

Edital	EDITAL PIBi-UENF 01/2023		
Projeto	Reposicionamento de drogas como antivirais efetivos contra o SARS-CoV-2		
Plano de Trabalho	Aprimoramento da Experiência de Usuário (UX experience) no HTP SurflexDock		
Nome do estudante	Kaue dos Santos Siqueira		
Curso	Ciência da computação	Centro	CCT
Nome do orientador	Jorge Hernandez Fernandez/ Coorientador: João Luiz De Almeida Filho		
Laboratório	LQFPP	Centro	CBB

1. Introdução e justificativa:

O HTP SurflexDock (Almeida Filho et al., 2022) é um software que aumenta a taxa de sucesso de experimentos que utilizam da técnica de Structure-Based Virtual Screening (SBVS), técnica tradicionalmente utilizada na busca de inibidores específicos para uma estrutura de recetor durante os estágios preliminares no estudo e desenvolvimento de fármacos. O software funciona em duas etapas: Na primeira etapa, o protocolo de acoplamento do conjunto permitirá a simulação da flexibilidade implícita da estrutura do receptor. Em sua segunda etapa, uma etapa de pós-processamento permitirá que o usuário reavalie compostos promissores expandindo a busca do espaço conformacional ou estimando a energia livre de ligação através do protocolo MM/PBSA (Almeida Filho et al., 2022). O HTP SurflexDock é um produto acadêmico desenvolvido 100% dentro do CBB-UENF e é utilizado pelos alunos de pós-graduação, este software já apontou resultados promissores no reposicionamento de drogas no combate à pandemia do SARS-Cov 2 (da Rocha Mattos et al., 2023).

Entretanto, o HTP SurflexDock apresenta certas redundâncias e deficiências em sua interface gráfica, essas que acabam por prejudicar a experiência do usuário (UX experience), causando com que alguns usuários possuem grande dificuldade ao utilizar o software ou que deparam com informações que não são necessárias no momento, causando uma deficiência de fluidez e praticidade para o usuário final. Desta forma, é necessário aprimorar o seu desenvolvimento “front-end”. Uma boa experiência de usuário irá gerar uma maior satisfação por parte dos usuários, uma melhor curva de aprendizado destinada fundamentalmente aos alunos de pós graduação da matéria “Biologia Computacional de interações proteicas” (PGBB-PGBV). Melhorando a facilidade e praticidade do uso do software, ele poderá alcançar seu real usuário final, os cientistas da área. (MARTINELLI et al., 2022)

2. Objetivos:

Atualizar a interface gráfica do HTP SurflexDock através do Framework Django em conjunto com React

2.1 Objetivos específicos:

- 1- Criação de uma periodicidade de horário no laboratório LQFPP
- 2- Implementação de técnicas de templates com o framework Django
- 3- Integração do Framework com a biblioteca React

4- Criação de protótipo visando uma padronização visual

5- Implementar a nova área de usuário no HTP

3. Metodologia:

O Django é um framework web escrito em python que é utilizado no desenvolvimento do Htp SurflexDock (DE BRITO et al., 2022). Naturalmente, este framework possui o seu foco maior no desenvolvimento back-end, porém ofertando algumas funcionalidades front-end como os templates. Como forma de aperfeiçoar este desenvolvimento front-end com o Django, podemos nos aproveitar de sua compatibilidade com algumas outras bibliotecas, e utilizá-la em conjunto com o React, biblioteca JavaScript desenvolvida pelo Facebook, especializada em programação front-end de alto nível. O conjunto de ambos, framework e biblioteca, tornará o aperfeiçoamento da parte visível do software, logo, melhorando a experiência do usuário. Visando uma padronização em sua interface gráfica e a criação de uma área para o usuário, para o preenchimento de dados, o software atenderá suas necessidades específicas de forma mais fluida.

4. Resultados esperados:

Com uma experiência de usuário aprimorada, é esperado que a curva de aprendizado dos estudantes de pós-graduação da matéria “Biologia Computacional de interações proteicas” melhore, e esses alunos consigam manusear o HTP SurflexDock de maneira fácil e simplificada, sem uma supervisão invasiva, criando certa independência ao usá-lo. Visamos a satisfação dos usuários proporcionando uma melhor experiência em sua utilização, acarretando em um maior engajamento e ampliando o número de usuários.

5. Cronograma:

Metas 2023-2024	Set/Out	Nov/Set	Jan/Fev	Mar/Abr	Mai/Jun	Jul/Ag
Implementação da biblioteca React e o framework Django	X	X				
Correção menores na página atual		X			X	X
Criação dos primeiros protótipos			X	X	X	
Confeção da área de usuário			X	X	X	X
Correções de usuários especialistas				X	X	X
Elaboração de relatório						X

6. Referências bibliográficas:

ALMEIDA FILHO, João L. de; FERNANDEZ, Jorge H.. HTP SurflexDock: a web tool for Structure-Based Virtual Screening analysis based on the Ensemble Docking protocol. *In: BRAZILIAN E-SCIENCE WORKSHOP (BRESOI)*, 16. , 2022, Niterói. Anais [...]. Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação, 2022 . p. 81-88. ISSN 2763-8774. DOI: <https://doi.org/10.5753/bresoi.2022.223295>.

da Rocha Matos, A., Caetano, B. C., de Almeida Filho, J. L., de Carvalho Martins, J. S. C., de Oliveira, M. G. P., das Chagas Sousa, T., Horta, M. A. P., Siqueira, M. M., & Fernandez, J. H. (2022). Identification of Hypericin as a Candidate Repurposed Therapeutic Agent for COVID-19 and Its Potential Anti-SARS-CoV-2 Activity. *Frontiers in Microbiology*, 13.828984. DOI: [10.3389/fmicb.2022.828984](https://doi.org/10.3389/fmicb.2022.828984)

MARTINELLI, Suéllen; LOPES, Larissa; ZAINA, Luciana. UX research in the software industry: an investigation of long-term UX practices. *In: SIMPÓSIO BRASILEIRO SOBRE FATORES HUMANOS EM SISTEMAS COMPUTACIONAIS (IHC)*, 21. , 2022, Diamantina.

DE BRITO, Rodrigo; DE CARVALHO, Carlos André Batista. Análise de segurança em aplicações Web construídas a partir dos frameworks Django, Express e Flask. *In: WORKSHOP DE TRABALHOS DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E DE GRADUAÇÃO - SIMPÓSIO BRASILEIRO DE SEGURANÇA DA INFORMAÇÃO E DE SISTEMAS COMPUTACIONAIS (SBSEG)*, 22. , 2022, Santa Maria. Anais [...]. Porto Alegre: Sociedade Brasileira de Computação, 2022 . p. 171-184.