

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JÚLIO DE MESQUITA FILHO"**

FACULDADE DE CIÊNCIAS - CAMPUS BAURU

DEPARTAMENTO DE COMPUTAÇÃO

BACHARELADO EM CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

RAFAEL BALDONI DO VALLE TALLIM

**DESENVOLVIMENTO DE APLICATIVO PARA VISUALIZAÇÃO  
CIENTÍFICA PARA ENSINO DE QUÍMICA**

BAURU

2017

RAFAEL BALDONI DO VALLE TALLIM

## **DESENVOLVIMENTO DE APLICATIVO PARA VISUALIZAÇÃO CIENTÍFICA PARA ENSINO DE QUÍMICA**

Trabalho de Conclusão de Curso do Curso  
de Ciência da Computação da Universidade  
Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”,  
Faculdade de Ciências, Campus Bauru.  
Orientador: Prof. Dr. José Remo Ferreira Brega

BAURU  
2017

Tallim, Rafael Baldoni do Valle.

Desenvolvimento de Aplicativo para Visualização Científica para Ensino de Química/ Rafael Baldoni do Valle Tallim, 2017

42 p. : il.

Orientador: Prof. Dr. José Remo Ferreira Brega

Monografia (Graduação) – Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho".  
Faculdade de Ciências, Bauru, 2017.

1. Aplicativo Android. 2. Smartphone. 3. Visualização Tridimensional de Moléculas.  
4. Unity3D.

Rafael Baldoni do Valle Tallim

## **Desenvolvimento de Aplicativo para Visualização Científica para Ensino de Química**

Trabalho de Conclusão de Curso do Curso de Ciência da Computação da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Faculdade de Ciências, Campus Bauru.

Banca Examinadora

**Prof. Dr. José Remo Ferreira Brega**

Orientador

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”  
Faculdade de Ciências  
Departamento de Computação

**Profa. Dra. Simone das Graças Domingues Prado**

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”  
Faculdade de Ciências  
Departamento de Computação

**Profa. Dra. Marcia Aparecida Zanoli Meira e Silva**

Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”  
Faculdade de Ciências  
Departamento de Computação

Bauru, 12 de dezembro de 2017.

# Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Viviane e Rodrigo, por todo o amor e pelos ensinamentos durante minha vida, pelo esforço para me dar as oportunidades que tive, e por sempre me apoiarem e incentivarem.

Agradeço ao meu irmão Levi, e a toda minha família, que mesmo estando longe sempre me motivaram com seu afeto, e sempre estiveram presentes em minha memória.

Aos meus amigos, com quem compartilhei momentos inesquecíveis durante minha vida acadêmica, e com quem espero compartilhar ainda mais.

Ao meu orientador Prof. Dr. José Remo Ferreira Brega pelo apoio e confiança durante o desenvolvimento deste projeto.

Ao colega Luiz Soares dos Santos Baglie, por me orientar no processo de desenvolvimento, e com quem sem a ajuda este projeto não teria sido possível.

A todos os professores, que se dedicam a nos passar conhecimento e sabedoria que levaremos para sempre.

# Resumo

A química é a ciência que estuda a composição, a estrutura, e as propriedades da matéria, unido as transformações realizadas pela mesma. Um dos componentes fundamentais para compreender esta ciência são as moléculas, entidades químicas eletricamente neutras constituídas por, pelo menos, dois átomos unidos através de ligações covalentes, ou atração eletrostática. Cada molécula possui suas próprias características que as levam a se comportar de diferentes maneiras quando expostas a certas condições, uma destas características é a geometria molecular, que é determinada pela disposição espacial dos átomos que compõe a molécula. Quando estudadas, tradicionalmente, as moléculas são representadas através de modelos bidimensionais, como é o caso em livros e apostilas, porém esta representação acaba dificultando a compreensão de sua geometria molecular. Este trabalho teve como objetivo o desenvolvimento de um aplicativo para *smartphone*, que possibilita uma visualização tridimensional de moléculas a partir de arquivos de coordenadas atômicas, facilitando assim a percepção de sua geometria molecular e trazendo um nível maior de interatividade com o usuário. O aplicativo foi desenvolvido para o sistema operacional Android, através da ferramenta Unity3D, e permite que o usuário tenha acesso tanto a moléculas pré-carregadas, quanto a moléculas armazenadas em um repositório online, fornecendo uma ferramenta de busca para isso. O aplicativo também proporciona ao usuário a capacidade de acessar informações complementares relacionadas a molécula que está sendo visualizada, auxiliando seu processo de aprendizado. Após explicações a respeito do processo de desenvolvimento são apresentadas imagens de cada um dos módulos da versão final do aplicativo em funcionamento, e posteriormente é feita uma conclusão mostrando que os objetivos do projeto foram satisfeitos.

**Palavras-chave:** Aplicativo Android; Smartphone; Visualização Tridimensional de Moléculas; Unity3D.

# Abstract

Chemistry is the science that studies the composition, the structure, and the properties of matter, together with the transformations carried out by it. One of the key components to understanding this science are molecules, electrically neutral chemical entities made up of at least two atoms bonded through covalent bonds, or electrostatic attraction. Each molecule has its own characteristics that make them behave in different ways when exposed to certain conditions, one of these characteristics is the molecular geometry, which is determined by the spatial arrangement of the atoms that make up the molecule. When studied, traditionally, molecules are represented by two-dimensional models, as is the case in books and handouts, but this representation makes it difficult to understand their molecular geometry. This work aimed to develop a smartphone application that allows a three - dimensional visualization of molecules from atomic coordinate files, thus facilitating the perception of its molecular geometry and bringing a higher level of interactivity with the user. The application was developed for the Android operating system through the Unity3D tool, and allows the user to have access to both preloaded molecules and molecules stored in an online repository, providing a search tool for this. The application also provides the user with the ability to access complementary information related to the molecule being viewed, aiding their learning process. After explaining the development process, images of each of the modules of the final version of the running application are presented, and then a conclusion is made showing that the project objectives have been met.

**Keywords:** Android App; Smartphone; Three-dimensional Visualization of Molecules; Unity3D.

# Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação Estrutural Etanol ( $C_2H_6O$ ).	12
Figura 2 – Especificações Técnicas Mali-T760 MP8	13
Figura 3 – Parcela do Mercado de cada Sistema Operacional.	14
Figura 4 – Arquivo .pdb do Metano.	17
Figura 5 – Arquivo .pdb da Amônia.	17
Figura 6 – Arquivo .xyz do Sulfeto de Hidrogênio.	18
Figura 7 – Captura de Tela UnityMol.	20
Figura 8 – Captura de Tela SourceTree.	22
Figura 9 – Diagrama da Integração dos Módulos do Aplicativo.	24
Figura 10 – Interface Inicial - Menu.	25
Figura 11 – Interface Inicial - Visualização.	26
Figura 12 – Tela de Seleção de Moléculas Offline.	27
Figura 13 – Caixa de Texto para Busca de Moléculas.	29
Figura 14 – Visualização Etanol ( $C_2H_6O$ ).	30
Figura 15 – Botão para Informações Complementares.	30
Figura 16 – Janela de Ajuda.	31
Figura 17 – Botão Sair.	31
Figura 18 – Ícone do Aplicativo.	32
Figura 19 – Tela de Seleção de Arquivos - Versão 1.0.	33
Figura 20 – Tela de Menu - Versão 1.0.	34
Figura 21 – Tela de Visualização de Moléculas - Versão 1.0.	34
Figura 22 – Tela de Moléculas Offline - Versão 2.0.	35
Figura 23 – Tela de Pesquisa de Moléculas - Versão 2.0.	36
Figura 24 – Tela de Visualização de Moléculas - Versão 2.0.	36
Figura 25 – Módulo de Moléculas Offline - Versão Final.	37
Figura 26 – Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online) - Versão Final.	38
Figura 27 – Módulo de Visualização de Moléculas - Versão Final.	38
Figura 28 – Tela de Informações Complementares - Versão Final.	39
Figura 29 – Tela de Ajuda - Versão Final.	39



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>10</b>
<b>1.1</b>	<b>Problema</b>	<b>11</b>
<b>1.2</b>	<b>Justificativa</b>	<b>12</b>
<b>1.3</b>	<b>Objetivos</b>	<b>14</b>
1.3.1	Objetivo Geral	14
1.3.2	Objetivos Específicos	15
1.3.3	Organização da Monografia	15
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO</b>	<b>16</b>
<b>2.1</b>	<b>Arquivos de Coordenadas Atômicas</b>	<b>16</b>
2.1.1	Arquivos .pdb	16
2.1.2	Arquivos .xyz	18
<b>2.2</b>	<b>Android SDK</b>	<b>18</b>
<b>2.3</b>	<b>Unity3D</b>	<b>18</b>
<b>2.4</b>	<b>UnityMol</b>	<b>19</b>
<b>2.5</b>	<b>Dimmol</b>	<b>20</b>
<b>2.6</b>	<b>Bitbucket</b>	<b>21</b>
<b>2.7</b>	<b>SourceTree</b>	<b>21</b>
<b>3</b>	<b>DESENVOLVIMENTO</b>	<b>23</b>
<b>3.1</b>	<b>Módulos do Aplicativo</b>	<b>23</b>
<b>3.2</b>	<b>Planejamento da Interface</b>	<b>25</b>
<b>3.3</b>	<b>Módulo de Moléculas Offline</b>	<b>26</b>
<b>3.4</b>	<b>Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online)</b>	<b>27</b>
<b>3.5</b>	<b>Módulo de Visualização</b>	<b>29</b>
<b>3.6</b>	<b>Módulo de Informações Complementares</b>	<b>30</b>
<b>3.7</b>	<b>Módulo de Ajuda</b>	<b>31</b>
<b>3.8</b>	<b>Módulo Sair</b>	<b>31</b>
<b>3.9</b>	<b>Nome e Ícone</b>	<b>32</b>
<b>3.10</b>	<b>Testes</b>	<b>32</b>
<b>4</b>	<b>VERSÕES DO APLICATIVO</b>	<b>33</b>
<b>4.1</b>	<b>Visual Chemistry 1.0</b>	<b>33</b>
<b>4.2</b>	<b>Visual Chemistry 2.0</b>	<b>35</b>
<b>4.3</b>	<b>Visual Chemistry - Versão Final</b>	<b>37</b>

<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>40</b>
<b>5.1</b>	<b>Trabalhos Futuros . . . . .</b>	<b>41</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>42</b>

# 1 Introdução

Por volta de 1960 surgiu a ideia da construção de uma rede de computadores em que informações pudessem ser compartilhadas rapidamente e de maneira descentralizada, para que o fluxo das informações não fosse interrompido por problemas em um ponto específico da rede. Esta proposta foi apresentada pelo Departamento de Defesa dos Estados Unidos que queria criar uma ferramenta de comunicação militar alternativa, que resistisse a um conflito nuclear mundial (MONTEIRO, 2001). O projeto, que inicialmente tinha finalidades exclusivamente militares, começou a contar com a participação de universidades e centros de pesquisa e, com o passar do tempo foi caminhando em uma direção diferente, focando no compartilhamento de informações (MONTEIRO, 2001). Com a inclusão de cada vez mais computadores de diversas localidades a rede, ela deixou de se limitar aos Estados Unidos e passou a conectar países ao redor do mundo, esta rede se tornou o que conhecemos hoje como internet.

Outra grande evolução na área da tecnologia que pode ser claramente observada são as transformações que ocorreram nos dispositivos móveis. Os primeiros a surgir foram os celulares. Eles eram de grande porte e suas funções se limitavam a basicamente efetuar e receber ligações, mas conforme a passagem do tempo e criação de novos componentes eletrônicos, os celulares sofreram modificações que os deixaram em um tamanho menor, mais adequado para um dispositivo portátil. Além disso, os avanços tecnológicos permitiram que suas capacidades fossem muito além de realizar ligações, sendo então criados os primeiros dispositivos móveis que forneciam ao usuário ferramentas como calculadora, e-mail, e agenda. Neste período também surgiram os primeiros dispositivos móveis que possuíam o sistema de toque de tela, que apesar de não ser tão preciso quando criado, foi o ponto inicial para o desenvolvimento do *touchscreen* que atualmente está presente na grande maioria dos *smartphones*. Os dispositivos móveis atuais, como *tablets* e *smartphones*, possuem recursos similares aos dos computadores pessoais, possuindo um sistema operacional próprio e diversas funcionalidades (COUTINHO, 2015), como a capacidade de instalar programas, utilizar navegadores de internet, acessar conteúdo multimídia, e transferir arquivos para seu armazenamento.

Atualmente os *smartphones* são utilizados por uma grande parcela dos usuários de telefones móveis, e o número de vendas anuais desses dispositivos já é maior do que o de celulares tradicionais. Um dos principais atrativos dos *smartphones* é a possibilidade de instalar aplicativos desenvolvidos por terceiros e com funções diversas, abrangendo todos os aspectos da vida moderna, tais como acesso a internet, conta bancária, relacionamentos interpessoais, e integração com sistemas maiores.

Os avanços tecnológicos nas áreas da internet e dos dispositivos móveis, em conjunto com o aumento do uso de *smartphones*, foram de grande importância para o surgimento do

setor de aplicativos conhecido atualmente. Este setor acompanha a evolução dos *smartphones*, e utiliza os recursos adicionados para seu próprio benefício. Fatores como o aumento da capacidade de processamento, e velocidade de conexão a internet, permitem que os aplicativos possam receber novas funcionalidades que anteriormente eram limitadas pelo aspecto técnico. Uma das áreas em que o crescimento do uso de aplicativos pode ser observado é a da educação. O uso dos *smartphones* para auxiliar no processo de ensino tem se mostrado eficaz, e através de seus recursos digitais possibilita que os alunos utilizem ferramentas modernas e inovadoras, despertando seu interesse no aprendizado por meio de uma maior interatividade com a disciplina (JUNIOR, 2012).

O considerável aumento no número de vendas de *smartphones* nos últimos anos (HINGORANI; WOODARD; ASKARI-DANESH, 2012) é um ponto importante para o desenvolvimento deste projeto, no qual o principal objetivo é criar um aplicativo, para o sistema operacional Android, para a visualização de moléculas tridimensionais que facilite a compreensão da disposição espacial das mesmas. Além disso, o aplicativo visa permitir uma maior interatividade do usuário com o conteúdo através dos recursos dos *smartphones*, tentando estimular um maior interesse no aprendizado na área da química.

## 1.1 Problema

A química é a ciência que estuda a composição, a estrutura, e as propriedades da matéria, unido as transformações realizadas pela mesma (JUARISTI; STEFANI, 2012). Ela é uma ciência extremamente abrangente, e está tão presente em nosso dia a dia que muitas vezes nem sequer notamos sua presença, como é o caso em nossa alimentação, onde geramos energia a partir de alimentos consumidos, através de reações químicas.

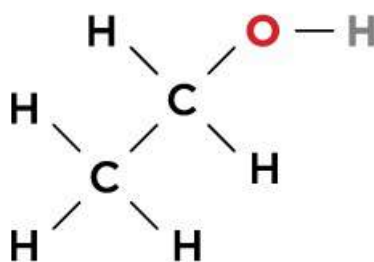
Um dos componentes de grande importância para a compreensão da química são as moléculas. Elas são entidades químicas eletricamente neutras constituídas por, pelo menos, dois átomos unidos através de ligações covalentes ou atração eletrostática (POULSEN, 2010). Cada molécula possui suas próprias características que as levam a se comportar de diferentes maneiras quando expostas a certas condições, uma destas características é a geometria molecular, determinada pela disposição espacial dos átomos que compõe a molécula (JUARISTI; STEFANI, 2012).

Apesar de serem estruturas tridimensionais, quando estudadas, tradicionalmente, as moléculas são apresentadas através de representações bidimensionais, como é o caso em livros e apostilas, porém este tipo de representação acaba dificultando a compreensão de sua geometria molecular.

A dificuldade de abstração e de visualização tridimensional dos alunos sempre foi apontada, pelos professores, como um dos principais problemas no aprendizado de Química. Essa dificuldade dos alunos está relacionada com a limitação dos recursos que os professores tradicionalmente tiveram para representar os aspectos tridimensionais dos modelos conceituais: giz, lousa, e retroprojetor (BAPTISTA, 2013).

A Figura 1 apresenta um exemplo de representação estrutural comumente utilizada para moléculas em livros didáticos.

Figura 1 – Representação Estrutural Etanol ( $C_2H_6O$ ).



Fonte: <http://www.aquimicadascoisas.org/>

Levando em conta as dificuldades observadas, um *software* que permite a exibição tridimensional das moléculas, onde o usuário é capaz de manipulá-las, através de *zoom*, e rotação para obter uma melhor visualização, pode funcionar como um grande complemento em seu processo de aprendizado, facilitando a percepção de como realmente é a estrutura molecular.

## 1.2 Justificativa

Os contínuos avanços tecnológicos em dispositivos móveis permitem solucionar novos problemas e, em vários casos, melhorar soluções prévias. Além disso, o barateamento de seus componentes eletrônicos os torna cada vez mais acessíveis para o público geral.

Atualmente grande parte dos *smartphones* modernos possuem processadores gráficos potentes como é o caso do Samsung Galaxy S6, dispositivo utilizado no desenvolvimento deste projeto, que possui o processador gráfico Mali-T760 MP8, cujas especificações estão apresentadas na Figura 2.

Figura 2 – Especificações Técnicas Mali-T760 MP8

<b>Manufacturer</b>	ARM		
<b>Mali-T700 Series</b>	<b>Mali-T760 MP8</b> 8 @ 700 - 772 (Boost) MHz <b>Mali-T760 MP6 (compare)</b> 6 @ 700 MHz <b>Mali-T760 MP4 (compare)</b> 4 @ 600 MHz <b>Mali-T760 MP2 (compare)</b> 2 @ 700 MHz <b>Mali-T720 MP4 (compare)</b> 4 @ 600 (Boost) MHz <b>Mali-T720 MP2 (compare)</b> 2 @ 650 MHz <b>Mali-T720 (compare)</b> 1 @ 600 MHz		
<b>Codename</b>	Midgard (3rd Generation)		
<b>Architecture</b>	Midgard (3rd-gen)		
<b>Pipelines</b>	8 - unified		
<b>Core Speed</b>	700 - 772 (Boost) MHz		
<b>Shared Memory</b>	no		
<b>DirectX</b>	DirectX 11		
<b>technology</b>	14 nm		
<b>Features</b>	OpenGL ES 3.1, OpenCL 1.1, DirectX 11, Renderscript, FSAA/MSAA		
<b>Date of Announcement</b>	01.03.2015 = 1004 days old		
<b>Link to Manufacturer Page</b>	<a href="http://www.arm.com/products/multimedia/m...">http://www.arm.com/products/multimedia/m...</a>		
<b>CPU</b>	<b>GPU Base Speed</b>		<b>GPU Boost / Turbo</b>
<b>Samsung Exynos 7420 Octa</b>	8 x 2100 MHz	700 MHz	772 MHz

Fonte: <https://www.notebookcheck.net/ARM-Mali-T760-MP8.140006.0.html>

Os avanços na capacidade gráfica dos dispositivos móveis é um ponto importante para o desenvolvimento do aplicativo, que utiliza de recursos gráficos para realizar a representação de moléculas tridimensionais.

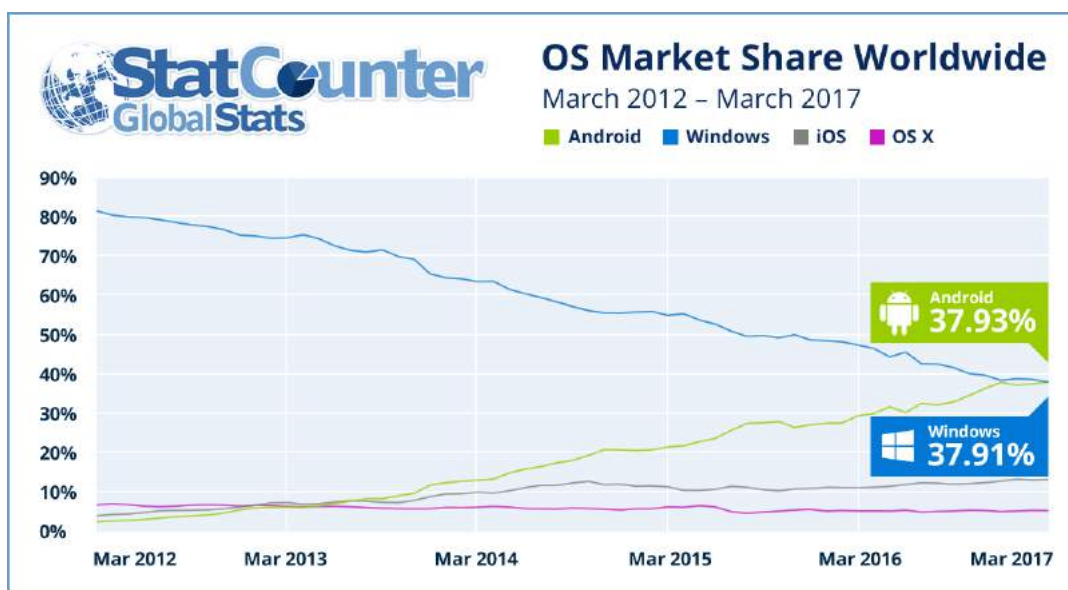
O principal fator motivador do projeto está relacionado ao sistema de visualização tridimensional de moléculas. Como visto anteriormente moléculas muitas vezes são representadas bidimensionalmente em livros e outros meios, o que compromete a compreensão de suas estruturas tridimensionais.

O aplicativo visa proporcionar uma percepção mais precisa das estruturas moleculares. Para isso são fornecidos ao usuário os mecanismos de interação com a representação tridimensional da molécula, como *zoom* e *rotação*, que permitem uma visualização a partir de diferentes ângulos. Além disso, o aplicativo tenta fazer com que essa interatividade funcione como uma forma de motivação, estimulando o interesse dos usuários e incentivando o processo de aprendizagem, principalmente com as gerações mais novas de alunos, que estão cada vez mais conectados à tecnologia (JUNIOR, 2012).

O Android foi escolhido como o sistema operacional do aplicativo. Entre os principais motivos para essa escolha estão a fácil integração com as ferramentas utilizadas durante o desenvolvimento, e por haver a disponibilidade de um *smartphone* Android para serem realizados os testes. Além disso, em março de 2017 o Android se tornou o sistema operacional mais utilizado no mundo ultrapassando o Windows, o que mostra que ele possui o atual domínio do mercado.

A Figura 3 apresenta um gráfico que mostra as porcentagens do mercado ocupadas pelos sistemas operacionais mais utilizados atualmente.

Figura 3 – Parcela do Mercado de cada Sistema Operacional.



Fonte: <http://gs.statcounter.com/>

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 Objetivo Geral

O objetivo geral do projeto apresentado neste documento é desenvolver um aplicativo para visualização tridimensional de estruturas moleculares. O aplicativo tem como principal

função auxiliar estudantes em seu processo de aprendizado em disciplinas relacionadas a química, permitindo uma visualização mais precisa das moléculas através de uma interface simples e intuitiva, além de proporcionar uma maior interatividade do usuário com o conteúdo didático.

### 1.3.2 Objetivos Específicos

- Definir os requisitos de software;
- Escolher uma metodologia de desenvolvimento adequada;
- Planejar quais serão os módulos do programa;
- Planejar como será a interface com o usuário;
- Desenvolver o módulo de pesquisa de moléculas;
- Desenvolver o módulo de acesso ao repositório;
- Desenvolver o módulo de visualização tridimensional;
- Desenvolver os demais módulos definidos; e
- Realizar testes para verificar o funcionamento do aplicativo.

### 1.3.3 Organização da Monografia

O presente trabalho divide-se em capítulos, sendo este o primeiro (Introdução). Os demais capítulos estão dispostos na seguinte ordem:

#### **Capítulo 2 - Fundamentação:**

Apresentação de conceitos teóricos e ferramentas utilizadas no trabalho.

#### **Capítulo 3 - Desenvolvimento:**

Descrição das etapas de desenvolvimento do trabalho.

#### **Capítulo 4 - Versões do Aplicativo:**

Apresentação das principais versões do aplicativo e de suas funcionalidades.

#### **Capítulo 5 - Conclusão:**

Considerações finais sobre o trabalho e possíveis trabalhos futuros.



## 2 Fundamentação

Neste capítulo são abordados alguns tópicos necessários para uma melhor compreensão do trabalho.

### 2.1 Arquivos de Coordenadas Atômicas

Para que seja possível realizar a representação tridimensional das moléculas, é necessário obter informações relacionadas a sua estrutura. Os arquivos de coordenadas atômicas são os responsáveis por fornecer os dados a partir dos quais a estrutura molecular será determinada. Entre esses dados estão as posições de cada um dos átomos da molécula indicados através de coordenadas cartesianas.

No projeto em questão foram utilizados dois formatos de arquivos de coordenadas atômicas: os formatos .pdb e .xyz.

#### 2.1.1 Arquivos .pdb

Estes arquivos são criados por pesquisadores com o foco em armazenar dados importantes de moléculas que possam ser utilizados posteriormente em pesquisas. Um dos locais onde os arquivos .pdb podem ser encontrados é no *Protein Data Bank* (<http://pdb101.rcsb.org/>), um repositório que contém arquivos de coordenadas atômicas e outras informações sobre proteínas e macromoléculas. Os arquivos .pdb são escritos a partir de observações realizadas por biólogos estruturais, que utilizam técnicas avançadas para determinar a distribuição espacial dos átomos de uma molécula (BERMAN et al., 2002).

A parte inicial dos arquivos .pdb é composta por um cabeçalho onde é feito um resumo da proteína, contendo informações como: o nome da molécula e o nome do autor do arquivo. Este cabeçalho é opcional e alguns arquivos .pdb não o possuem (BERMAN et al., 2002).

Após o cabeçalho, os arquivos apresentam as coordenadas atômicas dos átomos que compõem as moléculas. Para isso são utilizadas a palavra-chave ATOM, usada para indentificar átomos de proteínas ou ácidos nucleicos, e a palavra-chave HETATM, usada para identificar átomos de uma molécula pequena. (BERMAN et al., 2002)

Em sequência do uso de uma das palavras-chave, é apresentado uma série de dados a respeito do átomo, como o seu nome, o seu número no arquivo, o composto ao qual ele pertence, e suas coordenadas nos eixos cartesianos e um número relacionado ao seu comportamento conforme a variações de temperatura. (BERMAN et al., 2002)

Nos arquivos .pdb as ligações covalente podem, ou não, ser especificadas. Existem ar-

quivos .pdb onde as ligações são definidas explicitamente, e arquivos onde elas estão implícitas, cabendo ao *software* utilizado para visualização realizar as conexões entre os átomos (BERMAN et al., 2002).

A Figura 4 apresenta um arquivo .pdb do Metano, onde as ligações covalentes estão implícitas.

Figura 4 – Arquivo .pdb do Metano.

```

1  COMPND      METHANE
2  AUTHOR      DAVE WOODLOCK  95 12 18
3  ATOM        1  C          1      0.257 -0.363  0.000  1.00  0.00
4  ATOM        2  H          1      0.257  0.727  0.000  1.00  0.00
5  ATOM        3  H          1      0.771 -0.727  0.890  1.00  0.00
6  ATOM        4  H          1      0.771 -0.727 -0.890  1.00  0.00
7  ATOM        5  H          1     -0.771 -0.727  0.000  1.00  0.00
8  TER         6
9  END
10

```

Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 5 apresenta um arquivo .pdb da Amônia, onde as ligações covalentes estão explícitas.

Figura 5 – Arquivo .pdb da Amônia.

```

1  ATOM        1  N  NH3  A  1      00.000000.00000000-.001971  1.00 10.00
2  ATOM        2  HN1 NH3  A  1     -.470283.8145557.4239891  1.00 10.00
3  ATOM        3  HN2 NH3  A  1     -.470283-.814555.4239891  1.00 10.00
4  ATOM        4  HN3 NH3  A  1      00.94056.0000000.4239891  1.00 10.00
5  CONECT      1      2      3      4
6  CONECT      2      1
7  CONECT      3      1
8  CONECT      4      1
9  END

```

Fonte: Elaborada pelo autor.

### 2.1.2 Arquivos .xyz

Assim como o formato .pdb, este formato armazena informações cruciais quanto a disposição espacial dos átomos. Apesar de muito utilizado, o formato .xyz nunca foi formalmente definido, possuindo variações quanto a organização do arquivo. O mais próximo de uma definição formal é sua página no site do *software* Open Babel (<http://openbabel.org/wiki/XYZ>).

A sua primeira linha é destinada a indicar o número de átomos que compõe a molécula. A segunda linha é um espaço para comentários, onde geralmente se escreve o nome da molécula. Em seguida, vem a lista de átomos e suas respectivas coordenadas nos eixos cartesianos, sendo que cada átomo é representado em uma linha diferente.

Nos arquivos .xyz não há informações a respeito das ligações covalentes realizadas pelos átomos, essas ligações são determinadas pelo software com o carregamento do arquivo, a partir de cálculos realizados com base nas posições dos átomos.

A Figura 6 apresenta um exemplo de arquivo .xyz.

Figura 6 – Arquivo .xyz do Sulfeto de Hidrogênio.

```
1 3
2 H2S
3 S 0.434 0 0.000
4 H 1.734 0 0.000
5 H 0 0 1.225
```

Fonte: Elaborada pelo autor.

## 2.2 Android SDK

O Android SDK (*Software Development Kit*) foi utilizado neste projeto em sua versão 26.0.2. Desenvolvido pela Google, ele possui diversas ferramentas necessárias para se desenvolver e testar aplicativos para a plataforma Android.

Apesar de existir um ambiente de desenvolvimento para Android oficial da Google, o Android Studio, ele não foi utilizado neste trabalho, já que o Android SDK pode ser integrado diretamente ao Unity3D, o *software* escolhido para o desenvolvimento do projeto.

## 2.3 Unity3D

O Unity3D é uma ferramenta utilizada para o desenvolvimento de jogos 2D e 3D. Um de seus principais atrativos é seu editor gráfico que disponibiliza diversos componentes prontos

ao usuário, fazendo com que este possa ter um foco maior no desenvolvimento, sem grandes preocupações com alguns dos aspectos mais técnicos envolvidos, tais como *shaders*, colisores, e reprodução de áudio. Entre outros atrativos do Unity3D estão texturas já disponíveis, e um motor de física que suporta funcionalidades como mapeamento de colisão e sombras dinâmicas (<https://unity3d.com/pt>).

Apesar de ter um foco principal no desenvolvimento de jogos, o Unity3D também é uma excelente ferramenta para o desenvolvimento de aplicativos, principalmente aqueles que precisam de recursos gráficos mais avançados. Entre os principais fatores que contribuíram para o crescimento do uso do Unity3D está sua portabilidade, que permite que sejam criados programas para diversas plataformas, como, Android, iOS, consoles de video games, navegadores web, entre outros.

O Unity3D possui uma versão gratuita que possui os recursos principais da ferramenta, e versões pagas que possuem mais recursos como, a inclusão de pacotes extras, um editor gráfico superior, e uma ferramenta de análise de performance. Neste trabalho foi utilizado o Unity Personal 5.6.2f1, versão que é gratuita e voltada para estudantes e usuários casuais, que não precisem dos recursos mais avançados fornecidos pelas versões pagas.

Como mencionado anteriormente, para possibilitar o desenvolvimento para Android é necessário adicionar o Android SDK ao Unity3D, isso permite que o Unity3D gere os pacotes .apk que são utilizados para instalar os programas Android. Quanto ao código em si, ele pode ser escrito nas linguagens JavaScript, C# ou Boo (linguagem baseada em Python).

No projeto em questão a linguagem utilizada foi o C#, pelo fato de ser a linguagem em que foi escrito o UnityMol, *software* que serviu como base para este projeto.

## 2.4 UnityMol

O UnityMol é um *software* criado no Unity3D, que serve para edição e visualização de moléculas. Desenvolvido por Marc Baaden e sua equipe no Instituto de Biologia Físico-Química de Paris (<http://www.ibpc.fr/>). Ele foi criado a partir da percepção de que as capacidades gráficas do Unity3D serviriam perfeitamente para realizar representações tridimensionais de moléculas, e que o uso da ferramenta poderia auxiliar pesquisadores que não possuem o conhecimento técnico necessário para criar aplicações gráficas (LV et al., 2013).

Para realizar a representação das moléculas o UnityMol conta com o *shader* de Hyper-Balls, um algoritmo criado com o intuito de utilizar a unidade de processamento gráfico do dispositivo utilizado, para possibilitar uma visualização suavizada das estruturas moleculares, e que também realiza os cálculos necessários para permitir estilos variados de representações (CHAVENT et al., 2011).

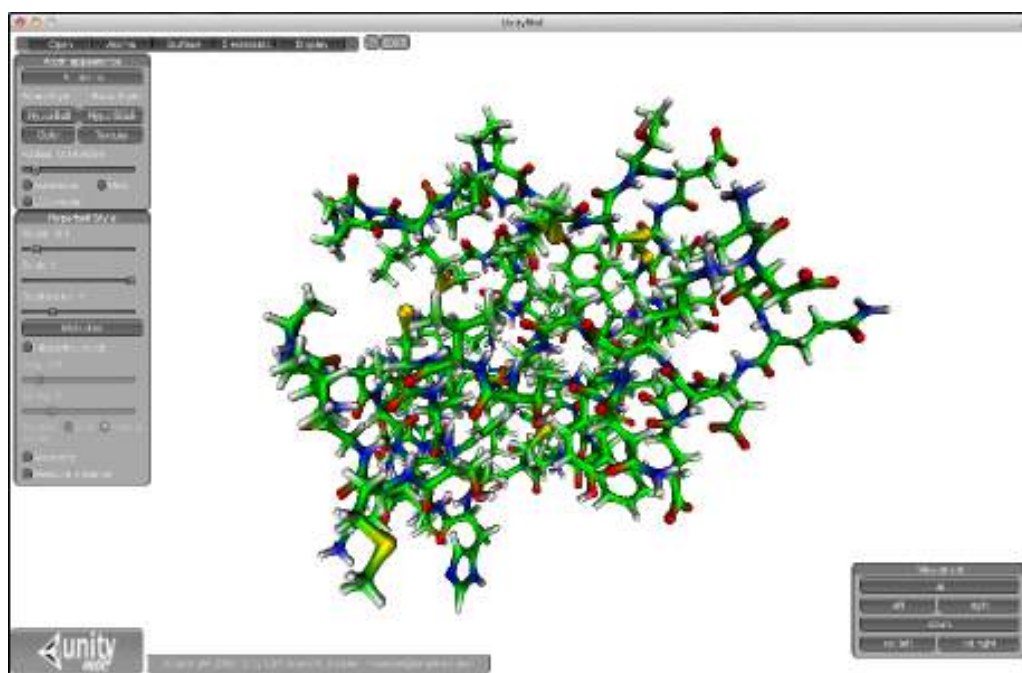
Em relação aos formatos de arquivos, o UnityMol é capaz de interpretar arquivos .pdb,

redes Cytoscape, mapas OpenDX, e malhas Wavefront OBJ (LV et al., 2013). Entre estes formatos o único utilizado no projeto foi o .pdb, apresentado anteriormente.

O UnityMol é um *software* com código aberto, e permite que desenvolvedores utilizem suas funcionalidades em seus próprios projetos. Neste trabalho ele serviu como ponto inicial para o desenvolvimento.

Uma captura de tela do UnityMol é apresentada na Figura 7.

Figura 7 – Captura de Tela UnityMol.



Fonte: <http://www.baaden.ibpc.fr/umol/index.html>

## 2.5 Dimmol

O Dimmol (*Distributed Immersive Multi-platform Molecular visualization*) é uma aplicação científica baseada no UnityMol, desenvolvida no Unity, e que utiliza o Unity Cluster Package para permitir uma visualização imersiva de estruturas moleculares através de diversos tipos de dispositivos, com suporte ao sistema de realidade virtual da Google(GoogleVR) (BAGLIE et al., 2017).

Assim como o UnityMol, o Dimmol também serviu para auxiliar o desenvolvimento do projeto em questão, sendo utilizadas algumas de suas funcionalidades para isso. Entre as funcionalidades utilizadas estão a de acesso a arquivos de moléculas armazenados no dispositivo, e a capacidade de interpretar arquivos no formato .xyz, formato que não é inicialmente reconhecido no UnityMol. Além disso também foi utilizada a função para acesso de arquivos de trajetória em repositório *online*, com adequações para arquivos .pdb e .xyz.

## 2.6 Bitbucket

O Bitbucket é um sistema, desenvolvido pela Atlassian, para controle de versão de código. Ele pode ser utilizado gratuitamente, e permite o armazenamento do código do usuário em seus servidores, registrando as modificações realizadas no mesmo, e criando novas versões a cada modificação. Com isso o usuário consegue desfazer alterações que possam ter gerado algum problema, ou que não tenham atingido seu objetivo. Ele foi utilizado neste projeto para facilitar o processo de desenvolvimento e mantê-lo organizado, além de manter o código em seus servidores para a eventual necessidade de um *backup*.

Link do projeto no Bitbucket:

<https://bitbucket.org/rafabaldoni/visual-chemistry/overview>

## 2.7 SourceTree

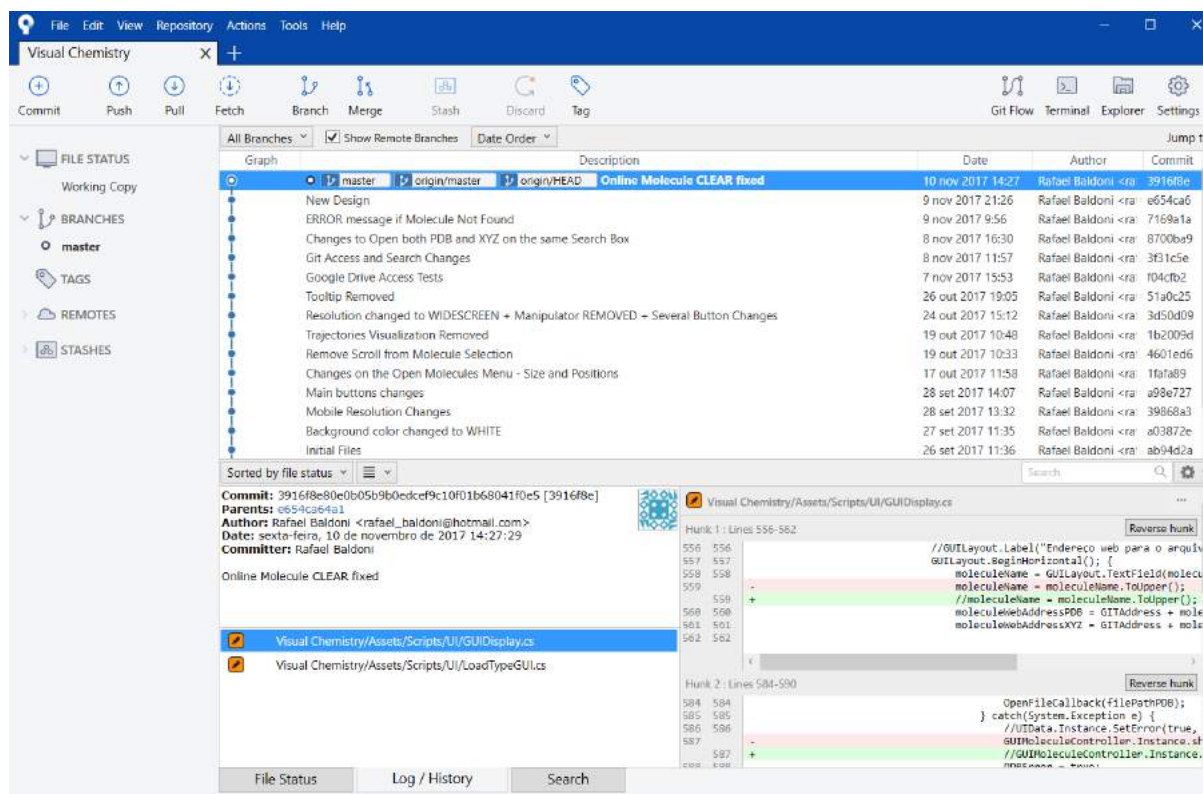
O SourceTree é um programa com versões para Windows e Mac, que pode ser utilizado integrado ao Bitbucket. Sua função é facilitar o processo de controle de versão do código, identificando automaticamente e em tempo real, alterações realizadas no mesmo.

O *software* foi utilizado no desenvolvimento deste trabalho, para registrar as mudanças realizadas no código, deixando identificado o que foi alterado em cada atualização, além de armazenar informações como a data e o horário da modificação, o que serviu para auxiliar o processo de desenvolvimento, mantendo-o organizado, e documentando as mudanças realizadas no aplicativo, permitindo que fossem adicionadas descrições a cada uma de suas versões.

As versões criadas no SourceTree em conjunto com os detalhes fornecidos em suas descrições, também servem para facilitar a compreensão do funcionamento do código, uma vez que funcionalidades implementadas durante um longo período de tempo podem se tornar confusas para o desenvolvedor.

A Figura 8 apresenta uma captura de tela do SourceTree, onde podem ser observadas algumas das principais mudanças realizadas durante o processo de desenvolvimento do aplicativo em questão.

Figura 8 – Captura de Tela SourceTree.



Fonte: Elaborada pelo autor.

## 3 Desenvolvimento

Neste capítulo serão apresentadas as etapas do desenvolvimento do aplicativo, explicando cada uma delas separadamente.

### 3.1 Módulos do Aplicativo

Antes de começar o desenvolvimento do código em si, foi necessário um planejamento inicial do aplicativo. Parte importante deste planejamento foi a definição dos requisitos de *software*, que definem quais são as necessidades que o *software* deve atender.

A modelagem de requisitos é a primeira etapa da solução de um problema de engenharia de *software*. O objetivo desta etapa é tentar compreender o problema para definir a melhor estratégia possível para resolvê-lo (PRESSMAN, 1995). Com a análise do problema e a divisão de suas necessidades em diferentes requisitos, é possível organizar e simplificar o processo de desenvolvimento, definindo módulos que possam ser implementados separadamente.

Os módulos definidos inicialmente são os seguintes:

1. Módulo de Pesquisa de Moléculas
2. Módulo de Acesso ao Repositório
3. Módulo de Visualização
  - a) Rotacionar
  - b) Ampliar / Reduzir
  - c) Mudar Tipo de Representação
4. Informações Complementares sobre a Molécula

Ainda que a identificação dos requisitos e definição dos módulos do aplicativo tenham sido feitas, antes de começar o desenvolvimento do projeto, algumas alterações foram realizadas, uma vez que durante o processo de desenvolvimento foi notada a necessidade de certas modificações. Apesar disso, esta etapa foi muito importante para fornecer uma modularização inicial que foi capaz de servir como guia e organizar o processo de desenvolvimento do aplicativo.

Entre as alterações realizadas, estão a junção dos módulos de Pesquisa de Moléculas e Acesso ao Repositório em um único módulo. Além disso, no módulo de Visualização foi optou-se por manter um único estilo de representação para a molécula. Também foi necessário a criação dos módulos de Moléculas Offline, Ajuda, e Sair, que serão especificados a seguir.



Os módulos do aplicativo após as alterações realizadas durante o desenvolvimento são os seguintes:

a) Módulo de Moléculas Offline: É o módulo responsável por apresentar quais as moléculas que já vem armazenadas no próprio aplicativo, permitindo que o usuário escolha qual delas deseja visualizar.

b) Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online): É o módulo responsável por realizar a busca por uma molécula, a partir da fórmula molecular digitada pelo usuário, e checar se ela está disponível no repositório online.

c) Módulo de Visualização: É integrado aos módulos anteriores, sendo o responsável por realizar a representação tridimensional da molécula selecionada. Possibilita também os mecanismos de interatividade com o usuário, através de funções como, rotacionar, e ampliar ou reduzir a molécula.

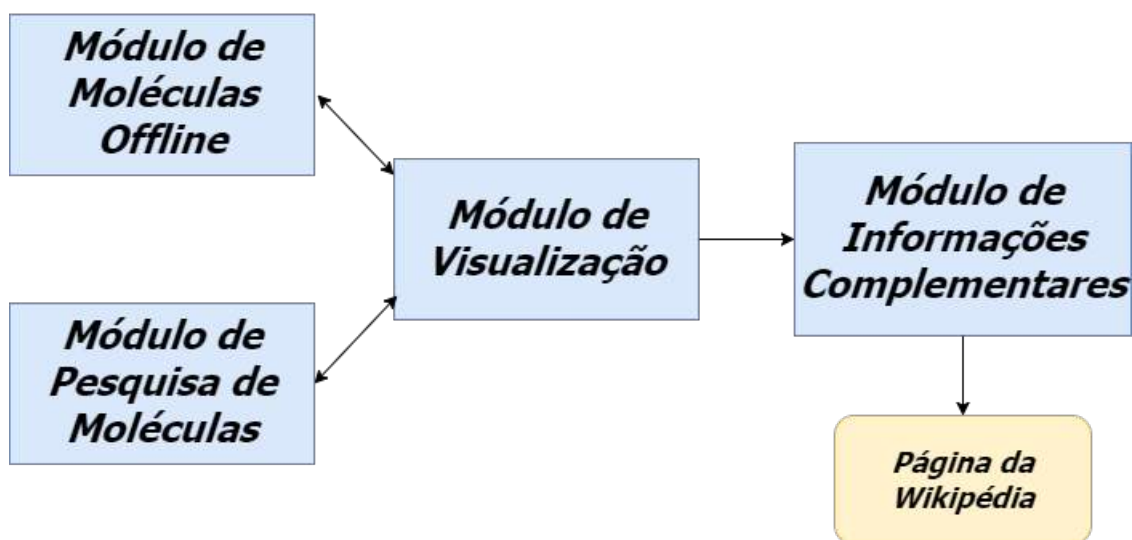
d) Módulo de Informações Complementares: É o módulo responsável por realizar a associação entre a molécula selecionada e sua respectiva página na Wikipédia, permitindo que o usuário possa obter informações sobre a molécula caso deseje.

e) Módulo de Ajuda: Fornece informações sobre o funcionamento do programa, auxiliando o usuário a utilizá-lo.

f) Módulo Sair: Permite ao usuário fechar o aplicativo.

A Figura 9 a seguir apresenta um diagrama que mostra como é a integração dos módulos do aplicativo. Considerando que os módulos de Ajuda e Sair podem ser acessados a qualquer momento durante a execução do aplicativo eles não foram incluídos no diagrama.

Figura 9 – Diagrama da Integração dos Módulos do Aplicativo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

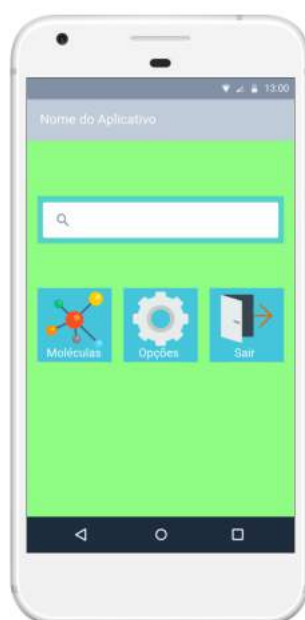
## 3.2 Planejamento da Interface

Outra etapa realizada antes do desenvolvimento do código foi o planejamento de um modelo de interface inicial para o aplicativo. Esta etapa teve como objetivo, organizar o conteúdo disponível no aplicativo de uma maneira que fosse visualmente agradável e que possa ser intuitivamente acessado pelo usuário.

Assim como os módulos do aplicativo, a interface também sofreu alterações em relação ao projeto inicial, todavia, as mudanças foram utilizadas para redefinir não somente a aparência dos elementos visuais, mas também sua diagramação.

A Figura 10 apresenta a interface planejada inicialmente para o Menu da aplicação.

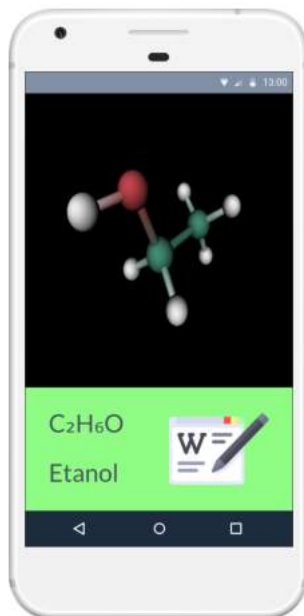
Figura 10 – Interface Inicial - Menu.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 11 apresenta a interface planejada inicialmente para o Módulo de Visualização da aplicação.

Figura 11 – Interface Inicial - Visualização.



Fonte: Elaborada pelo autor.

As alterações realizadas na interface são apresentadas no capítulo 4, que aborda as diferentes versões do aplicativo.

### 3.3 Módulo de Moléculas Offline

Este módulo permite o acesso a uma coleção de moléculas, a partir de arquivos de coordenadas nos formatos .pdb e .xyz armazenados no próprio aplicativo. Para isso foi utilizada no código uma estrutura que armazena os dados referentes a estes arquivos.

O módulo também é responsável por criar uma janela contendo botões com os nomes das moléculas disponíveis, para que o usuário possa escolher qual delas deseja visualizar, caso o usuário selecione uma das moléculas, é realizada a abertura do arquivo de coordenadas referente a molécula selecionada e em seguida é acionado o Módulo de Visualização.

A janela contendo seus nomes foi posicionada no centro da tela para fornecer uma visualização clara, e permitir que o usuário selecione as moléculas com maior precisão no *smartphone*. A janela é apresentada na Figura 12.

Figura 12 – Tela de Seleção de Moléculas Offline.



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 3.4 Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online)

Para a implementação deste módulo foi criado um repositório no GitHubGist, responsável pelo armazenamento dos arquivos de coordenadas das moléculas em seus servidores. Foram adicionados diversos arquivos de coordenadas ao repositório, para que o usuário tenha uma ampla capacidade de escolha. Estas moléculas foram selecionadas com base em questões como serem utilizadas didaticamente em áreas relacionadas a química, disponibilidade do arquivo de coordenadas na internet, e por possuírem páginas com informações complementares na Wikipédia.

Link do repositório no GitHubGist:

<https://gist.github.com/rafabaldoni/49e83e8d27723fd38ce8fd74096fb438>

As moléculas disponíveis no repositório são as seguintes:

1. Ag<sub>2</sub>S - Sulfeto de Prata
2. C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> - Acetileno
3. CaCl<sub>2</sub> - Cloreto de Cálcio
4. CaCO<sub>3</sub> - Carbonato de Cálcio
5. CaSO<sub>4</sub> - Sulfato de Cálcio
6. CCl<sub>4</sub> - Tetracloreto de Carbono
7. CdTe - Telureto de Cádmiio
8. CH<sub>4</sub> - Metano
9. CO<sub>2</sub> - Dióxido de Carbono
10. CrO<sub>3</sub> - Trióxido de Cromo

11.  $\text{CsCl}$  - Cloreto de Césio
12.  $\text{CuSO}_4$  - Sulfato de Cobre (II)
13.  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  - Óxido de Ferro (III)
14.  $\text{H}_2\text{CO}_3$  - Ácido Carbônico
15.  $\text{H}_2\text{O}$  - Água
16.  $\text{H}_2\text{S}$  - Sulfeto de Hidrogênio
17.  $\text{H}_2\text{SO}_4$  - Ácido Sulfúrico
18.  $\text{H}_3\text{BO}_3$  - Ácido Bórico
19.  $\text{H}_3\text{PO}_4$  - Ácido Fosfórico
20.  $\text{HCl}$  - Ácido Clorídrico
21.  $\text{HCN}$  - Cianeto de Hidrogênio
22.  $\text{HNO}_3$  - Ácido Nítrico
23.  $\text{HSbF}_6$  - Ácido Fluorantimônico
24.  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$  - Dicromato de Potássio
25.  $\text{KClO}_4$  - Perclorato de Potássio
26.  $\text{KNO}_3$  - Nitrato de Potássio
27.  $\text{KOH}$  - Hidróxido de Potássio
28.  $\text{N}_2$  - Nitrogênio
29.  $\text{NaCl}$  - Cloreto de Sódio
30.  $\text{NaHCO}_3$  - Bicarbonato de Sódio
31.  $\text{NaNO}_2$  - Nitrito de Sódio
32.  $\text{NH}_3$  - Amônia
33.  $\text{NO}_2$  - Dióxido de Nitrogênio
34.  $\text{P}_2\text{O}_5$  - Pentóxido de Fósforo
35.  $\text{SO}_2$  - Dióxido de Enxofre
36.  $\text{SO}_3$  - Óxido Sulfúrico
37.  $\text{TiO}_2$  - Dióxido de Titânio

O acesso aos arquivos no repositório foi baseado no módulo de Aquisição de Trajetórias do Dimmol (BAGLIE et al., 2017), sendo realizadas as alterações necessárias para buscar por arquivos nos formatos .pdb e .xyz.

A ferramenta de busca em si, funciona a partir do momento em que o usuário digita a fórmula molecular (exemplo: H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) da molécula que deseja visualizar, na caixa de texto disponível para busca de moléculas online. Esta caixa de texto diferencia letras maiúsculas de minúsculas, por isso é importante que o usuário digite a fórmula corretamente. A necessidade dessa diferenciação se deve ao fato de que existem elementos químicos representados por duas letras, sendo a primeira maiúscula e a segunda minúscula, como por exemplo o Cloro (Cl).

Na Figura 13 é apresentada a caixa de texto para busca de moléculas.

Figura 13 – Caixa de Texto para Busca de Moléculas.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Após o usuário ter fornecido a fórmula molecular da molécula escolhida, o aplicativo faz uma junção entre o link do repositório e a fórmula molecular, armazenando esta informação em uma variável, responsável por indicar o endereço web do arquivo de coordenadas da molécula selecionada.

O aplicativo tenta então adquirir o arquivo a partir do endereço indicado, testando o acesso ao arquivo tanto no formato .pdb quanto no formato .xyz. Caso ambos os acessos falhem, é determinado, então, que a molécula não está disponível no repositório, e portanto exibe uma mensagem de que este arquivo não existe no repositório. Se o arquivo for adquirido com sucesso, o aplicativo realiza sua abertura e ativa o Módulo de Visualização.

### 3.5 Módulo de Visualização

O Módulo de Visualização é ativado após a escolha da molécula que deseja ser visualizada, ele pode ser acionado a partir dos módulos de Moléculas Offline ou de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online). O Módulo de Visualização é o responsável por interpretar os dados provenientes dos arquivos de coordenadas atômicas e realizar a representação tridimensional das moléculas.

Para realizar esta representação são utilizadas funções do UnityMol (LV et al., 2013), em conjunto a representação por meio de HyperBalls (CHAVENT et al., 2011).

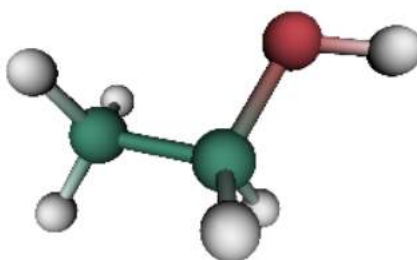
Com o uso destas ferramentas o aplicativo é capaz de identificar as coordenadas cartesianas de cada um dos átomos da molécula selecionada, e representá-los como esferas no espaço tridimensional, associando cores diferentes aos átomos de acordo com seus elementos químicos.

As ligações covalentes realizadas pelos átomos são representadas através de cilindros que conectam as esferas. Essas ligações podem ser identificadas pelo aplicativo de duas ma-

neiras diferentes. A primeira e mais simples, é quando elas são explicitamente indicadas no arquivo de coordenadas, cabendo ao *software* apenas realizar a representação destas conexões. A segunda, é quando estas informações estão implícitas, e o *software* precisa realizar cálculos para verificar se a distância entre dois átomos é menor do que a soma de seus raios covalentes, caso isto aconteça é concluído que existe uma ligação entre eles.

A Figura 14 tenta exemplificar como é a aparência da representação tridimensional de uma molécula do Etanol ( $C_2H_6O$ ).

Figura 14 – Visualização Etanol ( $C_2H_6O$ ).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Este módulo também é o responsável por fornecer algumas das mecânicas de interação com o usuário, como as capacidades de rotacionar a molécula, e de ampliar ou reduzir seu tamanho, ambas funcionalidades controladas a partir do uso do *touchscreen* do *smartphone*.

### 3.6 Módulo de Informações Complementares

O Módulo de Informações Complementares tem a função de possibilitar que o usuário obtenha mais informações a respeito da molécula selecionada. Para isso foi criado um botão, apresentado na Figura 15, que redireciona o usuário para a página da Wikipédia referente a molécula que está sendo visualizada.

Figura 15 – Botão para Informações Complementares.



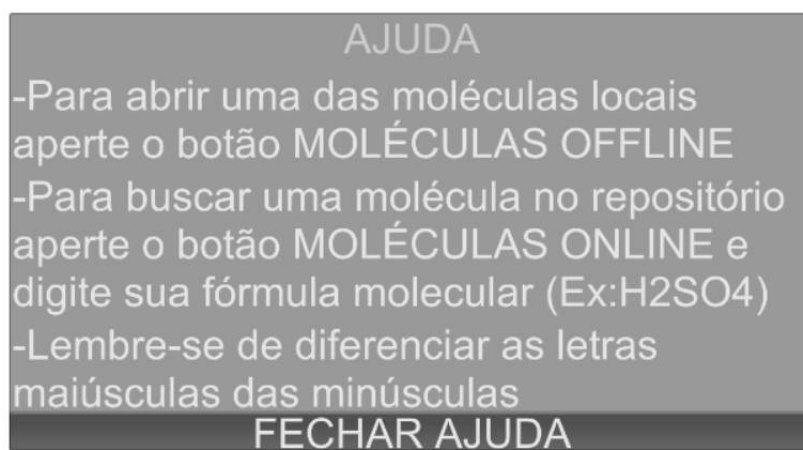
Fonte: <https://www.freepik.com/>

Este botão tem seu conteúdo constantemente modificado, para que com a visualização de uma nova molécula ele receba um novo endereço web, com base na fórmula molecular da molécula selecionada.

### 3.7 Módulo de Ajuda

O Módulo de Ajuda é composto por um botão que quando pressionado abre uma janela com informações para auxiliar o usuário no uso do aplicativo, a janela de ajuda é apresentada na Figura 16.

Figura 16 – Janela de Ajuda.



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 3.8 Módulo Sair

O Módulo Sair é composto por um botão que quando pressionado fecha o aplicativo, este botão está apresentado na Figura 17.

Figura 17 – Botão Sair.



Fonte: Elaborada pelo autor.

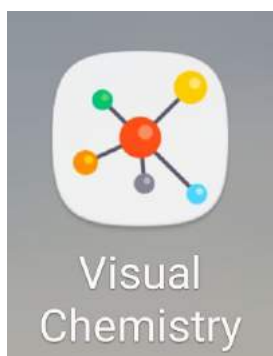


### 3.9 Nome e Ícone

O nome escolhido para o aplicativo foi Visual Chemistry (do inglês, Química Visual), pelo fato de se tratar de um aplicativo que tem como função principal facilitar a visualização do aspecto tridimensional das moléculas, e pela sua proposta de incentivar o estudo da disciplina por meio de ferramentas visuais.

A Figura 18 apresenta o ícone escolhido para o aplicativo, ele é composto pelo desenho de uma molécula genérica, desenhada de uma maneira similar à representação tridimensional fornecida pelo aplicativo.

Figura 18 – Ícone do Aplicativo.



Fonte: <https://www.freepik.com/>

### 3.10 Testes

Os testes foram realizados durante todo o processo de desenvolvimento do aplicativo. Foram realizados testes das funcionalidades incluídas no próprio Unity3D, e quando necessário foram criados protótipos para verificar se estas também funcionavam no *smartphone*. Com a conclusão do desenvolvimento do aplicativo, foram realizados testes em cada um dos módulos, tanto separadamente quanto em conjunto, para verificar se o sistema funciona como esperado.

No próximo capítulo serão apresentadas as principais versões geradas durante o desenvolvimento do aplicativo, explicando as principais modificações realizadas a cada versão.

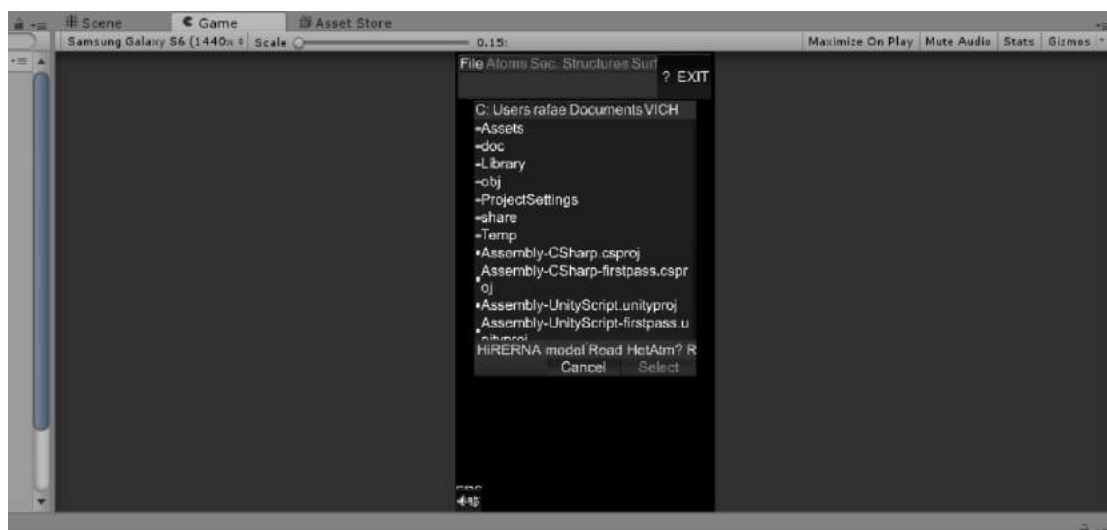
## 4 Versões do Aplicativo

### 4.1 Visual Chemistry 1.0

Nesta primeira versão do aplicativo, o Módulo de Moléculas Offline ainda não havia sido adicionado, portanto os arquivos de coordenadas, armazenados localmente no dispositivo, eram selecionados manualmente, sendo necessário encontrá-los entre os diretórios do *smartphone*.

A Figura 19 apresenta a tela de seleção de arquivos da versão 1.0 do aplicativo.

Figura 19 – Tela de Seleção de Arquivos - Versão 1.0.

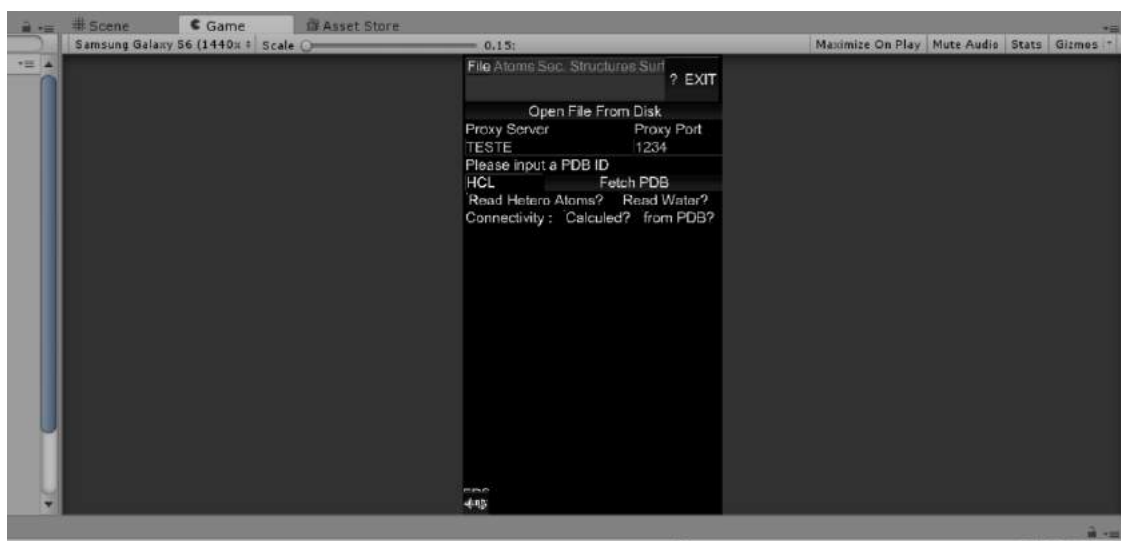


Fonte: Elaborada pelo autor.

O menu da versão inicial foi herdado da aplicação do UnityMol (LV et al., 2013) para Windows e por esta razão estava inicialmente escrito no idioma inglês, além disso, ele possuía informações e campos relativos a funcionalidades originais do UnityMol que não foram utilizadas no projeto, e portanto foram posteriormente retiradas.

A Figura 20 apresenta a tela de menu da versão 1.0 do aplicativo.

Figura 20 – Tela de Menu - Versão 1.0.

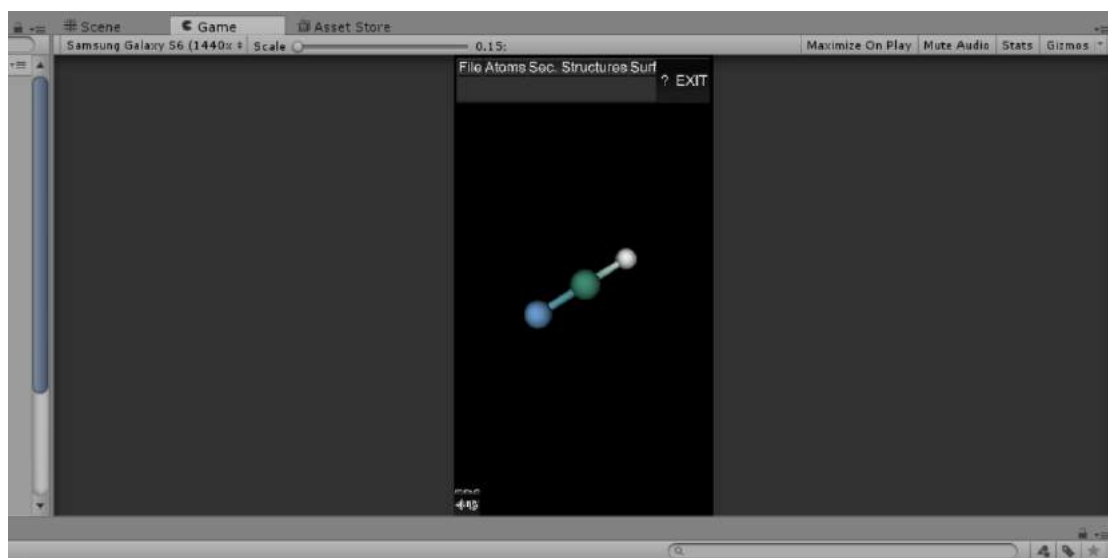


Fonte: Elaborada pelo autor.

O principal componente a ser testado na versão 1.0 foi o Módulo de Visualização de Moléculas. Nesta versão o módulo já estava completo e era capaz de realizar a representação tridimensional de moléculas, portanto foram necessários testes para verificar se os arquivos de coordenadas atômicas estavam sendo representados corretamente.

A Figura 21 apresenta o Módulo de Visualização em funcionamento, sendo representada nela uma molécula de Cianeto de Hidrogênio (HCN).

Figura 21 – Tela de Visualização de Moléculas - Versão 1.0.



Fonte: Elaborada pelo autor.

## 4.2 Visual Chemistry 2.0

Uma das principais mudanças realizadas na segunda versão do aplicativo, foi a inclusão do Módulo de Moléculas Offline, que passou a permitir a seleção de moléculas armazenadas localmente no dispositivo através de uma janela própria para essa escolha. Com a adição deste recurso, foram realizados testes para verificar se o Módulo de Visualização era ativado corretamente após a seleção de uma das moléculas.

A Figura 22 apresenta a tela de moléculas offline da versão 2.0, onde a janela com os nomes das moléculas armazenadas localmente estão disponíveis ao usuário.

Figura 22 – Tela de Moléculas Offline - Versão 2.0.



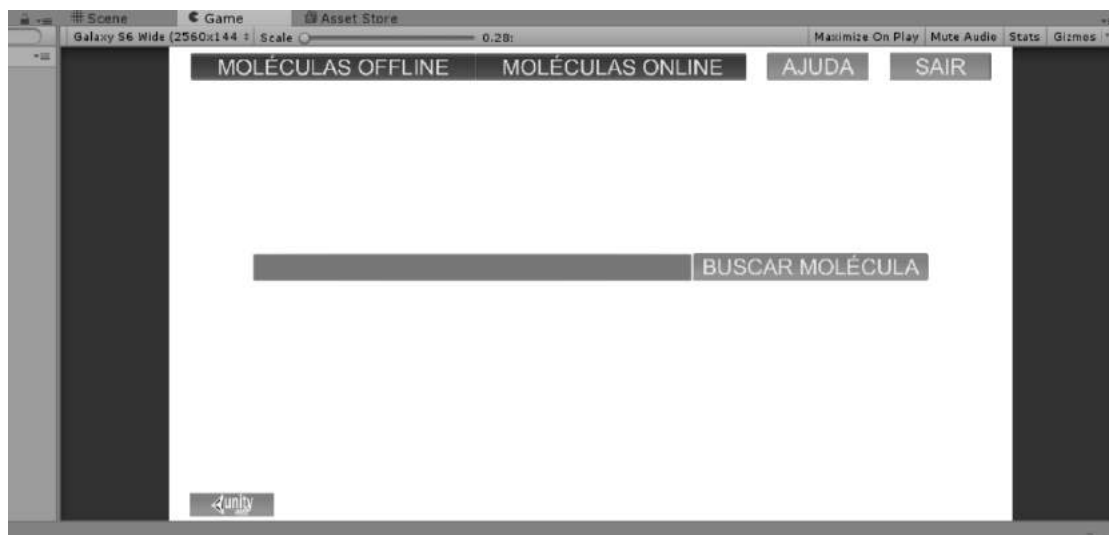
Fonte: Elaborada pelo autor.

Nesta versão também foi adicionado o Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online), responsável por realizar a busca de uma molécula em conjunto com o acesso ao repositório, para isso, foi criada a caixa de texto em que o usuário digita a fórmula molecular da molécula desejada.

Com a adição da caixa de texto, surge a necessidade de testes que possam garantir que a informação inserida pelo usuário estava sendo obtida corretamente. Além disso, também foram necessários testes para verificar se, após a obtenção da fórmula molecular inserida, o acesso ao repositório e aquisição do arquivo de coordenadas atômicas estava sendo realizado com sucesso.

A Figura 23 apresenta a tela de pesquisa de moléculas da versão 2.0, na qual é fornecida uma caixa de texto para que o usuário digite a fórmula molecular para obtenção da molécula desejada.

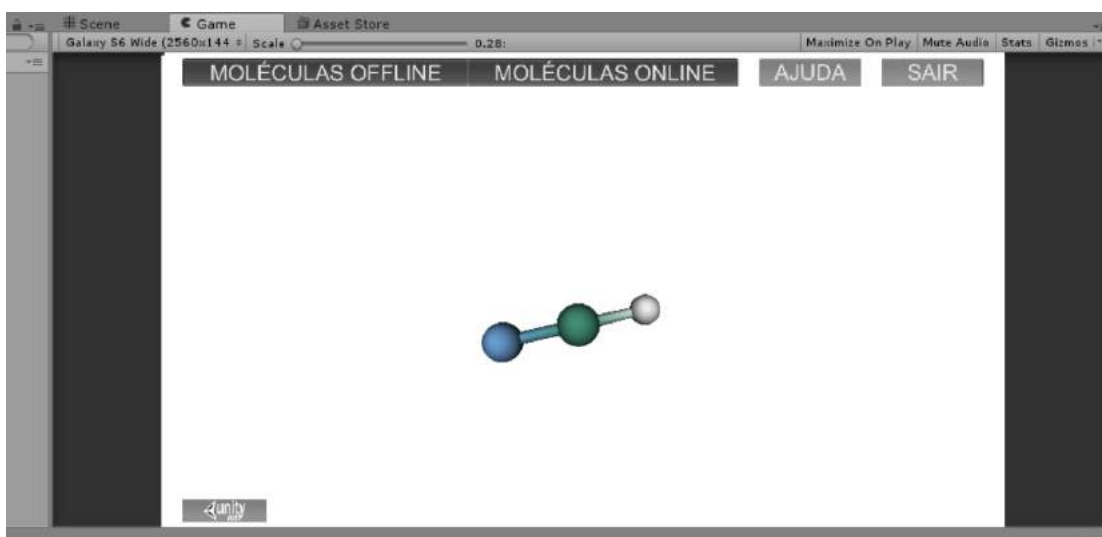
Figura 23 – Tela de Pesquisa de Moléculas - Versão 2.0.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Apesar de não terem sido realizadas alterações no funcionamento do Módulo de Visualização, foram feitas mudanças quanto ao seu aspecto visual, como, a redefinição da orientação do aplicativo para o *widescreen*, permitindo um espaço mais amplo para a visualização das moléculas, e a alteração da cor de fundo para o branco sendo esta uma escolha exclusivamente estética. A Figura 24 apresenta a tela de visualização de moléculas da versão 2.0, onde podem ser notadas essas mudanças.

Figura 24 – Tela de Visualização de Moléculas - Versão 2.0.



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 4.3 Visual Chemistry - Versão Final

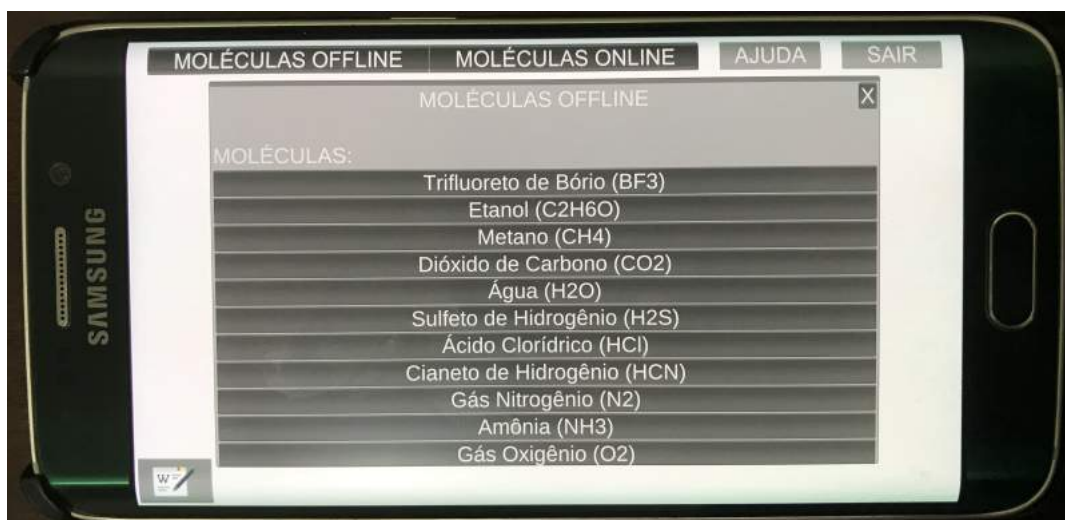
Nesta última versão do aplicativo foram adicionados os módulos de Informações Complementares, e Ajuda. Foram realizados testes para verificar o funcionamento destes novos módulos, assim como, todos os outros implementados, para garantir que a versão final satisfaz as necessidades esperadas.

O aplicativo foi desenvolvido para o *smartphone* Samsung Galaxy S6 Edge, e foi neste dispositivo que os testes foram realizados. A interface foi construída com base em sua resolução (2560x1440) e formato de tela, portanto, as janelas e botões da aplicação tiveram seus tamanhos definidos a partir destes dados. Apesar disso esse posicionamento pode ser adaptado para outros dispositivos com a alteração de alguns aspectos relacionados a resolução inserida na aplicação.

A seguir serão apresentadas imagens de cada um dos módulos da versão final do aplicativo, em execução, no Samsung Galaxy S6 Edge.

A Figura 25 apresenta o Módulo de Moléculas Offline em execução.

Figura 25 – Módulo de Moléculas Offline - Versão Final.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 26 apresenta o Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online) em execução.

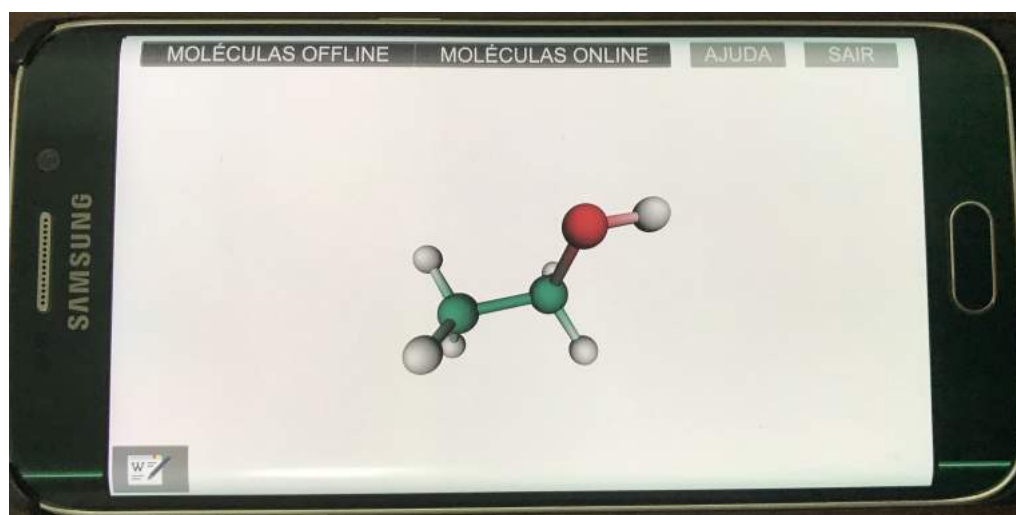
Figura 26 – Módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online) - Versão Final.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 27 apresenta o Módulo de Visualização de Moléculas em execução, sendo utilizado uma molécula do Etanol ( $C_2H_6O$ ) como exemplo.

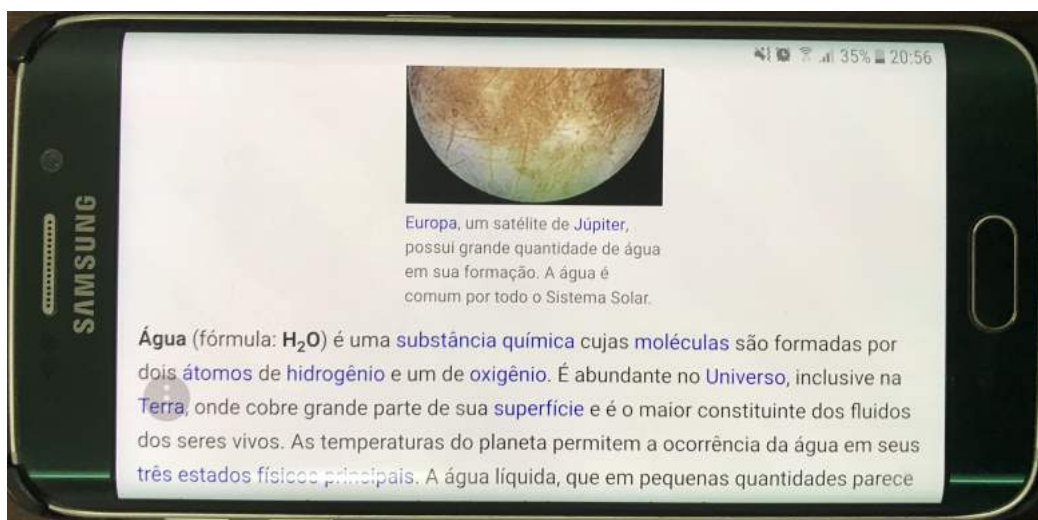
Figura 27 – Módulo de Visualização de Moléculas - Versão Final.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 28 apresenta um exemplo de tela da Wikipédia fornecendo informações complementares de uma molécula, no caso da Água ( $H_2O$ ), que é aberta a partir do acesso ao Módulo de Informações Complementares.

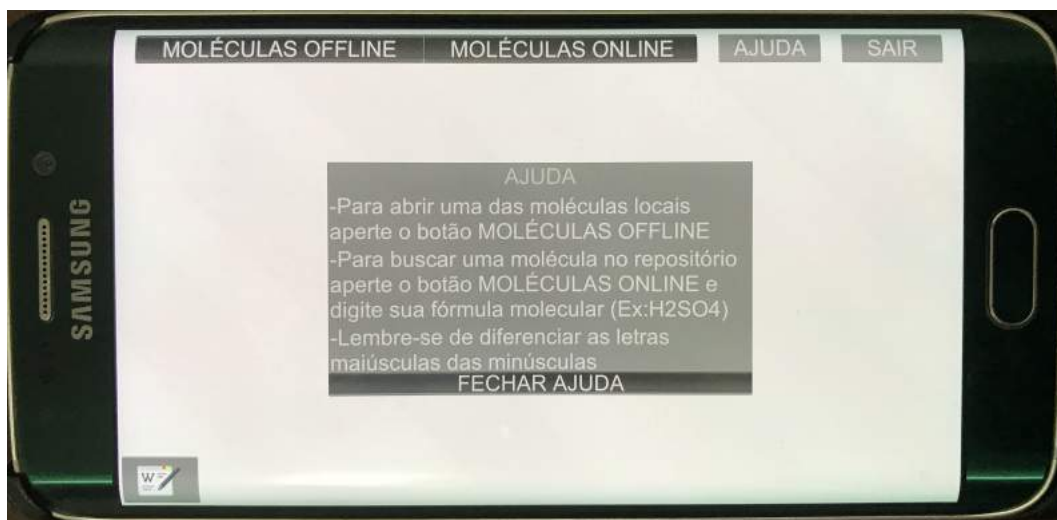
Figura 28 – Tela de Informações Complementares - Versão Final.



Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 29 apresenta o Módulo de Ajuda em execução.

Figura 29 – Tela de Ajuda - Versão Final.



Fonte: Elaborada pelo autor.



## 5 Conclusão

Com a versão final do Visual Chemistry concluída é possível observar que o projeto conseguiu cumprir seu objetivo geral, onde foi proposto o desenvolvimento de um aplicativo para visualização de estruturas moleculares tridimensionais, que possa auxiliar estudantes em disciplinas relacionadas a química.

A seguir são abordados os objetivos específicos definidos inicialmente no projeto, verificando se eles foram satisfeitos, e observando eventuais dificuldades e quais foram suas soluções.

-Definir os requisitos de software:

Os requisitos de software em si não foram especificados, mas estão associados aos módulos da aplicação, onde cada módulo implementa uma das funcionalidades necessárias do aplicativo.

-Escolher uma metodologia de desenvolvimento adequada:

Apesar de não ter sido escolhida uma metodologia de desenvolvimento específica foram utilizados alguns princípios do desenvolvimento ágil durante a execução do projeto, entre eles, a priorização do desenvolvimento do software do que realizar uma ampla documentação, e a criação de várias versões funcionais do software, para verificar se o desenvolvimento estava na direção correta para solucionar as necessidades do projeto.

Além disso, por se tratar de um projeto desenvolvido individualmente, não foi necessário um grande foco na documentação, o sistema de controle de versões permitiu um processo de desenvolvimento bem organizado, e deixou registrado todas as mudanças realizadas durante o projeto, com devidas anotações identificando quais funcionalidades foram implementadas, modificadas, ou retiradas.

-Planejar quais serão os módulos do programa:

Os módulos do programa que foram definidos inicialmente não eram capazes de solucionar todas as necessidades do aplicativo, por isso foi necessário a inclusão de novos módulos e sua reorganização. Após as adequações terem sido realizadas os módulos ficaram bem estruturados, e facilitaram o desenvolvimento do aplicativo.

-Planejar como será a interface com o usuário:

Foi realizado o planejamento de uma interface inicial que serviu para auxiliar o processo de desenvolvimento, e ajudou a definição de como os componentes gráficos ficariam organizados na tela, porém quando comparada com a interface final é possível notar que foram realizadas diversas alterações durante o desenvolvimento do projeto, apesar disso, essas

alterações não foram necessárias por problemas em si, na maioria dos casos elas foram feitas por questões da aparência do aplicativo.

-Desenvolver o módulo de pesquisa de moléculas:

O módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online) foi desenvolvido com sucesso, permitindo que o usuário realize a busca por uma molécula a partir de sua fórmula molecular.

-Desenvolver o módulo de acesso ao repositório:

Este módulo está entre os que foram modificados durante o desenvolvimento. Optou-se por juntá-lo ao módulo de Pesquisa de Moléculas (Moléculas Online), onde após o usuário ter realizado a busca por uma molécula é feito o acesso ao repositório para adquirir a molécula escolhida.

-Desenvolver o módulo de visualização tridimensional:

O Módulo de Visualização foi implementado com sucesso, ele é capaz de realizar a representação estrutural tridimensional das moléculas, e permite ao usuário as interações de rotação e *zoom*.

-Desenvolver os demais módulos definidos:

Os demais módulos também foram implementados com sucesso, entre eles, estão os módulos de Moléculas Offline, Informações Complementares, Ajuda, e Sair.

-Realizar testes para verificar o funcionamento do aplicativo:

Os testes foram realizados na ferramenta de desenvolvimento Unity3D sempre que a aplicação recebia alguma alteração. Quando necessário um protótipo do aplicativo era criado para que testes pudessem ser realizados também no *smartphone*. Após o término do desenvolvimento do aplicativo foram realizados testes mais extensos na aplicação, para verificar o funcionamento de todos os módulos e suas funcionalidades.

De maneira geral o projeto satisfaz os objetivos específicos inicialmente propostos, sendo que alguns deles sofreram algumas alterações necessárias para o desenvolvimento do aplicativo.

## 5.1 Trabalhos Futuros

Como trabalhos futuros pode-se considerar a criação de um sistema onde o usuário possa aplicar *tags* às moléculas, permitindo que ele possa categorizá-las como bem entender, e possibilitando que elas sejam acessadas diretamente, sem a necessidade de se realizar uma busca novamente. Além disso seria interessante a inclusão de novas moléculas ao repositório aumentando o número total de moléculas disponíveis.

# Referências

- BAGLIE, L. S. dos S.; NETO, M. P.; GUIMARÃES, M. de P.; BREGA, J. R. F. Distributed, immersive and multi-platform molecular visualization for chemistry learning. In: SPRINGER. *International Conference on Computational Science and Its Applications*. [S.l.], 2017. p. 569–584.
- BAPTISTA, M. M. Desenvolvimento e utilização de animações em 3d no ensino de química. [sn], 2013.
- BERMAN, H. M.; BATTISTUZ, T.; BHAT, T.; BLUHM, W. F.; BOURNE, P. E.; BURKHARDT, K.; FENG, Z.; GILLILAND, G. L.; IYPE, L.; JAIN, S. The protein data bank. *Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography*, International Union of Crystallography, v. 58, n. 6, p. 899–907, 2002.
- CHAVENT, M.; VANEL, A.; TEK, A.; LEVY, B.; ROBERT, S.; RAFFIN, B.; BAADEN, M. Gpu-accelerated atom and dynamic bond visualization using hyperballs: A unified algorithm for balls, sticks, and hyperboloids. *Journal of computational chemistry*, Wiley Online Library, v. 32, n. 13, p. 2924–2935, 2011.
- COUTINHO, A. *Era dos Smartphones: Um estudo Exploratório sobre o uso dos Smartphones no Brasil*. 2015.
- HINGORANI, K. K.; WOODARD, D.; ASKARI-DANESH, N. Exploring how smartphones supports students' lives. *Issues in Information Systems*, v. 13, n. 2, p. 33–40, 2012.
- JUARISTI, E.; STEFANI, H. A. *Introdução à Estereoquímica e à Análise Conformacional*. [S.l.]: Bookman Editora, 2012.
- JUNIOR, J. B. B. Do computador ao tablet: Vantagens pedagógicas na utilização de dispositivos móveis na educação/from computer to tablet: Advantages in the pedagogical use of mobile devices in education. *Revista educaonline*, v. 6, n. 1, p. 125–149, 2012.
- LV, Z.; TEK, A.; SILVA, F. D.; EMPEREUR-MOT, C.; CHAVENT, M.; BAADEN, M. Game on, science-how video game technology may help biologists tackle visualization challenges. *PloS one*, Public Library of Science, v. 8, n. 3, p. e57990, 2013.
- MONTEIRO, L. A internet como meio de comunicação: possibilidades e limitações. In: *Congresso Brasileiro de Comunicação*. [S.l.: s.n.], 2001. v. 24.
- POULSEN, T. Introduction to chemistry. Creative Commons, 2010.
- PRESSMAN, R. S. *Engenharia de software*. [S.l.]: Makron books Sao Paulo, 1995.