

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE INFORMÁTICA
CURSO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

LUÍS ANTÔNIO LEITE FRANCISCO DA COSTA

**Um estudo da visualização imersiva para
manipulação de moléculas**

Orientador: Profa. Dra. Luciana Nedel

Porto Alegre
2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor: Rui Vicente Oppermann

Pró-Reitor de Graduação: Vladimir Pinheiro do Nascimento

Diretor do Instituto de Informática: Prof.^a Carla Maria Dal Sasso Freitas

Coordenador do curso: Prof. Sérgio Luis Cechin

Bibliotecária-chefe do Instituto de Informática: Beatriz Regina Bastos Haro

"Vi Veri Vniversvm Vivvs Vici."

"Atraves da verdade, eu, enquanto vivi, conquistei o universo."

— DOUTOR FAUSTO, DE GOETHE

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família por todo o apoio à minha educação ao longo dos anos. Aos meus colegas e amigos pelas sábias dicas e conselhos. E à minha orientadora por suas valiosas recomendações.

RESUMO

A visualização de dados de forma imersiva utiliza equipamentos de realidade virtual que possibilitam ao usuário ver e interagir com entidades em um ambiente virtual. A área teve um grande desenvolvimento nas últimas décadas devido ao aumento na quantidade de informação a se manipular e ao crescimento tecnológico. No contexto de visualização e interação com moléculas, o apoio de um ambiente virtual em 3D potencialmente auxilia na compreensão e manipulação de dados e estruturas que, em outro caso, poderiam demandar mais esforço para serem interpretados de forma convencional. O objetivo do seguinte trabalho é estudar os benefícios da manipulação de moléculas em ambientes virtuais através do uso de equipamentos de realidade virtual como Head-Mounted Displays e interfaces 3D. Sendo assim, primeiramente desenvolvemos um ambiente para visualizar e manipular moléculas. A fim de testar e avaliar as vantagens da abordagem imersiva, realizamos um experimento comparativo com usuários utilizando dois tipos de abordagem (não-imersiva e imersiva) com o propósito de interagir com moléculas. Por fim, analisamos e discutimos os resultados obtidos a partir dos testes, os apresentando de forma a demonstrar os benefícios de um ambiente de visualização imersiva para a manipulação de moléculas.

Palavras-chave: Visualização imersiva. Head-Mounted Display. Interação 3D..

ABSTRACT

Immersive data visualization uses virtual reality devices that enable the user to see and interact with elements in a virtual environment. The area had a great development in the last decades due to the increase of the quantity of information to manipulate and the technological growing. In the context of visualization and interaction with molecules, the backup of a virtual environment in 3D potentially helps on the understanding of data and structure manipulation that, in other case, would demand too much effort to be interpreted in a conventional way. The objective of the following work is to study the benefits of molecule manipulation in virtual environments through the use of virtual reality equipment such as Head-Mounted Displays and 3D interfaces. Thus, first we developed an environment to visualize and manipulate molecules. To test it and evaluate the advantages of the immersive approach, we created a comparative experiment with users using two kinds of approach (non-immersive and immersive) with the purpose of interacting with molecules. Last, we analysed and discussed the results obtained from these tests, presenting them in a way to demonstrate the benefits of an immersive visualization environment for molecule manipulation.

Keywords: I. Immersive Visualization, Head-Mounted Display, 3D Interaction.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Diferentes abordagens de visualização de moléculas no VMD.....	20
Figura 1.2	Diferentes abordagens de visualização de moléculas no PyMOL.....	21
Figura 1.3	Estrutura da molécula do Complexo Binário de Caseína (PDB Id: 2csn) representada na interface da UnityMol, com resolução de 800 x 600.	22
Figura 2.1	Molécula da estrutura cristalina de uma enzima de planta (PDB Id: 5ie3) representada na interface da UnityMol, com resolução de 800 x 600. A molécula contém 7775 átomos com 8005 ligações atômicas.	26
Figura 3.1	Ambiente básico do programa desenvolvido na Unity, em que podem ser vistas a câmera do personagem em primeira pessoa e as suas mãos virtuais.....	30
Figura 3.2	Oculus Rift e sensor de posicionamento.....	31
Figura 3.3	Controles da Hydra Razer juntos da sua base de rastreamento.	32
Figura 3.4	Mapeamento dos comandos de interação da Razer Hydra.	38
Figura 3.5	Usuário selecionando com o auxílio das setas de "mira" diversos átomos, que assumem a cor magenta ao serem marcados.....	39
Figura 3.6	Usuário agarrando um átomo de nitrogênio (em azul), podendo movê-lo livremente enquanto mantiver um dos gatilhos dos controles da Razer Hydra pressionado.	40
Figura 3.7	Molécula do DNA rotacionada 90 graus para a direita, a partir de sua posição inicial no programa.	41
Figura 3.8	Apenas átomos de oxigênio (em vermelho) destacados na estrutura da molécula do DNA.	42
Figura 3.9	Aumento e diminuição do raio atômico dos elementos da molécula de DNA.	43
Figura 4.1	Relação de programas de visualização de moléculas utilizados pelos participantes conforme as opções fornecidas no questionário.....	46
Figura 4.2	Relação de outros programas de visualização de moléculas utilizados pelos participantes conforme informaram no questionário.....	46
Figura 4.3	Tipos de setups para as diferentes abordagens.	47
Figura 4.4	Disposição dos aparelhos no usuário.(a) Oculus Rift, (b) Base da Razer Hydra, e (c) Controles da Razer Hydra.....	48
Figura 4.5	Molécula da Lisina renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor branca representam átomos de hidrogênio; cor cinza, carbono; cor vermelha, oxigênio; e cor azul, nitrogênio.	49
Figura 4.6	Molécula do DNA renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; cor azul, nitrogênio; e cor laranja, fósforo.....	50
Figura 4.7	Molécula da GFP renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; e cor azul, nitrogênio.....	51
Figura 4.8	Molécula da Hemoglobina renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; cor azul, nitrogênio; e cor amarela, ferro.	52
Figura 5.1	Gráfico em barras apresentando as médias de tempo de execução para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.....	60

Figura 5.2 Gráfico em barras apresentando as médias de erros para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.	61
Figura 5.3 Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre o nível do conforto da abordagem não-imersiva.....	62
Figura 5.4 Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre o nível do conforto da abordagem imersiva.....	62
Figura 5.5 Gráfico em barras apresentando as médias de rotações de cabeça para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.....	65
Figura 5.6 Gráfico em barras apresentando as médias de translações para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.	66

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Configurações da máquina utilizada no experimento.....	46
Tabela 4.2	Ordem de realização dos testes para cada participante.....	56
Tabela 5.1	Valores comparativos entre os tempos (em medidas de segundos) com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.	59
Tabela 5.2	Valores comparativos entre a quantidade total de erros com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.	61
Tabela 5.3	Valores comparativos (em medidas de graus) entre a quantidade total de rotações da cabeça dos usuários com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.	64
Tabela 5.4	Valores comparativos (em medidas de metros) entre o total de translações dos usuários com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.	65
Tabela 5.5	Dados do programa.....	68

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

VR	Virtual Reality
AR	Augmented Reality
CAVE	Cave Automatic Virtual Environment
UI	User Interface
M	Mean
SD	Standard Deviation
GLSL	OpenGL Shading Language
Cg	C for Graphics
API	Application Programming Interface
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
ANOVA	Analysis of Variance

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	13
1.1 Motivação	13
1.2 Visualização de moléculas	14
1.2.1 Visual Molecular Dynamics.....	14
1.2.2 PyMOL	15
1.2.3 UnityMol.....	16
1.3 Questões do estudo	16
1.4 Contribuições	18
1.5 Estrutura do trabalho	18
2 PRINCIPAIS PROBLEMAS DA VISUALIZAÇÃO IMERSIVA	23
2.1 Usabilidade	23
2.2 Conhecimento prévio	24
2.3 Medidas de Qualidade	25
2.4 Escalabilidade	25
3 CONSTRUÇÃO DE UM AMBIENTE DE INTERAÇÃO	28
3.1 Solução proposta	28
3.2 Unity	29
3.3 Oculus Rift	30
3.4 Razer Hydra	31
3.5 Tipos de dados e informações	33
3.5.1 Arquivos PDB - Protein Data Bank	33
3.5.2 MeshLab	34
3.5.3 Nuvem de pontos	34
3.5.3.1 Obstáculos do formato OBJ	34
3.5.3.2 Formato OFF.....	35
3.5.3.3 Algoritmo de conversão e renderização das moléculas	36
3.6 Interação	37
3.6.1 Movimentação.....	37
3.6.2 Seleção	38
3.6.3 Agarrar	39
3.6.4 Giro	40
3.6.5 Visibilidade	41
3.6.6 Aumentar e diminuir	41
3.6.7 Desfazer Alterações	42
4 EXPERIMENTO: RAPIDEZ, ERROS E CONFORTO	44
4.1 Hipóteses	44
4.2 Materiais e métodos	45
4.2.1 Participantes	45
4.2.2 Dispositivos.....	46
4.2.3 Moléculas usadas nos testes.....	48
4.2.3.1 Lisina.....	48
4.2.3.2 DNA	49
4.2.3.3 Proteína Verde Fluorescente	50
4.2.3.4 Hemoglobina.....	51
4.2.4 Método	52
4.2.4.1 Instruções iniciais e tutorial	52
4.2.4.2 Testes com o DNA	52
4.2.4.3 Testes com a GFP.....	53

4.2.4.4 Testes com a Hemoglobina	54
4.2.5 Procedimento	55
5 RESULTADOS	57
5.1 Rapidez.....	58
5.2 Quantidade de erros	59
5.3 Conforto	62
5.4 Outros resultados	63
5.5 Discussão.....	66
5.6 Restrições tecnológicas	67
6 CONCLUSÃO	69
6.1 Resumo das contribuições	69
6.2 Trabalho futuro	70
REFERÊNCIAS.....	72
APÊNDICE A — TERMO DE CONSENTIMENTO UTILIZADO PARA OS EXPERIMENTOS	74
APÊNDICE B — QUESTIONÁRIO PRE-EXPERIMENTO	75
APÊNDICE C — QUESTIONÁRIO PÓS-EXPERIMENTO	76
APÊNDICE D — INSTRUÇÕES PARA A REALIZAÇÃO DOS TESTES	77
APÊNDICE E — DESCRIÇÃO DO FORMATO PDB.....	79
APÊNDICE F — DESCRIÇÃO DO FORMATO OBJ	81
APÊNDICE G — DESCRIÇÃO DO FORMATO OFF	82

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho descreve o estudo referente à construção e à avaliação dos benefícios de um ambiente imersivo para a visualização e manipulação de estruturas moleculares. A seguir será apresentada a motivação por trás do desenvolvimento desse estudo, assim como os trabalhos relacionados ao assunto.

1.1 Motivação

A visualização imersiva é uma área emergente da Realidade Virtual dedicada a pesquisar e a descobrir novas maneiras com que tecnologias e displays podem ser utilizados para criar um ambiente de interação virtual. Tal ambiente deve possibilitar ao usuário a visualização e manipulação de dados de forma que ele tenha uma experiência imersiva, ou seja, que o usuário tenha a percepção de estar fisicamente presente em um mundo não-físico.

De acordo com Steed et al. (2016), dado o fato que a tecnologia responsável pela criação de ambientes imersivos está sendo introduzida para o público em geral, a familiaridade com VR e interfaces imersivas aumenta, reduzindo as curvas de aprendizado e para a utilização prática em diferentes cenários. No âmbito científico, a visualização imersiva é de suma importância para garantir que pesquisadores possam utilizar ferramentas de realidade virtual, como Head-Mounted Displays e dispositivos de interação 3D, para explorar seus dados de forma intuitiva e proporcionar uma qualidade superior de compreensão analítica.

O Head-Mounted Display, ou HMD, é um dispositivo de vídeo usado na cabeça do usuário com um capacete (com a utilização opcional de fones de ouvido acoplados) como uma interface através da qual ele pode experimentar um ambiente virtual. Atualmente é ampla a utilização desses aparelhos em sistemas de Realidade Virtual, tendo como exemplos o Oculus Rift e o HTC Vive.

Já as interfaces 3D são definidas como uma UI que envolve uma interação em 3D. Por interação 3D se entende uma interação humano-computador em que as tarefas do usuários são executadas diretamente em um contexto especial em 3D. O maior uso dessa tecnologia se encontra nos campos de VR e AR. Uma vez que seus usuários normalmente estão de pé, andando e possuem um campo de visão limitado do mundo real, o uso convencional da interação com mouse e teclado se torna impraticável. Exemplos de dis-

positivos que criam esse tipo de interface ao usuário são alguns utilizados em videogames como o *Nintendo Wiimote*, *Microsoft Kinect*, *PS Move* e a *Razer Hydra*.

Para se realizar um estudo de visualização imersiva - uma vez definida a classe de aparelhos que serão utilizados para criar a imersão do usuário - também é necessário decidir qual será o tipo de estrutura alvo da interação que será o foco de desenvolvimento do ambiente imersivo. Para tanto, foram escolhidas as moléculas, que correspondem a um grupo de átomos, iguais ou diferentes, os quais se mantêm unidos e que não podem ser separados sem afetar ou destruir as propriedades das substâncias. A escolha se dá principalmente pela necessidade da área da Química por propostas de ambientes imersivos para o estudo, compreensão e manipulação de estruturas moleculares, conforme afirma Trellet et al. (2016).

Existem diversos programas que permitem a seus usuários a visualização de estruturas moleculares no ambiente de computador. No entanto, devido à limitação da tela da máquina e das ferramentas básicas do usuário (um mouse e um teclado), o estudo dessas estruturas é prejudicado e alternativas imersivas são uma solução para propiciar uma análise mais detalhada, natural e intuitiva das moléculas, além de um maior grau de compreensão do usuário.

1.2 Visualização de moléculas

A seguir são apresentados alguns trabalhos desenvolvidos que abordam a questão de interação com estruturas moleculares de forma tanto não-imersiva (sem o uso de dispositivos de realidade virtual e contando apenas com o uso de mouse e teclado) e imersiva (com uso de equipamentos de realidade virtual).

1.2.1 Visual Molecular Dynamics

VMD, também conhecido como *Visual Molecular Dynamics*, é um programa muito conhecido de visualização para exibir, animar e analisar grandes sistemas biomoleculares utilizando gráficos 3D e um script de execução, conforme pode ser observado na Figura 1.1 (a). O VMD fornece uma grande variedade de métodos para renderizar e colorizar a molécula. Além de estruturas moleculares "estáticas", o VMD também pode ser utilizado para animar e analisar a trajetória de uma dinâmica molecular (MD) em uma simulação.

A fim e tornar o programa imersivo, o Centro de Computação de Alto Desempenho (HPC, High Performance Computing) da Universidade de Groningen adaptou o programa para rodar em uma CAVE, ou um Reality Cube, uma das estruturas de realidade virtual mais avançadas disponíveis. Dentro do cubo, até 5 pessoas podem ser imersas em um mundo virtual em 3D e interagir com ele.

O *Reality Cube* (Cubo de Realidade), conforme pode ser visto na Figura 1.1 (b), é um cubo cortado pela metade cujas arestas medem 2,5 m de altura. Imagens em estéreo (3D) são projetadas de fora para as 4 faces: frente, esquerda, direita e no chão. A imagem do chão é projetada de cima através de um espelho. A estrutura permite que os espectadores experimentem a sensação de estarem completamente imersos dentro do ambiente virtual. Dentro do cubo, todos os usuários utilizam *shutter glasses* para visualizar o ambiente em estéreo (University of Groningen - Center of Information Technology, 2015).

Até o momento, todas as interações existentes são realizadas através de controles sem fio (não especificados pelos desenvolvedores), mas os desenvolvedores estão trabalhando em desenvolver uma interação por gestos em um futuro próximo.

1.2.2 PyMOL

O PyMOL é um sistema de visualização molecular open-source criado por Lyford DeLano, atualmente comercializado pela Schrodinger, Inc. O programa pode produzir imagens 3D de alta qualidade de pequenas moléculas e macromoléculas biológicas, como proteínas ou mesmo a molécula do DNA, conforme pode ser visto na Figura 1.2 (a). De acordo com o autor, quase um quarto de todas as imagens 3D de estruturas proteicas em literatura científica utilizaram PyMOL para serem renderizadas (Schrödinger, LLC, 2010).

O programa é uma das poucas ferramentas open-source de visualização disponíveis para uso em biologia estrutural. Como o próprio nome diz, a aplicação estende (amplia as funcionalidades naturais da linguagem) e é extensível (funções do programa podem ser implementadas com a linguagem) pela linguagem de programação *Python*. Ele também utiliza a *OpenGL Extension Wrangler Library* (GLEW) e a *Freeglut*, além de Tk para os widgets da GUI. O PyMOL pode ser utilizado normalmente em máquinas desktop e atualmente, a empresa Virtalis trabalha em uma abordagem imersiva para o PyMOL utilizando um display 3D de grandes dimensões e óculos de obturação para seus usuários,

conforme a Figura 1.2 (b), com resultados promissores em experiências de usabilidade com usuários (Virtalis Dev Team, 2015).

1.2.3 UnityMol

A UnityMol é um editor molecular, visualizador e plataforma de prototipação co-escrito em C sharp com o auxílio do motor gráfico da Unity3D - a qual será descrita em detalhes posteriormente. O programa foi desenvolvido pelo time de Marc Baaden no Laboratório LBT no IBPC do Instituto do CNRS em Paris. A UnityMol inclui por padrão a visualização dos átomos como HyperBalls (shaders especificamente desenvolvidos para estender o formato de uma esfera, permitindo que ela se interligue a outra esfera, representando as ligações entre átomos), feita para permitir a visualização de estruturas moleculares utilizando as capacidades da placa gráfica da máquina baseadas em shaders (seja com GLSL ou Cg).

Na versão atual do programa, ele permite a leitura das estruturas moleculares a partir de arquivos de Protein Data Bank (PDB), redes de Cytoscape, mapas potenciais em OpenDX e malhas em OBJ. Além disso, o programa conta com diversas ferramentas para manipulação de moléculas para extrair informações químicas úteis. O programa é open-source e se encontra em sua versão 0.9.6, com estudos para compatibilidade com equipamentos de realidade virtual como o Oculus Rift e o HTC Vive sendo testados atualmente, (DOUTRELIGNE et al., 2014).

1.3 Questões do estudo

Como pode ser observado nos trabalhos anteriormente citados, a visualização imersiva é capaz de criar uma série de benefícios especificamente para a área da Química que trata de visualização e manipulação de estruturas moleculares. As vantagens vão desde permitir uma compreensão melhor dos dados que estão sendo analisados até uma mudança de perspectivas, permitindo que o usuário ocupe o mesmo espaço que a molécula ocupa. O foco desse estudo é o desenvolvimento e avaliação de um ambiente de visualização imersiva em que o usuário possa interagir e manipular estruturas moleculares. Mais especificamente, o estudo será guiado pelas seguintes questões:

Quais são os benefícios de um ambiente imersivo em relação ao tipo de abor-

Adoção convencional para a manipulação de estruturas moleculares?

Conforme Trellet et al. (2016), um maior desenvolvimento das ferramentas de visualização disponíveis atualmente permitiria a criação de um cenário onde a visualização imersiva em 3D de um evento molecular poderia ser monitorada com mais precisão e impacto gráfico (maior significância visual) ao usuário. Além disso, ambientes imersivos favorecem a combinação de diferentes tipos de informações e tarefas de interação para serem realizadas. O estudo foca em investigar quais benefícios específicos esse tipo de ambiente poderia trazer para a manipulação de estruturas moleculares. Sendo assim, essa questão também se propõe a responder os seguintes questionamentos:

1. Abordagens que utilizam visualização imersiva permitem a realização de tarefas de interação de forma mais rápida?

A visualização através de um display comum, como uma tela de computador ou um monitor de grandes proporções, limita o campo de visão do usuário e não permite uma compreensão aceitável do elemento que ele está visualizando e tentando manipular. Além disso, o usuário depende do uso de dispositivos pouco intuitivos (como controles ou mouse) para alterar seu campo de visão e manipular um objeto tridimensional em um espaço bidimensional. Dessa forma, acreditamos que um ambiente imersivo, por proporcionar um campo de visão maior e sem a necessidade de ações extras do usuário além do movimento natural de sua cabeça, pode permitir a realização de tarefas de interação de forma mais rápida.

2. Abordagens que utilizam visualização imersiva ocasionam uma quantidade menor de erros na realização de tarefas de interação?

Ambientes imersivos "isolam" o usuário visualmente de quaisquer elementos além do ambiente em que está imerso e da tarefa que irá realizar, aumentando seu foco e concentração, além de mudar sua percepção de realidade. Segundo Steed et al. (2016), ao se realizarem tarefas de interação de forma imersiva, a proximidade desse tipo de visualização com uma experiência mais natural e intuitiva também induz a menos falhas e aumenta a curva de aprendizado do usuário. Além disso, um ambiente de visualização imersiva diminui o nível de abstração ao ampliar o ambiente do usuário de uma tela bidimensional para uma experiência tridimensional.

3. Abordagens que utilizam visualização imersiva podem ser mais confortáveis na realização de tarefas de interação?

Uma de nossas principais preocupações na construção de um ambiente de visualização imersiva é quanto ao conforto oferecido pela imersão, pois esse aspecto impacta diretamente na usabilidade do programa e dispositivos imersivos. Dessa forma, desejamos investigar se o usuário pode considerar uma abordagem imersiva mais confortável que uma abordagem não-imersiva e o quanto o conforto pode afetar o desempenho do usuário na realização de tarefas específicas.

1.4 Contribuições

Alem da validação das hipóteses que serão posteriormente apresentadas nesse estudo, as maiores contribuições desse trabalho são as seguintes:

- Apresentar os principais problemas relacionados à visualização imersiva e formas de reduzir tais problemas ao se desenvolver um ambiente imersivo (Capítulo 2);
- Detalhar os passos de desenvolvimento de um ambiente imersivo utilizando um Head-Mounted Display e um dispositivo de interação 3D para realizar a visualização e manipulação de estruturas moleculares (Capítulo 3);
- Avaliar os benefícios desse tipo de ambiente na realização de tarefas específicas em contraste com uma abordagem convencional não-imersiva (Capítulo 4).

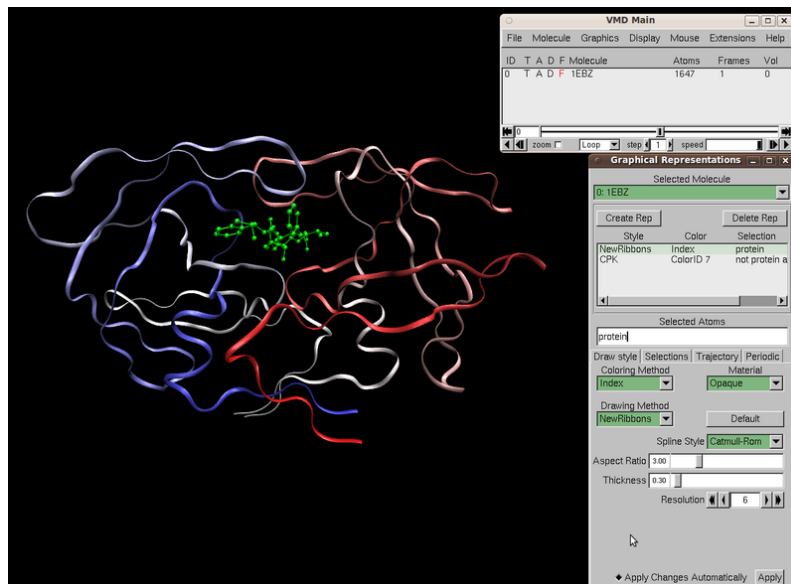
1.5 Estrutura do trabalho

O seguinte trabalho organiza-se da seguinte forma. No Capítulo 2 apresentamos uma breve explicação sobre a visualização imersiva, bem como um background de seus principais obstáculos tanto em termos de desenvolvimento quanto de avaliação. O Capítulo 3 primeiramente mostra uma solução proposta para a criação de um ambiente imersivo com foco na manipulação de estruturas moleculares e sua posterior avaliação através de testes com usuários. A seguir, é apresentada uma descrição detalhada das ferramentas e dispositivos utilizados para a construção do ambiente imersivo, assim como a estrutura dos tipos de dados e informações que foram utilizadas para construir os mecanismos de interação com o usuário. No Capítulo 4 são descritas as hipóteses que serão verificadas pelos testes, além de descrever o experimento realizado, bem como seus participantes, materiais e métodos e procedimentos utilizados para a realização de testes com abordagens

não-imersivas e imersivas com o programa desenvolvido no capítulo anterior. Também são apresentados os resultados colhidos e sua análise para a validação das hipóteses. Por fim, são descritas as conclusões obtidas com os resultados desse estudo, assim como as propostas para trabalhos futuros relacionados com a visualização imersiva.

Figura 1.1: Diferentes abordagens de visualização de moléculas no VMD.

(a) Estrutura da molécula do HIV apresentada na interface do VMD 1.8.7 em um desktop.



Fonte: <https://goo.gl/57QChe>

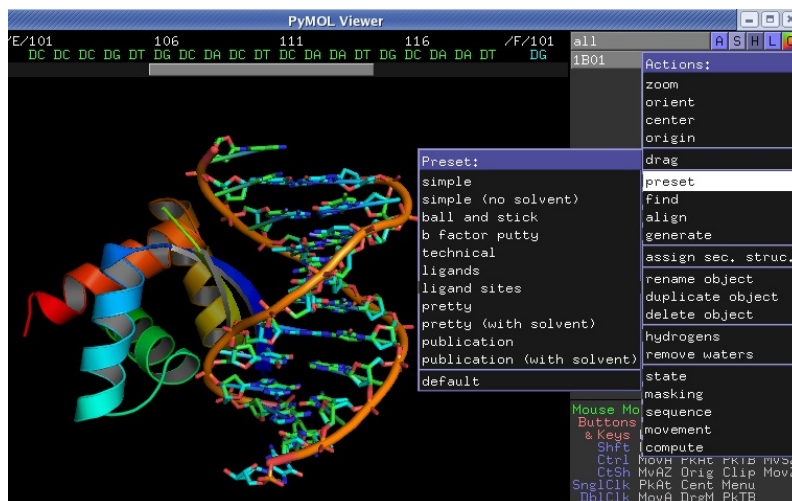
(b) CAVE (*Reality Cube*) exibindo uma molécula renderizada pelo VMD, com adaptação para uma abordagem imersiva.



Fonte: <https://goo.gl/h0Xzv2>

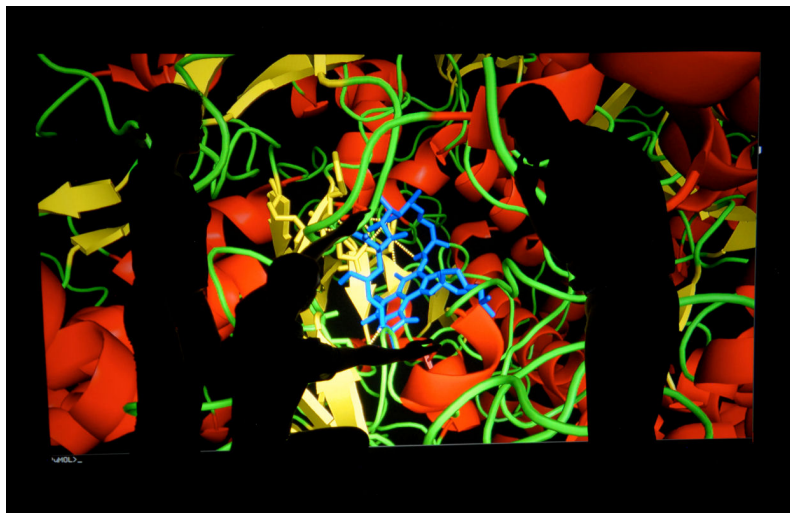
Figura 1.2: Diferentes abordagens de visualização de moléculas no PyMOL.

(a) Estrutura da molécula de DNA apresentada na interface do PyMOL em um desktop.



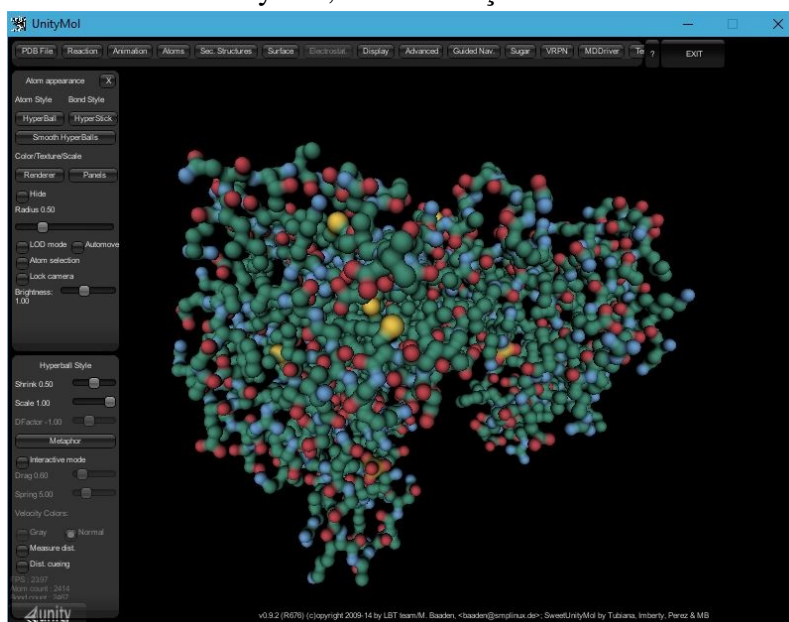
Fonte: <https://goo.gl/PN1MNG>

(b) Ambiente imersivo desenvolvido pela Virtualis. A molécula é renderizada pelo PyMOL, adaptado para visualização em uma CAVE.



Fonte: <https://goo.gl/3Cj9L0>

Figura 1.3: Estrutura da molécula do Complexo Binário de Caseína (PDB Id: 2csn) representada na interface da UnityMol, com resolução de 800 x 600.



Fonte: O Autor

2 PRINCIPAIS PROBLEMAS DA VISUALIZAÇÃO IMERSIVA

Por ser uma área de desenvolvimento recente, a visualização imersiva ainda possui diversos obstáculos para superar. Muitos dos problemas que precisam ser resolvidos na área também são comuns em outros segmentos da Computação, principalmente em Interação Humano-Computador (IHC), uma vez que a visualização imersiva é uma área que abrange vários aspectos de IHC. Apesar de não possuírem uma solução clara e objetiva, os problemas também podem ser vistos como metas a serem seguidas pelos pesquisadores e desenvolvedores que desejam construir e avaliar a qualidade de um ambiente de visualização imersiva de forma eficiente.

Os problemas listados a seguir são a seleção de alguns estudados por Chen (2005), sobre a visualização de informação e Johnson (2004), a respeito da visualização científica. Apesar de distintos, esses dois domínios de aplicação compartilham questões que são extremamente importantes para a visualização imersiva, uma área que pode ser utilizada nesses dois domínios. Mais especificamente, Tory and Moller (2004) nos definem que:

- A visualização de informação envolve dados não-espaciais ou abstratos, ou seja, conjuntos de informações que dificilmente podem ser representados fisicamente em um ambiente virtual.
- A visualização científica envolve dados científicos que possuem um componente físico como imagens médicas, simulação de fluidos e sistemas de informações geográficas.

Como no caso desse estudo estamos focando em moléculas, devemos nos concentrar no domínio de aplicação da visualização imersiva para visualização científica, já que estruturas moleculares possuem um componente físico e podem ser facilmente representadas espacialmente no ambiente virtual.

A seleção dos problemas apresentados nas subseções seguintes foi realizada levando em conta as questões dos dois domínios de aplicação que são pertinentes para a visualização imersiva e para o fundamento desse estudo.

2.1 Usabilidade

Segundo Chen (2005), essa é a questão mais crítica que a visualização imersiva enfrenta desde o surgimento dos primeiros estudos de ambientes virtuais e que permanece

como o ponto chave para o desenvolvimento da área. Isso decorre de dois motivos: o fato de que o ritmo de crescimento da visualização imersiva não cresce no mesmo compasso que os estudos de usabilidade e a complexidade do processo analítico (aliada à falta de ferramentas de baixo custo, prontas para o uso e reconfiguráveis) nesse tipo de sistema que pode ser demasiada difícil para o usuário compreender.

Johnson (2004) afirma ser um fato que, ao desenvolver um sistema de visualização imersiva, tanto do ponto de vista da visualização de informação ou científica, os cientistas desejam mais interação do usuário entre a modelagem, simulação e visualização que está atualmente disponível pela grande parte dos códigos de computador. Ou seja, em termos de usabilidade, um ambiente imersivo do ponto de vista científico deve permitir que seu usuário interaja com os dados diante de si da forma que forem representados, acompanhando cálculos em tempo real, mudando parâmetros, etc.

A visualização imersiva (e os domínios de aplicação da visualização de informação e científica) se trata de uma ferramenta explanatória que permite ao usuário interagir e compreender os dados e estruturas que estão sendo visualizados. Sendo assim, qualquer questão de usabilidade deve levar em conta o processo de compreensão, que depende em grande parte do usuário.

2.2 Conhecimento prévio

Como uma ferramenta de comunicação de informações tanto abstratas quanto físicas, a visualização imersiva e seus usuários precisam ter um denominador comum. Isso corresponde diretamente ao conceito de design orientado ao usuário em Interação Humano-Computador. Em geral, os usuários necessitam de dois tipos de conhecimentos para compreender o conteúdo que estão visualizando imersivamente:

- Conhecimento de como operar o dispositivo de interação (no caso desse estudo, uma interface de computador aliada a um Head-Mounted Display e uma ferramenta de interação 3D).
- Domínio de conhecimento de como interpretar o conteúdo visualizado.

Sendo assim, as decisões de design ao se desenvolver um ambiente e interface de visualização imersiva precisam levar em conta o nível de conhecimento prévio necessário para compreender o conteúdo visualizado. Ou seja, o ambiente imersivo precisa se adaptar em relação ao nível de conhecimento do usuário.

Ao se desenvolver uma solução para a questão da usabilidade, conseqüentemente podemos diminuir a dependência do usuário quanto ao primeiro tipo de conhecimento, uma vez que criamos um sistema de fácil manuseio, mesmo para usuários que não sejam familiarizados com esse tipo de ambiente virtual. No entanto, ainda permanece a necessidade de que o usuário possua um domínio de conhecimento pertinente ao conteúdo.

2.3 Medidas de Qualidade

Estabelecer medidas intrínsecas de qualidade é crucial para o desenvolvimento da visualização imersiva. Esse tipo de medida diz respeito a aspectos de avaliação que são inerentes à aplicação que é o foco do ambiente imersivo. Apesar disso, a área carece desse tipo de medida, uma vez que o campo da visualização imersiva costuma valorizar mais a inovação e originalidade nos trabalhos desenvolvidos do que as métricas utilizadas para avaliar sua qualidade.

Porém, segundo Chen (2005), a falta de medidas de qualidade quantificáveis mina diretamente os avanços, avaliação e seleção de ferramentas de visualização imersiva. A característica intrínseca é de suma necessidade para que o pesquisador possa obter uma métrica de qualidade mesmo na ausência de referências externas. Ou seja, a existência desse tipo de medida tornaria possível avaliar uma aplicação de visualização imersiva em termos das capacidades do usuário ao invés de apenas considerar fatores genéricos que normalmente são utilizados em testes de usabilidade.

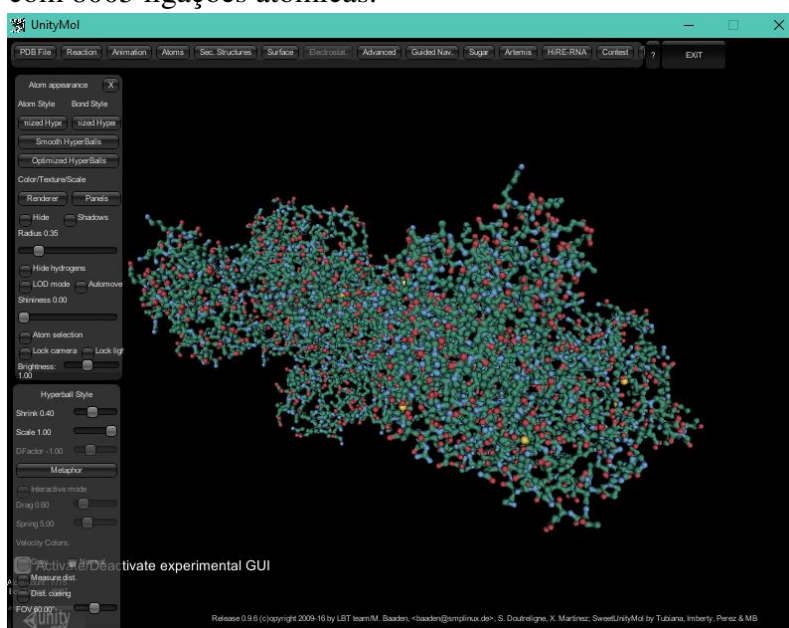
Apesar dessa questão ser particularmente complicada de ser solucionada, ela possui grandes benefícios quando analisada com cuidado, pois métricas de qualidade intrínsecas podem responder questões fundamentais da área, como o quanto fiel e eficientemente um design de visualização de informação ou visualização científica é capaz de representar os dados e também preservar suas propriedades ao serem representados visualmente.

2.4 Escalabilidade

O problema da escalabilidade é uma questão longa e persistente na área da visualização imersiva. Tomando a Figura 2.1 como exemplo, ela mostra uma molécula de grande porte renderizada no ambiente de visualização de desktop da UnityMol. A molécula da estrutura cristalina de uma enzima de planta (PDB Id: 5ie3) possui um total de

7775 átomos, contendo 8005 ligações atômicas (ligações entre átomos que estabelecem a estrutura da molécula). Para renderizar esse tipo de estrutura tão complexa no ambiente da UnityMol é recomendável utilizar máquinas de alta performance, que não são o alvo da área de visualização de informação, mas sim da visualização científica. De acordo com Chen (2005), a programação paralela e outros métodos computacionais de otimização e alta performance não são utilizados na visualização de informação, mas desempenham um papel crucial na área de visualização científica. Esse tipo de programação é essencial quando se está lidando com a representação e manipulação de estruturas moleculares, uma vez que proteínas simples costumam ter um número de átomos que varia de milhares a milhões, criando um alto custo computacional para sua representação visual.

Figura 2.1: Molécula da estrutura cristalina de uma enzima de planta (PDB Id: 5ie3) representada na interface da UnityMol, com resolução de 800 x 600. A molécula contém 7775 átomos com 8005 ligações atômicas.



Fonte: O Autor

Além disso, a questão da escalabilidade também deve ser estudada além do seu escopo tradicional de lidar com os níveis de hardware e de programas inteligentes e de alta performance, e ser capaz de lidar com os usuários em si. Ou seja, é preciso ser capaz de produzir soluções de visualização imersiva que possam reproduzir visualmente estruturas científicas de grande porte de forma a permitir uma experiência satisfatória ao usuário, sem comprometer sua imersão com problemas de renderização ou carregamento de estruturas ou imagens.

Sendo assim, a escalabilidade na visualização imersiva tenta lidar com o quanto de informação é possível não somente de ser processada pelos equipamentos de interação,

mas como o que o usuário consegue abstrair do que está visualizando a um nível aceitável de compreensão. Também é preciso levar em conta a questão do conforto quanto se lida com Head-Mounted Displays e dispositivos de interação 3D em uma abordagem imersiva, ou seja, o ambiente e os dados precisam ser ajustados de forma a garantir uma experiência confortável ao usuário.

3 CONSTRUÇÃO DE UM AMBIENTE DE INTERAÇÃO

3.1 Solução proposta

Dos trabalhos relacionados aos problemas abordados nesse estudo, uma forma de construir um ambiente de visualização imersiva e avaliar seus benefícios em relação a abordagens convencionalmente não-imersivas seria utilizar a interface gráfica da UnityMol. Essa escolha se deve ao fato de o programa ter sido desenvolvido totalmente sobre a engine gráfica da Unity3D, a qual é compatível com os equipamentos disponíveis para esse estudo: um Head-Mounted Display para a visualização e uma interface 3D para a interação - ambos detalhados nas seções posteriores.

Sendo assim, a opção seria adaptar a usabilidade do Head-Mounted Display e da interface 3D para o ambiente gráfico da UnityMol. No entanto, devido às dificuldades para realizar essa alternativa - uma vez que o programa requer configurações demasiadamente complexas para permitir a compatibilidade dos equipamentos - a opção mais viável é criar um ambiente a partir do zero na Unity, levando em conta questões como usabilidade e escalabilidade a fim de desenvolver um ambiente que proporcione mais benefícios em relação a abordagens não-imersivas.

Previamente à criação desse ambiente imersivo, foi estudada a questão da usabilidade e do conhecimento prévio, já que, entre todos os problemas, essas duas questões estão profundamente relacionadas uma com a outra. Espera-se que uma abordagem imersiva ofereça uma experiência que corresponda o mais próximo possível ao movimento humano e seja intuitiva. Além disso, parte-se do princípio que, na criação do ambiente de visualização imersiva, o usuário que vai utilizá-lo tem um grau mínimo de conhecimento sobre o objeto que será usado na interação (nesse caso, as moléculas), mesmo sem saber manipular ou não ser familiarizado com os dispositivos de realidade virtual. Por essa razão, no experimento que será descrito posteriormente, foram selecionados participantes da área de Química para realizar as tarefas de interação com as estruturas moleculares.

O problema da escalabilidade também será levado em consideração durante a construção do ambiente de visualização. Esse problema é diretamente dependente de duas partes: da ferramenta utilizada para a visualização da informação e também do equipamento utilizado para a criação do ambiente. No capítulo seguinte, será detalhado a configuração do equipamento e dos programas mostrando a extensão das possibilidades de representação que não prejudicaria a experiência do usuário e a compreensão da in-

formação. Posteriormente também serão detalhadas as restrições tecnológicas na criação desse ambiente.

As devidas medidas de qualidade serão utilizadas de forma tanto quantitativa quanto qualitativa para avaliar os benefícios que a abordagem imersiva pode proporcionar na realização das tarefas de interação propostas pelo experimento. Dessa forma será possível analisar se a visualização imersiva possui vantagens significativas em comparação com abordagens de interação não-imersivas.

3.2 Unity

A Unity é um dos programas mais utilizados para a criação de games e ambientes virtuais. Ela utiliza um motor gráfico 3D desenvolvido pela *Unity Technologies* que possui como alvo as seguintes APIs: *Direct3D* para o *Windows* e consoles *Xbox*, *OpenGL* para *Mac*, *Windows* e *Linux*, *OpenGL ES* no *Android* e *iOS* e outras APIs similares. Todos os scripts e programação desenvolvidos no programa são construídos em Mono, uma implementação *open-source* do *.NET Framework*. Podem ser utilizadas diversas linguagens de programação nos scripts como *C#*, *JavaScript* e *Boo* (similar a *Python*), (Unity Technologies, 2016).

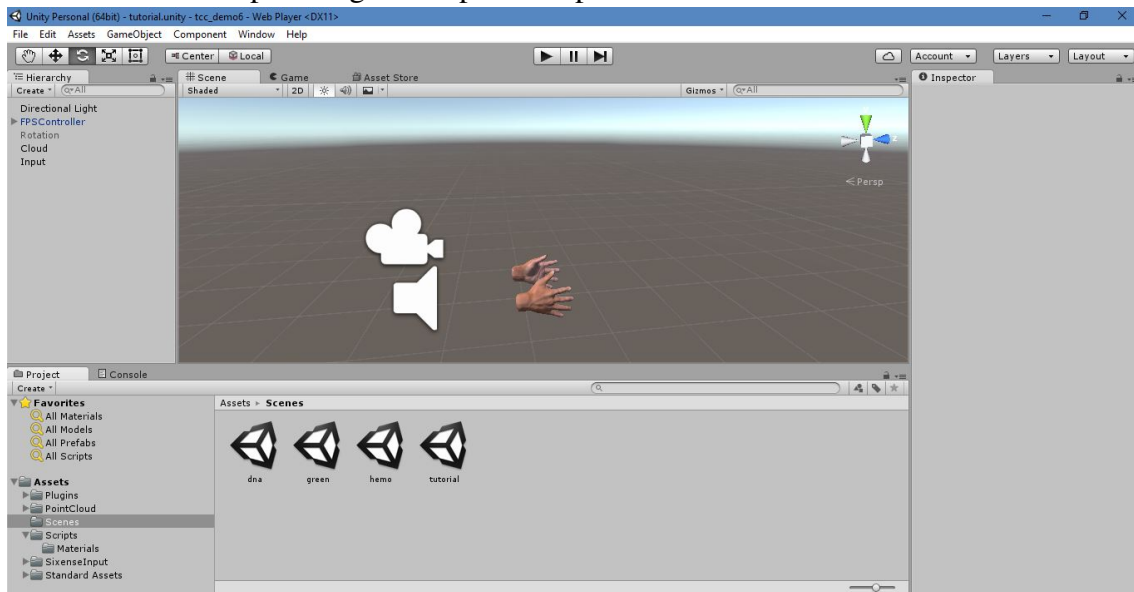
Como foi citado anteriormente, uma das principais razões por detrás da escolha da Unity como programa que irá ser o hospedeiro do ambiente de virtualização é a direta e fácil compatibilidade com os Head-Mounted Displays e interfaces 3D disponíveis atualmente. Desde o lançamento de tais dispositivos, o programa foi atualizado de forma a garantir a sua total compatibilidade com qualquer projeto, bastando para isso habilitar a opção de "*Virtual Reality Supported*" nas configurações do *Player* do projeto.

Em relação a aspectos de configuração para o programa, para o personagem de primeira pessoa que serviria como representação virtual do usuário e base para a configuração do Head-Mounted Display e da interface 3D, foi utilizada a implementação já existente na Unity, através do pacote *Standart Assets*. As devidas modificações foram implementadas de forma que o movimento através do ambiente deixasse de ser feito através do teclado, mas com o botão analógico do controle esquerdo do dispositivo de interface 3D. Além disso, os scripts foram modificados também de forma que o ângulo de deslocamento pelo cenário correspondesse ao ângulo da câmera (quando utilizando o mouse na abordagem não-imersiva) e do Head-Mounted Display (quando utiliza o dispositivo para a abordagem imersiva). Dessa forma, o usuário tem total liberdade de movimento pelo

ambiente, sem ficar restrito a um plano específico.

O ambiente desenvolvido conta com um cenário vazio onde é posicionado o personagem de primeira pessoa (apenas o objeto, sem renderização). As mãos representando os controles da interface 3D são posicionadas na frente do personagem, de forma a emular a posição natural das mãos de uma pessoa, conforme pode ser observado no editor do programa na Figura 3.1.

Figura 3.1: Ambiente básico do programa desenvolvido na Unity, em que podem ser vistas a câmera do personagem em primeira pessoa e as suas mãos virtuais.



Fonte: O Autor

3.3 Oculus Rift

O Oculus Rift é um Head-Mounted Display desenvolvido e fabricado pela empresa Oculus VR. Todo o estudo foi realizado com a versão mais atual disponível no mercado para consumidores, lançada em março de 2016. Ele possui uma resolução de 1080 x 1200 em ambas as lentes do visor em OLED, com uma taxa de refresh de 90 Hz e um ângulo de visão de 110 graus. O sistema de rastreamento de posição do aparelho chamado "Constellation", é composto por um sensor estacionário infravermelho USB que captura a luz que é emitida pelos LEDs IR que são integrados no dispositivo (Oculus Rift Dev Team, 2016). Isso possibilita a criação de um espaço 3D, permitindo que o usuário use o Rift enquanto estiver sentado, de pé, ou caminhando pela área em que se localiza. Esse modelo do Rift ainda acompanha um sensor de posicionamento que é necessário para o estudo, já que quando colocado na posição correta diante do usuário ele pode identificar

a posição atual do Rift em relação ao ambiente real, reproduzindo-a no ambiente virtual.

Figura 3.2: Oculus Rift e sensor de posicionamento.



Fonte: <https://goo.gl/Axr81w>

Para a configuração do Oculus Rift - graças à direta compatibilidade do dispositivo com a versão 5.4.5 da Unity - não é necessário nenhum tipo de configuração específica, além da já citada anteriormente no próprio programa. Basta conectar o aparelho ao computador e a câmera existente no personagem se torna automaticamente habilitada para a visão através do Oculus Rift, uma vez que o programa é executado. Além disso, é necessário que o sensor de posicionamento seja colocado em uma superfície firme, orientado para o usuário e apontando para o Oculus Rift, com uma variação de posição possível de 90 graus tanto para a esquerda quanto para a direita, a fim de manter o rastreamento da posição do Oculus Rift correto.

3.4 Razer Hydra

Ao contrário do HTC Vive (um outro modelo de Head-Mounted Display), que tem controles para simular os movimentos das mãos, a versão atual do Oculus Rift não possui tais acessórios (os quais estão no momento sendo produzidos pela empresa para venda mais tarde) e necessita de um equipamento secundário para fazer tal procedimento. Nesse caso foi escolhida a Hydra, desenvolvida pela Razer.

A Razer Hydra é um controle de movimento e detecção de orientação desenvolvido pela Sixsense Entertainment com parceria com a Razer USA. Ele utiliza um campo magnético fraco para detectar a posição absoluta e a orientação dos controles com uma precisão, conforme afirmado pelos seus desenvolvedores, de 0,001 mm a 1 mm, possuindo

seis graus de liberdade (Razer Hydra Dev Team, 2011). A versão utilizada nesse estudo é conectada com fios, mas uma versão wireless do equipamento já está sendo desenvolvida pela Razer.

Com uma parceria com a Valve, a Razer Hydra é compatível com a maioria dos jogos disponibilizados pelo serviço da empresa, o Steam. Basta utilizar uma SDK própria para utilizar o equipamento.

Figura 3.3: Controles da Hydra Razer juntos da sua base de rastreamento.



Fonte: <https://goo.gl/dYqSL9>

Para configurar a Razer Hydra corretamente para o funcionamento dentro do ambiente da Unity, foi utilizado o plugin Sixsense, que permite integrar o uso do aparelho à cena. A API é simples e utiliza modelos de mãos tridimensionais com uma gama variada de movimentos. Os scripts que acompanham o plugin são altamente modulares, permitindo modificações simples para alterar as atribuições de cada botão da Razer Hydra de acordo com movimentos e ações dos dedos das mãos. Além disso, foram seguidas as orientações fornecidas no guia do dispositivo para sua correta utilização, assim como aspectos de calibração.

A fim de proporcionar uma experiência imersiva que se aproxime ao máximo dos movimentos reais é preciso acompanhar o giro do corpo do usuário através dos equipamentos disponíveis. Dessa forma, faz-se necessária alguma forma de rastrear o giro do torso para que as mãos acompanhem o movimento do corpo da forma mais natural possível. A solução encontrada foi adaptar o código que estabelece o movimento do avatar do usuário pelo cenário para que as mãos virtuais da Razer Hydra girassem junto da rotação da câmera. Tal rotação é feita em torno do corpo do personagem de primeira pessoa e somente em um eixo. Dado o campo de visão do Oculus Rift como sendo de 110 graus,

ou seja, mais limitado do que a visão humana, se espera que o usuário gire o torso junto da cabeça quando precisar visualizar partes do ambiente que não estejam em seu campo de visão. Sendo assim, no momento em que o usuário realiza um giro natural com o torso e cabeça, as mãos irão acompanhar o seu corpo.

3.5 Tipos de dados e informações

Depois de estabelecida a forma de construção do ambiente de visualização imersiva, é necessário decidir quais serão os tipos de dados que serão visualizados e manipulados através da interface 3D. As sub-seções a seguir apresentam os formatos de dados utilizados para criar os objetos de visualização do ambiente imersivo, assim como as suas limitações e adaptações ao programa.

3.5.1 Arquivos PDB - Protein Data Bank

O formato de arquivo PDB (*Protein Data Bank*, Banco de Dados Proteico) é um arquivo de texto formatado de maneira a descrever as estruturas tridimensionais das moléculas contidas no Protein Data Bank. Esse formato gera descrição e anotação para proteínas e estruturas de ácidos nucleicos incluindo coordenadas atômicas, cadeias observadas, estruturas assinaladas secundárias, assim como a conectividade atômica. As estruturas moleculares apresentadas nesse formato normalmente são depositadas com outras moléculas como água, íons, ácidos nucleicos, ligandos e assim por diante, que são descritos no arquivo PDB também.

A motivação por trás da criação desse formato de estudo em 1976 foi desenvolver um tipo de arquivo que fosse humanamente legível e que permitisse aos pesquisadores trocar informações de coordenadas proteicas através de um sistema de banco de dados. Sofrendo diversas modificações e revisões através dos anos, a versão atual do formato PDB é 3.20 (Worldwide PDB Foundation, 2003).

Um trecho do arquivo PDB correspondente à molécula do DNA (PDB Id: 123d) pode ser visualizado no Apêndice E, assim como uma descrição detalhada de cada linha do formato PDB.

3.5.2 MeshLab

O programa selecionado para poder visualizar graficamente a estrutura molecular descrita em arquivos PDB foi o MeshLab. A escolha foi devido a dois fatores principais, sendo o primeiro a gama de formatos que o programa consegue ler e identificar, além da facilidade de conversão de formatos e de manipulação do objeto (malha) no ambiente. O MeshLab é um sistema de software avançado de malhas 3D orientado para a manipulação e processamento de grandes conjuntos de malhas que possibilita uma gama de ferramentas para edição, limpeza, inspeção, renderização e conversão em outros tipos de estruturas gráficas. O programa foi desenvolvido pelo centro de pesquisa do Instituto di Scienza e Tecnologie dell'Informazione, que faz parte do National Research Council da Italia, além de ser gratuito e open-source, sujeito aos requisitos da licença GNU (General Public License) (ISTI - CNR, 2014). O programa também é amplamente utilizado no ambiente acadêmico como em microbiologia, reconstrução de superfícies, paleontologia, prototipação de cirurgias ortopédicas, ortodontia, entre outros.

Para a visualização dos arquivos em PDB utilizados nesse trabalho, a manipulação deles é simples no ambiente do MeshLab. Primeiramente os arquivos PDB correspondentes às moléculas foram visualizados de forma que os átomos fossem representados por esferas, o que corresponde à visão natural e padrão desse tipo de estrutura em todos os programas citados na seção 1.2. Na seção seguinte será detalhada o tipo de conversão a ser aplicada nos arquivos visualizados no MeshLab a fim de tornar as moléculas utilizáveis no ambiente desenvolvido na Unity.

3.5.3 Nuvem de pontos

3.5.3.1 *Obstáculos do formato OBJ*

O tipo de formato de malhas (objetos) que normalmente é utilizado na Unity é o Wavefront.obj. Esse formato é uma definição geométrica e foi desenvolvido pela Wavefront Technologies para o seu pacote de Visualizações Avançadas. O formato foi amplamente adotado pela maior parte dos programas de desenvolvimento de ambientes 3D e é um formato universalmente aceito. Se trata de um simples arquivo que representa somente a geometria 3D do objeto, respectivamente a posição de cada vértice, a posição de cada textura UV com sua coordenada, as normais e as faces que formam cada polígono

definidas como uma lista de vértices. Por padrão, as coordenadas dos vértices são armazenadas no sentido anti-horário, fazendo assim a declaração explícita das faces normais desnecessária. As coordenadas do formato OBJ não possuem unidades, mas os arquivos contém informação sobre a escala em uma linha de comentário específica (Carnegie Mellon University Computer Science Department, 2005).

Os tipos de dados e organização padrão deles no arquivo podem ser visualizadas no Apêndice F.

Existem dois problemas ao tentar converter uma malha no formato de PDB para OBJ. Apesar de o MeshLab exibir a estrutura molecular corretamente, com todos os átomos com suas respectivas cores, ao passar essa estrutura para OBJ as informações de cores são perdidas, porque o formato OBJ lida com texturas e não com cores sólidas, que são uma opção mais simples para colorir uma estrutura 3D. Sendo assim, a respectiva molécula em formato OBJ não possui nenhuma cor, apenas o material padrão das malhas. A outra dificuldade encontrada nessa conversão é que, dada a natureza de interação desse estudo, é preciso considerar a necessidade de poder manipular cada átomo como uma estrutura isolada, e não apenas a molécula como um todo. Ao ser convertido para OBJ, a molécula se torna um objeto único e selecionar partes específicas desse objeto através do ambiente da Unity se torna uma tarefa complexa. Para tanto, surge a necessidade de buscar um outro tipo de formato para poder representar a molécula no ambiente da Unity.

Sendo assim, a solução encontrada foi abrir o arquivo PDB no MeshLab de forma que cada átomo fosse representado por um ponto. Felizmente, as cores atribuídas a cada átomo por padrão são passadas aos pontos, uma informação necessária para poder identificar cada átomo visualmente. Dessa forma, seria possível passar a nuvem de pontos que representa a molécula na Unity e apenas associar uma esfera simples (uma forma primitiva da Unity) a cada átomo, o que possibilitaria a manipulação de cada átomo individualmente, já que cada um seria um objeto único. A melhor forma encontrada para exportar essa nuvem de pontos e poder trabalhar com ela na Unity foi convertê-la para o formato OFF, que será apresentado a seguir.

3.5.3.2 *Formato OFF*

O formato OFF (Object File Format) é um dos padrões mais simples para a descrição dos polígonos que compõe o objeto tridimensional (Princeton University, 2004). Dessa forma, ele foi escolhido para realizar a conversão para a nuvem de pontos e poder ser adaptado para a representação no ambiente da Unity. Para apresentar como o arquivo

é estruturado, tomamos como exemplo a mesma molécula do DNA (PDB Id: 123d), conforme pode ser visualizada no Apêndice G.

3.5.3.3 Algoritmo de conversão e renderização das moléculas

Apesar de a Unity reconhecer praticamente qualquer formato de arquivo de objeto em 3D, o formato OFF não é reconhecido pelo programa e nuvem de pontos normalmente precisam de um código de conversão para serem representadas no programa.

O script desenvolvido funciona da seguinte forma: ele lê as linhas do arquivo OFF e cria um GameObject que corresponde a molécula, sendo que seus "filhos", são os átomos. Ele primeiramente posiciona todos os pontos no ambiente de acordo com suas coordenadas e atribui a cor a eles de acordo com as informações do arquivo. No momento em que os pontos são instanciados, é atribuído a cada um dos pontos da lista uma esfera, que também faz parte de um array, ficando na mesma posição que o ponto. Sendo assim, o ponto se torna o centro da esfera.

Uma vez que a representação e conversão de formatos através do MeshLab somente preserva as informações das posições de cada átomo na molécula assim como sua respectiva cor (segundo o padrão da IUPAC), algumas alterações no algoritmo são necessárias para manter a representação de cada molécula o mais aproximada e fiel possível das informações originais contidas no arquivo PDB. Primeiramente, é preciso garantir que cada átomo possui o tamanho e escala corretas, já que as ligações atômicas na representação molecular via PDB se dão de forma que cada átomo fica ligado a outro por si só, sem a necessidade de uma representação por traços, por exemplo. Para isso, foi consultada a tabela oficial do raio atômico de cada elemento químico, obtendo as informações necessárias para a representação correta do tamanho e convertendo as medidas dadas em Angstroms para pixels. Dentro do algoritmo, essas informações são passadas diretamente para a escala de cada esfera, assim ajustando o tamanho representativo de cada átomo e tornando clara as ligações de cada um.

Dessa forma, a molécula é renderizada no cenário do ambiente da Unity e é possível interagir tanto com a estrutura completa quanto com cada átomo isoladamente. Para garantir uma experiência mais natural para o usuário, colisores foram adicionados às esferas que representam os átomos, assim o usuário não pode atravessá-las.

3.6 Interação

Para criar as mecânicas de interação do programa, o ambiente de visualização imersiva na Unity foi desenvolvido da seguinte forma. O usuário, no caso um personagem em primeira pessoa, utilizará o mouse (para a abordagem não-imersiva) ou o Oculus Rift (para a abordagem imersiva) para observar o cenário a sua volta e realizará as interações com os elementos (nesse caso, as moléculas) com a Razer Hydra. Nas subseções seguintes segue uma breve explicação sobre cada umas interações que o usuário pode realizar com qualquer estrutura molecular representada no programa utilizando o Oculus Rift e Razer Hydra, assim como a motivação por trás da escolha de cada tipo de mecânica.

Todo o programa desenvolvido nesse estudo, assim como os scripts utilizados para capturar o log de eventos das tarefas realizadas pelos usuários no experimento que será descrito posteriormente, pode ser visualizado através do link <https://goo.gl/J5DRua>.

Na Figura 3.4 pode ser visualizado o mapeamento completo da mecânica de interação desenvolvida no ambiente imersivo utilizando a Razer Hydra. Os aspectos de cada interação serão detalhados a seguir. Como pode ser observado, a disposição das interações nos controles está "espelhada", o que se deve a um problema de implementação em que não foi possível atribuir a mesma função aos mesmos botões de ambos os controles da Razer Hydra. Qualquer tipo de modificação na atribuição dos botões em quaisquer dos controles da Razer Hydra provocava um erro de compilação ou o dispositivo sofria de sérios problemas de funcionamento. Sendo assim, as funções dos botões foram atribuídos utilizando a disposição padrão já implementada no pacote da Sixense para a Unity.

3.6.1 Movimentação

Para se mover pelo cenário, conforme pode ser visto na Figura 3.4, o usuário utilizará o botão analógico do controle esquerdo da Razer Hydra, emulando uma funcionalidade presente na maioria dos controles de videogames. Como foi citada anteriormente, a movimentação pelo cenário é livre, pois o usuário pode se mover em qualquer direção (frente, trás, esquerda, direita e diagonais) e, dado um ângulo de sua visao (definido pelo mouse ou pelo Oculus Rift), pode se mover nessa direção relativa também.

Figura 3.4: Mapeamento dos comandos de interação da Razer Hydra.

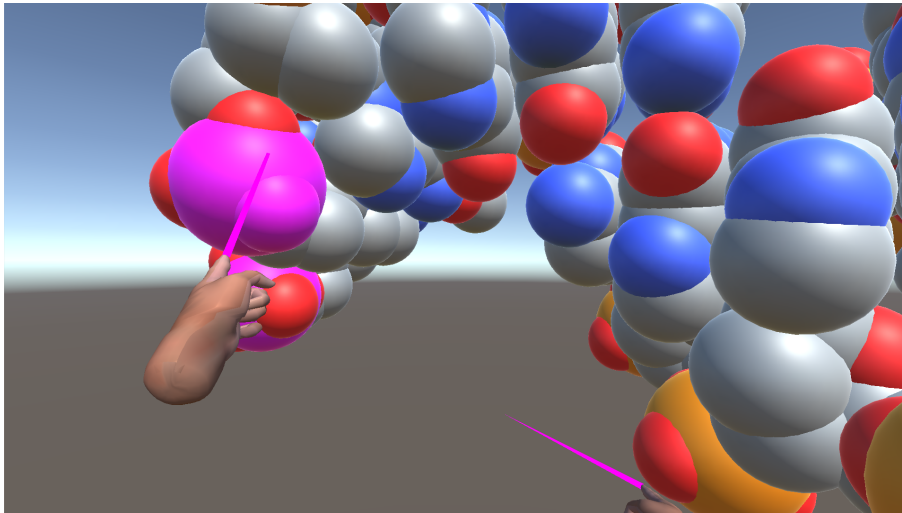
Fonte: O Autor

3.6.2 Seleção

Imitando o movimento natural, o usuário pode apontar e selecionar átomos da molécula. Para tornar a direção de seleção o mais precisa possível e diminuir a quantidade de erros, primeiramente foi definido que a posição padrão das mãos virtuais da Razer Hydra seria com o gesto de "apontar" (com o dedo indicador das duas mãos em riste e os outros dedos fechados). Além disso, para auxiliar o usuário na seleção de objetos, foram gerados raios coloridos que acompanham a ponta dos dedos indicadores e funcionam como uma "mira". O primeiro objeto que esse raio atingir será o objeto selecionado pelo usuário quando ele utilizar o botão apropriado da Razer Hydra, conforme pode se observar no exemplo da Figura 3.5. A escolha desse tipo de interação se dá pelo fato de que os programas apresentados na seção 1.2 utilizam o auxílio do mouse ou de menus de seleção para destacar partes específicas de uma molécula. Acreditamos que ao utilizar o movimento do controle da Razer Hydra para apontar e marcar um ou mais átomos oferece

uma experiência mais intuitiva e natural, com um alto grau de imersão ao usuário.

Figura 3.5: Usuário selecionando com o auxílio das setas de "mira" diversos átomos, que assumem a cor magenta ao serem marcados.



Fonte: O Autor

Sendo assim, o usuário pode utilizar o controle esquerdo ou direito da Razer Hydra e, pressionando o botão número 2 ou botão número 1, respectivamente, os átomos que estiverem sendo apontados pela "mira" da mão específica serão selecionados e adquirirão a cor magenta, indicando ao usuário visualmente que o átomo está selecionado. Caso o usuário tenha feito uma seleção incorreta, basta pressionar o mesmo botão de seleção na mão que estiver apontando para o átomo selecionado incorretamente e ele será desmarcado, retornando a sua cor original.

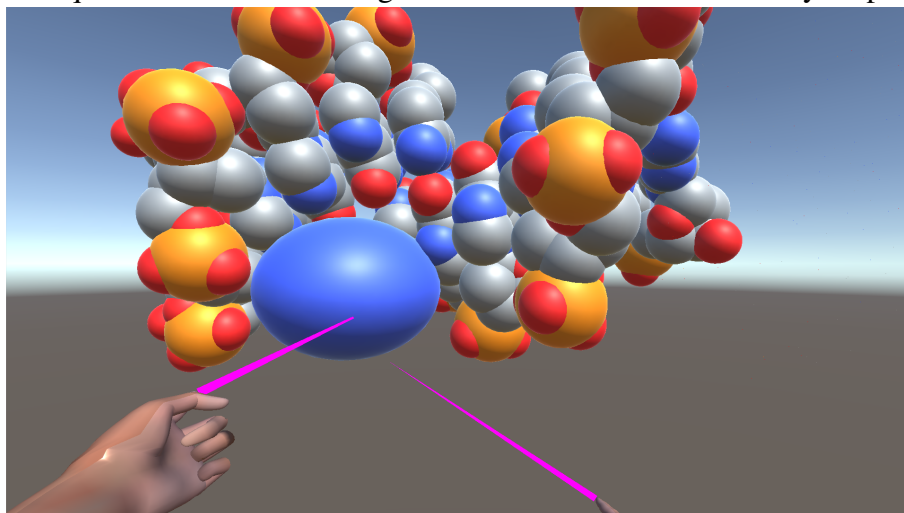
3.6.3 Agarrar

Utilizando o controle esquerdo ou direito da Hydra, o usuário pode agarrar um átomo (ou vários) que foi previamente selecionado e movimentá-lo para onde desejar. Para isso, basta manter pressionado o gatilho esquerdo ou direito para mover o átomo livremente, como se estivesse agarrando-o com sua própria mão. Para soltar o átomo, basta soltar o gatilho do controle correspondente à mão que o está agarrando e irá permanecer na posição que o usuário o soltou. Um exemplo dessa mecânica de interação pode ser visualizado na Figura 3.6.

A mecânica de agarrar um ou mais átomos é uma solução mais natural e interativa do que os outros programas apresentados na seção 1.2 apresentam. Enquanto em muitos deles a seleção e movimento de átomos para determinadas posições é feita com menus,

no ambiente imersivo desenvolvido estamos buscando uma experiência mais intuitiva, em que o usuário pode pegar um ou mais átomos e movê-lo livremente pelo espaço do ambiente, o posicionando em qualquer lugar.

Figura 3.6: Usuário agarrando um átomo de nitrogênio (em azul), podendo movê-lo livremente enquanto mantiver um dos gatilhos dos controles da Razer Hydra pressionado.

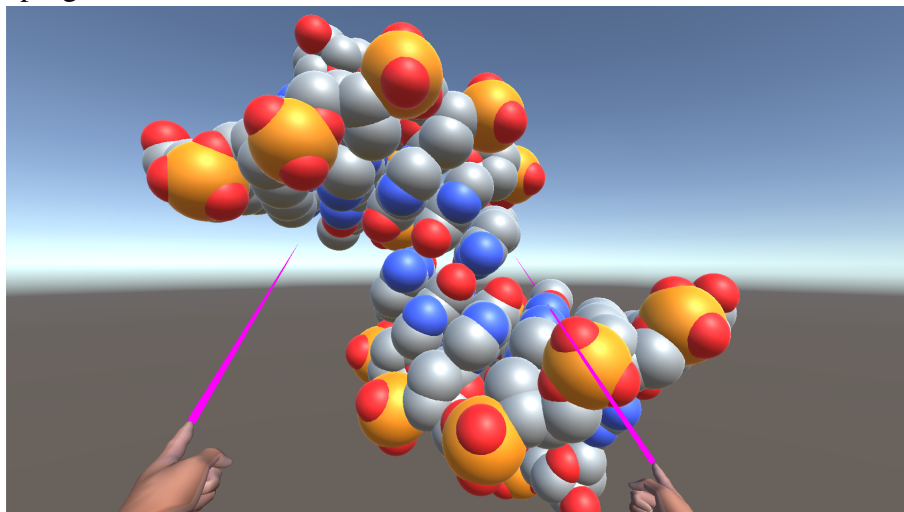


Fonte: O Autor

3.6.4 Giro

Apesar de possuir movimento livre em todos os ângulos e direções, sem nenhum tipo de restrição, no espaço virtual em que a molécula está sendo exibida (tanto ao utilizar o mouse quanto o Oculus Rift), o usuário pode desejar modificar o ângulo da estrutura molecular. A razão para essa mecânica seria poder visualizar a molécula de forma diferente, sendo capaz de observar partes que não estejam visíveis através do ponto de vista do usuário. Para isso, ele pode utilizar o giro do botão analógico do controle direito da Razer Hydra para girar a molécula em diferentes ângulos, até que encontre a posição desejável para sua visualização. Além disso, todos os programas apresentados na seção possuem essa função que permite o giro da molécula, então seria conveniente implementá-la no ambiente imersivo que desenvolvemos. A Figura 3.7 ilustra esse tipo de interação com a molécula.

Figura 3.7: Molécula do DNA rotacionada 90 graus para a direita, a partir de sua posição inicial no programa.



Fonte: O Autor

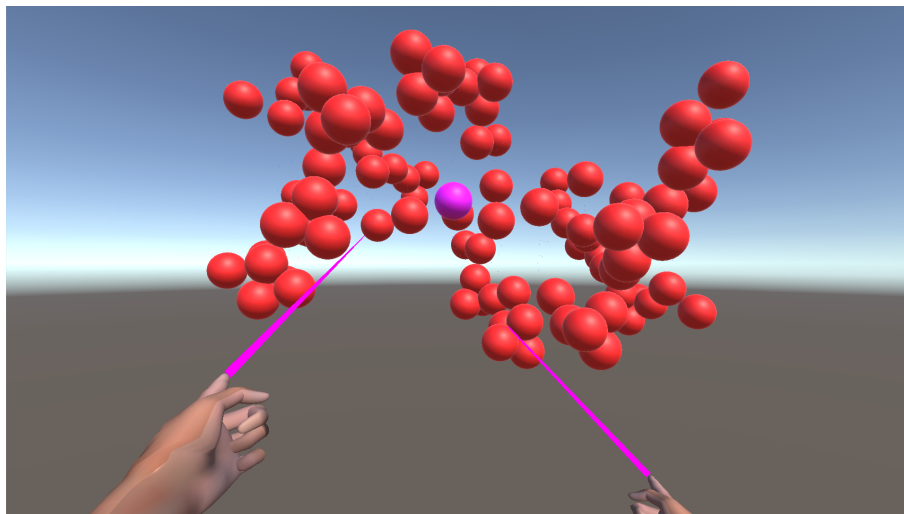
3.6.5 Visibilidade

É possível tornar apenas um certo tipo de átomo visível na cena, como por exemplo apenas os de carbono, ou oxigênio, etc. Para tanto, basta utilizar a função de selecionar um átomo e, ao pressionar o botão número 4 no controle esquerdo ou o botão número 3 do controle direito da Razer Hydra, todos os átomos do mesmo tipo correspondente ao selecionado, ficarão destacados na molécula. A Figura 3.8 ilustra como a mecânica de visibilidade de tipos de átomos funciona. Esse tipo de mecânica de interação se mostra útil uma vez que dos todos os programas apresentados na seção 1.2 possuem alguma funcionalidade que permite a visibilidade de apenas um tipo de átomo no ambiente de visualização.

3.6.6 Aumentar e diminuir

Para permitir que o usuário possa visualizar a estrutura molecular de formas diferentes, é possível aumentar (Figura 3.9 (a)) ou diminuir (Figura 3.9 (b)) o tamanho dos átomos de forma proporcional. Para aumentar o tamanho dos átomos basta manter pressionado o bumper do controle esquerdo e para diminuir o tamanho deles basta manter o bumper do controle direito da Razer Hydra pressionado. Ao soltar qualquer um dos bumpers, as alterações de tamanho irão cessar. Essa função está presente em todos os programas apresentados na seção 1.2, uma vez que aumentar ou diminuir o raio dos áto-

Figura 3.8: Apenas átomos de oxigênio (em vermelho) destacados na estrutura da molécula do DNA.



Fonte: O Autor

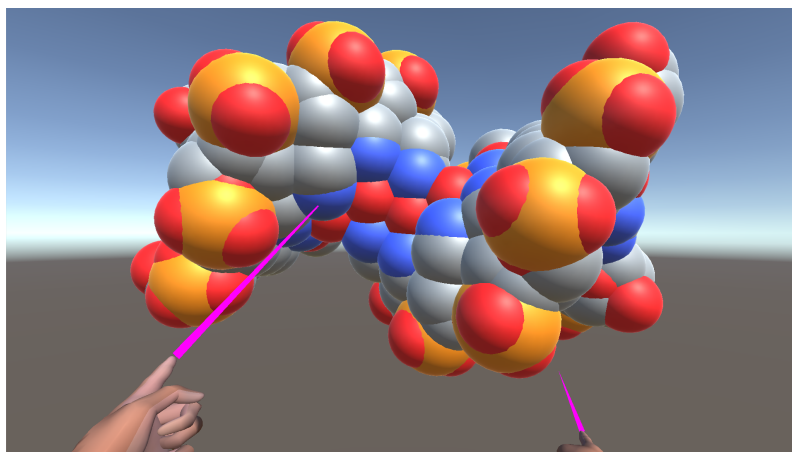
mos é extremamente necessário para permitir a visualização mais precisa da posição de certos elementos e de que como eles se combinam com os átomos adjacentes.

3.6.7 Desfazer Alterações

Todos os tipos de interação apresentados até agora modificam a estrutura molecular original. Além das alterações que o usuário deseja realizar, podem ocorrer modificações incorretas como seleções incorretas, aumentos ou diminuições de átomos, mudanças de posicionamento da molécula ou de átomos que foram agarrados. Sendo assim, é necessária uma função que permita desfazer qualquer tipo de modificação na molécula. Para tanto, basta que o usuário pressione o botão número 3 do controle esquerdo ou o botão número 1 do controle direito da Razer Hydra para restaurar as configurações de posição e proporções originais e cores da estrutura molecular.

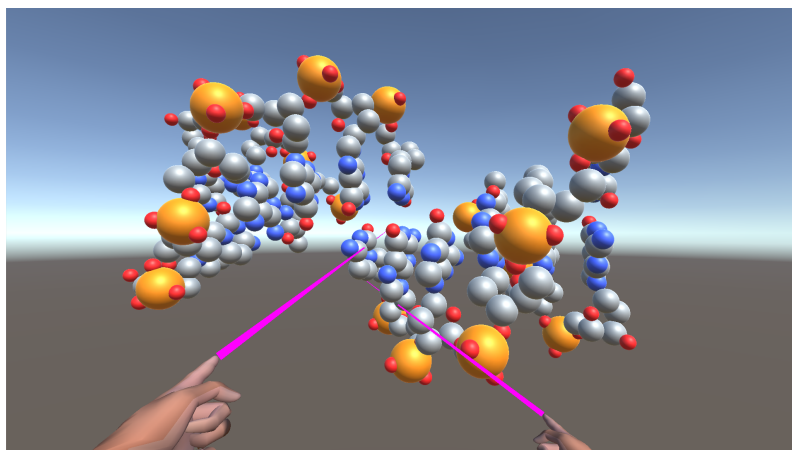
Figura 3.9: Aumento e diminuição do raio atômico dos elementos da molécula de DNA.

(a) Aumento do raio dos átomos.



Fonte: O Autor

(b) Diminuição do raio dos átomos.



Fonte: O Autor

4 EXPERIMENTO: RAPIDEZ, ERROS E CONFORTO

Nesse experimento, será investigado o quão rápida, com menos erros e confortável uma abordagem imersiva pode ser em relação a uma não-imersiva. A seguir serão apresentadas as hipóteses desenvolvidas para embasar o experimento quais foram os materiais e métodos utilizados no desenvolvimento e realização dos testes com usuários.

4.1 Hipóteses

Este experimento investiga os benefícios da visualização imersiva para interação com estruturas moleculares utilizando um Head-Mounted Display e um dispositivo de manipulação 3D. A hipótese geral é que um ambiente de visualização imersiva para manipular moléculas oferece mais rapidez, precisão e conforto ao usuário. Em um nível mais específico, o experimento testa as seguintes hipóteses:

- **H1: A realização de tarefas de interação com estruturas moleculares em um ambiente virtual imersivo utilizando um Head-Mounted Display é mais rápida do que utilizando uma abordagem não-imersiva.**

Ambientes virtuais imersivos criam de maiores graus de liberdade de movimentos ao usuário do que o uso de mouse e teclado, ao proporcionarem uma experiência que permite uma movimentação e interação mais natural. Além disso, aumentam o campo de visão, possibilitando a análise de uma quantidade maior de dados partindo de um mesmo posicionamento do usuário.

- **H2: A realização de tarefas de interação com estruturas moleculares em um ambiente virtual imersivo utilizando um Head-Mounted Display ocasiona menos erros do que utilizando uma abordagem não-imersiva.**

Ambientes imersivos afetam positivamente a experiência do usuário, uma vez que aumentam o foco e interesse com a tarefa que está realizando, além de diminuir as distrações visuais externas por aumentar seu campo de visão.

- **H3: A realização de tarefas de interação com estruturas moleculares em um ambiente virtual imersivo utilizando um Head-Mounted Display oferece um nível de conforto maior que utilizando uma abordagem não-imersiva.**

Pelo fato de ambientes virtuais imersivos proporcionarem uma experiência mais natural ao usuário, eles podem criar um nível maior de conforto ao exigirem ações menos complexas para interagir com o ambiente virtual em que o usuário se encontra imerso.

4.2 Materiais e métodos

4.2.1 Participantes

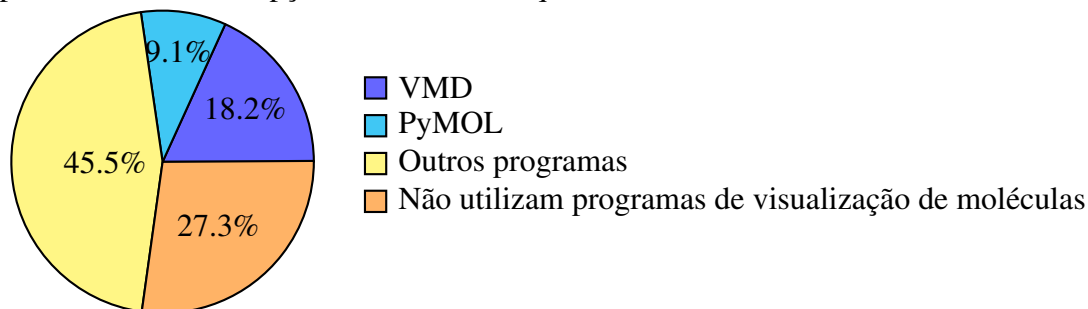
O experimento envolveu uma amostra de 11 voluntários (6 homens e 5 mulheres). Todos eram estudantes que já possuíam formação acadêmica na área de Química ou Biotecnologia. Destes participantes, 45,5% possuíam o Ensino Superior Incompleto, enquanto 27,3% possuíam Pós-graduação incompleta e os 27,3% restantes Pós-graduação completa. As idades variavam de 19 a 28 anos ($M = 23$, $SD = 3,13$). Essa escolha de amostra foi tomada levando em conta utilizar participantes que tivessem um domínio e conhecimento prévio sobre os dados utilizados no experimento, nesse caso, as estruturas moleculares. A todos os participantes foi fornecido um termo de consentimento antes da realização do estudo (vide Apêndice A).

Os indivíduos possuíam pouco conhecimento sobre o propósito do experimento (i.e, visualização imersiva). Somente um dos participantes possuía uma experiência com realidade virtual e afirmou que havia se sentido confortável nela. Dos três participantes que afirmaram ter problemas de visão, o usuário que possuía apenas miopia optou por realizar os testes com a abordagem imersiva do Oculus Rift sem o uso de seus óculos. Como no formulário de questionamento posterior aos testes, esse mesmo participante não apresentou reclamações quanto a problemas de visão ou desconforto ao utilizar o Oculus Rift, os resultados não são alterados. Os outros dois participantes que afirmaram possuir problemas de miopia e astigmatismo (nesses casos, ambos problemas para os participantes), optaram por realizar os testes imersivos com o Oculus Rift utilizando seus próprios óculos também, com os testes transcorrendo normalmente.

Quanto à experiência dos participantes em relação a programas de computador para a visualização de moléculas, a Figura 4.1 mostra o comparativo das informações colhidas.

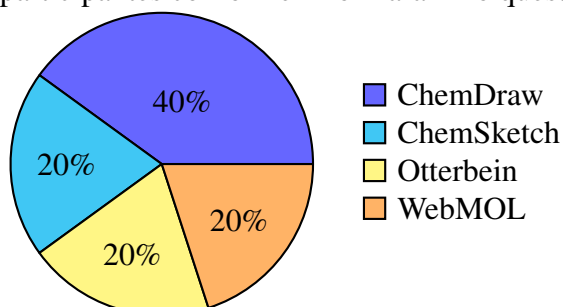
A Figura 4.2 mostra a relação de programas utilizados pelos participantes que indicaram usar outros dos listados no questionários.

Figura 4.1: Relação de programas de visualização de moléculas utilizados pelos participantes conforme as opções fornecidas no questionário.



Fonte: O Autor

Figura 4.2: Relação de outros programas de visualização de moléculas utilizados pelos participantes conforme informaram no questionário.



Fonte: O Autor

4.2.2 Dispositivos

As variáveis independentes são o display (Head-Mounted Display ou display comum) e as tarefas que serão realizadas. Já as variáveis dependentes são a rapidez, a quantidade de erros e o nível de conforto. A configuração da máquina utilizada para o experimento pode ser visualizada na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Configurações da máquina utilizada no experimento.

<i>Característica</i>	<i>Especificação</i>
Processador	Intel Core i5 4670
Modelo	Haswell
Frequência	799,53 MHz
Cache (L1)	4 x 32 KBytes (8-way)
Memória	15 GBytes (DDR3)
GPU	NVidia GeForce GTX 760
Modelo	ZOTAC
Memória Global	4096 MBytes

Fonte: O Autor

Para o display utilizado na realização de tarefas com abordagem não-imersiva foi

utilizado um monitor LCD de 21,5 polegadas, com um refresh rate de 60 Hz e resolução de 1920 x 1080 pixels, conforme a Figura 4.3 (a). Para a realização de tarefas com uma abordagem imersiva, cada participante foi equipado com um Oculus Rift, de especificações descritas na seção 3.2 e mostrado na Figura 4.3 (b).

Figura 4.3: Tipos de setups para as diferentes abordagens.

(a) Abordagem não-imersiva utilizando o display da máquina, a Razer Hydra e o mouse.



Fonte: O Autor

(b) Abordagem imersiva utilizando o Oculus Rift e seu sensor, e a Razer Hydra.

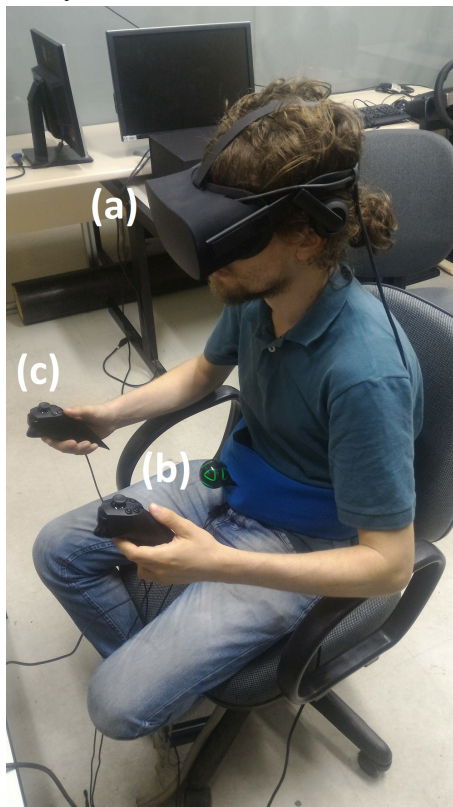


Fonte: O Autor

A interação com o ambiente de visualização desenvolvido é realizada através da utilização dos controles da Razer Hydra e do uso do mouse, para a abordagem não-imersiva. Para a abordagem imersiva, o usuário deve utilizar os controles da Razer Hydra e o Oculus Rift para realizar a movimentação da câmera pelo ambiente, acompanhando o movimento de sua própria cabeça. Para realizar o experimento com ambas as abordagens e permitir o rastreamento da posição das mãos do usuário (conforme descrito na subseção 3.6.4), a base da Hydra foi presa por um cinto no participante. A disposição de todos os

aparelhos e descrita na Figura 4.4.

Figura 4.4: Disposição dos aparelhos no usuário.(a) Oculus Rift, (b) Base da Razer Hydra, e (c) Controles da Razer Hydra.



Fonte: O Autor

4.2.3 Moléculas usadas nos testes

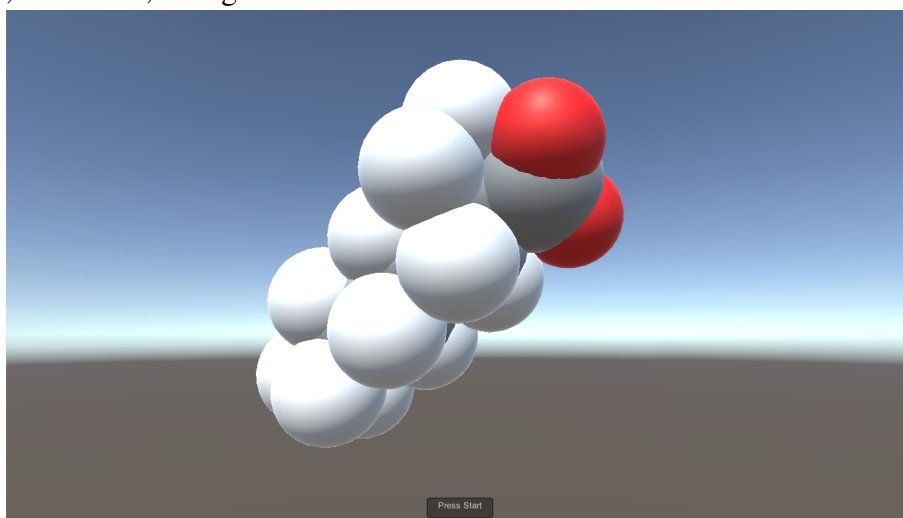
4.2.3.1 Lisina

A fim de praticar o conhecimento adquirido antes dos testes, cada participante é convidado a experimentar os diferentes tipos de interação que o sistema proporciona com a molécula de lisina (PDB Id: LYS). A Lisina é um aminoácido polar básico e altamente solúvel em água. Em circunstâncias normais, um ser humano consome quantidade suficiente de lisina através da alimentação. A falta desse aminoácido pode ocasionar crescimento lento, fadiga, náusea, tontura, perda de apetite e distúrbios reprodutivos. É encontrada principalmente em alimentos ricos em proteínas como: carnes, frutos do mar, produtos à base de soja, leite e derivados. Em menor concentração, é encontrada em verduras e legumes. O excesso de lisina no organismo pode resultar em diarreia, dor de estômago, aumento do colesterol, danos hepáticos e renais. Como vários estudos já

foram realizados para esclarecer o papel da Lisina no organismo e no tratamento de vários problemas de saúde, o conhecimento e detalhamento desse aminoácido é de suma importância para a Química, (Amino Acids Guide, 2016).

Por se tratar de uma molécula pequena e simples, conforme pode ser visto pela sua renderização no ambiente 3D da Unity pela Figura 4.5, ela se torna uma escolha apropriada para servir de prática para os participantes se familiarizem com as tarefas e comandos dos testes antes de realizá-los.

Figura 4.5: Molécula da Lisina renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor branca representam átomos de hidrogênio; cor cinza, carbono; cor vermelha, oxigênio; e cor azul, nitrogênio.



Fonte: O Autor

4.2.3.2 DNA

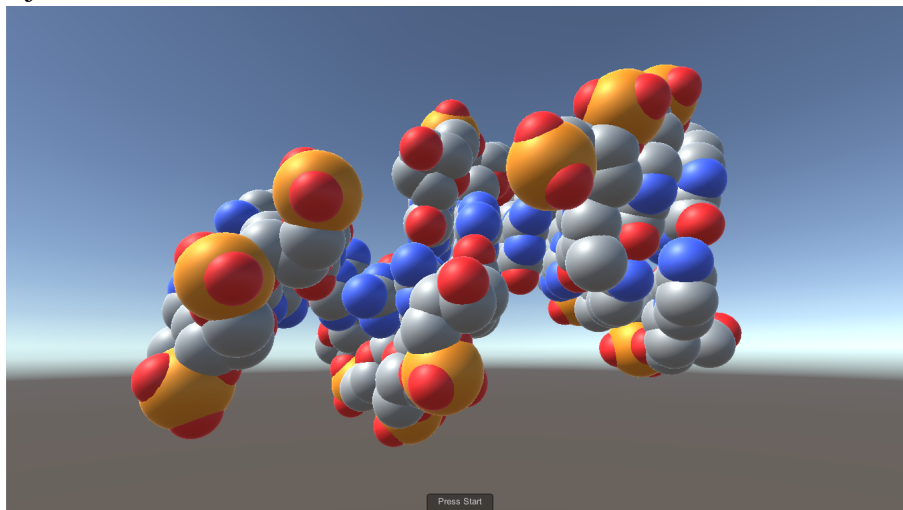
A estrutura do DNA (Deoxyribonucleic acid, PDB Id: 123d) é uma das moléculas mais conhecidas do mundo. Contendo o código genético responsável pelas definições das características físicas de cada ser humano assim como a produção de proteínas, a cadeia principal do DNA é formada por fosfato e resíduos de açúcar, dispostos alternadamente.

O açúcar no ADN é 2-desoxirribose, uma pentose (açúcar com cinco carbonos). Os açúcares são unidos por grupos fosfato que formam ligações fosfodiéster entre o terceiro e quinto átomos de carbono dos anéis de açúcar adjacentes. Estas ligações assimétricas significam que uma cadeia de DNA tem uma direção. Numa dupla hélice, a direção dos nucleotídeos de uma cadeia é oposta à direção dos nucleotídeos da outra cadeia, (ALBERTS et al., 2002)

Sendo assim, conforme podemos observar na Figura 4.6, é uma molécula simples

mas de muita importância para se compreender as estruturas mais básicas das formações moleculares de organismos vivos.

Figura 4.6: Molécula do DNA renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; cor azul, nitrogênio; e cor laranja, fósforo.



Fonte: O Autor

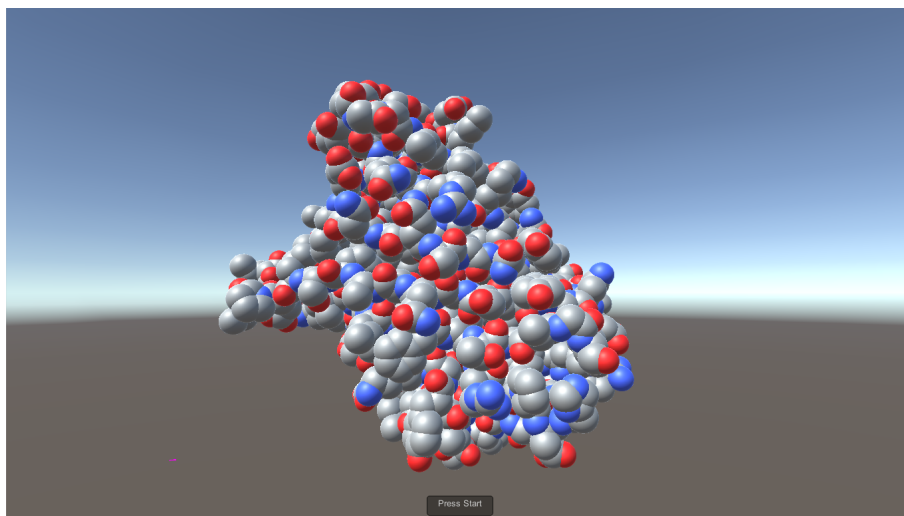
4.2.3.3 Proteína Verde Fluorescente

A Proteína Verde Fluorescente (GFP, *Green Fluorescent Protein*, PDB Id: 1ema), uma molécula encontrada em espécies de águas-vivas dos mares do Pacífico Norte. Sua função é converter luz azul produzida por outra proteína (a Aequorin) para luz verde. A proteína absorve luz ultra-violeta do sol e a emite como uma luz verde de baixa energia. Essa propriedade simples tem sido utilizada como uma ferramenta de pesquisa por décadas por cientistas, que unem a GFP a um objeto específico (quer seja outra proteína ou mesmo um vírus) e gravam imagens sob uma luz ultra-violeta de um comprimento de onda específico. Isso permite que se acompanhe, por exemplo, o início e a expansão de uma infecção viral dentro de todo um organismo, ou, sob um microscópio, a vida de uma proteína dentro de uma célula.

A respeito de sua estrutura molecular, temos que as cadeias fosforescentes da GFP são compostas por uma tríade de aminoácidos enterrados no fundo de seu núcleo - serina, tirosina, glicina - que sofre uma reação química especial e cria uma cromosfera no ambiente celular (no caso, água), gerando um ambiente perfeito para a reação de captura/soltura do fóton acontecer. O conhecimento já adquirido a respeito da estrutura e química da GFP permitiu que cientistas façam mudanças específicas nos aminoácidos da

GFP e criem novas formas da proteína que podem produzir luzes de cores diferentes, se tornando uma poderosa ferramenta para cientistas de diversos campos de pesquisa. Além disso, pelo que podemos observar na Figura 4.7, a estrutura da GFP é complexa, tornando-a útil para verificar a quantidade de erros que ocorrem aos usuários tentando localizar moléculas específicas em seu interior.

Figura 4.7: Molécula da GFP renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; e cor azul, nitrogênio.



Fonte: O Autor

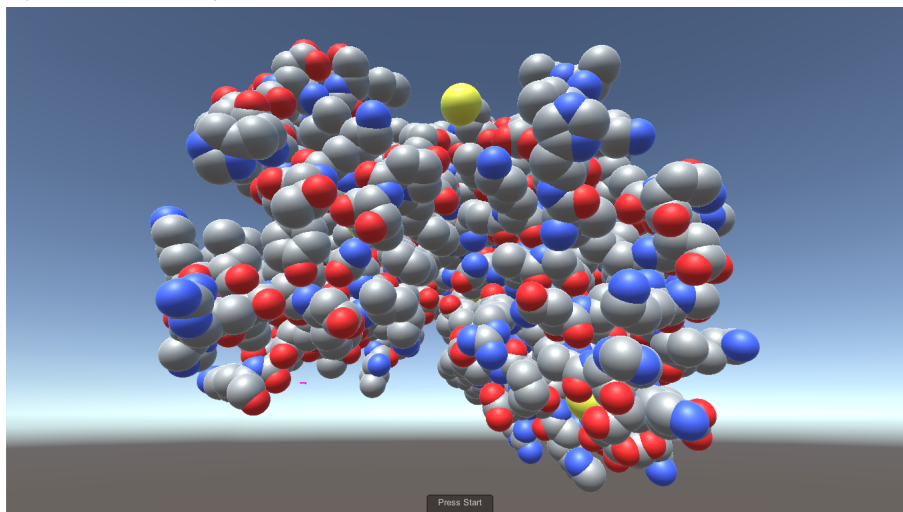
4.2.3.4 Hemoglobina

A hemoglobina (PDB Id: 3a0g) foi a segunda proteína a ter sua estrutura determinada pela cristalografia por raios-X, assim como também torna nosso sangue vermelho. É composta por quatro cadeias proteicas diferentes, duas alfas e duas betas, em que cada uma contém uma molécula especial chamada heme. Essas moléculas heme contém um átomo de ferro cada, que se liga ao oxigênio que respiramos e o carrega pela nossa corrente sanguínea. Esse ferro também se liga ao monóxido de carbono, infelizmente com muito mais força que com o oxigênio, tornando esse gás um veneno silencioso e letal para humanos.

Dessa forma, devido ao papel importante dos átomos de ferro na estrutura molecular da hemoglobina, conforme podemos observar pela Figura 4.8, é importante que se possa localizar de uma forma simples e sem muito esforço todos os ferros presentes na molécula. Como esses átomos não estão muito visíveis na molécula a uma primeira vista, é importante ver que tipo de abordagem seria mais confortável ao usuário para poder

encontrar esses átomos específicos.

Figura 4.8: Molécula da Hemoglobina renderizada pelo programa desenvolvido na Unity. Esferas de cor cinza representam átomos de carbono; cor vermelha, oxigênio; cor azul, nitrogênio; e cor amarela, ferro.



Fonte: O Autor

4.2.4 Método

4.2.4.1 Instruções iniciais e tutorial

Antes de realizar os testes de fato, cada usuário foi instruído através do agente de testes e com o auxílio visual da Figura 3.4 sobre o mapeamento e funcionamento de cada comando de interação virtual disponível na implementação com a Razer Hydra.

A fim de praticar o conhecimento adquirido antes dos testes, cada participante é convidado a experimentar os diferentes tipos de interação que o sistema proporciona com a molécula de lisina, descrita na seção 4.2.3.1. Tal procedimento não entra como um teste válido do experimento e o usuário pode utilizar o tempo que desejar para praticar os controles e comandos da Hydra, assim como se familiarizar com o ambiente do programa.

4.2.4.2 Testes com o DNA

O usuário realizou uma tarefa relativamente simples que serviu para avaliar comparativamente o desempenho em níveis de rapidez utilizando duas abordagens diferentes: uma não-imersiva utilizando a Razer Hydra, mouse e tela do computador; e uma imersiva, utilizando a Razer Hydra e o Oculus Rift. Os testes foram nomeados como DNA NI

(Não-imersivo) e DNA I (Imersivo), respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante eram: localizar e selecionar todos átomos de fósforo das moléculas de fosfato presentes na molécula de DNA (um total de 16 átomos). Cada molécula de fosfato se constitui de um átomo de fósforo (exibido em cor alaranjada no programa) e três átomos de oxigênio (exibidos em cor vermelha) ligados a ele. Assim que o usuário realizava a tarefa com sucesso, uma mensagem era exibida tanto na tela do computador (para a abordagem não-imersiva) como no Oculus Rift (para a abordagem imersiva). O usuário também podia sinalizar ao agente de teste se não conseguisse realizar o experimento e desejasse desistir.

Essa tarefa foi desenvolvida se pensando em analisar a rapidez em que o usuário poderia selecionar, agarrar e mover átomos específicos. Para não tornar a tarefa demasiada demorada e complexa, foi escolhido apenas um tipo de átomo para interagir. A utilidade dessa tarefa é poder interagir diretamente e de uma forma natural (como se o usuário estivesse agarrando o átomo com suas próprias mãos), movendo os átomos para posições diferentes, ao contrário dos programas já abordados anteriormente que utilizam menus e ferramentas de seleção mais convencionais (de um ponto de vista não-imersivo) para realizar esse tipo de tarefa.

Os erros cometidos pelos usuários na realização das tarefas com essa molécula eram contabilizados da seguinte forma: o número de vezes que o usuário pressionou o botão 2 na controle esquerdo mais o número de vezes que pressionou o botão 3 do controle direito deve ser igual à 16. Qualquer quantidade acima desses valores foi computada como um erro, além da quantidade de desmarcações que o usuário realizou. O número de vezes que o usuário também pressionou o botão 3 no controle esquerdo ou o botão 4 no controle direito para desfazer alterações na molécula foi contabilizado como erro.

4.2.4.3 Testes com a GFP

O usuário realizou uma tarefa um pouco mais complexa que serviu para avaliar comparativamente o desempenho em níveis de precisão utilizando duas abordagens diferentes: uma não-imersiva utilizando a Razer Hydra, mouse e tela do computador; e uma imersiva, utilizando a Razer Hydra e o Oculus Rift. Os testes foram nomeados como GFP NI (Não-imersivo) e GFP I (Imersivo), respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante eram: localizar e selecionar todos os sete átomos que compõe o anel aromático característico da tirosina, um dos três tipos de aminoácidos que formam o interior da GFP. O anel aromático da tirosina é di-

ferenciável de outros por possuir um átomo de oxigênio ligado em um de seus carbonos. Sendo assim, o usuário devia selecionar os seis átomos de carbono (representados pela cor cinza) do anel mais um átomo de oxigênio (representando pela cor vermelha) ligado a ele. Para realizar a tarefa, somente era permitido utilizar a ferramenta de aumento ou diminuição do tamanho dos átomos para lhe auxiliar, sendo proibido que o participante agarrasse um átomo ou grupo deles para "abrir" a molécula. Quando a tarefa era concluída, o agente de testes sinalizava o fim do teste. O usuário também podia sinalizar ao agente de teste se não conseguisse realizar o experimento e desejasse desistir.

Por se tratar de uma molécula que possui um nível de complexidade estrutural maior, a tarefa foi desenvolvida visando criar uma situação que exigisse atenção e precisão do usuário para ser realizada. Sendo assim, selecionar átomos específicos da molécula de tirosina é uma forma apropriada de verificar a quantidade de erros que o usuário irá realizar até conseguir localizar e identificar os átomos solicitados. Além disso, poder identificar e selecionar partes específicas de uma estrutura molecular é uma funcionalidade básica que qualquer programa de interação molecular deve ser capaz de oferecer ao usuário.

Os erros cometidos pelo usuário na realização das tarefas com essa molécula eram contabilizados da seguinte forma: o número de vezes que o usuário pressionou o botão 2 no controle esquerdo mais o número de vezes que pressionou o botão 3 do controle direito deve ser igual a 7. Qualquer quantidade acima desses valores era computada como um erro, além da quantidade de desmarcações que o usuário realizou. Também são considerados erros o número de vezes que o usuário pressionou o gatilho do controle esquerdo ou o gatilho do controle direito, uma vez que as instruções deixam claro que o usuário não podia utilizar a funcionalidade de agarrar os átomos. O número de vezes que o usuário também pressionou o botão 3 no controle esquerdo ou o botão 4 no controle direito para desfazer alterações na molécula era contabilizado como erro.

4.2.4.4 Testes com a Hemoglobina

O usuário realizou uma tarefa um pouco mais complexa que serviu para avaliar comparativamente o desempenho em níveis de conforto utilizando duas abordagens diferentes: uma não-imersiva utilizando a Razer Hydra, mouse e tela do computador; e uma imersiva, utilizando a Razer Hydra e o Oculus Rift. Os testes foram nomeados como HEM NI (Não-Imersivo) e HEM I (Imersivo), respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante eram: utilizar somente o

comando de agarrar e mover átomos, desmembrando a molécula para localizar e selecionar um dos átomos de ferro da estrutura da hemoglobina (representando na cor amarela). Ao encontrar um dos ferros, o usuário devia selecioná-lo e pressionar o botão de destaque para permitir que apenas os átomos de ferros ficassem visíveis. Assim que o usuário realizou a tarefa com sucesso, uma mensagem foi exibida tanto na tela do computador (para a abordagem não-imersiva) como no Oculus Rift (para a abordagem imersiva). O usuário também podia sinalizar ao agente de teste se não conseguisse realizar o experimento e desejasse desistir.

A tarefa foi desenvolvida baseando em uma ideia de teste que os desenvolvedores da UnityMol atualmente estão trabalhando com a molécula de Hemoglobina para verificar a usabilidade de seu programa de forma imersiva, utilizando tanto o Oculus Rift quanto o HTC Vive, (UnityMol Dev Team, 2015). Como a tarefa elaborada pela equipe desenvolvedora do programa exige o uso de menus da interface para realizar algumas tarefas (como a seleção e visibilidade dos átomos de ferro), tal abordagem foi adaptada para nosso teste com o uso dos botões da Razer Hydra, garantindo uma forma mais natural e simples e de interação.

Os erros cometidos pelo usuário na realização das tarefas com essa molécula eram contabilizados da seguinte forma: o número de vezes que o usuário deselecionou átomos e quantas vezes ele pressionou o bumper do controle esquerdo ou o bumper do controle direito, uma vez que as instruções deixavam claro que o usuário não podia utilizar a funcionalidade de aumentar ou diminuir os átomos. O número de vezes que o usuário também pressionou o botão 3 no controle esquerdo ou o botão 4 no controle direito para desfazer alterações na molécula era contabilizado como erro.

4.2.5 Procedimento

A ordem de realização dos testes foi diferente para cada usuário, conforme pode ser observado na Tabela 4.1. Após ter assinado um termo de consentimento informando sobre a natureza dos experimentos, assim como seus riscos e benefícios, o participante respondeu um pré-questionário para colher informações. Após isso, o agente de testes prendeu o cinto com a base da Razer Hydra em torno do torso do participante e o orientou a se sentar posicionado de frente para o display do computador, de forma ereta. Além disso, os testes somente se iniciaram após o usuário ter se familiarizado com os aparelhos através da prática não-oficial com a molécula de lisina (conforme descrita na seção

4.2.4.1). Todas as instruções dos testes exibidas aos usuários previamente a sua realização podem ser vistas no Apêndice D.

Tabela 4.2: Ordem de realização dos testes para cada participante.

<i>Participantes</i>	<i>Ordem dos Testes</i>
1	GFP NI - DNA I - HEM I - DNA NI - GFP I - HEM NI
2	GFP I - GFP NI - HEM I - DNA I - DNA NI - HEM NI
3	GFP NI - DNA NI - GFP I - HEM NI - DNA I - HEM I
4	GFP NI - HEM I - HEM NI - GFP I - DNA I - DNA NI
5	HEM NI - DNA I - HEM I - DNA NI - GFP I - GFP NI
6	DNA I - HEM I - GFP I - GFP NI - DNA NI - HEM NI
7	DNA I - GFP NI - HEM I - HEM NI - GFP I - DNA NI
8	GFP I - GFP NI - DNA I - HEM I - HEM NI - DNA NI
9	DNA NI - HEM NI - HEM I - GFP NI - DNA I - GFP I
10	DNA I - GFP I - HEM NI - DNA NI - GFP NI - HEM I
11	HEM NI - DNA NI - DNA I - GFP I - HEM I - GFP NI

Fonte: O Autor

Caso o teste a ser realizado utilizasse a abordagem não-imersiva, o agente de teste orientou que o usuário poderia soltar qualquer um dos controles da Hydra a qualquer momento para utilizar o movimento do mouse para ajustar sua visão no ambiente do teste. Após o participante se sentar na cadeira de frente para a tela do computador, o agente de testes irá iniciar o programa. Antes que o usuário pudesse utilizar a Razer Hydra, o agente realizou a calibração obrigatório do aparelho e o entregou nas mãos do usuário. Finalizado o teste, o programa exibiu uma mensagem de sucesso na tela (para os casos dos testes com o DNA e a Hemoglobina) e o agente de teste sinalizou que o teste foi concluído, encerrando o programa e gravando os dados colhidos do participante.

Caso seja a abordagem imersiva, os passos já citados foram repetidos com a diferença que o usuário colocou o Oculus Rift na cabeça e o agente de teste esperou que o participante sinalizasse que já havia posicionado o aparelho corretamente e de forma confortável. Uma vez iniciado o programa, o agente de teste realizou a calibração obrigatória da Razer Hydra e o entregou nas mãos do usuário. Também, finalizado o teste, o programa exibiu uma mensagem de sucesso na tela (para os casos dos testes com o DNA e a Hemoglobina) e o agente de teste sinalizou que o teste foi concluído, encerrando o programa e gravando os dados colhidos do participante.

Ao finalizar toda a série de testes, o participante respondeu um questionário para avaliar aspectos como conforto e opiniões sobre a qualidade de cada abordagem utilizada, assim como possíveis sugestões de aspectos que podem ser melhorados tanto na experiência não-imersiva quanto imersiva.

5 RESULTADOS

Para analisar os resultados obtidos através dos testes deste experimento, o nível de significância foi definido com $p = 0,05$.

Primeiramente, foi realizado o teste Shapiro-Wilk para testar a hipótese nula de que todos os dados coletados com as diferentes abordagens são oriundos de uma distribuição normal. Esse teste é um dos mais utilizados em testes de interação com usuário para testar a normalidade da distribuição de dados de uma amostra. Para a aplicação do teste foram escolhidos os dados pertinentes ao tempo de execução e a quantidade de erros de cada teste do experimento pelos usuários. Essa escolha se deve ao fato dessas serem as duas variáveis quantitativas que estão sendo avaliadas nesse experimento.

De acordo com os cálculos e tabelas apresentados em Shapiro and Wilk (1965), os testes foram realizados e, em relação ao tempo, somente para as amostras relativas aos testes DNA I, GFP NI e HEM NI o valor do fato W calculado é menor que o valor de W tabelado, rejeitando a hipótese nula de que esses dados específicos vêm de uma distribuição normal. Já em relação a quantidade de erros, somente o teste GFP NI apresentou um valor de W calculado maior que o valor de W tabelado, aceitando a hipótese nula de que esses dados específicos vêm de uma distribuição normal. Esses resultados válidos obtidos com o teste Shapiro-Wilk já são suficientes para validarmos a normalidade da distribuição dos dados da amostra para esse experimento, considerando o fato que estamos lidando com uma amostra muito pequena.

As tabelas com os resultados colhidos através do experimento bem como os valores obtidos no teste Shapiro-Wilk e os valores que serão citados posteriormente podem ser acessados através do link <http://goo.gl/SNuSu9>.

Os dados foram coletados entre os vários participantes para comparar a performance com setups diferentes (abordagem não-imersiva e imersiva) para verificar o efeito de cada abordagem sobre o tempo e quantidade de erros para a realização das tarefas.

É necessário observar que um dos participantes desistiu da tarefa relativa ao teste GFP I, sinalizando ao agente de testes para finalizá-lo, pois não era capaz de realizar a tarefa solicitada. Sendo assim, os dados colhidos desse usuário não somente foram descartados do conjunto de dados desse teste em particular como também foram eliminados da totalidade dos resultados. Portanto, todos os cálculos estatísticos estão sendo realizados sobre amostras de tamanho 30 (para todos os testes com a abordagem não-imersiva ou imersiva) e tamanho 10 (para cada teste com um dos tipos de abordagem).

Sobre cada um dos aspectos abordados pelo experimento nas subseções seguintes, será aplicado o teste T-Student sobre os dados estatísticos. A escolha desse tipo de teste se justifica no estudo pois, segundo Preece, Rogers and Sharp (2002) que afirma que os melhores experimentos controlados iniciam com uma hipótese que tem implicações práticas e resultados teóricos de ampla importância. Um experimento controlado tem pelo menos duas condições e aplica testes estatísticos, como testes-T e análise de variância (ANOVA), para verificar estatisticamente diferenças significativas. Para conjuntos de dados com tamanhos iguais, será utilizado o teste T-Student pareado e, para conjuntos de tamanhos diferentes será utilizado o teste T-Student não-pareado. Além disso, o teste T-Student é de simples utilização e implementação sobre um conjunto de dados e garante um resultado satisfatório em relação a diferenças estatísticas de duas amostras.

5.1 Rapidez

Pelo tempo de realização das tarefas para cada grupo de testes (não-imersivo e imersivo) para cada uma das três tarefas propostas aos usuários, os dados estatísticos obtidos na Tabela 5.1 mostram que os participantes que utilizaram a abordagem não-imersiva levaram mais tempo para concluir os testes em comparação com os participantes que utilizaram a abordagem imersiva.

Ao aplicar o teste T-Student pareado sobre esse conjunto de dados para poder validar a hipótese H1, obtém-se um valor $p = 0,056$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.1. Como $p = 0,05$, podemos afirmar que a diferença dos tempos não é considerada estatisticamente significativa.

Com esse resultado, para poder inferir que, de fato, a realização das tarefas através da abordagem imersiva é mais rápida do que com a abordagem não-imersiva, o teste T-Student também foi utilizado para se comparar os pares de resultados de tempo para cada uma das tarefas, com as diferentes abordagens.

Para os testes DNA NI e DNA I, foram obtidos os dados comparativos exibidos na Tabela 5.1. Ao aplicar o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,022$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.1. Como $p < 0,05$, podemos afirmar que a diferença dos tempos é considerada estatisticamente significativa. Esse resultado significativo mostra que a tarefa escolhida especificamente para a molécula de DNA para demonstrar que uma abordagem imersiva se mostraria mais rápida que a não-imersiva validou com sucesso

nossa hipótese H1.

Em relação aos testes GFP NI e GFP I, os dados comparativos obtidos também são exibidos na Tabela 5.1. Aplicando o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,247$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.1. Como nesse caso $p > 0,05$, temos que a diferença dos tempos não é significativa estatisticamente.

Finalmente, em relação aos testes HEM I e HEM NI, foram obtidos os dados comparativos também podem ser visualizados na Tabela 5.1. Aplicando o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,022$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.1. Como $p < 0,05$, podemos afirmar que a diferença dos tempos é considerada estatisticamente significativa.

Tabela 5.1: Valores comparativos entre os tempos (em medidas de segundos) com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.

<i>Testes</i>	<i>Média (M)</i>	<i>Desvio-padrão (SD)</i>	<i>Valor mínimo</i>	<i>Valor máximo</i>
Total NI	116,094	85,769	97.051	135.136
Total I	50,996	37,647	71.711	99.827
DNA NI	139,879	36,348	113.877	165.881
DNA I	101,427	29,188	80.547	122.307
GFP NI	125,890	60,373	85.330	169.079
GFP I	98,288	43,339	67.285	129.291
HEM NI	82,512	37,754	55.504	109.520
HEM I	57,593	22,543	41.467	73.720

Fonte: O Autor

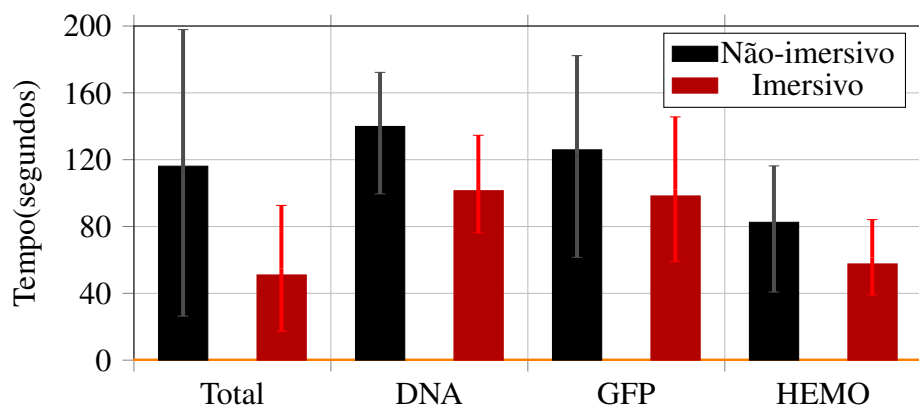
O gráfico da Figura 5.1 ilustra em barras as médias e desvios-padrões obtidos em todos os testes com os dois tipos de abordagens (não-imersiva e imersiva) em relação ao tempo de execução das tarefas. Com o auxílio visual desse gráfico é mais fácil de compreender as diferenças entre as médias, em termos de significância estatística.

5.2 Quantidade de erros

Pelo número de erros colhidos na realização das tarefas para cada grupo de testes (não-imersivo e imersivo) para cada uma das três tarefas propostas aos usuários, os dados estatísticos exibidos na Tabela 5.2 mostram que os participantes que utilizaram a abordagem não-imersiva tiveram mais erros ao realizarem as tarefas solicitadas do que utilizando a abordagem imersiva.

Ao aplicar o teste T-Student pareado sobre esse conjunto de dados para poder va-

Figura 5.1: Gráfico em barras apresentando as médias de tempo de execução para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.



Fonte: O Autor

lidar a hipótese H2, obtem-se um valor $p = 0,039$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.2. Como $p > 0,05$, podemos afirmar que a diferença da quantidade total de erros com as duas abordagens não é considerada estatisticamente significativa.

Sendo assim, para poder inferir que, de fato, a realização das tarefas através da abordagem imersiva ocasiona menos erros que a abordagem não-imersiva, o teste T-Student também foi utilizado comparando os pares de resultados de tempo para cada uma das tarefas, com as diferentes abordagens.

Para os testes DNA NI e DNA I, foram obtidos os dados comparativos também exibidos na Tabela 5.2. Aplicando o teste T-Student pareado sobre as quantidades de erros desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,050$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.2. Como $p = 0,05$, podemos afirmar que a diferença da quantidade de erros não é considerada estatisticamente significativa.

Em relação aos testes GFP NI e GFP I, foram obtidos os dados comparativos também exibidos na Tabela 5.2. Aplicando o teste T-Student pareado sobre as quantidades de erros desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,047$ e valores do intervalo de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.2. Como $p < 0,05$, temos que a diferença do número de erros é estatisticamente significativa. Esse resultado significativo mostra que a tarefa escolhida especificamente para a molécula da GFP para demonstrar que uma abordagem imersiva ocasionaria menos erros que a não-imersiva validou com sucesso nossa hipótese H2.

Por fim, em relação aos testes HEM NI e HEM I, foram obtidos os dados comparativos também exibidos na Tabela 5.2. Aplicando o teste T-Student pareado sobre as quantidades de erros desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,343$ e valores do intera-

valores de confiança de 95% exibidos na Tabela 5.2. Como $p > 0,05$, podemos afirmar que a diferença da quantidade de erros não é considerada estatisticamente significativa.

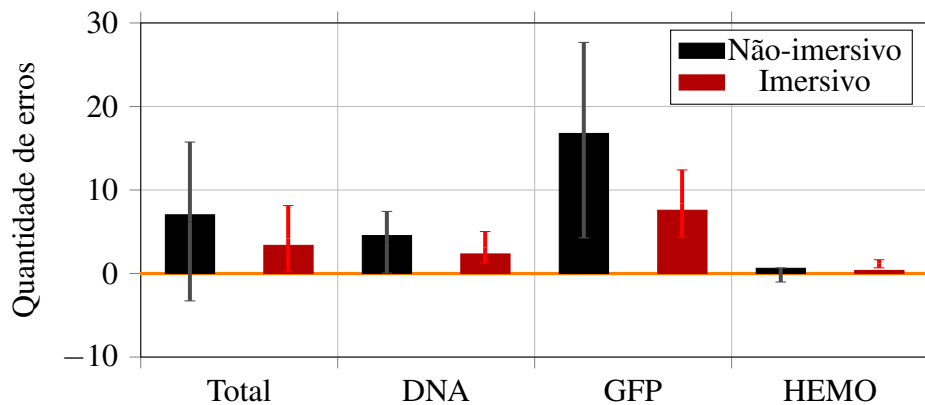
Tabela 5.2: Valores comparativos entre a quantidade total de erros com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.

<i>Testes</i>	<i>Média (M)</i>	<i>Desvio-padrão (SD)</i>	<i>Valor mínimo</i>	<i>Valor máximo</i>
Total NI	7,031	9,508	3,480	10,581
Total I	3,375	3,965	1,894	4,855
DNA NI	4,545	3,689	1,860	7,139
DNA I	2,345	1,888	0,949	3,650
GFP NI	16,768	11,700	8,330	25,069
GFP I	7,578	4,0290	4,817	10,582
HEM NI	0,627	0,843	-0,003	1,203
HEM I	0,372	0,483	-0,041	0,645

Fonte: O Autor

O gráfico da Figura 5.2 ilustra em barras as médias e desvios-padrões obtidos em todos os testes com os dois tipos de abordagens (não-imersiva e imersiva) em relação à quantidade de erros cometidos pelos usuários. Com o auxílio visual desse gráfico é mais fácil de compreender as diferenças entre as médias, em termos de significância estatística. O desvio padrão negativo que se pode visualizar em algumas das amostras se deve ao fato de estarmos lidando com um grupo pequeno de participantes que obteve quantidades de erros muito diferentes entre si.

Figura 5.2: Gráfico em barras apresentando as médias de erros para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.

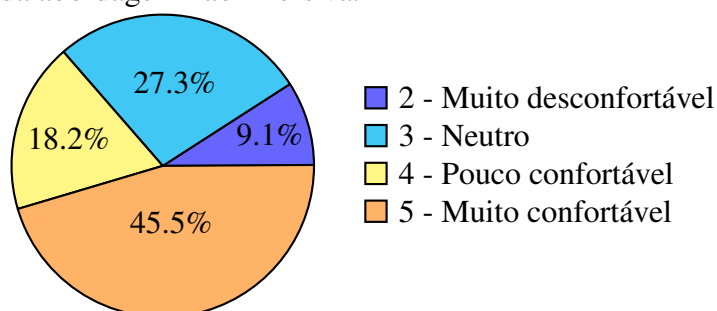


Fonte: O Autor

5.3 Conforto

Por se tratar de um aspecto qualitativo, o nível de conforto que cada participante experienciou foi avaliado através de um questionário realizado posteriormente às tarefas.

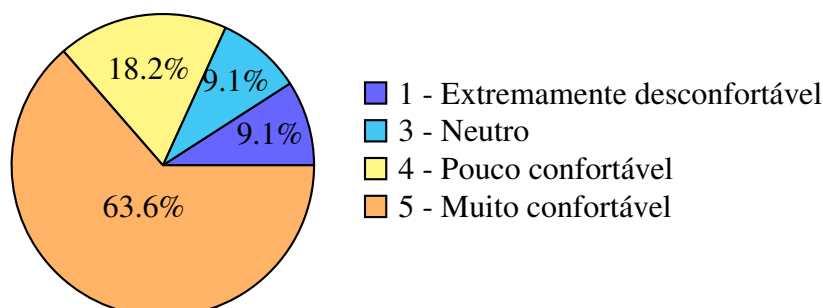
Figura 5.3: Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre o nível do conforto da abordagem não-imersiva.



Fonte: O Autor

Com base nesses resultados colhidos através do questionário realizado posteriormente aos testes, podemos primeiramente analisar que, de acordo com as respostas apresentadas no gráfico da Figura 5.3, podemos dizer que não houve uma quantidade considerável de participantes que declararam um nível alto de conforto ao utilizarem a Razer Hydra e o mouse na abordagem não-imersiva durante o experimento. Outro aspecto desse interessante desse gráfico que pode ser percebido é que não houve participantes que declarassem o nível mais baixo de conforto durante essa abordagem no experimento (nesse caso, "extremamente desconfortável").

Figura 5.4: Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre o nível do conforto da abordagem imersiva.



Fonte: O Autor

Já com os resultados colhidos através do questionário realizado posteriormente aos testes e exibido no gráfico da Figura 5.4, podemos afirmar que houve uma porcentagem maior de usuários que afirmaram ter se sentido muito confortáveis ao utilizar a Razer

Hydra e o Oculus Rift na abordagem imersiva durante os experimentos. Sendo assim, a análise desses dados subjetivos brutos valida a hipótese H3.

5.4 Outros resultados

Um resultado interessante é que, dos 30 testes realizados no total utilizando a abordagem não-imersiva (apenas com a interação através da Razer Hydra e do movimento do mouse), em 66% desses testes os usuários não utilizaram o movimento do mouse em nenhum momento do teste para realizar as tarefas. Mesmo sendo orientados sobre a possibilidade de soltar um dos controles da Hydra a qualquer momento do teste e poder utilizar o mouse para ajustar sua visão, os usuários preferiram apenas utilizar a função de rotacionar a molécula, para ajustar seu campo de visão.

Dessa forma, com essa informação podemos fazer uma análise detalhada de o quanto cada participante movimentou sua cabeça (mais especificamente, seu campo de visão) em cada uma das abordagens para todos os testes. As informações de rotação, que correspondem ao deslocamento da cabeça em torno da fossa mandibular e também da cabeça em torno do eixo do pescoço, são capturadas pelo programa ao longo da execução dos testes em quantidade total de graus deslocados.

Portanto, podemos analisar que para todos os testes, conforme os dados comparativos exibidos na Tabela 5.3, nota-se que os participantes rotacionaram mais a cabeça utilizando a abordagem imersiva do que a abordagem não-imersiva. Especificamente, ao aplicar o teste T-student pareado sobre esses conjuntos de dados, obtemos um valor $p = 0.00002$ e valores do intervalo de confiança de 95% também dispostos na Tabela 5.2. Como $p < 0,05$, temos que a diferença do total de rotações é estatisticamente significativa.

Já para os testes DNA NI e DNA I, foram obtidos os dados comparativos também exibidos na Tabela 5.3. Ao aplicar o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de dados desses dois testes, obtemos um valor de $p = 0,231$ e valores do intervalo de confiança de 95% também dispostos na Tabela 5.2. Como $p > 0,05$, temos que a diferença do total de rotações não é estatisticamente significativa.

Para os testes GFP NI e GFP I, obtemos os dados comparativos exibidos na Tabela 5.3, Aplicando o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de dados desses dois testes, foi obtido um valor de $p = 0.00038$ e valores do intervalo de confiança de 95% também dispostos na Tabela 5.2. Como $p < 0,05$, temos que a diferença do total de rotações é estatisticamente significativa.

Finalmente, para os testes HEM NI e HEM I, os dados comparativos obtidos podem ser visualizados na Tabela 5.3, Ao aplicar o teste T-Student pareado sobre os conjuntos de dados desses dois testes, foi obtido um valor de $p = 0,025$ e valores do intervalo de confiança de 95% também dispostos na Tabela 5.2. Como $p < 0,05$, temos que a diferença do total de rotações é estatisticamente significativa.

Tabela 5.3: Valores comparativos (em medidas de graus) entre a quantidade total de rotações da cabeça dos usuários com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.

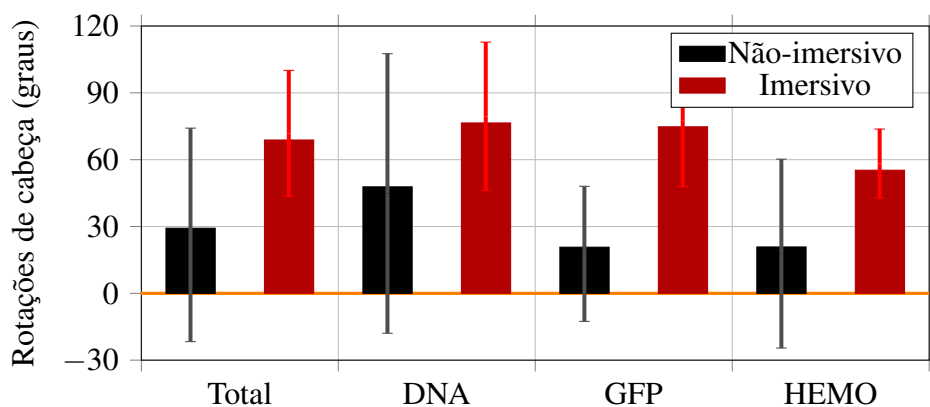
<i>Testes</i>	<i>Média (M)</i>	<i>Desvio-padrão (SD)</i>	<i>Valor mínimo</i>	<i>Valor máximo</i>
Total NI	29.230	47.919	11.336	47.123
Total I	68.839	28.264	58.285	79.394
DNA NI	47.811	62.757	2.917	92.705
DNA I	76.492	33.301	52.669	88.498
GFP NI	20.717	30.323	-0.974	42.409
GFP I	74.766	29.835	53.423	96.109
HEM NI	20.822	42.406	-9.513	51.159
HEM I	55.277	15,476	44.206	66.348

Fonte: O Autor

O gráfico da Figura 5.5 ilustra em barras as médias e desvios-padrões obtidos em todos os testes com os dois tipos de abordagens (não-imersiva e imersiva) em relação às rotações feitas pela cabeça dos usuários durante a realização das tarefas. Com o auxílio visual desse gráfico é mais fácil de compreender as diferenças entre as médias, em termos de significância estatística. Os valores negativos para alguns dos desvios-padrões relativos aos testes com a abordagem não-imersiva se justificam pois muitos usuários não movimentaram o mouse para ajustar sua visão, portanto o valor de rotação permaneceu em zero, criando desvio-padrões que se mostram maiores do que suas próprias médias.

Além disso, outro fator que podemos analisar dos dados colhidos através do experimento é o quanto cada usuário transladou durante a realização dos testes. Nesse caso, estamos levando em conta a distância total percorrida pelo usuário no ambiente virtual do começo ao fim de cada teste, em medidas de metros. Vale observar que o sistema de física da Unity assume, por padrão, que cada unidade do sistema equivale a 1 metro. Sendo assim, com os dados comparativos obtidos na Tabela 5.4, percebe-se que os participantes transladaram mais no total de testes com a abordagem não-imersiva do que com a abordagem imersiva. Essa conclusão se confirma ao aplicar o teste T-Student pareado sobre esse conjunto específico de dados, obtendo um valor de $p = 0,734$ e valores do intervalo de confiança de 95% também dispostos na Tabela 5.4. Uma vez que $p > 0,05$, pode-se dizer que a diferença entre o total de translações com as duas abordagens não é estaticamente

Figura 5.5: Gráfico em barras apresentando as médias de rotações de cabeça para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.



Fonte: O Autor

significativa.

No entanto, observando mais detalhadamente para cada conjunto de testes com as duas abordagens, tal fato em relação às translações não se repete. Ao aplicar o teste T-Student pareado para os conjuntos de dados dos testes DNA NI e DNA I, GFP NI e GFP I, HEM NI e HEM I, obtém-se valores de p iguais à 0,117, 0,044 e 0,351, respectivamente, com os intervalos de confiança de 95% dispostos na Tabela 5.4. Como apenas para os testes relativos à GFP foi obtido um $p < 0,05$, pode-se afirmar que para esse conjunto específico a diferença entre as translações com as duas abordagens foi estatisticamente significativa.

Tabela 5.4: Valores comparativos (em medidas de metros) entre o total de translações dos usuários com as duas abordagens e os valores mínimo e máximo para os intervalos de confiança de 95%.

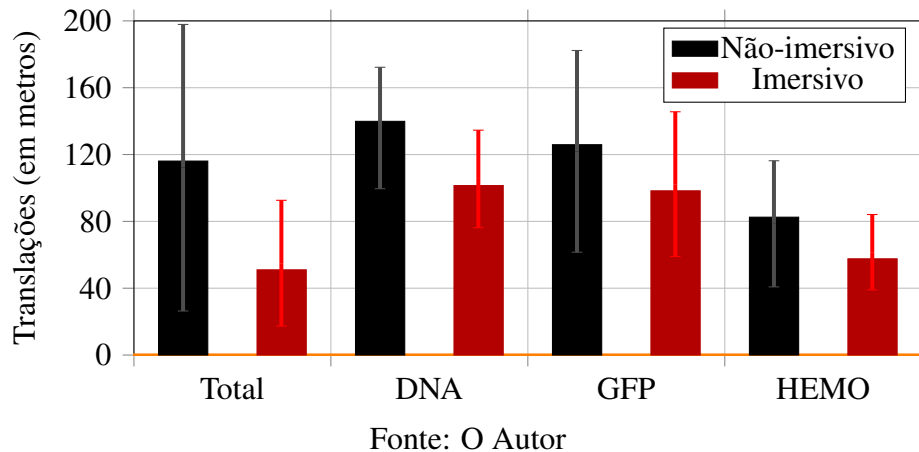
Testes	Média (M)	Desvio-padrão (SD)	Valor mínimo	Valor máximo
Total NI	41.609	25.766	31.987	51.230
Total I	39.649	20.619	31.950	47.349
DNA NI	19.971	12.296	11.174	28.767
DNA I	37.647	30.586	15.766	59.527
GFP NI	50,180	25,277	41,217	59,143
GFP I	37,835	12,133	33,460	42,209
HEM NI	55,134	25,620	46,050	64,219
HEM I	42,224	15,782	36,534	47,915

Fonte: O Autor

O gráfico da Figura 5.6 ilustra em barras as médias e desvios-padrões obtidos em todos os testes com os dois tipos de abordagens (não-imersiva e imersiva) em relação às translações feitas pelos usuários durante a realização das tarefas. Com o auxílio visual

desse gráfico é mais fácil de compreender as diferenças entre as médias, em termos de significância estatística.

Figura 5.6: Gráfico em barras apresentando as médias de translações para cada teste com as duas abordagens, assim como seu desvio-padrão representado pela linha vertical de erro.



5.5 Discussão

Nesse experimento foi investigada a rapidez, quantidade de erros e nível de conforto proporcionados pela realização de tarefas com uma abordagem imersiva comparada a uma abordagem não-imersiva. As tarefas correspondentes aos testes do experimento foram elaboradas levando em conta tais aspectos para avaliar através dos usuários.

Os resultados colhidos e analisados mostraram que, em geral, o tempo para a realização das tarefas solicitadas aos usuários é menor quando utilizam uma abordagem imersiva em relação a uma abordagem não-imersiva, apesar de que, isoladamente comparando os tempos de realização para a mesma tarefa com diferentes abordagens (no caso dos testes GFP NI e GFP I), a diferença de tempos não foi estatisticamente significativa.

Além disso, em geral, a quantidade de erros que os participantes obtiveram na realização de tarefas foi significativamente menor ao utilizarem a abordagem imersiva ao invés da não-imersiva. Somente para análise de dois grupos de testes com diferentes abordagens (testes DNA NI e DNA I e testes HEM NI e HEM I) a diferença na quantidade de erros não foi considerada estatisticamente significativa.

Os dados colhidos e analisados a respeito do nível de conforto revelaram que uma porcentagem maior de usuários afirmou ter experimentado mais conforto utilizando a abordagem imersiva do que a abordagem não-imersiva para a realização das tarefas. Pode-

se dizer que essa diferença em benefício do conforto maior com a abordagem imersiva tenderia a se acentuar se a amostra de participantes para o experimento tivesse sido maior.

Tal tendência para um nível de conforto maior com a abordagem imersiva talvez se revele nos dados obtidos ao se analisar o total de movimentos que os usuários realizaram com a cabeça (rotações). Percebe-se que na abordagem imersiva os usuários rotacionaram a cabeça estatisticamente mais do que com a abordagem não-imersiva. Isso pode se dever ao fato de a visualização imersiva proporciona uma experiência mais próxima à realidade, além de ser intuitiva e incentivar o usuário a se movimentar mais no ambiente em que está imerso e a girar mais sua cabeça. Esse contraste se torna mais evidente quando se analisa o fato de que com a abordagem não-imersiva a maior parte dos usuários preferiu manter a câmera do programa estacionária e não movimentar o mouse por considerarem a tarefa de utilizar o mouse tendo que soltar um dos controles da Razer Hydra muito trabalhosa.

Um fato curioso é perceber que os usuários transladaram, ou seja, se movimentaram mais pelo cenário virtual com a abordagem não-imersiva do que com a abordagem imersiva (apesar de que, estatisticamente, a diferença entre as translações com as duas abordagens, na sua maioria, não foi significativa). Essa movimentação menor com a abordagem imersiva provavelmente se deve ao fato de os usuários não sentirem necessidade de se movimentar pelo cenário virtual quando estão utilizando o Oculus Rift e, dessa forma, possuírem mais liberdade de movimento com suas cabeça. Ou seja, na abordagem imersiva os usuários possuem um maior campo de visão e são capazes de visualizar partes da estrutura molecular de cada molécula com apenas movimentos da cabeça ao invés de necessitarem se movimentar pelo ambiente virtual.

5.6 Restrições tecnológicas

As restrições que poderiam comprometer o experimento tanto com as abordagens não-imersiva quanto imersiva com os usuários dizem respeito principalmente à questão da quantidade de frames por segundo necessária para garantir uma visualização confortável. De modo a otimizar a experiência do usuário, todas as características de renderização na Unity foram desabilitadas ou colocadas na capacidade mínima (sombras, shaders, iluminação). De imediato, houve uma melhoria considerável na quantidade de FPS do programa. A Tabela 5.5 mostra os dados colhidos durante as execuções do programa com todas as moléculas utilizadas nesse estudo. Claramente, conforme o tamanho da molécula aumentava, o número de vértices renderizados na cena também crescia. Esse dado foi re-

tirado das estatísticas da própria Unity, ao se visualizar a molécula completa, centralizada na cena, como as Figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8 mostram. Também desse tipo de perspectiva foram extraídos os FPS quando observados na interface do programa sendo renderizado diretamente na máquina conforme as especificações da Tabela 4.1. Os dados do Oculus Rift foram obtidos através de um script que exhibe na visão do Oculus a quantidade de FPS atuais. Essa quantidade também foi medida levando em conta o mesmo posicionamento das imagens anteriores, para se obter a comparação mais aproximada possível.

Tabela 5.5: Dados do programa

<i>Moléculas</i>	<i>Número de átomos</i>	<i>Número de vértices</i>	<i>FPS na interface do programa</i>	<i>FPS no Oculus Rift</i>
Lisina	25	$24,1 * 10^3$	850,4	90,5
DNA	366	$113,5 * 10^3$	305,1	88,3
GFP	1717	$502,2 * 10^3$	110,6	73,7
Hemoglobina	2152	$1,1 * 10^6$	86,1	68,2

Fonte: O Autor

Para a visualização não-imersiva, o recomendável são valores de FPS próximos ou maiores a 60, enquanto para a visualização imersiva, segundo o próprio manual do Oculus Rift, um valor de FPS próximo ou maior de 90 é considerado aceitável. Interessante notar que, mesmo com o valor baixo de FPS no Oculus Rift observado para os casos da GFP e da Hemoglobina, a experiência dos usuários durante o experimento não foi comprometida, uma vez que nenhum participante reportou nenhuma reclamação quanto ao desempenho do programa. Foi preciso selecionar cuidadosamente os tipos de moléculas que seriam escolhidas para os experimentos e renderizadas tanto na abordagem não-imersiva quanto imersiva que garantissem uma visualização apropriada. Para tanto, era necessário estabelecer um limite aceitável para quantos objetos seriam possíveis de visualizar de forma a não diminuir a um nível crítico o número de FPS e não impactar significativamente a experiência do usuário, a deixando inviável.

6 CONCLUSÃO

6.1 Resumo das contribuições

Essa seção resume as descobertas obtidas através desse estudo e respondem os questionamentos apresentados na seção 1.3, além de apresentar outras conclusões relevantes ao trabalho.

Primeiramente, foi descoberto que a interação com estruturas moleculares através de um ambiente imersivo apresenta vários benefícios quando comparado a um ambiente não-imersivo convencional. Ao se avaliar separadamente cada vantagem que um ambiente imersivo poderia proporcionar ao usuário sob um contexto de interação específico, pode-se observar que a abordagem imersiva é mais rápida, ocasiona menos erros e proporciona um nível de conforto maior para a realização de tarefas específicas, no nosso caso, para a manipulação de moléculas.

Além disso, os dados estatísticos obtidos a partir dos resultados colhidos pelo experimento comprovam que os usuários que realizaram as diversas tarefas utilizando a abordagem imersiva tiveram um tempo de execução menor do que com a abordagem não-imersiva. A diferença entre as médias de tempo foi estatisticamente significativa tanto ao se avaliar para todos os testes com as duas abordagens quanto para os testes com a molécula de DNA, que possuía uma tarefa atribuída especificamente para poder avaliar a questão da rapidez do usuário com as duas abordagens).

Pelos resultados obtidos, também é possível afirmar que a realização das tarefas solicitadas aos usuários proporcionou uma quantidade de erros menor quando utilizaram a abordagem imersiva. A diferença entre as médias de tempo foi estatisticamente significativa tanto ao se avaliar para todos os testes com as duas abordagens quanto para os testes com a molécula de GFP que, assim como a molécula do DNA, possuía uma tarefa atribuída de forma específica. Nesse caso, para poder avaliar a questão da quantidade de erros que o usuário provocaria com as duas abordagens.

Também percebemos uma porcentagem maior de usuários que consideraram a abordagem imersiva mais confortável que a abordagem não-imersiva. Além disso, é evidente que existe uma tendência ao aumento desse tipo de opinião favorável em relação ao conforto da abordagem imersiva. Tal fato provavelmente teria se acentuado ao se utilizar uma amostra de usuários de tamanho maior.

Finalmente, pelas informações analisadas a respeito dos movimentos de rotação

de cabeça, se pode perceber que foi considerado mais intuitivo girar mais a cabeça no ambiente desenvolvido e utilizando a abordagem imersiva para a realização das tarefas. Ao contrário, em relação às translações realizadas pelos usuários, se notou que a quantidade de translações foi maior na realização de tarefas com a abordagem não-imersiva do que com a abordagem imersiva. Em ambos os casos (tanto para as rotações quanto para as translações), observa-se que a naturalidade de utilizar o Oculus Rift como "câmera" para visualizar o cenário contribuiu para essas conclusões, uma vez que o dispositivo torna a experiência de visualizar o ambiente mais natural e intuitiva ao replicar o movimento da cabeça do próprio usuário.

6.2 Trabalho futuro

Algumas perguntas realizadas aos participantes no questionário fornecido após o experimento, revelaram respostas interessantes sobre aspectos que podem ser melhorados quanto às mecânicas de interação do ambiente imersivo desenvolvido assim como na forma como as estruturas moleculares são apresentadas. Diversas sugestões dos participantes são de melhorar os níveis de precisão e sensibilidade da Razer Hydra, algo que é inerente ao hardware do dispositivo e de difícil ajuste. Também foi sugerida a representação das ligações atômicas através de bastonetes e um guia de instruções dentro da visualização imersiva do Oculus Rift com os comandos disponíveis na Razer Hydra.

Todas essas sugestões e críticas dos usuários servem como estímulo para aprimorar o programa com novas funcionalidades, melhorar a utilização dos mecanismos de imersão disponíveis e realizar experimentos com amostras maiores de participantes. Além disso, as hipóteses que foram validadas através do experimento fornecem metas válidas para o desenvolvimento e avaliação de mais ambientes imersivos não somente para área da Química mas também para outros setores de conhecimento diferentes que possam tirar proveito dos benefícios que esse tipo de abordagem apresenta.

Em relação a trabalhos futuros com o programa que explorassem a questão da visualização imersiva, seria interessante desenvolver e avaliar o desempenho dos usuários do programa utilizando ferramentas diferentes de imersão como o *Nintendo Wiimote*, *PS Move* ou *Microsoft Kinect* para realizar a interação 3D com as moléculas e o uso de CAVE. A mudança de equipamentos pode proporcionar mecânicas e experiências diferentes para os usuários, afetando diretamente a maneira como eles se sentem imersos no ambiente virtual.

Além disso, seria interessante utilizar abordar questões diferentes de questionamento aos usuários de futuros experimentos de interação como o background em relação a jogos para relacionar com o desempenho dos usuários ao utilizar os dispositivos de interação 3D. Também seria útil usar critérios mais precisos para avaliar a questão do conforto ao se utilizar abordagens não-imersivas e imersivas para experimentos de interação, como o Simulator Sickness Questionnaire (SSQ), (KENNEDY et al., 1993).

REFERÊNCIAS

ALBERTS, B. et al. Molecular biology of the cell; fourth edition. In: **Molecular Biology of the Cell**. Washington, USA: Nova Iorque e Londres: Garland Science, 2002. p. 492–502.

Amino Acids Guide. Lysine. 2016. Available from Internet: <<http://www.aminoacidsguide.com/Lys.html>>.

Carnegie Mellon University Computer Science Department. Obj file format. 2005. Available from Internet: <<http://www.cs.cmu.edu/~mbz/personal/graphics/obj.html>>.

CHEN, C. Top 10 unsolved information visualization problems. **IEEE Computer Society**, v. 05, Jul 2005.

DOUTRELIGNE, S. et al. Unitymol: Interactive scientific visualization for integrative biology large data analysis and visualization (ldav). **IEEE 4th Symposium on Computer Graphics**, v. 10, 2014.

ISTI - CNR. Meshlab documentation. 2014. Available from Internet: <<http://meshlab.sourceforge.net/>>.

JOHNSON, C. Top scientific visualization research problems. **IEEE Computer Graphics and Applications**, v. 04, Jul 2004.

KENNEDY, R. S. et al. Simulator sickness questionnaire: An enhanced method for quantifying simulator sickness. **The International Journal of Aviation Psychology**, v. 3, p. 203–220, Dec 1993. Available from Internet: <http://dx.doi.org/10.1207/s15327108ijap0303_3>.

Oculus Rift Dev Team. Oculus rift user guide and documentation. 2016. Available from Internet: <<https://product-guides.oculus.com/en-us/documentation/rift/latest/concepts/book-rug/>>.

PREECE, J.; ROGERS, Y.; SHARP, H. Design de interação. In: **Além da interação homem-computador**. Porto Alegre, Brazil: Bookman, 2002. p. 480.

Princeton University. Off file format. 2004. Available from Internet: <http://segeval.cs.princeton.edu/public/off_format.html>.

Razer Hydra Dev Team. Razer hydra - pc gaming motion sensing controllers master guide. 2011. Available from Internet: <<http://dl.razerzone.com/master-guides/Hydra/HydraOMG-ENG.pdf>>.

Schrödinger, LLC. The PyMOL molecular graphics system, version 1.8. 2010. Available from Internet: <<https://www.pymol.org/>>.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. An analysis of variance test for normality (complete samples). **Biometrika**, v. 52, Dec 1965.

STEED, C. A. et al. Immersive visual analytics for transformative neutron scattering science. **IEEE Immersive Analytics Workshop (VR 2016)**, 2016.

TORY, M.; MOLLER, T. Human factors in visualization research. **IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics**, v. 10, Jan 2004.

TRELLET, M. et al. Interactive visual analytics of molecular data in immersive environments via a semantic definition of the content and the context. **IEEE VR 2016/VR 2016 Workshop on Immersive Analytics**, 2016.

Unity Technologies. Unity manual. 2016. Available from Internet: <<https://docs.unity3d.com/Manual/index.html>>.

UnityMol Dev Team. User guide - virtual reality immersion (oculus and vive). 2015. Available from Internet: <<http://www.baaden.ibpc.fr/umol/Doc/manual/html/d4/dee/a00008.html>>.

University of Groningen - Center of Information Technology. Reality cube. 2015. Available from Internet: <<http://www.rug.nl/society-business/centre-for-information-technology/research/hpcv/faciliteiten/realitycube>>.

Virtalis Dev Team. Virtual reality (vr) leading technology company. 2015. Available from Internet: <<https://www.virtalis.com/vr-for-pymol/>>.

Worldwide PDB Foundation. Pdb file format documentation. 2003. Available from Internet: <<http://www.wwpdb.org/documentation/file-format>>.

APÊNDICE A — TERMO DE CONSENTIMENTO UTILIZADO PARA OS EXPERIMENTOS

Você está sendo convidado(a) a participar de uma serie de testes de interação para um estudo de Trabalho de Conclusão do Curso de Ciência da Computação da UFRGS. Este documento tem o propósito de explicar os objetivos do estudo, os procedimentos, os riscos e como serão conduzidos os testes.

Pedimos que leia este documento atentamente e esclareça todas as dúvidas antes de consentir na sua participação.

Objetivo: Existem inúmeros programas de computador que permitem a visualização e manipulação de estruturas moleculares. No entanto, uma abordagem através da visualização imersiva, utilizando dispositivos de realidade virtual e interação 3D, é mais indicada para proporcionar uma experiência mais compreensiva e natural para o usuário deste tipo de aplicação. Este estudo visa avaliar a usabilidade de usuários que utilizam uma interação simples com estruturas moleculares e através de dispositivo de realidade imersiva.

Procedimentos: Os participantes realizarão três testes com três moléculas diferentes. Cada teste será dividido em utilizar a abordagem sem e com o dispositivo de realidade virtual. Cada teste terá uma tarefa específica que o usuário deve realizar utilizando as duas abordagens. Se o participante não for capaz de realizar a tarefa solicitada, ele deverá informar o agente de testes. O tempo total para a realização desses testes com cada usuário é estimado em cerca de 30 minutos. E os participantes podem, sem nenhum prejuízo e a qualquer tempo, interromper o teste, se assim o desejarem.

Riscos e benefícios: O presente estudo pode apresentar riscos para pessoas que possuam algum histórico de tonturas, labirintites ou enjoô por movimento. Se você tem qualquer uma destas condições deve indicar neste momento.

Os benefícios para o participante são oportunidades para experimentar uma abordagem completamente imersiva para interagir e manipular moléculas utilizando equipamentos de realidade virtual que contribuíra no desenvolvimento e aperfeiçoamento de abordagens similares no futuro.

APÊNDICE B — QUESTIONÁRIO PRE-EXPERIMENTO

1. Nome
2. Endereço de email
3. Idade
4. Gênero
5. Nível educacional (Ensino médio, Superior Incompleto, Superior Completo, Pós-graduação Incompleto, Pós-graduação Completo)
6. Você possui algum problema de visão? (Miopia, Presbiopia, Astigmatismo, Hipermetropia, Outros)
7. Você já teve alguma experiência com realidade virtual? Se sim, qual?
8. Se já teve, se sentiu confortável na experiência?
9. Você utiliza programas para visualização de moléculas? Se sim, qual? (VMD, PyMOL, UnityMol, Não utilizo programas, Outros)
10. Se você escolheu "Outros" na questão anterior, especifique qual o tipo de programa que utiliza.

APÊNDICE C — QUESTIONÁRIO PÓS-EXPERIMENTO

1. O quão confortável você se sentiu utilizando apenas a Razer Hydra para realizar as tarefas solicitadas? (1 - Extremamente desconfortável, 2 - Muito desconfortável, 3 - Neutro, 4 - Pouco confortável, 5 - Muito confortável)
2. Você conseguiu realizar as tarefas com essa abordagem? Se sim, informe se teve alguma dificuldade. Se não, explique o motivo.
3. O quão confortável você se sentiu utilizando o a Razer Hydra e o Oculus Rift para realizar as tarefas solicitadas? (1 - Extremamente desconfortável, 2 - Muito desconfortável, 3 - Neutro, 4 - Pouco confortável, 5 - Muito confortável)
4. Você conseguiu realizar as tarefas com essa abordagem? Se sim, informe se teve alguma dificuldade. Se não, explique o motivo.
5. Em relação à abordagem não-imersiva, deseja deixar alguma sugestão sobre algum aspecto que pode ser melhorado?
6. Em relação à abordagem imersiva, deseja deixar alguma sugestão sobre algum aspecto que pode ser melhorado?

APÊNDICE D — INSTRUÇÕES PARA A REALIZAÇÃO DOS TESTES

Abaixo seguem as instruções exibidas para cada participante antes da realização de cada teste do experimento. A fim de facilitar a compreensão do usuário, os testes foram numerados de 1 a 6, ao invés de receberem a nomenclatura com o nome da molécula (DNA, GFP ou HEM) e o tipo de abordagem (NI - Não-imersiva, I - Imersiva), como foi utilizada ao longo do estudo:

- Seja bem-vindo ao teste número 1! Você deverá localizar, selecionar e mover com a ferramenta de agarrar, todos os átomos de fósforo presentes na molécula de DNA utilizando a Razer Hydra e o movimento do mouse. Os átomos de fósforo possuem a cor alaranjada e estão incluídos na molécula de fosfato (1 átomo de fósforo e 4 átomos de oxigênio). Uma mensagem será exibida na tela quando você tiver completado a tarefa!
- Seja bem-vindo ao teste número 2! Você deverá localizar, selecionar e mover com a ferramenta de agarrar, todos os átomos de fósforo presentes na molécula de DNA utilizando a Razer Hydra e o Oculus Rift. Os átomos de fósforo possuem a cor alaranjada e estão incluídos na molécula de fosfato (1 átomo de fósforo e 4 átomos de oxigênio). Uma mensagem será exibida na tela quando você tiver completado a tarefa!
- Seja bem-vindo ao teste número 3! Você deverá localizar e selecionar, com o auxílio da Razer Hydra e do movimento do mouse, todos os 7 átomos que compõe o anel aromático característico da tirosina, um dos três tipos de aminoácidos que formam o interior da GFP. O anel aromático da tirosina é diferenciável de outros por possuir 1 átomo de oxigênio ligado em um de seus carbonos. Sendo assim, você deve selecionar os 6 átomos de carbono (representados pela cor cinza) do anel mais 1 átomo de oxigênio (representando pela cor vermelha) ligado a ele. Para realizar a tarefa deverá utilizar apenas o comando de aumentar ou diminuir o tamanho dos átomos para adentrar no interior da estrutura molecular. não agarre nenhum átomo. O agente de testes lhe sinalizará quando tiver concluído a tarefa.
- Seja bem-vindo ao teste número 4! Você deverá localizar e selecionar, com o auxílio da Razer Hydra e do Oculus Rift, todos os 7 átomos que compõe o anel aromático característico da tirosina, um dos três tipos de aminoácidos que formam o interior

da GFP. O anel aromático da tirosina é diferenciável de outros por possuir 1 átomo de oxigênio ligado em um de seus carbonos. Sendo assim, você deve selecionar os 6 átomos de carbono (representados pela cor cinza) do anel mais 1 átomo de oxigênio (representando pela cor vermelha) ligado a ele. Para realizar a tarefa deverá utilizar apenas o comando de aumentar ou diminuir o tamanho dos átomos para adentrar no interior da estrutura molecular. não agarre nenhum átomo. O agente de testes lhe sinalizará quando tiver concluído a tarefa.

- Seja bem-vindo ao teste número 5! Com o auxílio da Razer Hydra e com o movimento do mouse, você deverá utilizar apenas o comando de agarrar e mover átomos, desmembrando a molécula, para localizar e selecionar um dos átomos de ferro da estrutura da hemoglobina (representando na cor amarela). Ao encontrar um dos ferros, o selecione e pressione o botão de destaque para permitir que apenas os átomos de ferros fiquem visíveis. Uma mensagem será exibida na tela quando tiver completado a tarefa.
- Seja bem-vindo ao teste número 6! Com o auxílio da Razer Hydra e do Oculus Rift, você deverá utilizar apenas o comando de agarrar e mover átomos, desmembrando a molécula, para localizar e selecionar um dos átomos de ferro da estrutura da hemoglobina (representando na cor amarela). Ao encontrar um dos ferros, o selecione e pressione o botão de destaque para permitir que apenas os átomos de ferros fiquem visíveis. Uma mensagem será exibida na tela quando tiver completado a tarefa.

APÊNDICE E — DESCRIÇÃO DO FORMATO PDB

```

1  HEADER  DNA                               03-MAY-93 123D
2  TITLE   DNA HELIX STRUCTURE AND REFINEMENT ALGORITHM: COMPARISON
      OF
3  TITLE   2 MODELS FOR D(CCAGGCM==5==CTGG) DERIVED FROM NUCLSQ, TNT,
4  TITLE   3 AND X-PLOR
5  ...
6  EXPDTA  X-RAY DIFFRACTION
7  ...
8  REMARK  1
9  REMARK  1 REFERENCE 1
10 REMARK  1 AUTH  U.HEINEMANN,M.HAHN
11 REMARK  1 TITL  C-C-A-G-G-C-M5C-T-G-G: HELICAL FINE STRUCTURE,
12 REMARK  1 TITL  2 HYDRATION, AND COMPARISON WITH
      C-C-A-G-G-C-C-T-G-G
13 REMARK  1 REF   J.BIOL.CHEM.                V. 267 7332 1992
14 ...
15 SEQRES  1 A 10  DC DC DA DG DG DC 5CM DT DG DG
16 SEQRES  1 B 10  DC DC DA DG DG DC 5CM DT DG DG
17 ...
18 ATOM    1 O5' DC A 1      14.061 0.233 22.053 1.00 61.23  O
19 ATOM    2 C5' DC A 1      14.545 -0.512 20.953 1.00 56.47  C
20 ATOM    3 C4' DC A 1      13.980 -0.093 19.579 1.00 49.57  C
21 ATOM    4 O4' DC A 1      14.545 1.164 19.167 1.00 43.64  O
22 ATOM    5 C3' DC A 1      14.303 -1.024 18.412 1.00 47.25  C
23 ...
24 HETATM 120 N1 5CM A 7     20.029 7.218 -1.855 1.00 12.51  N
25 HETATM 121 C2 5CM A 7     19.330 6.007 -1.992 1.00 13.38  C
26 HETATM 122 N3 5CM A 7     17.932 6.100 -1.992 1.00 9.64   N
27 HETATM 123 C4 5CM A 7     17.314 7.264 -2.061 1.00 11.62  C
28 HETATM 124 C5 5CM A 7     18.067 8.475 -1.992 1.00 13.27  C
29 ...

```

Cada uma das linhas do arquivo segue o seguinte padrão:

- **HEADER, TITLE e AUTHOR:** fornecem informação sobre os pesquisadores que

definiram a estrutura molecular; vários outros tipos de dados estão disponíveis, fornecendo outros tipos de informação;

- **REMARK:** podem conter anotações livres, mas eles também possuem informação padronizada; por exemplo, o `REMARK 1 TITL C-C-A-G-G-C-M5C-T-G-G: HELICAL FINE STRUCTURE`, descreve como construir a estrutura de dupla-hélice do DNA de acordo com os grupos de átomos;
- **SEQRES:** dão as sequências das três cadeias de peptídios (nomeadas A, B e C), que podem ir desde uma linha até várias;
- **ATOM:** descreve as coordenadas dos átomos que formam a estrutura molecular. Para esse exemplo, a primeira linha `ATOM` descreve o átomo alpha-N do primeiro resíduo da cadeia peptídica A; os primeiros três números em ponto flutuante são as coordenadas x, y e z e estão em unidades de Angstroms. As próximas três colunas correspondem a ocupância (relacionado à quantidade de átomos conglomerados), fator de temperatura e o nome do elemento químico, respectivamente;
- **HETATM:** descreve as coordenadas dos hetero-átomos, ou seja, dos átomos que não fazem parte da molécula e são dispensáveis no nosso estudo.

APÊNDICE F — DESCRIÇÃO DO FORMATO OBJ

- Lista de vértices geométricos (v), com coordenadas (x, y, z[, w]), onde o w é opcional e o valor padrão é 1.0;
- Lista de coordenadas de textura (vt), com valores (u, v[, w]), que variam entre 0 e 1, e o valor padrão de w é 0; No exemplo abaixo, essas coordenadas não existem pois o objeto não tem informações de textura;
- Lista de normais (vn) com forma (x,y,z), que podem ser especificadas depois de cada vértice, não necessariamente sendo listadas depois;
- Vértices de parâmetros espaciais (vp) de forma (u [,v] [,w]), opcionais e não disponíveis no exemplo abaixo;
- Lista de faces dos polígonos (f).

OBS: Linhas de comentário são iniciadas por #.

```

1 #####
2 # Object 123d.obj
3 #
4 # Vertices: 15372
5 # Faces: 29280
6 #
7 #####
8 vn 0.000000 4.823147 2.980867
9 v 14.061000 1.379677 22.761684 1.000000 0.050980 0.050980
10 vn 0.000000 4.823147 -2.980867
11 v 14.061000 1.379677 21.344315 1.000000 0.050980 0.050980
12 vn 0.000000 -4.823148 2.980867
13 v 14.061000 -0.913677 22.761684 1.000000 0.050980 0.050980
14 ...
15 f 2//2 13//13 15//15
16 f 13//13 1//1 14//14
17 f 15//15 14//14 5//5
18 ...

```

APÊNDICE G — DESCRIÇÃO DO FORMATO OFF

- Primeira linha: número de vértices (nesse caso, correspondente ao número de pontos e átomos da molécula), número de faces (zero) e número de arestas (zero)
- Lista de vértices: coordenadas x, y e z seguidas pela correspondente cor do ponto em RGB
- Lista de faces: número de vértices, seguido pelo número de sequência dos vértices indexados (começando por zero e nesse caso, inexistente no arquivo)

```
1 COFF
2 366 0 0
3 14.061 0.233 22.053 255 13 13 255
4 14.545 -0.512 20.953 144 144 144 255
5 13.98 -0.093 19.579 144 144 144 255
6 14.545 1.164 19.167 255 13 13 255
7 ...
```
