

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

LUIS ANTONIO LEITE FRANCISCO DA COSTA

**Estudo da visualização imersiva através do
Head-Mounted Display e interfaces 3D para
manipulação de dados**

Orientador: Profa. Dra. Luciana Nedel

Porto Alegre
2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitora: 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 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. O apoio de um ambiente virtual em 3D potencialmente auxilia na compreensão e manipulação de dados que, em outro caso, poderiam demandar mais esforço para serem interpretados de forma convencional. O objetivo do seguinte trabalho é explorar maneiras de visualizar dados em ambientes virtuais através do uso de equipamentos de realidade virtual como o Head-Mounted Display e interfaces 3D e avaliar seus benefícios.

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

ABSTRACT

Immersive data visualization uses virtual reality devices that enable the use 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. The backup of a virtual enviornment in 3D potencially helps on the understanding of the data manipulation that, in other case, would demand too much effort to be interpreted in a convencional way. The goal of the following work is to explore the ways of visualize data in virtual environment throught the use of virtual reality devices such as the Head-Mounted Display and 3D interfaces.

Keywords:

.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 CAVE (Reality Cube) exibindo uma molécula utilizando o VMD.	14
Figura 1.2 Diferentes abordagens de visualização no PyMOL.....	15
Figura 1.3 Estrutura da molécula do Complexo Binário de Caseína (2CSN) repre- sentada na interface da UnityMol, com resolução de 800X600.	16
Figura 2.1 Representação visual de um grande grafo contendo 15606 vértices e 45878 arestas.....	23
Figura 3.1 Ambiente básico do programa desenvolvido na Unity, em que podem ser vistas a camera do personagem de primeira pessoa e as mãos virtuais.....	27
Figura 3.2 Oculus Rift e sensor de posicionamento.....	28
Figura 3.3 Controles da Hydra Razer juntos da sua base de rastreamento.	29
Figura 4.1 Tipos de setups para as diferentes abordagens.	42
Figura 4.2 Disposição dos aparelhos no usuário.....	43
Figura 4.3 Molécula do DNA.....	44
Figura 4.4 Molécula do DNA renderizada pelo programa.....	45
Figura 4.5 Molécula da GFP renderizada pelo programa.	46
Figura 4.6 Molécula da Hemoglobina renderizada pelo programa.....	47
Figura 4.7 Mapeamento dos comandos de interação da Razer Hydra.	48
Figura 4.8 Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre a nível do conforto da abordagem não-imersiva.....	55
Figura 4.9 Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre a nível do conforto da abordagem imersiva.....	56

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 Ordem de realização dos testes para cada participante.....	50
Tabela 4.2 Valores comparativos entre os tempos totais de execução de todos os testes com as duas abordagens.....	52
Tabela 4.3 Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 1 e 2 com as duas abordagens.....	52
Tabela 4.4 Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.....	53
Tabela 4.5 Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.....	53
Tabela 4.6 Valores comparativos entre a quantidade de erros total de todos os testes com as duas abordagens.....	54
Tabela 4.7 Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 1 e 2 com as duas abordagens.....	54
Tabela 4.8 Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.....	54
Tabela 4.9 Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 5 e 6 com as duas abordagens.....	55
Tabela 4.10 Valores comparativos entre os níveis de conforto informados pelos usuários após realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.	56
Tabela 4.11 Valores comparativos entre o total de translações em graus com a cabeça feitas pelos usuários ao realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.	57
Tabela 4.12 Valores comparativos entre o total de rotações em graus com a cabeça feitas pelos usuários ao realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.....	57
Tabela 5.1 Dados do programa.....	60

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

VR Virtual Reality

FOV Field of View

M Mean

SD Standart Deviation

GLSL OpenGL Shading Language

Cg C for Graphics

MDS Multidimensional Scaling

KDViz Knowledge-domain Visualization

API Application Programming Interface

IUPAC International Union of Pure and Applied Chemistry

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	12
1.1 Motivação.....	12
1.2 Trabalhos relacionados.....	13
1.2.1 VMD	13
1.2.2 PyMOL	14
1.2.3 UnityMol.....	15
1.3 Questões do Estudo.....	16
1.4 Contribuições.....	18
1.5 Estrutura do trabalho.....	18
2 DESENVOLVIMENTO E AVALIAÇÃO DE AMBIENTES IMERSIVOS	20
2.1 Principais Problemas da Visualização Imersiva	20
2.1.1 Usabilidade	20
2.1.2 Conhecimento prévio	21
2.1.3 Medidas de qualidade	22
2.1.4 Escalabilidade	22
2.1.5 Visualização de domínio de conhecimento.....	23
2.2 Solução proposta	24
3 CONSTRUÇÃO DE UM AMBIENTE DE INTERAÇÃO.....	26
3.1 Unity	26
3.1.1 Configuração da Unity	26
3.2 Oculus Rift.....	27
3.2.1 Configuração do Oculus Rift	28
3.3 Razer Hydra	28
3.3.1 Configuração da Razer Hydra.....	29
3.4 Tipos de dados e informações	30
3.4.1 Arquivos PDB - Protein Data Bank	30
3.4.2 MeshLab	32
3.4.3 Nuvem de pontos	33
3.4.3.1 Obstáculos do formato OBJ	33
3.4.3.2 Formato OFF.....	35
3.4.3.3 Algoritmo de conversão e representação da nuvem.....	35
3.5 Interação	36
3.5.1 Movimentação.....	37
3.5.2 Seleção	37
3.5.3 Agarrar	38
3.5.4 Giro	38
3.5.5 Visibilidade	38
3.5.6 Aumentar e Diminuir	38
3.5.7 Desfazer Alterações	39
4 EXPERIMENTO: RAPIDEZ, ERROS E CONFORTO.....	40
4.1 Hipóteses	40
4.2 Materiais e métodos	41
4.2.1 Participantes	41
4.2.2 Aparelhos	42
4.2.3 Moléculas de interação	43
4.2.3.1 Lisina.....	43
4.2.3.2 DNA	44
4.2.3.3 Proteína Verde Fluorescente	45

4.2.3.4 Hemoglobina.....	46
4.2.4 Método	47
4.2.4.1 Instruções iniciais e tutorial	47
4.2.4.2 Testes com o DNA	48
4.2.4.3 Testes com a GFP.....	49
4.2.4.4 Testes com a Hemoglobina	49
4.2.5 Procedimento	50
4.3 Resultados.....	51
4.3.1 Rapidez	52
4.3.2 Quantidade de erros	53
4.3.3 Conforto	55
4.3.4 Outros Resultados	56
4.4 Discussão.....	58
5 CONCLUSÃO	59
5.1 Resumo das descobertas	59
5.2 Restrições tecnológicas	60
5.3 Trabalho futuro	61
REFERÊNCIAS.....	62
APÊNDICE A — TERMO DE CONSENTIMENTO UTILIZADO PARA OS EXPERIMENTOS	64
APÊNDICE B — QUESTIONÁRIO PRE-EXPERIMENTO	65
APÊNDICE C — QUESTIONÁRIO POS-EXPERIMENTO	66
APÊNDICE D — INSTRUÇÕES PARA A REALIZAÇÃO DOS TESTES	67

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho descreve o estudo referente à construção e à avaliação dos benefícios de um ambiente imersivo para realizar a visualização e manipulação de diferentes tipos de dados e entidades.

1.1 Motivação

A visualização imersiva é uma área emergente da Computação Gráfica 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.

De acordo com Steed et al. (2016), dado o fato de 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 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 interface 3D, para explorar seus dados de forma intuitiva e proporcionando uma qualidade superior de compreensão analítica.

Para se realizar um estudo de visualização imersiva, primeiramente é necessário decidir qual será o tipo de estrutura alvo da interação e que será o foco de desenvolvimento do ambiente imersivo. Para tanto, foram escolhidas as moléculas, um grupo de átomos, iguais ou diferentes, que 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.

Existem diversos programas que possibilitam aos 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 Trabalhos relacionados

A seguir são apresentados alguns trabalhos desenvolvidos que abordam a questão de interação com estruturas moleculares digitais 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 VMD

VMD, tambem conhecido como Visual Molecular Dynamics, é um programa muito conhecido de visualizacao para exibir, animar e analisar grandes sistemas biomoleculares utilizando graficos 3D e um script de runtime. 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 de tornar o programa imersivo, o Centro de Alta Performance de Computacao (HPC) 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, ate 5 pessoas podem ser imersas em um mundo virtual em 3D e interagir com ele.

O Reality Cube (Cubo de Realidade) 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 experienciem a sensação de estarem completamente imersivos dentro do ambiente virtual. Dentro do cubo, todos os usuários utilizam óculos de obturação para visualizar o ambiente de forma clara (University of Groningen - Center of Information Technology, 2015).

Até o momento, o único tipo de interação existente é realizada através de controles wireless, mas os desenvolvedores estão trabalhando em desenvolver uma interação por gestos em um futuro próximo.

Figura 1.1: CAVE (Reality Cube) exibindo uma molécula utilizando o VMD.



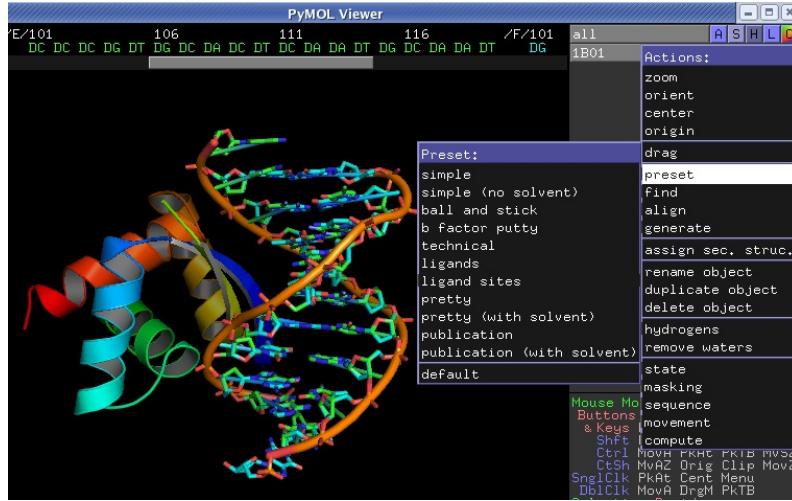
1.2.2 PyMOL

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).

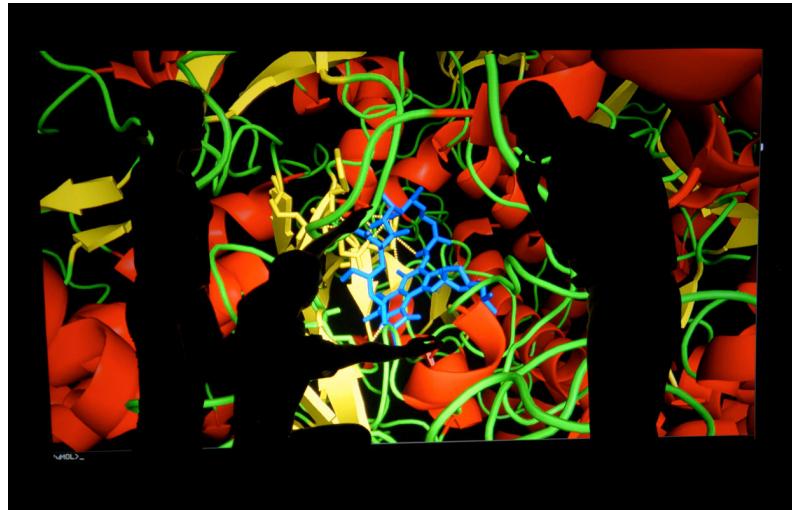
O programa é uma das poucas ferramentas open-source de visualização disponíveis para uso em biologia estrutural. Como o próprio nome diz, a aplicação extende e é extensível pela linguagem de programação Python. Ele também utiliza a OpenGL Extension Wrangler Library (GLEW) e a Freeglut, além de Tk para os widgets da GUI. O PyMOL pode ser utilizado normalmente em máquinas desktop e atualmente, a empresa Virtalis está trabalhando em uma abordagem imersiva para o PyMOL utilizando display 3D de grandes dimensões e óculos de obturação para seus usuários, conforme a Figura 1.2 (b), com resultados promissores (Virtalis Dev Team, 2015).

Figura 1.2: Diferentes abordagens de visualização no PyMOL.

(a) Estrutura da molécula de DNA apresentada na interface do PyMOL



(b) Ambiente imersivo desenvolvido pela Virtualis utilizando PyMOL.



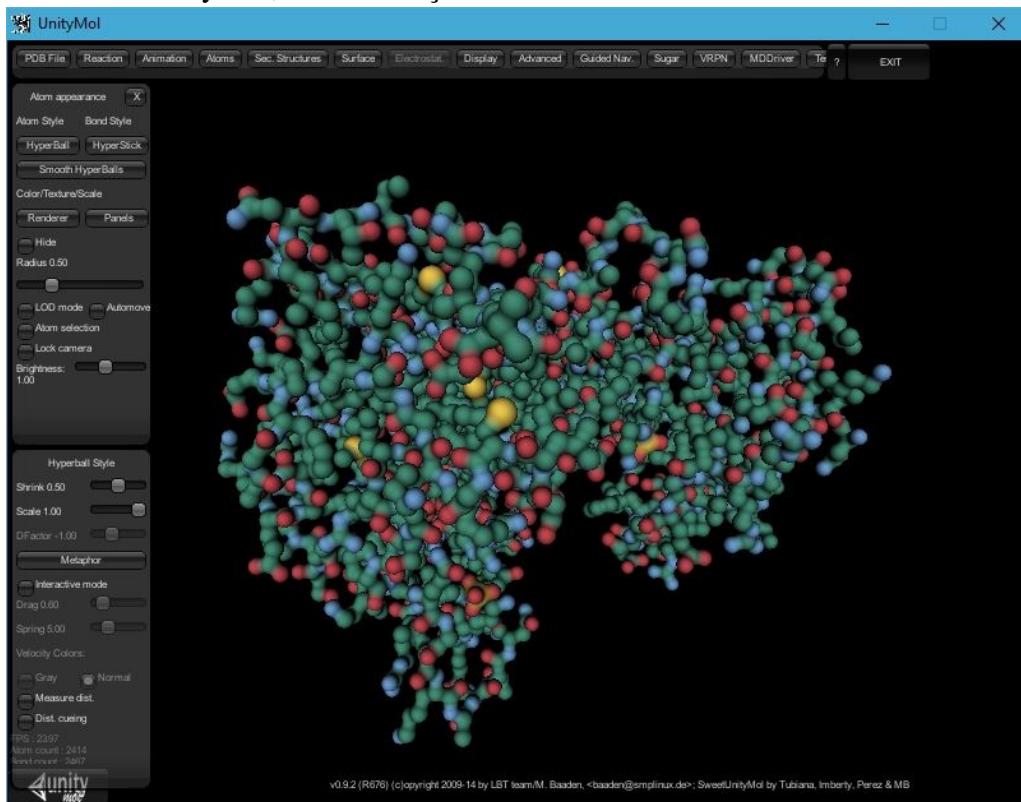
1.2.3 UnityMol

A UnityMol é um editor molecular, visualizador e plataforma de prototipação codificado 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, 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 meshes 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 Vive sendo testados atualmente, (DOUTRELIGNE et al., 2014).

Figura 1.3: Estrutura da molécula do Complexo Binário de Caseína (2CSN) representada na interface da UnityMol, com resolução de 800X600.



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:

1. Quais são os benefícios de um ambiente imersivo em relação ao tipo de abordagem 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 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:

(a) 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 anti-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, podem permitir a realização de tarefas de interação de forma mais rápida.

(b) Abordagens que utilizam a 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. A proximidade da realidade imersiva com uma experiência mais natural e intuitiva também induz a menos falhas e aumenta a curva de aprendizado do usuário, segundo (STEED et al., 2016) que poderiam ocorrer ao realizar tarefas de interação, diminuindo o nível de abstração ao ampliar o ambiente do usuário de uma tela bidimensional para uma experiência 3D.

(c) Abordagens que utilizam a visualização imersiva podem ser mais confor-

táveis na realização de tarefas de interação?

Uma de nossas principais preocupações na construção de um ambiente de visualização imersiva é no 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 seram posteriormente apresentadas nesse estudo, as maiores contribuicoes desse trabalho são as seguintes:

- Apresentar os principais problemas relacionados ao campo da 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 interface 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:

1. Desenvolvimento e Avaliação de Ambientes Imersivos

É apresentada uma breve explicação sobre a visualização imersiva, bem como um background de seus principais obstáculos tanto em termos de desenvolvimento quanto de avaliação. Além disso, uma solução é proposta para a criação de um ambiente imersivo com foco na manipulação de estruturas moleculares e sua posterior avaliação através de testes com usuários.

2. Construção de um ambiente de interação

O capítulo consiste em 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.

3. Experimento: Rapidez, erros e nível de conforto

Nesse capítulo 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.

2 DESENVOLVIMENTO E AVALIAÇÃO DE AMBIENTES IMERSIVOS

2.1 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). Tal seleção foi feita levando em consideração o quão pertinentes cada aspecto seria para embasar esse estudo.

2.1.1 Usabilidade

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 porque o ritmo de crescimento da visualização de informações não cresce no mesmo compasso que os estudos de usabilidade e avaliações empíricas. A complexidade do processo analítico envolvido na maior parte dos sistemas de visualização de informação é o maior obstáculo a ser ultrapassado. Os usuários finais não têm uma compreensão de como os dados brutos podem ser transformados em, por exemplo, imagens coloridas ou objetos virtuais que eles são capazes de interagir.

A falta de ferramentas de baixo custo, prontas para o uso e sistemas de visualização de informação reconfiguráveis impacta diretamente em prejuízo do desenvolvimento de estudos empíricos de qualidade. Além disso, as metodologias de estudo são limitadas no sentido que não visam os detalhes específicos que precisam ser avaliados na visualização de informação.

O maior gargalo na razão pela pouca quantidade de estudos de usabilidade nessa área seja que a visualização de informação de forma imersiva é uma ferramenta exploratória que permite ao usuário interagir com o conteúdo visualizado e compreender seu

significado. Esse processo de compreensão depende em grande parte do usuário, portanto, qualquer estudo de usabilidade deve levar em conta o que o usuário comprehende do padrão de informação que lhe é apresentado. E é justamente esse ponto que leva à abordagem do próximo problema.

2.1.2 Conhecimento prévio

O foco desse ponto é que, como um veículo para comunicar informação abstrata, 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 (IHC).

Em geral, os usuários necessitam de dois tipos de conhecimentos para entender a mensagem transmitida através da visualização imersiva de informações:

- 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 devem levar em conta o nível de conhecimento prévio necessário para compreender a informação visualizada. A questão do conhecimento prévio pode ser estendida também como uma necessidade de sistemas de visualização de informação que se adaptem em relação ao conhecimento de seus usuários.

Ao se desenvolver uma solução para o primeiro problema mencionado anteriormente (a usabilidade), podemos diminuir a dependência do primeiro tipo de conhecimento por parte do usuário. Uma vez que aumentamos o nível de usabilidade do sistema tornamos de fácil manuseio a ferramenta, mesmo para aqueles que não sejam familiarizados com diferentes equipamentos e interfaces de manipulação em 3D. No entanto, essa solução não dispensa a necessidade de um domínio de conhecimento.

2.1.3 Medidas de qualidade

Estabelecer medidas intrínsecas de qualidade é crucial para o desenvolvimento da visualização imersiva. Apesar disso, até recentemente, a falta dessas medidas não era vista como tão preocupante para a área. Isso se deve à tradicional prioridade que o campo dá a trabalhos originais e inovadores.

No entanto, a falta de medidas de qualidade quantificáveis mina diretamente os avanços, avaliação e seleção de ferramentas de visualização imersiva. Uma métrica de qualidade intrínseca iria simplificar o desenvolvimento e avaliação de diversos algoritmos. A característica intrínseca é necessária para que o pesquisador possa derivar uma métrica de qualidade mesmo na ausência de referências externas. A garantia de tais medidas de qualidade vão permitir que os estudos de usabilidade possam avaliar a consistência entre a melhor solução baseada nas capacidades do usuário e uma solução baseada em medidas intrínsecas.

Tomemos como exemplo desse tipo de métrica o nível de estresse usado por algoritmos de escala multidimensional (MDS). O objetivo do MDS é projetar dados de grandes dimensões para duas ou três dimensões enquanto minimiza a distorção total. Quanto menor o nível de estresse, melhor será a solução do MDS.

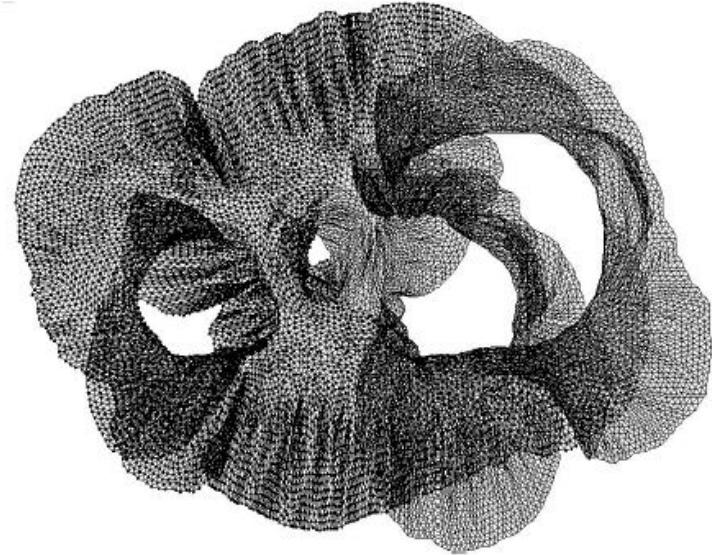
Apesar dessa questão ser particularmente desafiadora, o seu potencial é altamente recompensador quando analisada com cuidado, pois métricas de qualidade intrínsecas podem responder questões fundamentais da área como com qual extensão um design de visualização de informação representa os dados fiel e eficientemente, e com qual extensão essa representação preserva as propriedades intrínsecas dos dados convertidos?

2.1.4 Escalabilidade

O problema da escalabilidade é uma questão longa e duradoura na área da visualização imersiva. Tomando a figura como exemplo, ela mostra um grande grafo desenhado por um algoritmo de layouts rápidos. Em questão de alguns segundos foi desenhado um grafo contendo 15.600 vértices e 45.878 arestas. No entanto, tal algoritmo estava rodando sobre um supercomputador, uma máquina que não é o alvo da área de visualização de informação. Isso porque a programação paralela e outras métodos computacionais de otimização e alta performances não são utilizados na visualização imersiva tanto quanto na área de visualização científica. A escalabilidade deve ser estudada além do seu escopo

tradicional de lidar com os níveis de hardware e de programas inteligentes e de alta performance, mas também poder lidar com os usuários em si.

Figura 2.1: Representação visual de um grande grafo contendo 15606 vértices e 45878 arestas.



Sendo assim, a escalidade 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. Além disso, é preciso levar em conta a questão de confortabilidade quanto se lida com Head-Mounted Displays como um dispositivo de visualização imersiva. O ambiente e os dados precisam ser ajustados de forma a garantir uma experiência confortável ao usuário, já que o dispositivo permite um nível de imersão maior quando comparado a outras abordagens não-imersivas.

2.1.5 Visualização de domínio de conhecimento

O desafio da visualização do domínio de conhecimento (KDViz) é um problema de origem holística. Contendo elementos dos problemas anteriormente citados, ele é o mais complicado de elucidar. Primeiramente é preciso deixar clara a diferença entre conhecimento e informação, que pode ser analisada em termos do papel da construção social. Conhecimento é o resultado da construção social, embora a informação também seja, mas em uma extensão muito menos extensiva. Como exemplo podemos imaginar que, o fato de um artigo falar sobre a extinção em massa é informação, ao passo que o fato de o artigo

representar o ápice dos trabalhos em pesquisa sobre extinções em massa é conhecimento porque o valor, ou status do artigo é estabelecido ou endorsado um processo de construção social. O KDViz foca em transmitir estruturas de informação que possuam tais valores.

A grande vantagem por trás da visualização imersiva (e, mais especificamente, da visualização de informação) é a possibilidade de exibir quantidades de informação que estão além da capacidade de uma visão textual. Além do mais, interagir com a visualização da informação pode ser mais do que apenas selecionar, retirar e compreender itens da informação. Todo o corpo do domínio de conhecimento está sujeito ao renderizado do KDViz. Devido ao problema do KDViz ser rico em detalhes, grande em escala, extensivo em duração e amplo em escopo, qualquer solução eficiente dele pode ser generalizada para uma variada gama de áreas além da visualização imersiva.

2.2 Solução proposta

Dos trabalhos relacionados aos problemas abordados nesse estudo, uma forma de construir um ambiente de visualizaçãoo imersiva e avaliar seus benefícios em relação à abordagens convencionalmente não-imersivas seria utilizar a interface grafica da UnityMol. Essa escolha se deve ao fato de o programa ter sido desenvolvido totalmente sobre a engine grafica da Unity3D, a qual é compativel com os equipamentos disponiveis para esse estudo: o Oculus Rift para a visualização e a Razer Hydra para a interação - ambos detalhados nas seções posteriores.

Sendo assim, a opção seria adaptar a usabilidade do Oculus Rift e da Razer Hydra 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 do equipamento - a opção viável é criar um ambiente do a partir do zero na Unity, levando em conta questões como usabilidade e escabalabilidade a fim de desenvolver um ambiente que proporcione mais benefícios em relação à 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

mento 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 informação. Posteriormente serão detalhadas as restrições tecnológicas na criação desse ambiente.

As devidas medidas de qualidades 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 CONSTRUÇÃO DE UM AMBIENTE DE INTERAÇÃO

3.1 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 Microsoft Windows e consoles Xbox, OpenGL para Mac, Windows e Linux, OpenGL ES no Android e iOS e outras APIs similares. Todo 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 hóspedeiro do ambiente de virtualização é a direta e fácil compatibilidade com o próximo equipamento que iremos discutir, o Oculus Rift. Desde o lançamento do dispositivo, o programa foi atualizado de forma a garantir a total compatibilidade do Oculus com qualquer projeto, bastando para isso habilitar a opção de "*Virtual Reality Supported*" nas configurações do player do projeto.

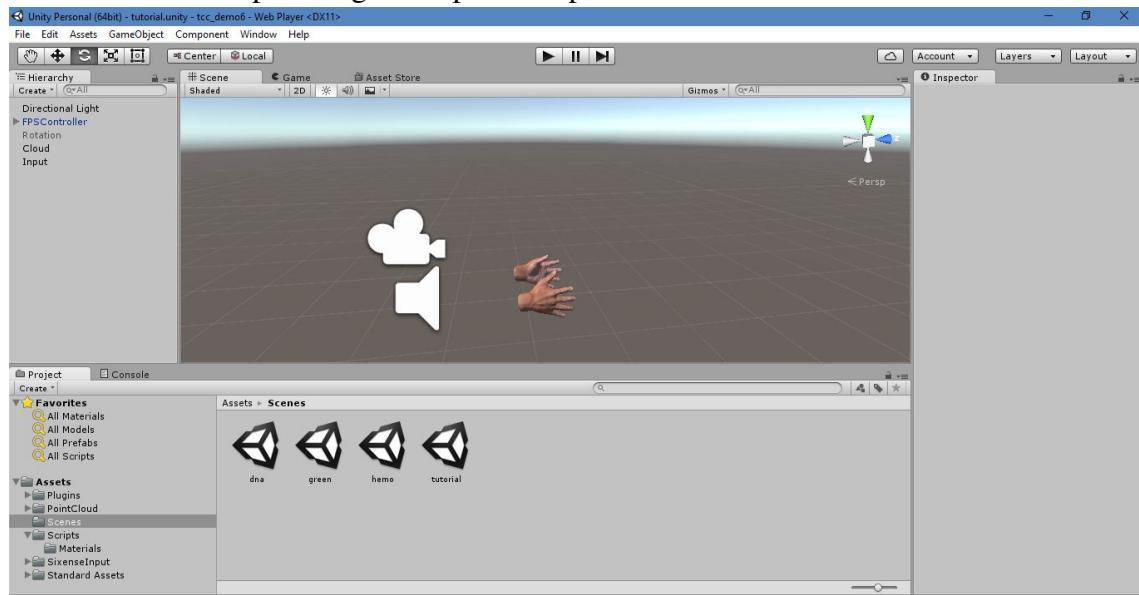
3.1.1 Configuração da Unity

Para o personagem de primeira pessoa que serviria como representação virtual do usuário e base para a configuração do Oculus Rift e da Razer Hydra, 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 os botões analógicos do controle esquerdo da Razer Hydra. 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-immersiva) e do Oculus Rift (quando utilizando 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 Razer Hydra são posicionadas na frente do personagem, de forma a emu-

lar a posição natural das mãos em 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 camera do personagem de primeira pessoa e as mãos virtuais.



3.2 Oculus Rift

O Oculus Rift é um head-mounted display desenvolvido e fabricado pela empresa Oculus VR. Esse dispositivo de Realidade Virtual foi um dos primeiros a ser desenvolvido tanto para uso comercial quanto para privado. Todo o estudo foi realizado com a versão mais atual disponível no mercado para consumidores, lançada antes em março de 2016. Ela possui uma resolução de 1080X1200 em ambas as lentes do visor em OLED, com uma taxa de refresh de 90Hz e um ângulo de visão de 110 graus. O sistema de rastreamento de posição do aparelho chamado "Constellation" é realizado 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 pelo quarto. 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.



3.2.1 Configuração do Oculus Rift

Graças à direta compatibilidade do dispositivo com a versão 5.4.5 da Unity, não é necessária nenhuma 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.

3.3 Razer Hydra

Ao contrário de outros head-mounted displays, como o HTC Vive que possui controles para simular os movimentos das mãos, a versão atual do Oculus Rift não possui tais acessórios (que 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 desenvol-

vido 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 1 mm e 1°, 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 games 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.



3.3.1 Configuração da Razer Hydra

Para configurar a Razer Hydra corretamente para o funcionamento dentro do ambiente da Unity, foi utilizado o plugin Sixense, 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.

Devido ao fato de tanto o Oculus Rift quanto a Razer Hydra não possuírem um sensor de giroscópio que possa acompanhar o giro do corpo do usuário dos equipamentos, faze-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 personagem 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 111 graus, se espera que o usuário gire o torso junto da cabeça. ou seja, no momento em que o usuário realiza um giro natural com o torso e cabeça, as mãos irão acompanhar o seu corpo.

3.4 Tipos de dados e informações

Depois de estabelecida 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.

3.4.1 Arquivos PDB - Protein Data Bank

O formato de arquivo PDB (Protein Data Bank) é um arquivo de texto formattado de forma 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. Esse formato de arquivo também mantém os dados de macromoléculas biológicas no novo formato mmCIF.

A motivação por trás da criação desse formato de estudo em 1976 foi desenvolver um tipo de arquivo que fosse humanamente legível que permitisse aos pesquisadores trocar informações de coordenadas proteicas através de um sistema de banco de dados. O formato original era limitado a 80 colunas, que eram baseadas na largura dos antigos cartões perfurados de computadores que antigamente eram utilizados. Sofrendo diversas mo-

dificações e revisões através dos anos, a versão atual do formato PDB é 3.20 (Worldwide PDB Foundation, 2003).

```

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 peptídos (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, fator de temperatura e o nome do elemento químico, respectivamente.
- **HETATM:** descreve as coordenadas dos hetero-ótomos, ou seja, dos átomos que não fazem parte da molécula e são dispensáveis no nosso estudo.

3.4.2 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 (mesh) no ambiente. O MeshLab é um sistema de software avançado de meshes 3D orientado para a manipulação e processamento de grandes conjuntos de meshes que possibilita uma gama de ferramentas para edição, limpeza, inspeção, renderização e conversão em outros tipos de estruturas gráficas. O programa foi desenvolvido pelos centro de pesquisa do Istituto 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 forma visualizados de forma que os átomos fossem representados por esferas, o que corresponde à visão natural desse tipo de estrutura molecular. Na seção seguinte será detalhada o tipo de conversão necessária de ser realizada no MeshLab a fim de tornar as moléculas utilizáveis no ambiente desenvolvido na Unity.

3.4.3 Nuvem de pontos

3.4.3.1 Obstáculos do formato *OBJ*

Os tipos de formatos de meshes (objetos) que normalmente são utilizados na Unity é o Wavefront.obj. Esse formato é uma definição geométrica desenvolvida 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. Ele se trata de um simples arquivo que representa somente a geometria 3D do objeto, respectivamente a posição de cada vertex, 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 em ordem anti-horária, 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 são descritas abaixo:

- 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 sao 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 ...

```

No entanto, existem dois problemas ao tentar converter um mesh 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, pq 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 dos meshes. 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 e seleção 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 converter ela para o formato OFF, que será explicado a seguir.

3.4.3.2 Formato OFF

O formato OFF (Object File Format) é um dos padrões mais simples para a descrição dos polígonos que compõe um 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 molécula 123d, conforme representada abaixo:

- 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 ...

```

3.4.3.3 Algoritmo de conversão e representação da nuvem

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, 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 Angstrons 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 no usuário não pode atravessá-las.

3.5 Interação

Para a 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 de primeira pessoa, utilizará o mouse (para a abordagem não-imersiva) ou o Oculus Rift (para a abordagem imersiva) para poder 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 uma das interações que o usuário pode re-

alizar com qualquer estrutura molecular representada no programa utilizando o Oculus Rift e Razer Hydra.

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.

3.5.1 Movimentação

Para se mover pelo cenário, 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 e, dado um ângulo de sua visao (definido pelo mouse ou pelo Oculus Rift), pode se mover nessa direção relativa também.

3.5.2 Seleção

Imitando o movimento natural, o usuário pode apontar e selecionar átomos da molécula. Para tornar a direção de seleção o mais preciso possível e diminuir a quantidade de erros, primeiramente foi definida que a posição padrão das mãos virtuais da Razer Hydra seria com a animação 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 criadas retas coloridas que acompanham a ponta dos dedos indicadores e funcionam como uma "mira". O primeiro objeto que essa reta atingir será o objeto selecionado pelo usuário quando ele utilizar o botão apropriado da Razer Hydra.

Sendo assim, o usuário pode utilizar o controle esquerdo ou direito da Hydra e, pressionando o botão número 2 ou botão número 1, respectivamente, os atomos 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 deselecionado, retornando a sua cor original. Esse tipo de ação de deselecionar átomos será posteriormente contabilizada como um erro por parte do usuário durante os experimentos.

3.5.3 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 poder 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.

3.5.4 Giro

Apesar de possuir movimento livre em todos os ângulos e direções 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 fim de visualizá-la de forma diferente, para partes dela que não estejam visíveis através do seu ponto de vista. Para isso, ele pode utilizar o giro do botão analógico do controle direito da Hydra para girar a molécula em diferentes ângulos, até que encontre a posição desejável para sua visualização.

3.5.5 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 que 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, ficaram destacados na molécula.

3.5.6 Aumentar e Diminuir

Para permitir que o usuário possa visualizar a estrutura molecular de formas diferentes é possível aumentar ou diminuir 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.

3.5.7 Desfazer Alterações

A fim de desfazer qualquer tipo de alteração que o usuário tenha realizado na estrutura molecular como seleções incorretas, aumentos ou diminuições de átomos, mudanças de posicionamento da molécula ou de átomos que foram agarrados, é possível pressionar 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 da estrutura molecular.

4 EXPERIMENTO: RAPIDEZ, ERROS E CONFORTO

Nesse experimento, será investigado o quanto rápida, com menos erros e confortável uma abordagem imersiva pode ser em relação a uma não-imersiva.

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 nível mais específico, o experimento testa as seguintes hipóteses:

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

Ambientes virtuais imersivos criam maiores graus de liberdade de movimentos ao usuário do que o uso de mouse e teclado, além de aumentar 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 com imersão através da utilização de 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 com imersão através da utilização de um Head-Mounted Display oferece um nível de conforto maior que utilizando uma abordagem não-imersiva.**

Ambientes virtuais imersivos criam maiores graus de liberdade de movimentos ao usuário do que o uso de mouse e teclado, além de aumentar o campo de visão,

possibilitando a análise de uma quantidade maior de dados partindo de um mesmo posicionamento do usuário.

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). A maior parte dos participantes estava realizando ou havia terminado seus estudos de pós-graduação.

Os indivíduos eram 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 à 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, 18,2% afirmaram utilizar VMD; 9,1% utilizam PyMOL; 45,5% afirmaram utilizar outros tipos de programas e os 27,3% restantes afirmaram não utilizar nenhum tipo de programa. Dos participantes que disseram utilizar outro tipo de programa dos listados para a visualização de moléculas, 18,2% utilizam o ChemDraw; 9,1% utilizam o ChemSketch; 9,1% utilizam Otterbein e os 9,1 restante utilizam o Web-

MOL.

4.2.2 Aparelhos

As variáveis independentes são o Head-Mounted Display e as tarefas que serão realizadas. Já as variáveis dependentes são a rapidez, quantidade de erros e nível de conforto.

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 4.1 (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 4.1 (b).

Figura 4.1: Tipos de setups para as diferentes abordagens.
 (a) Abordagem não-imersiva.



(b) Abordagem imersiva.



A interação com o ambiente de visualização desenvolvida 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 é descrita na Figura 4.2.

Figura 4.2: Disposição dos aparelhos no usuário.



4.2.3 Moléculas de interação

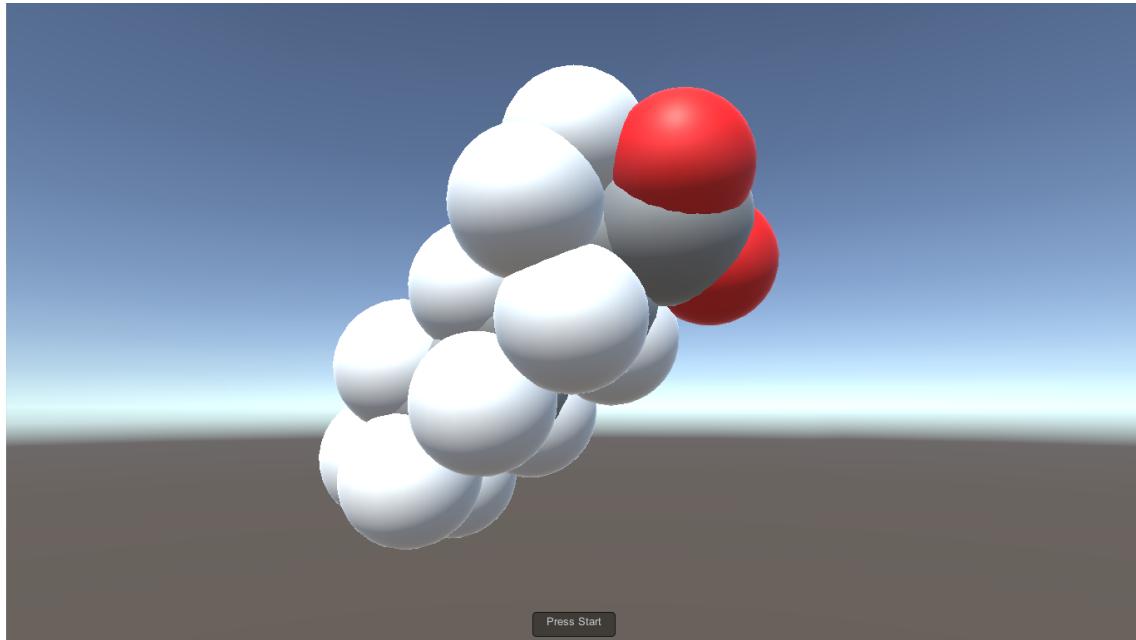
4.2.3.1 Lisina

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 alta-

mente 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, ela se torna uma escolha apropriada para servir de prática para os participantes se familiarizarem com as tarefas e comandos dos testes antes de realizá-los.

Figura 4.3: Molécula do DNA.



4.2.3.2 DNA

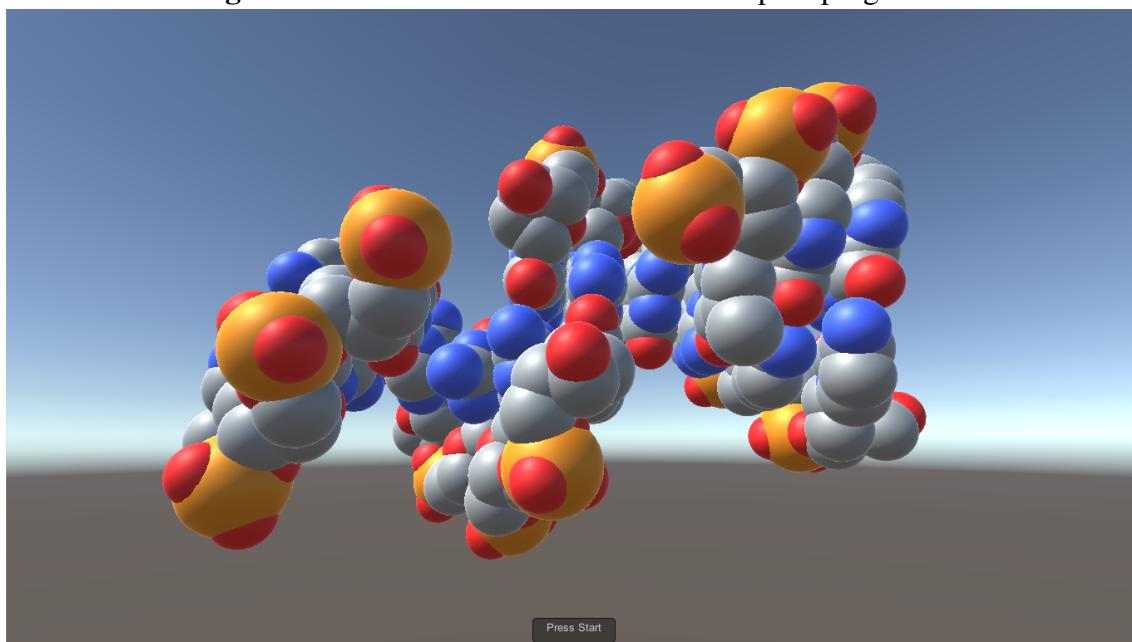
A estrutura do DNA (Deoxyribonucleic acid, PDB Id: 123d) é uma das moléculas mais conhecidas do mundo. Contendo o código genético responsável pelas definições das características físicas de cada ser humano assim como a produção de proteínas, a cadeia principal do DNA é formada por fosfato e resíduos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

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 fosfodiester 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, é uma molécula simples mas de muita importância para se compreender as estruturas mais básicas das formações moleculares de organismos vivos.

Figura 4.4: Molécula do DNA renderizada pelo programa.



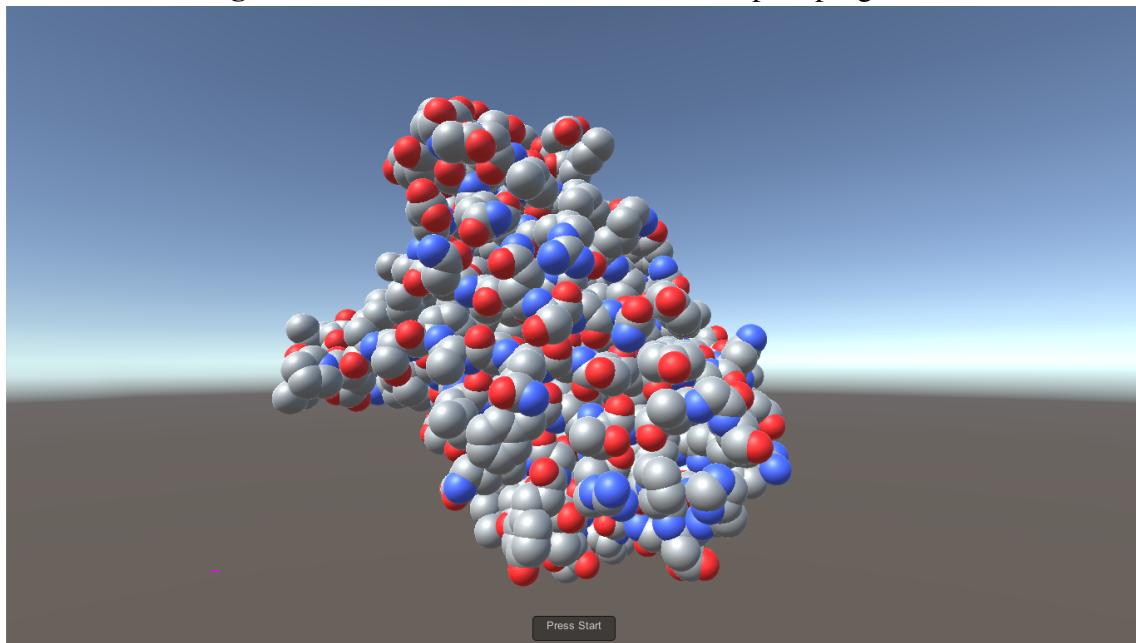
4.2.3.3 Proteína Verde Fluorescente

A estrutura molecular escolhida para esse experimento foi 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 outras 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 um 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 sofrem uma reação química especial e criam uma cromosfera no ambiente celular (no caso, água), criando 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, 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 4.5: Molécula da GFP renderizada pelo programa.



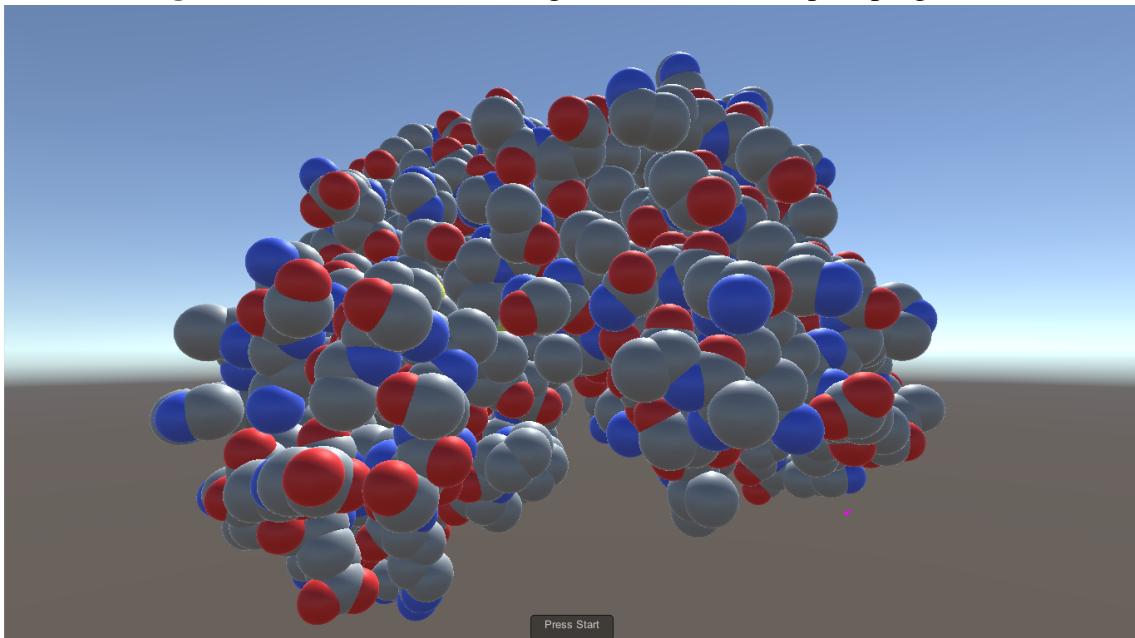
4.2.3.4 Hemoglobina

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 contêm 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 par-

anos.

Dessa forma, devido ao papel importante dos átomos de ferro na estrutura molecular da hemoglobina, é importante que se possa localizar de uma forma simples e 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 4.6: Molécula da Hemoglobina renderizada pelo programa.



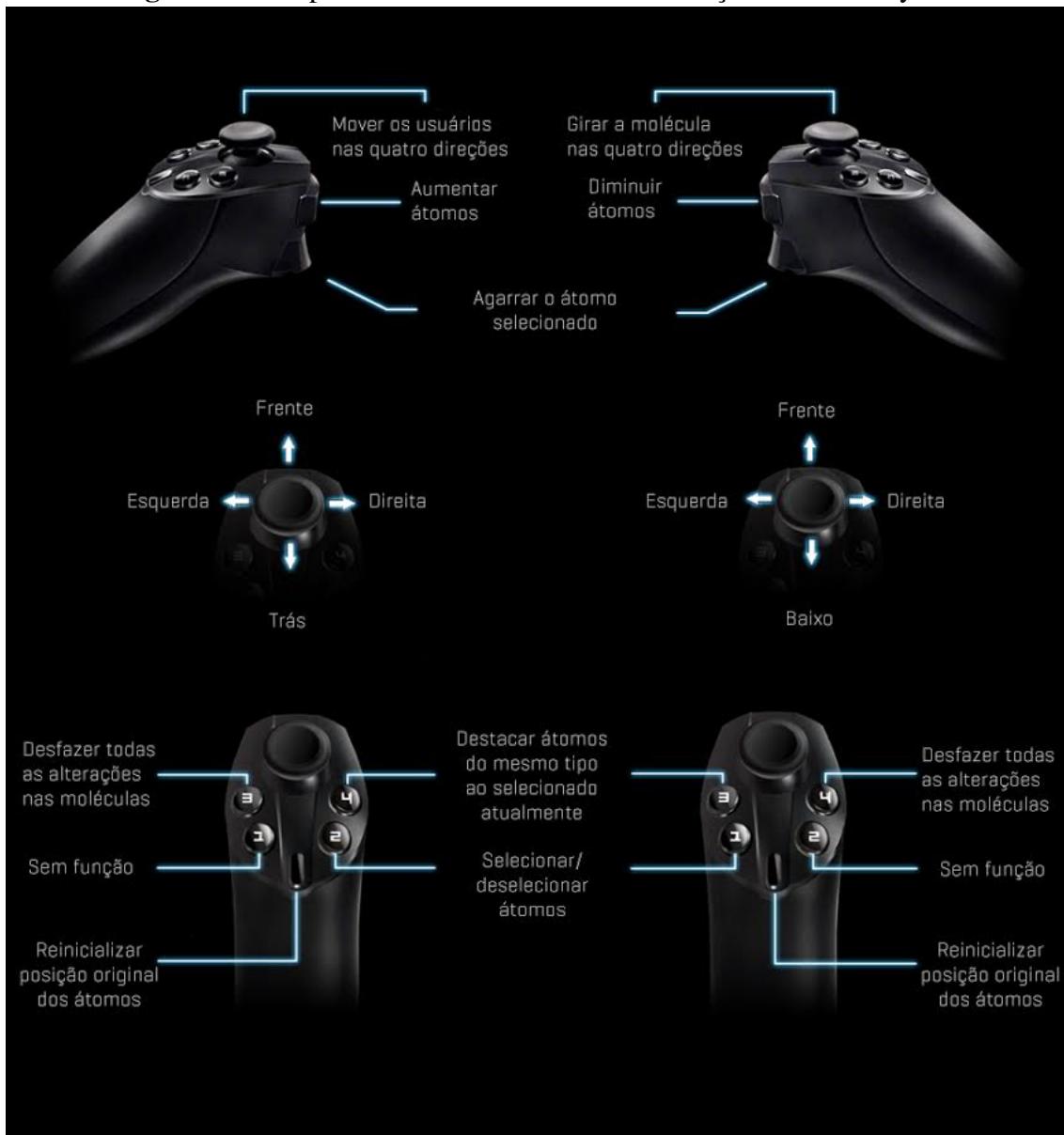
4.2.4 Método

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 imagem abaixo sobre o mapeamento e funcionamento de cada comando da 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 . 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.

Figura 4.7: Mapeamento dos comandos de interação da Razer Hydra.



4.2.4.2 Testes com o DNA

O usuário deverá realizar uma tarefa relativamente simples que servirá par 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 numerados como 1 e 2, respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante são localizar e selecionar todos átomos de fósforo das moléculas de fosfato presentes na molécula de DNA. 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 foi exibida tanto na tela do computador (para a abordagem não-imersiva) e no Oculus Rift (para a abordagem imersiva). O usuário também pode sinalizar ao agente de teste se não conseguir realizar o experimento e desejar desistir.

4.2.4.3 Testes com a GFP

O usuário deverá realizar uma tarefa um pouco mais complexa que servirá par 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 numerados como 3 e 4, respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante são de 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 diferenciável de outros por possuir um átomo de oxigênio ligado em um de seus carbonos. Sendo assim, você deve 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 sinaliza o fim do teste. O usuário também pode sinalizar ao agente de teste se não conseguir realizar o experimento e desejar desistir.

4.2.4.4 Testes com a Hemoglobina

O usuário deverá realizar uma tarefa um pouco mais complexa que servirá par 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 numerados como 5 e 6, respectivamente para cada tipo de abordagem.

As instruções para essa tarefa fornecidas ao participante são de 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 deve selecioná-lo e pressionar 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. O usuário também pode sinalizar ao agente de teste se não conseguir realizar o experimento e desejar desistir. Assim que o usuário realizava a tarefa com sucesso, uma mensagem foi exibida tanto na tela do computador (para a abordagem não-imersiva) e no Oculus Rift (para a abordagem imersiva).

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 responderá um pré-questionário para colher informações. Após isso, o agente de testes prende o cinto com a base da Razer Hydra em torno do torso do participante e o orienta a se sentar posicionado de frente para o display do computador, de forma ereta. Além disso, os testes somente iniciarão após o usuário ter se familiarizado com os aparelhos através da prática não-oficial com a molécula de lisina (conforme descrita na seção 6.2.3.1). Todas as instruções dos testes exibidas aos usuários previamente a sua realização podem ser vistas no Apêndice D.

Tabela 4.1: Ordem de realização dos testes para cada participante.

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

Caso seja o teste a ser realizado utilize a abordagem não-imersiva, o agente de testes irá orientar que o usuário pode largar 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 com orientação diretamente para a tela do computador, o agente de testes irá iniciar o programa. Antes que o usuário possa utilizar

a Hydra, o agente irá realizar o calibramento obrigatório do aparelho e irá entregá-la nas mãos do usuário. Finalizado o teste, o programa irá exibir uma mensagem de sucesso na tela (para os casos do DNA e Hemoglobina) e o agente de testes irá sinalizar que o teste foi concluído, encerrando o programa e gravando os dados colhidos do participantes.

Caso seja a abordagem imersiva, os passos já citados serão repetidos com a diferença que o usuário irá colocar o Oculus Rift na cabeça e o agente de testes irá esperar que o participante sinalize que já posicionou o aparelho corretamente e de forma confortável. Uma vez iniciado o programa, o agente de testes irá realizar o calibramento obrigatório da Hydra e irá entregá-lo nas mãos do usuário. Também, ao finalizado o teste, o programa irá exibir uma mensagem de sucesso na tela (para os casos do DNA e Hemoglobina) e o agente de testes irá sinalizar que o teste foi concluído, encerrando o programa e gravando os dados colhidos do participantes.

Ao finalizar toda a série de testes, o participante deverá responder 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.

4.3 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. 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.

E necessário observar que um dos participantes desistiu da tarefa relativa ao teste 4, portanto seus dados não foram utilizados nos cálculos estatísticos, deixando um dos conjuntos da amostra com tamanho 10.

As tabelas com os resultados colhidos através do experimento bem como os valores que serão citados posteriormente podem ser acessados através de link.

4.3.1 Rapidez

Pelo tempo de realização das tarefas para cada grupo de testes (não-immersivo e imersivo) para cada uma das três tarefas propostas aos usuários, os dados estatísticos obtidos na tabela 4.2 mostram que os participantes que utilizaram a abordagem não-immersiva levaram mais tempo para concluir os testes em comparação com os participantes que utilizaram a abordagem imersiva.

Tabela 4.2: Valores comparativos entre os tempos totais de execução de todos os testes com as duas abordagens.

Valores	<i>Abordagem não-immersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	122,183 s	87,103 s
Desvio-padrão (SD)	54,230 s	39,186 s

Ao aplicar o teste T-student sobre esse conjunto de dados para poder validar a hipótese H1, obtém-se um valor $p = 0,002$ e dada que a média entre os dois conjuntos de dados é 36,033 s, com um intervalo de confiança de 95% definido por 18,657 s a 53,409 s, podemos afirmar que a diferença dos tempos é considerada estatisticamente muito significativa.

Para poder inferir que, de fato, a realização das tarefas através da abordagem imersiva é mais rápida do que com a abordagem não-immersiva, 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 referentes a molécula do DNA (testes 1 e 2), foram obtidos os dados comparativos exibidos na tabela 4.3.

Tabela 4.3: Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 1 e 2 com as duas abordagens.

Valores	<i>Abordagem não-immersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	147,475 s	105,365 s
Desvio-padrão (SD)	42,705 s	34,814 s

Aplicando o teste t-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,0073$ e dada a média dos tempos do teste 1 menos o teste 2 sendo 42,109, com intervalo de confiança de 95% definido por 14,121 a 70,098, temos que a diferença dos tempos é estatisticamente muito 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-immersiva validou com sucesso nossa hipótese H1.

Em relação aos testes referentes a molécula da GFP (testes 3 e 4), foram obtidos os dados comparativos exibidos na tabela 4.4.

Tabela 4.4: Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.

Valores	Abordagem não-immersiva	Abordagem imersiva
Média (M)	133,326 s	98,288 s
Desvio-padrão (SD)	62,359 s	43,339 s

Ao aplicar o teste T-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,118$ e dada a média dos tempos do teste 3 menos o teste 4 sendo 35,040, com intervalo de confiança de 95% definido por -10,946 a 81,026, temos que a diferença dos tempos não é significativa estatisticamente.

Já em relação aos testes referentes a molécula da Hemoglobina (testes 5 e 6), foram obtidos os dados comparativos exibidos na tabela 4.5.

Tabela 4.5: Valores comparativos entre os tempos totais de execução dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.

Valores	Abordagem não-immersiva	Abordagem imersiva
Média (M)	85,748 s	58,674 s
Desvio-padrão (SD)	37,39 s	21,836 s

Aplicando o teste t-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,0113$ e dada a media dos tempos do teste 5 menos o teste 6 sendo 27,074, com um intervalo de confiança de 95% definido por 7,602 a 46,546, temos que a diferença dos tempos é estatisticamente significativa.

4.3.2 Quantidade de erros

Pelo número de erros colhidos na realização das tarefas para cada grupo de testes (não-immersivo e imersivo) para cada uma das três tarefas propostas aos usuários, os dados estatísticos exibidos na Tabela 4.6 mostram que os participantes que utilizaram a abordagem não-immersiva tiveram mais erros ao realizarem as tarefas solicitadas do que utilizando a abordagem imersiva.

Ao aplicar o teste T-student sobre esse conjunto de dados para poder validar a hipótese H2, obtém-se um valor $p = 0,0006$ e dada que a média entre os dois conjuntos de dados é 2,28, com um intervalo de confiança de 95% definido por 1,06 a 3,50, podemos afirmar que a diferença dos tempos é considerada estatisticamente extremamente

Tabela 4.6: Valores comparativos entre a quantidade de erros total de todos os testes com as duas abordagens.

Valores	<i>Abordagem não-immersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	4,48	2,34
Desvio-padrão (SD)	4,96	3,10

significativa.

Para poder inferir que, de fato, a realização das tarefas através da abordagem imersiva ocasiona menos erros que a abordagem não-immersiva, 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 referentes a molécula do DNA (testes 1 e 2), foram obtidos os dados comparativos exibidos na Tabela 4.7.

Tabela 4.7: Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 1 e 2 com as duas abordagens.

Valores	<i>Abordagem não-immersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	4,55	2,55
Desvio-padrão (SD)	3,50	1,97

Aplicando o teste T-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,0515$ e dada a média dos tempos do teste 1 menos o teste 2 sendo 2,0, com intervalo de confiança de 95% definido por -0,02 a 4,02, temos que a diferença de numero de erros não é estatisticamente muito significativa.

Em relação aos testes referentes a molécula da GFP (testes 3 e 4), foram obtidos os dados comparativos exibidos na Tabela 4.8.

Tabela 4.8: Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 3 e 4 com as duas abordagens.

Valores	<i>Abordagem não-immersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	8,55	4,40
Desvio-padrão (SD)	5,43	4,30

Aplicando o teste T-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,0016$ e dada a média dos tempos do teste 3 menos o teste 4 sendo 3,60, com intervalo de confiança de 95% definido por 1,78 a 5,42, temos que a diferença do numero de erros é estatisticamente muito 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-immersiva validou com sucesso nossa hipótese H2.

Finalmente, em relação aos testes referentes a molécula da Hemoglobina (testes 5 e 6), foram obtidos os dados comparativos exibidos na Tabela 4.9.

Tabela 4.9: Valores comparativos entre a quantidade de erros totais dos testes 5 e 6 com as duas abordagens.

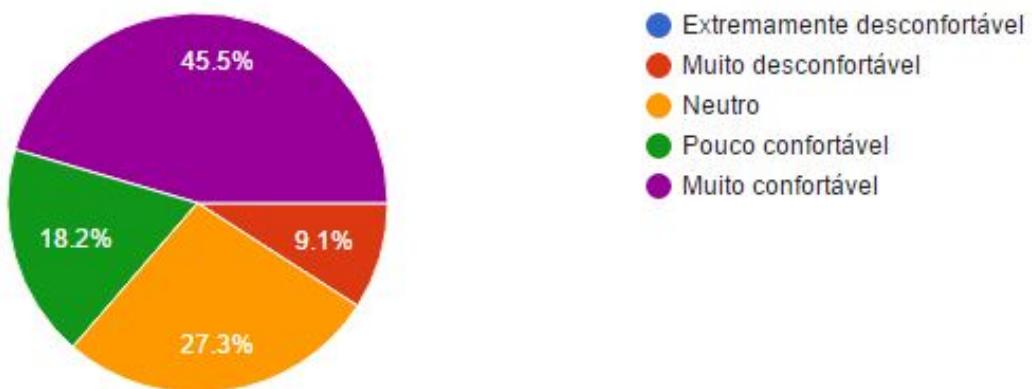
<i>Valores</i>	<i>Abordagem não-imersiva</i>	<i>Abordagem imersiva</i>
Média (M)	0,36	0,27
Desvio-padrão (SD)	0,50	0,47

Aplicando o teste T-student sobre os conjuntos de tempos desses dois testes, foi obtido um valor $p = 0,5884$ e dada a média dos tempos do teste 5 menos o teste 6 sendo 0,09, com um intervalo de confiança de 95% definido por -0,27 a 0,45, temos que a diferença dos tempos não é estatisticamente significativa.

4.3.3 Conforto

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

Figura 4.8: Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre a nível do conforto da abordagem não-imersiva.



Com base nesses resultados colhidos através do questionário realizado posteriormente aos testes, podemos realizar uma análise desses dados ao atribuir números aos níveis de conforto apresentados aos usuários para avaliar os dados quantitativamente (vide Apêndice C). Dessa forma, obtemos os dados estatísticos exibidos na Tabela 4.10.

Figura 4.9: Respostas dos participantes em pós-questionamento sobre a nível do conforto da abordagem imersiva.

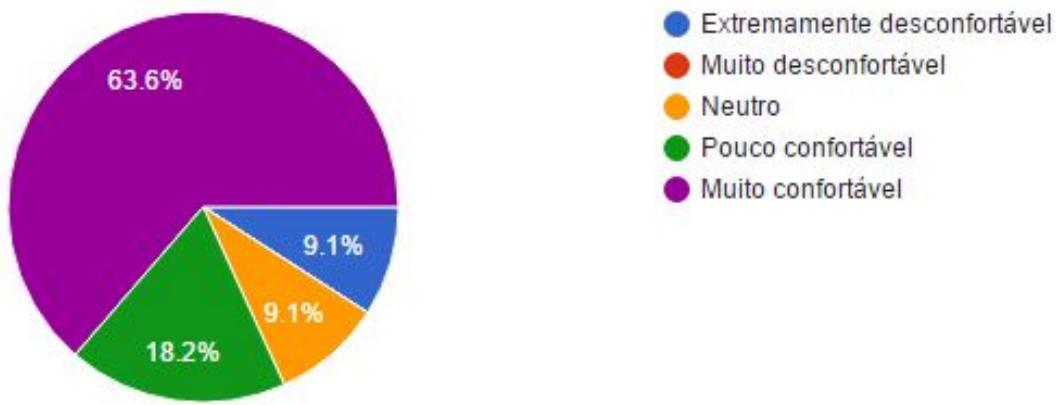


Tabela 4.10: Valores comparativos entre os níveis de conforto informados pelos usuários após realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.

Valores	Abordagem não-imersiva	Abordagem imersiva
Média (M)	4	4,27
Desvio-padrão (SD)	1,10	1,27

Aplicando o teste T-student sobre esses dois conjuntos de dados, obtemos um valor $p = 0,1921$ e dada a média dos níveis de conforto entra as abordagens como sendo -0.27, com intervalo de confiança de 95% definido por -0,71 a 0,16, temos que a diferença de nível de conforto entre as duas abordagens não é estatisticamente significativa. Sendo assim, não é possível validar a hipótese H3 com a análise dos dados qualitativos colhidos no experimento.

4.3.4 Outros Resultados

Um resultado interessante é que, dos 33 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 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 translação, correspondente ao deslocamento da cabeça em torno da fossa mandibular, e de rotação, correspondente ao deslocamento 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 4.11, nota-se que os participantes transladaram mais a cabeça utilizando a abordagem imersiva do que a abordagem não-imersiva.

Tabela 4.11: Valores comparativos entre o total de translações em graus com a cabeça feitas pelos usuários ao realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.

Valores	Abordagem não-imersiva	Abordagem imersiva
Média (M)	9,705	34,738
Desvio-padrão (SD)	15,899	21,986

Especificamente, ao aplicar o teste T-student sobre esses conjuntos de dados, obtemos um valor $p = 0,0001$ e dada a diferença entre as médias das translações entre as abordagens como sendo $-25,859$, com intervalo de confiança de 95% definido por $-34,075$ a $-17,643$, temos que a diferença de translações entre as duas abordagens é estatisticamente extremamente significativa.

Mais ainda, se analisarmos para todos os testes, conforme os dados comparativos exibidos na Tabela 4.12, nota-se que os participantes rotacionaram mais a cabeça utilizando a abordagem imersiva do que a abordagem não-imersiva.

Tabela 4.12: Valores comparativos entre o total de rotações em graus com a cabeça feitas pelos usuários ao realizarem todas as tarefas, com ambas abordagens.

Valores	Abordagem não-imersiva	Abordagem imersiva
Média (M)	17,676	31,790
Desvio-padrão (SD)	31,120	25,055

Mais detalhadamente, ao aplicar o teste t-student sobre esses dois conjuntos de dados, obtemos um valor $p = 0,0271$ e dada a diferença da média das rotações entre as abordagens como sendo $-16,634$, com intervalo de confiança de 95% definido por $-31,260$ a $2,0$, temos que a diferença de rotações entre as duas abordagens é estatisticamente significativa.

4.4 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 3 e 4), a diferença de tempos não foi significativa.

Aém 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 1 e 2 e testes 5 e 6) a diferença na quantidade de erros não foi considerada significativa.

Os dados colhidos e analisados a respeito do nível de conforto revelou que não se apresentou uma diferença estatisticamente significativa entre o conforto que os usuários experienciaram com os dois tipos de abordagens ao realizarem as tarefas. Mesmo assim, se percebe uma tendência à abordagem imersiva apresentar um nível de conforto superior à abordagem não-imersiva. Um benefício que possivelmente se acentuaria estatisticamente se a amostra de participantes para o experimento tivesse sido maior.

Essa tendência para um conforto maior com a abordagem imersiva talvez se revele nos dados obtidos através dos dados obtidos ao se analisar o total de movimentos que os usuários realizaram com a cabeça (tanto translações como rotações). Percebe-se que na abordagem imersiva os usuários transladaram e rotacionaram a cabeça estatisticamente mais do que com a abordagem não-imersiva. Isso pode se dever ao fato de a visualização imersiva proporcionar uma experiência mais próxima à realidade e intuitiva, incentivando o usuário a movimentar 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.

5 CONCLUSÃO

5.1 Resumo das descobertas

Essa seção resume as descobertas obtidas através desse estudo e que respondem os questionamentos apresentados na seção 1.3:

1. Quais são os benefícios de um ambiente imersivo em relação ao tipo de abordagem tradicional para a manipulação de estruturas moleculares?

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 gera um tempo menor, menos erros e um nível de conforto maior para a realização de tarefas específicas.

(a) Abordagens que utilizam visualização imersiva permitem a realização de tarefas de interação de forma mais rápida?

Os dados estatísticos gerados 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.

(b) Abordagens que utilizam a visualização imersiva ocasionam uma quantidade menor de erros na realização de tarefas de interação?

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.

(c) Abordagens que utilizam a visualização imersiva podem ser mais confortáveis na realização de tarefas de interação?

Como afirmado anteriormente, mesmo não apresentando uma diferença estatisticamente significativa, percebe-se uma tendência que uma abordagem imersiva se mostre mais confortável que uma abordagem não-imersiva. Nesse caso, provavelmente o resultado teria se mostrado válido ao se utilizar uma amostra de usuários de tamanho maior. Apesar disso, pelas informações analisadas à respeito dos movimentos totais dos usuários com a cabeça (translação

e rotação) pode-se perceber que foi considerado mais intuitivo movimentar mais a cabeça utilizando a abordagem imersiva para a realização das tarefas.

5.2 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 5.1 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 retirado das estatísticas da própria Unity, ao se visualizar a molécula completa, centralizada na cena, como as Figuras 4.3, 4.4, 4.5 e 4.6 mostram. Também desse tipo de perspectiva foram extraídos os FPS quando observados na interface do programa sendo renderizado diretamente na máquina. Os dados do Oculus Rift foram obtidos através de um script que exibe 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 5.1: Dados do programa

Moléculas	Número de átomos	Número de vértices	FPS na interface do programa	FPS no Oculus Rift
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

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. 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.

5.3 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 sugerido 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 e melhorar os mecanismos de imersão disponíveis. Além disso, as hipóteses que foram validades através do experimento fornecem um guia válido para o desenvolvimento 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.

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.
- DOUTRELINE, 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/>>.
- 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>>.
- 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 gamming 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/>>.
- STEED, C. A. et al. Immersive visual analytics for transformative neutron scattering science. **IEEE Immersive Analytics Workshop (VR 2016)**, 2016.
- 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>>.
- 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>>.
- Virtualis Dev Team. Virtual reality (vr) leading technology company. 2015. Available from Internet: <<https://www.virtualis.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 contribuirá 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, Nao utilizo programas, Outros)
10. Se você escolheu "Outros" na questão anterior, especifique qual o tipo de programa que utiliza.

APÊNDICE C — QUESTIONÁRIO POS-EXPERIMENTO

1. O quanto 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 quanto confortável você se sentiu utilizando o 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-immersiva, 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:

- 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.