

Jsmol-Integration

Konzept von Joachim Jakob 03.07.2021

Inhaltsverzeichnis

Variante Content-Typ in H5P.....	2
Variante als Moodle- oder Wordpress-Plugin.....	4
Variante als Moodle-Filter.....	5
Variante als Materialart bzw. Lernressourcentyp mit eigenem Rendering.....	6

Variante Content-Typ in H5P	
Funktionen aus Nutzersicht	<p>Der Nutzende wählt "Chemie-Applet" als Inhalts-Typ aus Der Nutzende erhält im Bearbeitungsformular Möglichkeiten:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Hochladen einer eigenen Strukturformeldatei in einem geeigneten Format • Suche einer Strukturformeldatei aus einer angeschlossenen externen Moleküldatenbank (muss aus Datenschutzgründen konfiguratativ von z.B. Moodle-Administratoren deaktivierbar oder auf bestimmte Datenquellen beschränkbar sein) • Auswahl bestimmter Ansichtsteuerungselemente (z.B. Kugel-Stab-Modell, Drahtgitter, Orbitale, Wasserstoffbrückenbindungen an/aus, Wasserstoffatome an/aus, etc.) die später als Formularelemente in der H5P-Aktivität abgebildet werden • Setzen von Startwerten • Optional Eingabe von Zielwerten/Ansichtseinstellungen die der Nutzer einstellen muss, damit die Aktivität als erfolgreich abgeschlossen gilt • Auswahl von Moleküldateien aus einer lokal ggfs. vorhandenen Datenanblage
Zu unterstützende Dateiformate (Dateiendung / Mimetype*) *Auswahl	<p>benötigt:</p> <ul style="list-style-type: none"> • MOL chemical/x-mdl-molfile • MOL2 chemical/x-mol2 • PDP chemical/x-pdb • SDF chemical/x-mdl-sdfile <p>optional:</p> <ul style="list-style-type: none"> • ENT chemical/x-pdb • SD chemical/x-mdl-sdfile • MCM chemical/x-macmolecule • CML chemical/x-cml • ASN chemical/x-ncbi-asn1 • SW chemical/x-swissprot
Funktionen aus Administratoren-Sicht (z.B. Moodle, Wordpress)	<ul style="list-style-type: none"> • Entscheidung, ob die aktuellste Version aus dem H5P-Hub extern nachgeladen wird, ggfs. mit Versions-Pinnung oder ob eine lokal als Kopie in der eigenen Instanz hinterlegte Version zum Rendern von H5Ps in der eigenen Instanz eingesetzt wird. • Konfiguration, welche Auswahlmöglichkeiten dem Nutzenden angeboten werden • Konfiguration der integrierten Suche über externe Datenbanken • Deaktivieren der integrierten Suche über externe Datenbanken • Aktivierung einer ggfs. vorhandenen Dateiablageorts für von der eigenen Instanz bereitgestellten Moleküldateien • Optional Anbindung an den Sodis Content Pool bzw. Sodix/MUNDO oder das WirLernenOnline Repository als

Variante Content-Typ in H5P

	im System registrierbare und fest verküpfbare Moleküldatenquelle
Baustellen im Code (diese wären für alle Varianten notwendig)	<ul style="list-style-type: none">• Aktuellen Gesamt-Codestand noch mit Java basiertem Jmol https://sourceforge.net/projects/jmol/files/latest/download? reduzieren auf ausschließlich den jsmol.zip Anteil• Google-Cookie-Referenzen entfernen• JmolTracker.php mit allen Referenzen entfernen• Startparameter mit automatisch angepassten Pfaden, die z.B. in den Examples wie jsmol.htm noch relativ von aufrufender HTML-Datei zur daneben liegenden Skript-Datei verweist: j2sPath, jarPath, jarFile, serverURL (soweit nicht komplett entfernt)• Falls in einer Seite mehrere Applets geladen werden und diese über einen Filter in die gleiche HTML-Seite gerendert würden, müssten die IDs in der das jeweilige Applet initialisierende Funktion und dem Einhängepunkt-div und dem Startparameter-Objekt dynamisch fortlaufend nummeriert werden• Für das Laden von Dateien der üblichen Molekülformel-Dateiformate müssten die CORS-Header soweit möglich auf allow * gesetzt werden• Die mitgelieferte jQuery-Version müsste auf eine aktuelle angehoben werden wegen der Performance und der Sicherheit• Enthaltene Dritt-Libraries wie jQuery sollten über npm (ggfs. mit npm über eine package.json gepinnt) automatisch aktualisiert werden• Der Quelltext des optimierten Library-Codes sollte für die freie Verwendung auch in Dritt-Projekten auf Github frei zugänglich gemacht werden

Variante als Moodle- oder Wordpress-Plugin

<p>Funktionen aus Nutzersicht (Dateiformate s.o. Variante Content-Typ in H5P)</p>	<p>Der Nutzende wählt "Chemie-Applet" als Aktivitäten-Typ aus Der Nutzende erhält im Bearbeitungsformular Möglichkeiten:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Hochladen einer eigenen Strukturformeldatei in einem geeigneten Format • Suche einer Strukturformeldatei aus einer angeschlossenen externen Moleküldatenbank (muss aus Datenschutzgründen konfiguratv von z.B. Moodle-Administratoren deaktivierbar oder auf bestimmte Datenquellen beschränkbar sein) • Auswahl bestimmter Ansichtsteuerungselemente (z.B. Kugel-Stab-Modell, Drahtgitter, Orbitale, Wasserstoffbrückenbindungen an/aus, Wasserstoffatome an/aus, etc.) die später als Formularelemente in der H5P-Aktivität abgebildet werden • Setzen von Startwerten • Optional Eingabe von Zielwerten/Ansichtseinstellungen die der Nutzer einstellen muss, damit die Aktivität als erfolgreich abgeschlossen gilt • Auswahl von Moleküldateien aus einer lokal ggfs. vorhandenen Datenanblage
<p>Funktionen aus Administratoren-Sicht (z.B. Moodle, Wordpress)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Entscheidung, ob die aktuellste Version aus dem H5P-Hub extern nachgeladen wird, ggfs. mit Versions-Pinnung oder ob eine lokal als Kopie in der eigenen Instanz hinterlegte Version zum Rendern von H5Ps in der eigenen Instanz eingesetzt wird. • Konfiguration, welche Auswahlmöglichkeiten dem Nutzenden angeboten werden • Konfiguration der integrierten Suche über externe Datenbanken • Deaktivieren der integrierten Suche über externe Datenbanken • Aktivierung einer ggfs. vorhandenen Dateiablageorts für von der eigenen Instanz bereitgestellten Moleküldateien • Optional Anbindung an den Sodis Content Pool bzw. Sodix/MUNDO oder das WirLernenOnline Repository als im System registrierbare und fest verküpfbare Moleküldatenquelle
<p>Baustellen im Code (diese wären für alle Varianten notwendig)</p>	<p>s. Variante Content-Typ in H5P</p>

Variante als Moodle-Filter	
<p>Funktionen aus Nutzersicht (Dateiformate s.o. Variante Content-Typ in H5P)</p>	<p>Der Nutzende lädt eine Molekülformeldatei aus dem Moodle-Repository in einen Textbereich (z.B. Textfeld, Textseite) in dem der Jsmol Moodle-Filter aktiviert ist.</p> <p>Sobald der Inhalt gespeichert wird, ergänzt der Filter bei der Auslieferung der Seite die notwendige Quelltext-Umhüllung, und das Darstellungs-JSmol-Applet wird auf der Kursseite gerendert.</p> <p>Falls mehrere Applets auf diese Weise erzeugt werden, werden die IDs der Applets fortlaufend nummiert.</p> <p>Der Nutzer könnte anschließend prinzipiell auch eigene selbstdefinierte Schaltflächen mit eigenem JavaScript in daneben liegenden Textbereichen zur Ansichtsteuerung der Applets ergänze, dies ist bei diesem Szenario jedoch nicht das Hauptziel.</p>
<p>Funktionen aus Administratoren-Sicht (z.B. Moodle, Wordpress)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Entscheidung, ob die aktuellste Version aus dem H5P-Hub extern nachgeladen wird, ggfs. mit Versions-Pinnung oder ob eine lokal als Kopie in der eigenen Instanz hinterlegte Version zum Rendern von H5Ps in der eigenen Instanz eingesetzt wird. • Konfiguration, welche Auswahlmöglichkeiten dem Nutzenden angeboten werden • Deaktivieren der integrierten Suche über externe Datenbanken - Default, nicht aktivierbar • Die Basis-JSmol Library für die jeweilige Moodle-Instanz wird verpackt in ein Plugin installiert. • Der JSmol Filter wird eigens installiert.
<p>Baustellen im Code</p> <p>(diese wären für alle Varianten notwendig)</p>	<p>s. Variante Content-Typ in H5P</p>

Variante als Materialart bzw. Lernressourcentyp mit eigenem Rendering

<p>Funktionen aus Nutzersicht (Dateiformate s.o. Variante Content-Typ in H5P)</p>	<p>Der Nutzende öffnet in einer Mediathek oder im edu-sharing Repository eine Molekülformeldatei.</p> <p>An Stelle eines Downloads wird die Datei vom edu-sharing Rendering-Service unter Zuhilfenahme der dort integrierten JSmol-Skripte gerendert so dass eine interaktive Darstellung angeboten wird.</p> <p>Die Standardansicht ist mit häufig brauchbaren Startwerten vorkonfiguriert. In einer ausklappbaren erweiterten Ansicht erhalten Nutzende Optionen wie die weiteren Ansichtsdarstellungen angeboten.</p> <p>Optional könnte auch eine Live-Suche in der Suchumgebung in angeschlossenen Molekül Datenbanken erfolgen.</p> <p>Alternativ könnten optional auch im Schulkontext häufig benötigte Moleküle mit ggfs. auch gepflegten Molekülorbitaldaten direkt in der WLO- oder MUNDO-Suche mit vorgehalten werden, filterbar nach einem eigenen Lernressourcentyp bzw. als eigene Materialart, welche die Mimetypes (als technical format im LOM) der gängigen Molekül dateiformate umfasst.</p>
<p>Funktionen aus Administratoren-Sicht von über Plugins angeschlossenen Drittsystemen (z.B. Moodle, Wordpress)</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Entscheidung, ob die aktuellste Version aus dem H5P-Hub extern nachgeladen wird, ggfs. mit Versions-Pinnung oder ob eine lokal als Kopie in der eigenen Instanz hinterlegte Version zum Rendern von H5Ps in der eigenen Instanz eingesetzt wird. • Konfiguration, welche Auswahlmöglichkeiten dem Nutzenden angeboten werden • Deaktivieren der integrierten Suche über externe Datenbanken - Default, nicht aktivierbar • Die Basis-JSmol Library für die jeweilige Moodle-Instanz wird verpackt in ein Plugin installiert. • Der JSmol Filter wird eigens installiert.
<p>Baustellen im Code (diese wären für alle Varianten notwendig)</p>	<p>s. Variante Content-Typ in H5P</p>