

# 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 proposée 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

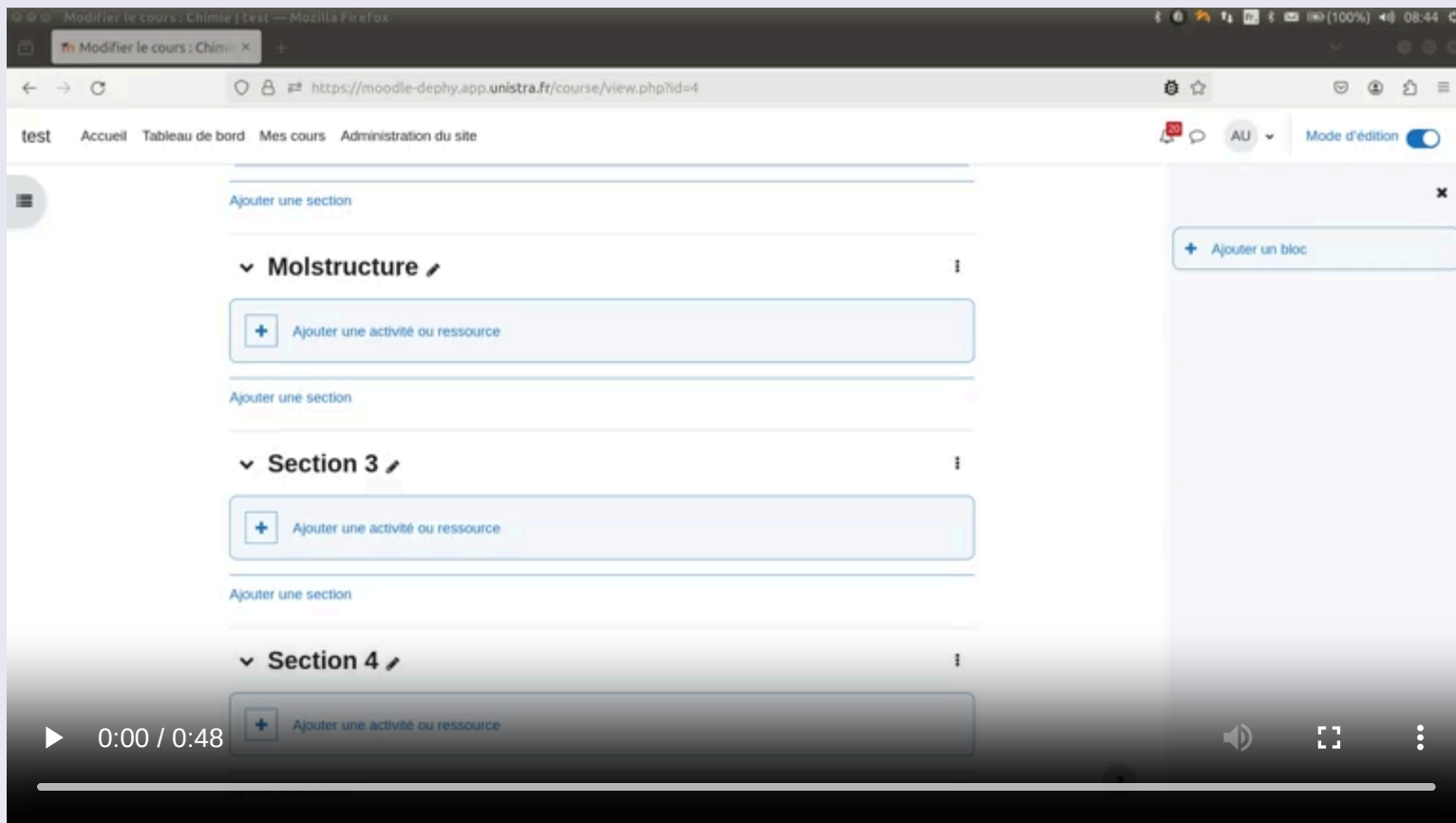
# Plugin éditeur Tiny Molstructure



## 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 displays a Moodle course page in a Mozilla Firefox browser. The address bar shows the URL: <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" and the "Mode d'édition" is turned on. The main content area shows a "Ajouter une section" interface with three sections: "Molstructure", "Section 3", and "Section 4". Each section has a "+ Ajouter une activité ou ressource" button. A right-hand sidebar contains a "+ Ajouter un bloc" button. A video player is overlaid at the bottom, 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 shows 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, and the word count is '0 mots'. The page also features a navigation menu with 'Cours', 'Paramètres', 'Participants', 'Notes', 'Rapports', and 'Plus'. A video player is visible at the bottom of the page, showing a play button and a progress bar at 0:00 / 0:57. The video player also has controls for volume, full screen, and a settings menu.

# 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

[+](#) Ajouter une activité ou ressource

Ajouter une section

▼ Section 2

[+](#) 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:

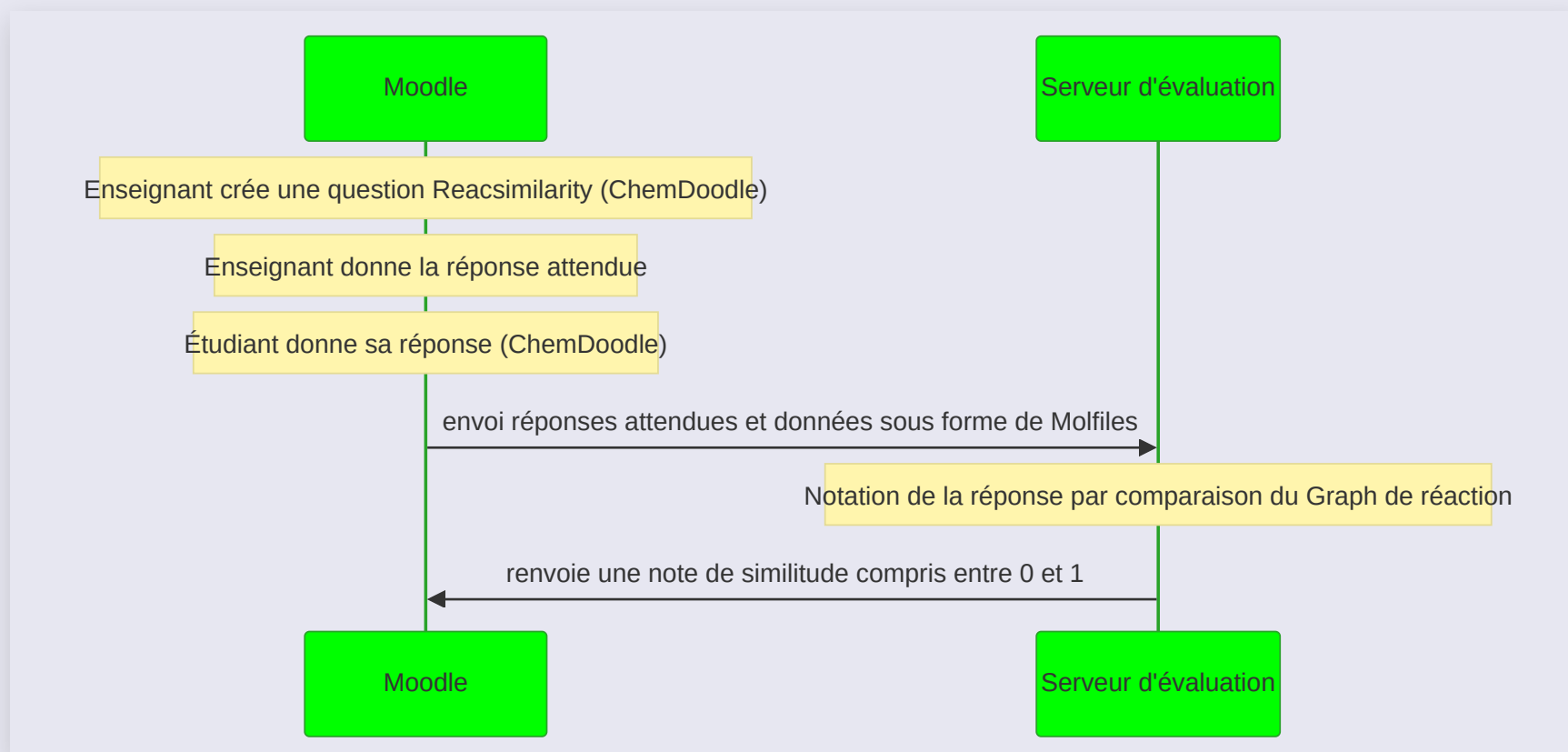
- Menthol**: CC1=C(C(C1)O)C(C)C
- Ethanol**: CCO
- Acide citrique**: OC(CC(=O)O)C(=O)O

The interface includes a navigation menu at the top with "new39plf", "Accueil", "Tableau de bord", "Mes cours", "Administration du site", "Aide Moodle", and "Plus". 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.

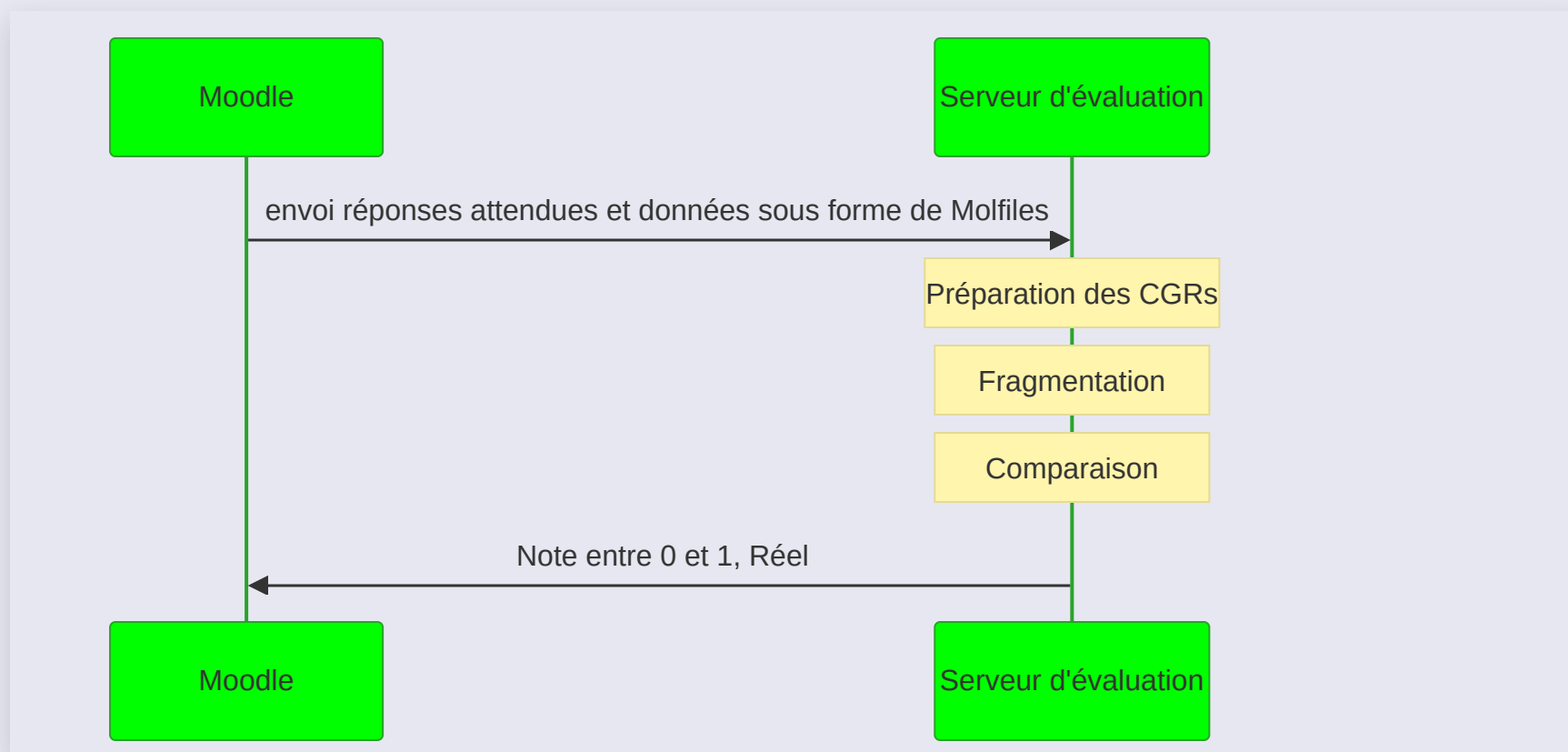
# ReacSimilarity



# Reacsimilarity - Principe



# Reacsimilarity - Le serveur d'évaluation



# Molfiles

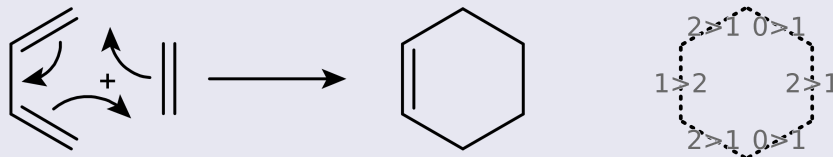
- Format de fichier de description de structures chimiques
  - Liste atomes
  - Types de liaisons
  - Coordonnées spatiales 2D/3D
  - Attributs associés aux atomes et liaisons
  - Attributs associés à la structure entière (e.g charge)





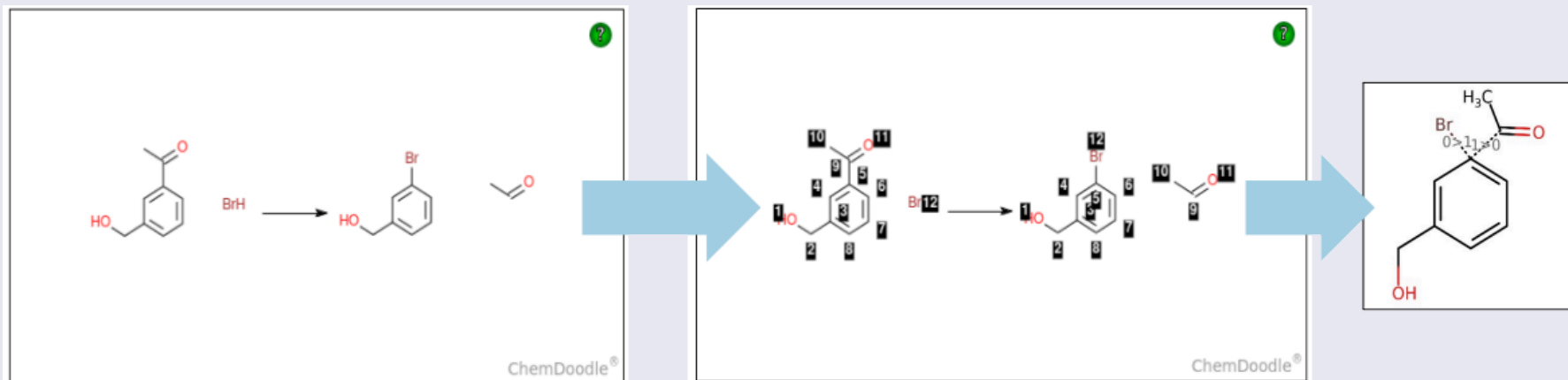
## CGRs

- Condensed graph of reaction (CGR)
  - CGR = pseudomolécule
  - ⇒ 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.



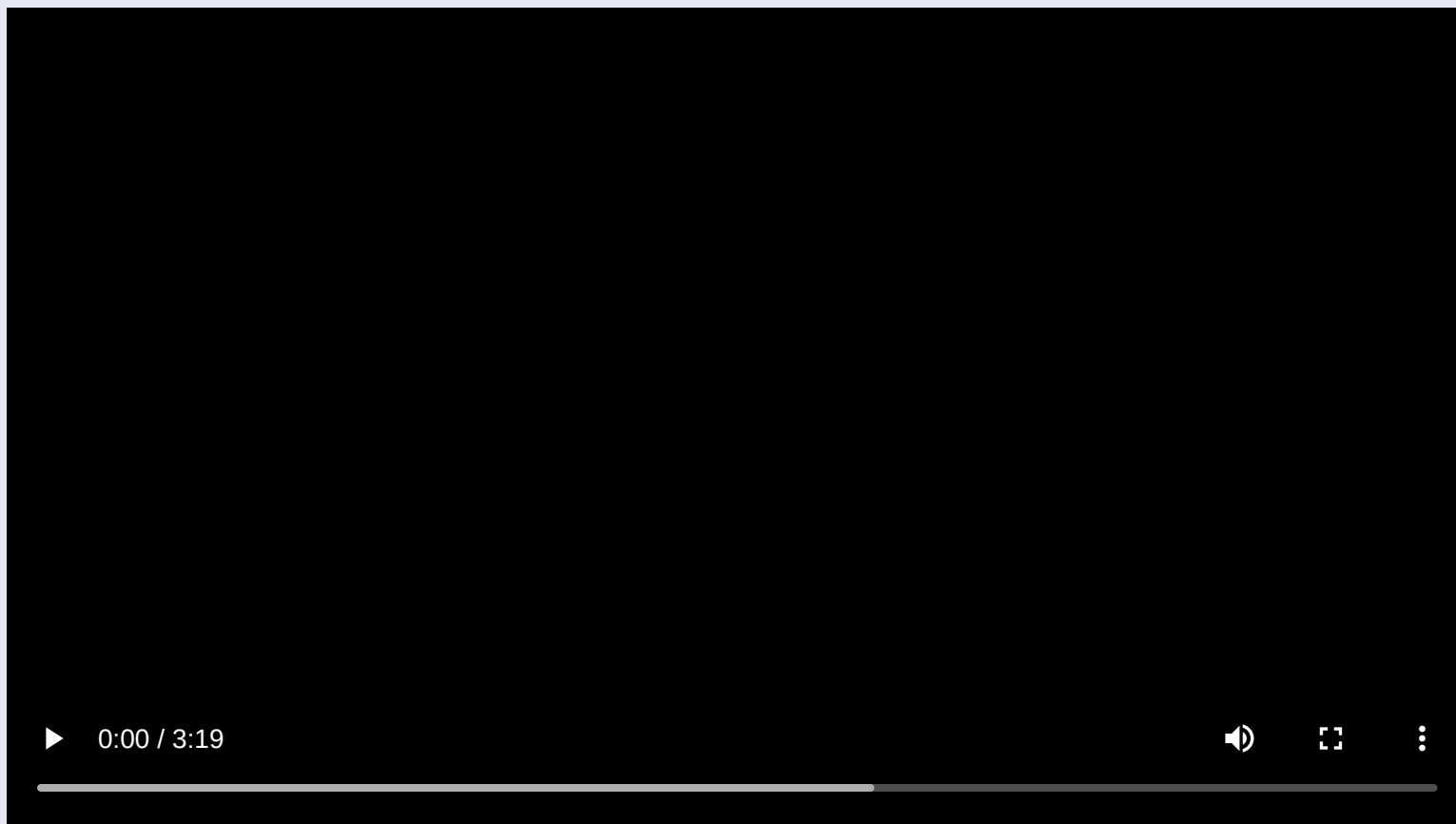
## Reacsimilarity - Options de notation

- 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

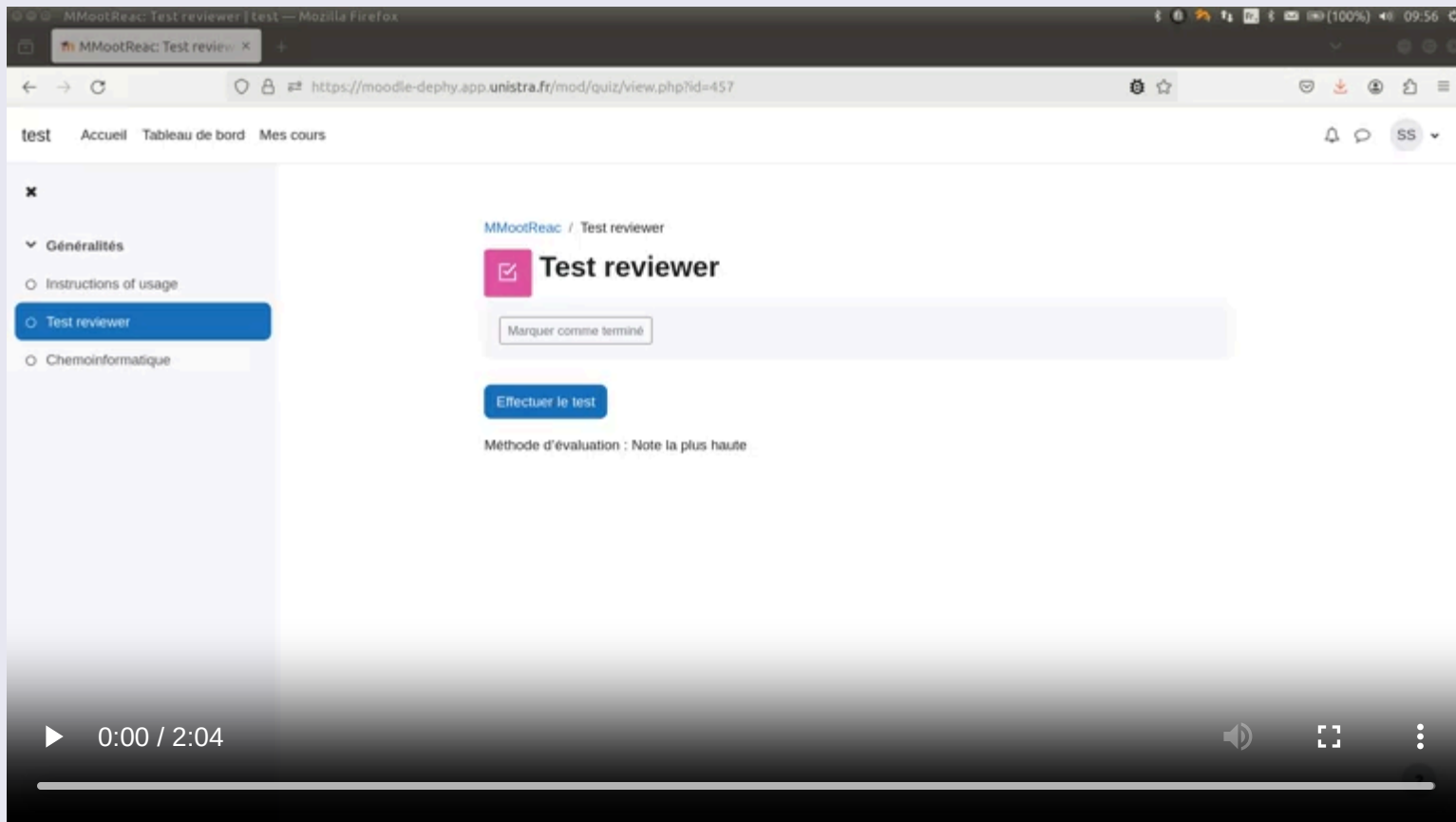
# Reacsimilarity - Démo Enseignant

The screenshot 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=458&/orview=1](https://moodle-dephy_app.unistra.fr/mod/quiz/view.php?id=458&/orview=1). The page title is "test". The navigation menu includes "Accueil", "Tableau de bord", "Mes cours", and "Administration du site". The main content area is titled "MMootRec / Chemoinformatique" and "TEST Chemoinformatique". Below the title, there are tabs for "Test", "Paramètres", "Questions", "Résultats", "Banque de questions", and "Plus". A button labeled "Marquer comme terminé" is visible. Below it is a button "Ajouter question". The evaluation method is listed as "Méthode d'évaluation : Note la plus haute". A yellow message box states "Aucune question n'a encore été ajoutée". At the bottom of the main content area is a button "Retour au cours". On the right side, there is a sidebar with a button "Ajouter un bloc". The video player interface at the bottom shows a play button, a progress bar at "0:00 / 2:18", a volume icon, a full screen icon, and a settings icon.

## 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 "Test reviewer" with a pink icon, a "Marquer comme terminé" button, and an "Effectuer le test" button. Below the buttons, it indicates the evaluation method: "Méthode d'évaluation : Note la plus haute". At the bottom of the screenshot, a video player interface is visible, showing a play button, a progress bar at "0:00 / 2:04", and icons for volume, full screen, and settings.

# Futur

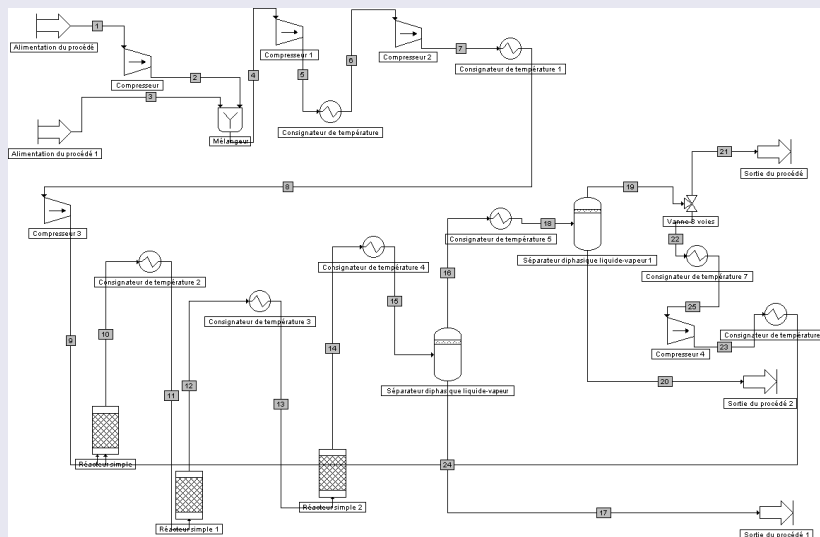
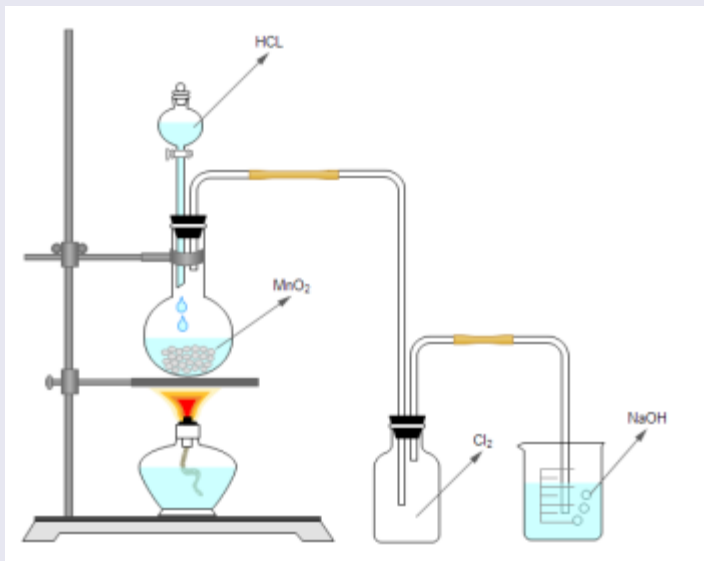


## Futures évolutions

- 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](https://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](mailto:g.marcou@unistra.fr)
  - [louis.plyer@unistra.fr](mailto:louis.plyer@unistra.fr)
- DNum
  - [cperves@unistra.fr](mailto:cperves@unistra.fr)
- ChemDoodle Web Components
- Anatomie d'un fichier Molfil

Liens vers les plugins Moodle



# Questions