "Généralités", "Instructions of usage", "Test reviewer" (highlighted in blue), and "Chemoinformatique". The main content area displays the quiz title "MMootReac / Test reviewer" and "Test reviewer" with a pink icon. Below the title is a button labeled "Marquer comme terminé" and another button labeled "Effectuer le test". At the bottom of the main content area, it says "Méthode d'évaluation : Note la plus haute". The video player controls at the bottom show a play button, a progress bar at 0:00 / 2:04, a volume icon, a full screen icon, and a settings icon.

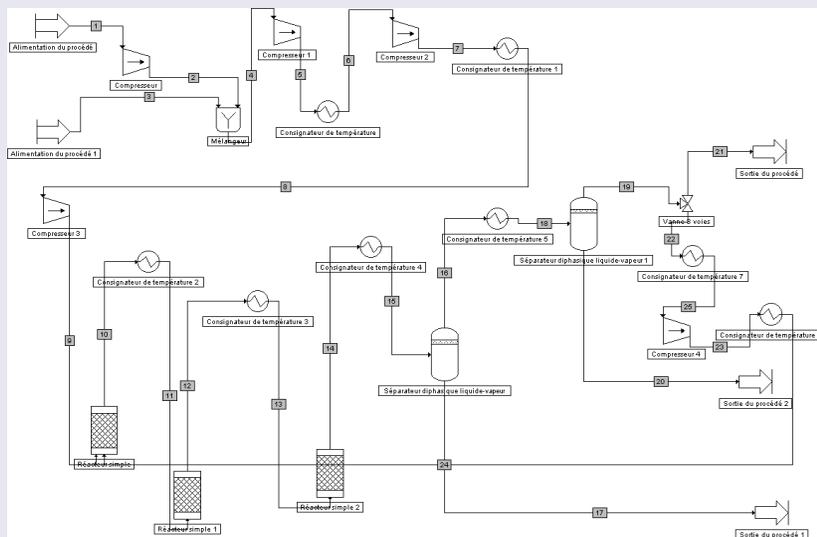
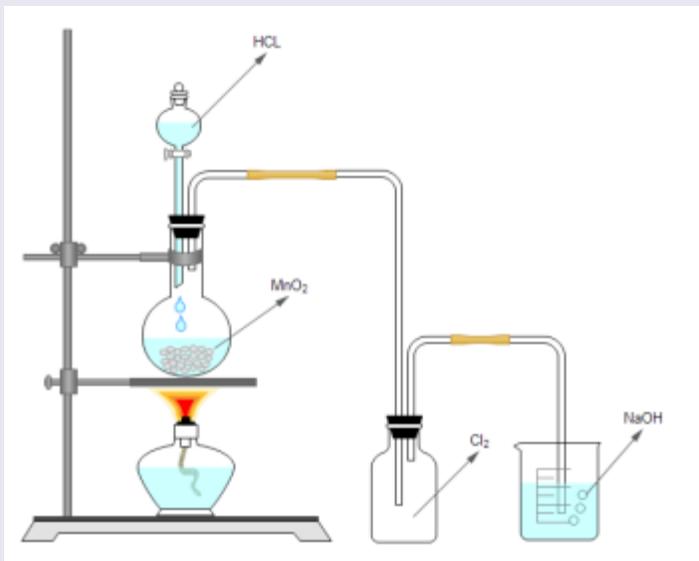
Futur

Futures évolutions

- Mise à jour des différents plugins au fil des versions Moodle
- Tiny
 - Finitions nouvelle version avec 3D
- ReacSimilarity et Molsimilarity
 - Mise à jour des serveurs d'évaluation
 - Passe en full ES6 pour Molsimilarity
- Évolution Selon les retours

Nouveau plugin en préparation

- Génie chimique
 - Développement d'un sketcher open source, plugins tinymce et question type en préparation



- Laboratoire Chemoinformatique / DNum / Société Ikigai

Contacts Liens

- Les plugins : sur moodle.org
- Publication
 - Plyer, L., Marcou, G., Perves, C. et al.
Implementation of a soft grading system for chemistry in a Moodle plugin. J Cheminform 14, 72 (2022).
- Laboratoire de Chemoinformatique
 - g.marcou@unistra.fr
 - louis.plyer@unistra.fr
- DNum
 - cperves@unistra.fr
- ChemDoodle Web Components
- Anatomie d'un fichier Molfil

Liens vers les plugins Moodle



Questions