



ACTION 5



1			ANR-20-NCUN-0004 DéPhy COPIL#5		Université de Strasbourg
---	--	---	----------------------------------	---	-------------------------------------

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Démo plug in: Connection to the Moodle test platform

<https://moodle-dephy.app.unistra.fr/>

Moodle DEPHY Test

Nom d'utilisateur

Mot de passe

Se souvenir du nom d'utilisateur

Connexion

[Vous avez oublié votre nom d'utilisateur et/ou votre mot de passe ?](#)


Votre navigateur doit supporter les cookies [?](#)

Des cours peuvent être accessibles aux visiteurs anonymes

Connexion anonyme

Se connecter au moyen du compte :

CAS



Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Creation of the question (1)

Modification du test Journée Déphy

Questions : 0 | Ce test est ouvert

Note maximale

Total des notes : 0,00



Mélanger

Ajouter ▾

- + une question
- + de la banque de questions
- + une question aléatoire

Choisir un type de question à ajouter

- Calculée
 - Calculée à choix multiple
 - Calculée simple
 - Cloze (réponses intégrées)
 - Glisser-déposer sur texte
 - Glisser-déposer sur une image
 - Marqueurs à glisser-déposer
 - Molsimilarity
 - Sélectionner les mots manquants
- AUTRE
- Description

A molsimilarity question type that allows the quantitative comparison between the answer given by the student and the one given by the teacher.



Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Creation of the question (2)

Nom de question

Texte de la question

Note par défaut

Feedback général

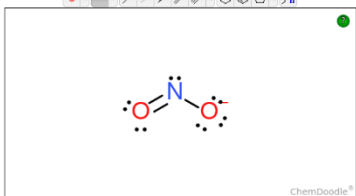
Numéro d'identification

Please select a value of threshold. The answer is refused below this threshold.

Please select a value of alpha value. It will be used to modify the grade accordingly.

Option stereochemistry

Correct answers You must provide at least one possible answer. Please draw a molecule and click on the "Insert given structure as answer/..." button for each answer.



Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chémoinformaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Formulas

- Grade g_{rest} : Tanimoto similarity between the student's and teacher's structures, computed on the REST server.

- Stereochemistry analysis not requested ?

→ g_{rest} sent back to Moodle.

- Otherwise ?

$$\rightarrow g_{rest} = \begin{cases} \frac{\#Correct\ Stereo\ Center}{\#Total\ Stereo\ Center}, & \text{if similarity score} = 1 \\ 0, & \text{if similarity score} \neq 1 \end{cases}$$

- g_{rest} returned to the Moodle server, final grade g is calculated:

$$\rightarrow g = \begin{cases} (g_{rest})^\alpha, & \text{if } (g_{rest})^\alpha \geq t \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

- t and α are user defined parameters.
- α parameter modulates teacher's exigency:
 - $\alpha < 1$ soft grading
 - $\alpha > 1$ severe grading

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER

Plugin Molsimilarity : Creation of the question (3)

Please select a value of alpha value. It will be used to modify the grade accordingly.

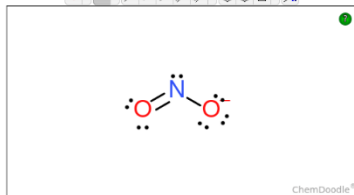
1

Option stereochemistry

Stereo must not be taken in account

Correct answers

You must provide at least one possible answer. Please draw a molecule and click on the "Insert given structure as answer..." button for each answer.



Please insert a molecule

Réponses

Answer: 1

Note 100%

Insert given structure as answer / update the answer with the structure

View structure in the editor



Pensez au placement des électrons de valence !



Please select a value of alpha value. It will be used to modify the grade accordingly.

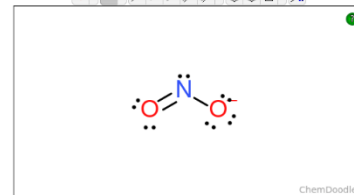
1

Option stereochemistry

Stereo must not be taken in account

Correct answers

You must provide at least one possible answer. Please draw a molecule and click on the "Insert given structure as answer..." button for each answer.



Réponses

Answer: 1

Note 100%

Insert given structure as answer / update the answer with the structure

View structure in the editor



Pensez au placement des électrons de valence !

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER

Plugin Molsimilarity : Deletion of an answer (4)

Answers

Answer: 1

Grade: 100%

Insert given structure as answer / update the answer with the structure

View structure in the editor

Clear the answer

Feedback

feedback test

Blanks for 1 More Answers

Answers

Answer: 1

Grade: Clear the answer

Insert given structure as answer / update the answer with the structure

View structure in the editor

Clear the answer

Feedback

feedback test

Blanks for 1 More Answers

- Set the grade to « Clear the answer »
- Click on the « Clear the answer» button
- Click on the “save changes and continue editing” or “save changes” button

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Student interface

The image displays the Molsimilarity student interface for a chemistry question. The question is: "Dessiner la forme de Lewis du Nitrite." (Draw the Lewis structure of Nitrite). The student's answer is shown in a ChemDoodle editor, displaying the Lewis structure of nitrite (NO₂⁻). A red arrow points to a "Terminer le test..." button. A red box highlights the score "Note de 1,00 sur 1,00" in the question details. The correct answer is shown in a separate box, displaying the Lewis structure of nitrite (NO₂⁻). The text below the correct answer reads: "L'ion nitrite est la base conjuguée de l'acide nitreux. L'acide nitreux est un acide faible instable de formule HNO₂. La formule de l'ion nitrite est NO₂⁻." The correct answer is also displayed in a box with the text "The correct answer is:".

Question 1
Réponse enregistrée
Noté sur 1,00
Marquer la question
Modifier la question

Question 1
Correct
Note de 1,00 sur 1,00
Marquer la question
Modifier la question

Dessiner la forme de Lewis du Nitrite.

Answer:

ChemDoodle®

Terminer le test...

Dessiner la forme de Lewis du Nitrite.

Answer:

L'ion nitrite est la base conjuguée de l'acide nitreux. L'acide nitreux est un acide faible instable de formule HNO₂. La formule de l'ion nitrite est NO₂⁻.

The correct answer is:

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Your turn

Possible types of question:

- Identify the major product of a reaction.
- Drawing a Lewis structure.
- Drawing a given configuration of a molecule (R/S, E/Z)
- Question with multiple good answers: ex “What is the structure of glucose ?”, where the answer can be one of three structures: open, furanose and pyranose.

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molsimilarity : Stereochemistry

Stereocenters comparison using INCHI: impossible if the structures (without stereo labels) are not identical.

If the similarity score is not equal to 1, a $g_{rest} = 0$ is returned to Moodle.

4th example: student has confused an alcohol function with an ether: the Tanimoto similarity score

student/teacher structures is 0.8.

Therefore:

→ $g_{rest} = 0$, if the stereochemistry is required

→ $g_{rest} = 0.8$ otherwise.

Teacher answer	Student answer	Similarity of stereo-omitted molecular graph	Stereochemistry used for grading ?	Grade ?
		1	Yes	1
		1	No	1
		1	Yes	0,5
		1	No	1
		1	Yes	0
		1	No	1
		1	Yes	0
		1	No	1
		0,8	Yes	0
		0,8	No	0,8

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

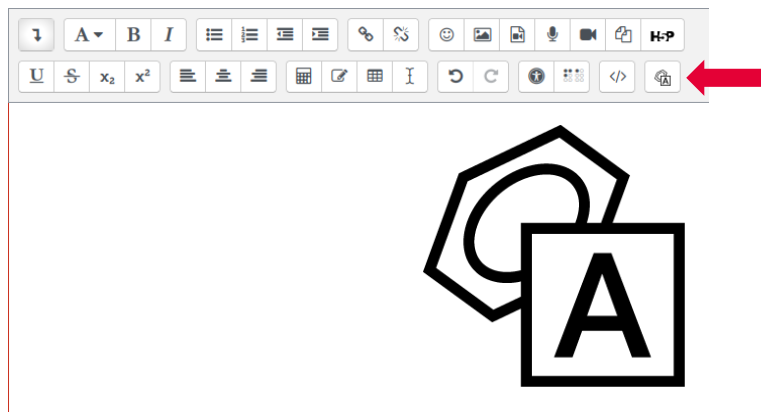
Plugin Molstructure

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molstructure : Where to find the Molstructure plugin / Interface

In any question, the plugin is available to add a picture of a molecule/reaction.



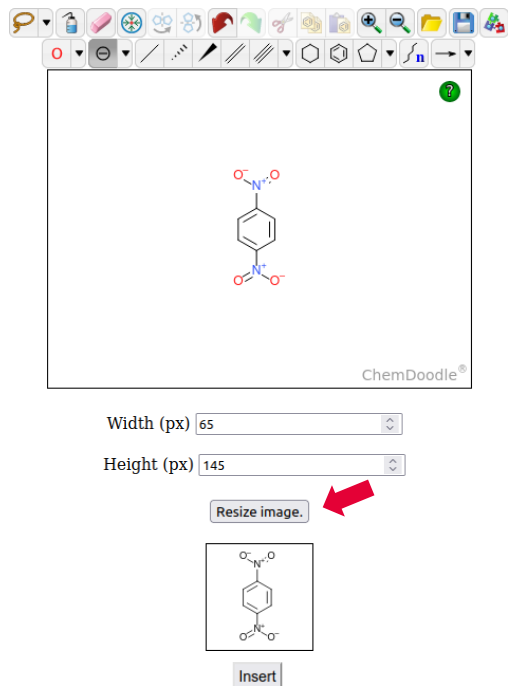
Draw a molecule, resize the canvas and click on insert.

The screenshot shows the Molstructure plugin interface. It features a toolbar at the top with various drawing tools. Below the toolbar is a large white canvas for drawing. To the right of the canvas is a red arrow pointing to the text "Editor". Below the canvas are two input fields for "Width (px)" and "Height (px)", with a red arrow pointing to the text "Resizing of the image". Below these fields is a "Resize image" button and a small white preview window, with a red arrow pointing to the text "Live preview". At the bottom of the interface is an "Insert" button, with a red arrow pointing to the text "Click to insert the drawing".

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molstructure: How to resize the image



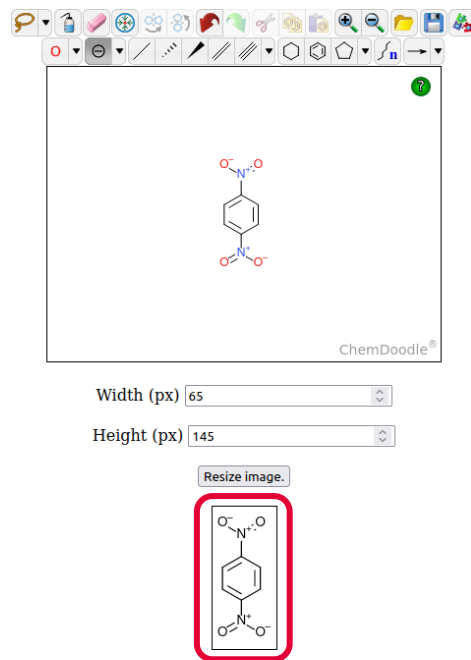
ChemDoodle®

Width (px) 65

Height (px) 145

Resize image.

Insert



ChemDoodle®

Width (px) 65

Height (px) 145

Resize image.

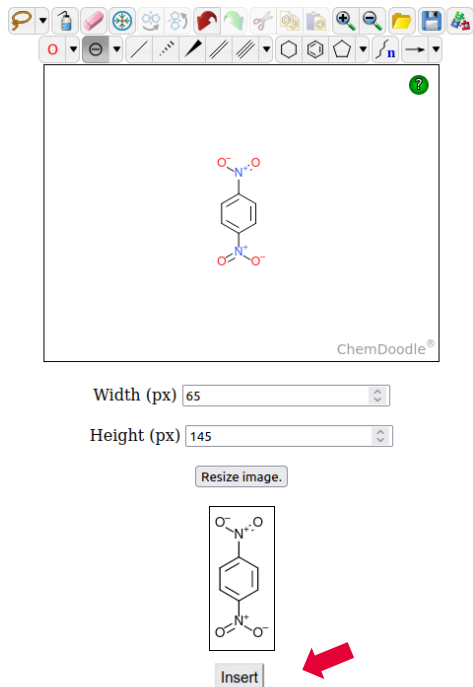
To resize the image:

- Modify the values of Width and Height to fit the drawn compound.
- Click on the 'Resize image' button.

Action 5 - Développer la pratique virtuelle du dessin technique en chimie

CHM –Faculté de chimie, ECPM, Faculté de pharmacie, IUT Robert Schuman. **Intervenant: Ingénieur Chemo-informaticien CHM - Louis PLYER**

Plugin Molstructure: How to insert the image



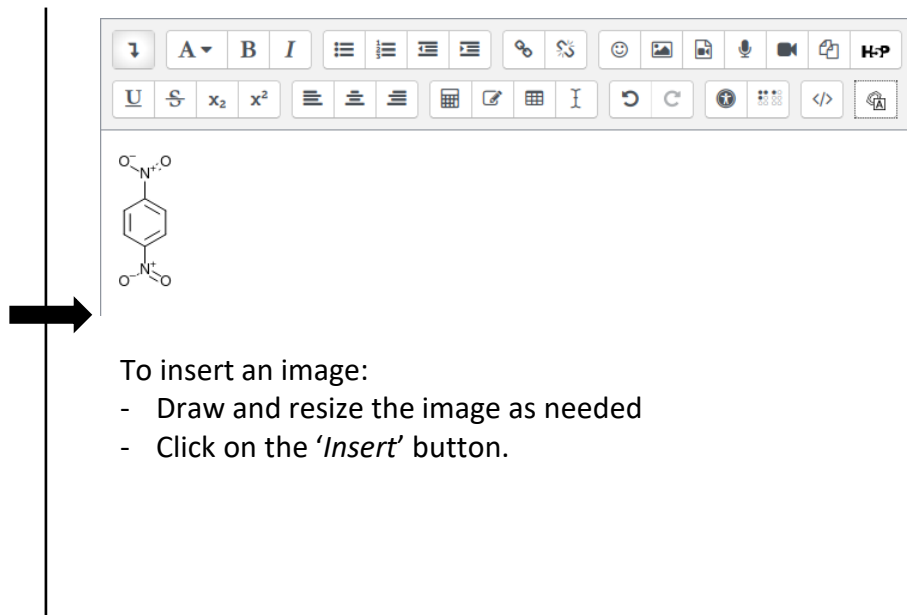
ChemDoodle®

Width (px) 65

Height (px) 145

Resize image.

Insert



To insert an image:

- Draw and resize the image as needed
- Click on the 'Insert' button.