

RealMol: Una interfaz natural de usuario con realidad virtual para visualización molecular

David Israel Flores Granados^a, Christian Alan Vargas García^a, José Enrique Álvarez Estrada^a, Jorge Arturo Pintor Morales^a, Melissa Victoria Mendiola Peralta^a

^a Departamento de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad del Caribe, SM. 78, Mza. 1, Lote 1, Esquina Fraccionamiento Tabachines, 77528 Cancún, México

dflores@ucaribe.edu.mx, 120300049@ucaribe.edu.mx, jea@ucaribe.edu.mx,
120300048@ucaribe.edu.mx, 110300120@ucaribe.edu.mx

Resumen. Los visualizadores moleculares son herramientas de gran utilidad en diversas líneas de conocimiento relacionadas con las ciencias químicas, biológicas o de sus áreas interdisciplinarias. A pesar de su utilidad, los visualizadores convencionales aún poseen limitantes al momento de mostrar a detalle cierto tipo de información o requieren de operaciones sofisticadas para obtener determinadas configuraciones de las estructuras moleculares.

La realidad virtual permite disminuir las limitantes de la mayoría de los visualizadores moleculares que se muestran en dispositivos con proyecciones bidimensionales, mostrando al usuario una representación más realista de las estructuras tridimensionales. Sin embargo, para obtener determinadas conformaciones, los visualizadores moleculares reciben instrucciones a través de línea de comandos, esta característica implica una mayor inversión de tiempo para los usuarios y una interfaz inexistente para dispositivos de realidad virtual. Al utilizar tecnología de detección de voz y movimientos corporales (específicamente de brazo) es posible mejorar la experiencia de uso y simplificar el manejo de los visualizadores moleculares. Este documento contiene el diseño, desarrollo, implementación y evaluación de una interfaz natural de usuario para incorporar realidad virtual en un visualizador molecular, demostrando no sólo la factibilidad del proyecto sino también su eficacia y utilidad en un entorno de trabajo virtual.

Palabras Clave: Visualizador molecular, Interfaz Natural de Usuario, Realidad Virtual.

1 Introducción

Las interacciones entre los equipos informáticos, dispositivos y usuarios humanos han tenido un vertiginoso avance propiciado por el aumento en el poder de cómputo ocurrido durante las últimas décadas del siglo XX e inicios del presente. Las interacciones actuales requieren procesar grandes cantidades de información en menos tiempo para facilitar la adquisición y visualización de datos, además, dichas interacciones exigían un mayor nivel de abstracción por parte de los usuarios cuando no se habían desarrollado recursos tecnológicos para interacción centrada en el usuario. La demanda de interacciones humano-computadora más precisas e intuitivas se presenta en disciplinas tan diversas como: educación, aeronáutica, astronomía, química, entre muchas otras. Por otra parte, son notables las contribuciones al respecto que se hacen en los campos de gráficos tridimensionales, asistentes virtuales, entornos de inmersión y desarrollo de Interfaz Natural de Usuario (NUI por sus siglas en inglés). Un caso especial es la visualización de información molecular tridimensional; en esta área se realizan esfuerzos para dilucidar cuestiones biológicas que requieren interacciones con un alto grado de precisión en su manipulación.

Actualmente hay una diversidad de herramientas de visualización molecular tales como: XMakeMol [1], Jmol [2], Ras-Mol [3], Avogadro [4], MGLTools [5], Chimera [6], entre otras. Estos programas tienen características que les permiten a la comunidad científica investigar y comprender mejor algunos fenómenos bioquímicos, accediendo a distintas bases de datos. Una de las bases de datos más importantes en estructuras tridimensionales es The Protein Data Bank [7], la cual contiene información tridimensional de los átomos que conforman las proteínas que ahí se almacenan. La importancia de estas herramientas radica en la comprensión de las estructuras moleculares a través de la visualización precisa, hecho por el cual se le dio un fuerte impulso a la creación de gráficos por computadora, tal como lo mencionan Gu y Bourne [8] en una revisión de temas fundamentales en bioinformática estructural.

Un visualizador molecular ampliamente usado en la comunidad científica es PyMOL [9], entre sus características notables está la capacidad de generar imágenes de alta resolución exportables en modo estéreo. Otro aspecto relevante es su interfaz con el usuario, la cual permite obtener configuraciones complejas de las estructuras tridimensionales y realizar cálculos con el lenguaje de programación que tiene incorporado o mediante la combinación del lenguaje de programación Python. El costo asociado a un alto nivel de sofisticación en la interfaz de PyMOL es la pérdida de intuición para ejecutar algunas acciones básicas; por lo general, se deben considerar una secuencia de instrucciones y sus parámetros respectivos para cumplir con la sintaxis de su lenguaje de control.

Por otra parte, una desventaja asociada a los dispositivos estándar de visualización bidimensional es la dificultad para representar la profundidad en el despliegue de la estructura molecular en 3D; para disminuir este problema los usuarios tienen que realizar operaciones como traslaciones, rotaciones y cortes sobre la estructura que podrían evitarse si la visualización se realizara con dispositivos de inmersión. Sin embargo, la conexión entre los dispositivos de inmersión virtual y los visualizadores moleculares actuales requieren configuraciones técnicas no triviales. Por lo tanto, implementar una interfaz intuitiva que utilice movimientos corporales y comandos por voz, denominada genéricamente NUI, es una alternativa para realizar operaciones habituales en visualizadores moleculares que se desplieguen en dispositivos de inmersión de realidad virtual.

Entre los dispositivos con sensores que se pueden utilizar para crear una NUI se encuentra Microsoft Kinect® [10], quien cuenta con un marco de trabajo estable y continuamente mejorado mediante actualizaciones. Mientras que los cascos de realidad virtual como Oculus Rift® [11], Samsung Gear VR® [12] y PlayStation VR® [13], entre otros, se pueden utilizar para una visualización tridimensional con mayor inmersión.

1.1 Propuesta

La idea central del proyecto es proporcionar una interfaz centrada en el usuario para un programa de manipulación y visualización molecular, de tal forma que se utilicen instrucciones por voz y movimientos corporales como una alternativa para las operaciones habituales del visualizador, además de desplegar las imágenes generadas

por el software en un dispositivo de realidad virtual por inmersión; para hacer las pruebas de concepto se seleccionó PyMOL como visualizador molecular de código abierto, Kinect ® como dispositivo sensor de la interfaz y Oculus Rift ® como dispositivo de inmersión de realidad virtual, además como una alternativa a los gestos manuales también se propuso la incorporación de un mando para consola de videojuegos.

La intencionalidad de proporcionar una NUI a un visualizador molecular es reducir al máximo la introducción de líneas de comandos de forma manual a través de la consola del visualizador; además de agregar la percepción de la profundidad enviando las imágenes generadas por el software al casco de realidad virtual. La integración de la NUI permitirá a usuarios con un entrenamiento mínimo, o ninguno, manipular intuitivamente el sistema de visualización molecular, inclusive con operaciones complejas. El beneficio de agregar esta característica incidirá directamente en alumnos, profesores e investigadores que lleven a cabo tareas e investigaciones en el campo de las ciencias químico-biológicas. Mientras que el uso del casco de realidad virtual permitirá una inmersión que proporcionará al usuario una experiencia realista que facilitará la visualización y la interpretación de la información presentada en el visualizador molecular.

2 Desarrollo

El desarrollo de la interfaz consideró tres aspectos fundamentales: la conexión y proyección del visualizador molecular con el dispositivo de inmersión, el envío de datos del dispositivo de inmersión al visualizador molecular y el diseño e implementación de un analizador sintáctico que traduzca las órdenes por voz y movimientos del usuario en instrucciones sintácticamente válidas para el visualizador. La integración de los tres aspectos previos se realizó tomando como base la metodología Extreme Programming (XP) debido a que permite un desarrollo ágil e iterativo [14].

2.1 Conexión entre el visualizador y el dispositivo de inmersión

El visualizador molecular PyMOL tiene versiones para ejecutarse sobre distintos sistemas operativos. Sin embargo, en el momento de realizar este desarrollo, sólo había documentación de programación suficientemente robusta para el dispositivo de realidad virtual Oculus Rift en el sistema operativo Windows, esto fue el factor determinante en la selección de la plataforma y las herramientas de soporte para la interconexión entre el visualizador y el dispositivo de inmersión. La primera herramienta que se implementó para este fin fue un script en Python que proyecta las imágenes estereoscópicas del visualizador molecular al dispositivo de realidad virtual. La configuración de los dispositivos de proyección es una tarea esencialmente técnica pero no trivial, el principal problema a resolver es la orientación de las imágenes, misma que se solucionó mediante programación en el script de Python.

2.2 Manejo de señales del dispositivo de inmersión

Las principales señales que se transmiten desde el dispositivo de inmersión son los datos de los acelerómetros y giroscopios. El mecanismo para capturar en cada momento la posición tridimensional del casco con respecto a un punto de origen inicial se realizó mediante un arreglo de valores flotantes que almacena los valores que envía el casco de realidad virtual (coordenadas x, y, z). En esta fase se programó un script en Python para almacenar los arreglos previos y compararlos con los nuevos valores capturados a lapsos regulares, la diferencia de posiciones da una magnitud de cambio y con estos valores se ejecutan comandos de posicionamiento de la cámara. Un elemento importante en el script de Python fue el uso de la biblioteca *ovrsdk* para asegurar el formato y velocidad de la lectura de los datos.

2.3 Diseño e implementación del analizador sintáctico

El analizador sintáctico es la parte central en el desarrollo de la NUI. Su función es la interpretación fonética, así como de los movimientos corporales que realiza el usuario a nivel de instrucciones.

El diseño del analizador tiene como base un archivo de palabras reservadas en el lenguaje de programación de PyMOL y de forma jerárquica sus opciones para cada instrucción. Este archivo en formato de etiquetas XML es utilizado por dos programas: un script de en Python para formar un árbol de instrucciones, del cual se genera dinámicamente un menú de acciones para desplegar en el dispositivo de inmersión; y otro programa que lo usa para validar las instrucciones de voz, empleando también un árbol sintáctico, a diferencia del primer programa que opera sobre el visualizador molecular, este último se encarga de gestionar las señales de los sensores del dispositivo Kinect© y está programado en el lenguaje C#. La estructura general del archivo XML es la siguiente:

```
<menu>
  <text>Comando</text>
  <code>command</code>
  <page>
    <menu>
      <text>Menu 1</text>
      <code>menu 1</code>
      <page>
        <command>
          <text>Comando 1</text>
          <code>command 1</code>
        </command>
      </page>
    </menu>
  </page>
</menu>
```

La estructura descrita previamente permite añadir menús, submenús e instrucciones con un nivel de anidación dinámico. Además, es posible asociar a cada menú un texto

para entrenar el reconocimiento fonético y proporcionar un código que sirva para navegar por los menús o para ejecutar una instrucción, en la Figura 1 se puede observar el contenido del archivo XML y su relación con los comandos y menús.

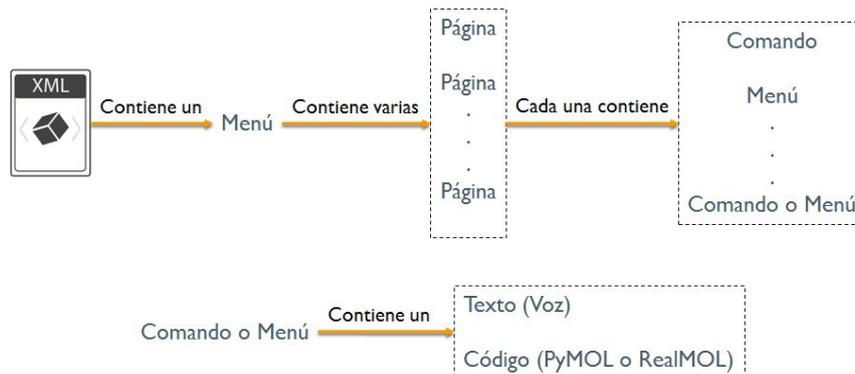


Fig. 1. Diagrama de contenido del archivo XML. El archivo XML contiene información que es usada tanto por el árbol sintáctico que interpreta los comandos de voz como por el árbol de reconfiguración de menús.

El archivo XML se traduce en un árbol de instrucciones en el programa en C# y en el script de Python utilizando una estructura de datos (clase) a la que se denominó *CommandNode*.

El programa desarrollado en C# valida los comandos o instrucciones de voz recorriendo el árbol buscando hijos que tengan el mismo valor en el campo *Text* que el del comando de voz introducido, si no se encuentra una coincidencia entonces se considera el comando de voz como no válido. Por cada comando de voz validado se envía la información del atributo *Code* del último hijo al script en Python. El script en Python recorre el árbol de forma similar al programa en C# con la diferencia de que utiliza el atributo *Code* para hacer su recorrido, si el último atributo *Code* recibido corresponde a una opción del menú, creado para la interfaz, entonces el script en Python utiliza los atributos *Text* de sus hijos para desplegar el nuevo menú; si es un comando, entonces lo ejecuta directamente, la Figura 2 resume este proceso y muestra los atributos de la clase *CommandNode*.

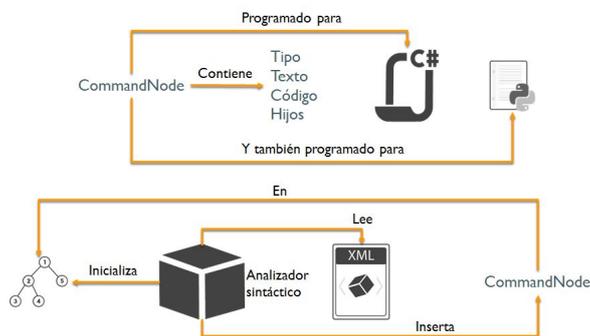


Fig. 2. Diagrama del analizador sintáctico. El archivo XML contiene y almacena información para validar las instrucciones que forma en un árbol sintáctico.

2.4 Integración de componentes

Después de implementar los tres elementos fundamentales del proyecto, el siguiente paso en la construcción de la interfaz fue establecer la interacción entre los programas y el arreglo de sensores para control de juegos Kinect® o el mando para consola de videojuegos como control opcional. La interacción con Kinect® abarcaba dos ámbitos: la interpretación de los comandos de voz y la de gestos corporales.

En el primer ámbito de interacción, el software de desarrollo que controla al arreglo de sensores usa una lista de palabras claves asociadas con acciones sobre la estructura molecular proyectada por PyMOL (selección, traslación, rotación, acercamiento, alejamiento, etc.); estas palabras claves se comparan con las emitidas por el usuario y en caso de que probabilísticamente sean semejantes entonces el analizador sintáctico determina que código en el árbol de comandos se debe formar, y posteriormente corrobora que la secuencia de parámetros culmine en una instrucción sintácticamente bien formada en algún nodo del árbol; una vez completado el comando se envía al script que administra PyMOL mediante un socket UDP local. En la Figura 3 se muestra un esquema del funcionamiento entre las interfaces de adquisición de datos, su validación y representación inmediata.

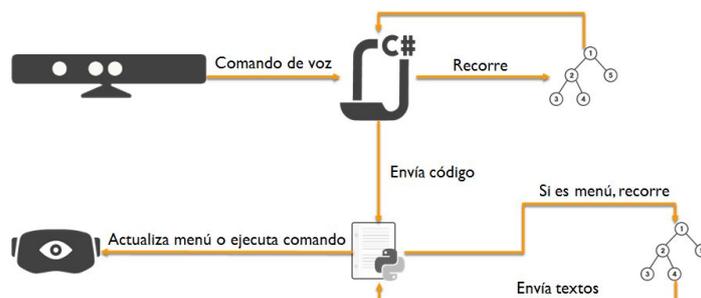


Fig. 3. Interacción entre las interfaces. El arreglo de sensores Kinect® y el visor de realidad virtual Oculus Rift® son controlados por scripts para actualizar las operaciones mediante recorridos por árboles.

El segundo ámbito de interacción relaciona la operación que previamente fue capturada con la dirección y velocidad a ejecutarla; para graduar esta intensidad de acción sobre la estructura tridimensional, el usuario debe realizar movimientos de su brazo derecho; por ejemplo, en el caso de que el usuario haya seleccionado, mediante voz o control, la operación de rotación libre, entonces la velocidad y dirección de rotación estará sujeta al movimiento del brazo, los marcadores se basan en la mano derecha con respecto al hombro derecho como punto de origen (véase Figura 4). Es importante mencionar que cuando sea seleccionado previamente la acción de rotación, entonces los movimientos en diagonal se interpretan como un incremento/decremento en los ejes X-Y, mientras que el cambio en el eje Z se puede realizar con el comando de giro. Para los comandos de acercamiento/alejamiento y giro sobre un eje, el control de la velocidad y dirección se reduce a un solo movimiento del brazo. Para cualquier caso, el comando se finaliza cuando se alza la mano izquierda.

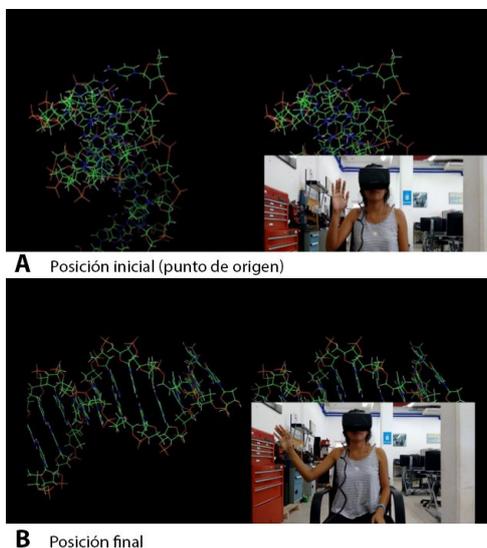


Fig. 4. Ámbito de interacción con gestos corporales. La velocidad y dirección con la que se realiza una operación en la estructura tridimensional se entona con un movimiento de brazo a partir de la posición inicial (A) hasta un punto ajustado por la posición de la mano con respecto al origen (B).

El manejo con control de consola de video juegos es una alternativa que reemplaza a los sensores de Kinect, su uso es intuitivo con los movimientos de los joysticks y botones. Además, su procesamiento para validar instrucciones se realiza de la misma forma por el analizador sintáctico. La Figura 5 describe gráficamente la integración de la NUI con el visualizador molecular PyMOL.

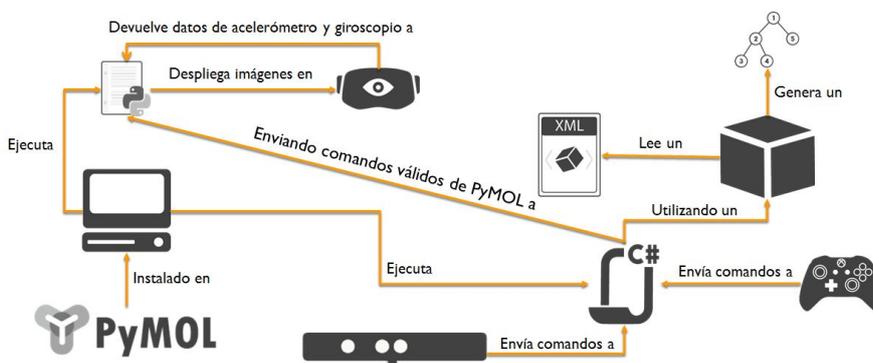


Fig. 5. Integración de los componentes de la NUI. El despliegue de la estructura tridimensional en el dispositivo de inmersión se actualiza mediante comandos de voz y gestos corporales que son interpretados y formados por los programas ayudándose de árboles sintácticos.

La integración de todos los componentes debe responder a la combinación de instrucciones que ofrece el visualizador, en la siguiente tabla se muestran los principales comandos de PyMOL que se implementaron en la interfaz.

Tabla 1. Principales comandos que se implementaron en la NUI y que son introducidos vía un arreglo de sensores o control de consola de video juegos.

Comando en PyMOL©	Descripción del comando	Uso con Kinect©
<i>load</i>	Descarga archivos PDB	Voz
<i>select</i>	Selecciona un conjunto de átomos	Voz
<i>show</i>	Muestra una selección de moléculas con algún tipo de representación (esferas, mallas, líneas, secundaria, superficie, puntos, varillas)	Voz
<i>hide</i>	Oculto una selección de moléculas	Voz
<i>delete</i>	Elimina de la lista de visualización un grupo de moléculas seleccionadas.	Voz
<i>move</i>	Reposiciona un conjunto de moléculas en el espacio tridimensional.	voz y movimiento
<i>translate</i>	Desplaza la cámara de visualización	voz y movimiento
<i>rotate</i>	Rota la cámara de visualización	voz y movimiento
<i>zoom</i>	Acerca o aleja la cámara de visualización	voz y movimiento

3 Evaluación del prototipo

La herramienta con la que se evaluó la facilidad de uso de la interfaz natural de usuario fue System Usability Scale (SUS), la herramienta proporciona una escala de usabilidad que se calcula a partir de un cuestionario de diez preguntas de acuerdo a la metodología general de Diseño Centrado en el Usuario (DCU). Brooke [15] sugiere que los participantes deberán completar este cuestionario inmediatamente después de haber utilizado el sistema bajo análisis.

3.1 Metodología para el Diseño Centrado en el Usuario

La variabilidad de implementaciones para productos usables es extensa pero no hay un consenso sobre lo que se puede considerar exactamente como DCU [16], aunque

es aceptada la equivalencia con contextos como Diseño centrado en el Humano (HCD por sus siglas en inglés). A pesar de la dificultad de encontrar una definición ampliamente aceptada, existen estándares internacionales que han estudiado esta área e intentan regular sus principales actividades. El estándar ISO 13407 [17] propone cuatro actividades fundamentales que debe considerar en un diseño DCU (ver Figura 6):

- a) Entender y especificar el contexto de uso - El producto se diseñó para alumnos, profesores e investigadores que llevan a cabo diversas tareas e investigaciones en el campo de las ciencias químico-biológicas.
- b) Especificar los requisitos de usuario y la organización - El objetivo del usuario es tener una interacción intuitiva con el sistema que evite el uso de la línea de comandos y que ponga al usuario en el centro del diseño.
- c) Producir soluciones de diseño - Este se realizó mediante el prototipado de propuestas bajo una metodología de desarrollo Extreme Programming (XP).
- d) Evaluar las propuestas de acuerdo a los requisitos - La herramienta de evaluación fue el System Usability Scale.

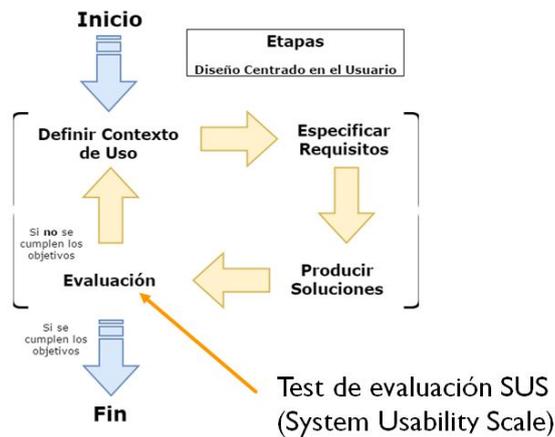


Fig. 6. Diseño Centrado en el Usuario según la norma ISO 13407. En el diseño del estándar existe una fase de evaluación la cual se implementó con el método SUS y cuya escala está entre 0 y 100, de menor a mayor usabilidad respectivamente.

Dado que las tres primeras actividades ya fueron descritas, la siguiente sección se enfoca en las pruebas de usabilidad.

3.2 Método de evaluación de usabilidad de la NUI RealMol

Las pruebas SUS poseen un sistema de puntuación con ponderaciones diferenciadas. Primero se etiquetan aquellas preguntas que sugieren algo positivo del desarrollo y se obtiene el valor de contribución de cada respuesta y su puntuación respectiva se le

resta una unidad; mientras que la contribución de cada pregunta asociada a los aspectos negativos se le resta 5 unidades [18].

SUS hace una ponderación de 10 respuestas obtenidas por el usuario para medir las siguientes características relevantes (veáse el cuestionario en <https://figshare.com/projects/RealMol/14579>):

- i) **Facilidad de Aprendizaje.** Este rubro permite medir que tan fácil es el aprender a usar la interfaz en cuestión. Se obtiene con la suma de los valores de las preguntas 4 y 10, después se multiplica el resultado por 12.5.
- ii) **Facilidad de Uso:** Indica que tan intuitivo es el uso de la interfaz en cuestión. Se obtiene sumando todos los reactivos excepto la pregunta 4 y 10, después se multiplica el resultado por 3.125.
- iii) **Usabilidad General:** Este es el rubro principal del método. Se obtiene sumando los valores de todos los reactivos, después el resultado se multiplica por 2.5.

Finalmente, al obtener la puntuación individual de cada prueba se realiza un promedio para obtener una puntuación final del producto. Este resultado se utilizó para buscar una calificación sobre una tabla de puntuaciones basada en más de 3000 pruebas SUS realizadas [17] (ver Tabla 2).

Tabla 2. Escala de valores para la evaluación de la NUI. Utilizando SUS se calcula el aporte de cada respuesta al cuestionario de evaluación y la suma de todos los valores calculados se asocia a una calificación cualitativa.

Rango de valores SUS	Calificación	Rango Percentil
84.1 - 100	A+	96 – 100
80.8 – 84	A	90 – 95
78.9 – 80.7	A-	85 – 89
77.2 – 78.8	B+	80 – 84
74.1 – 77.1	B	70 – 79
72.6 – 74	B-	65 – 69
71.1 – 72.5	C+	60 – 64
65 – 71	C	41 – 59
62.7 – 64.9	C-	35 – 40
51.7 – 62.6	D	15 – 34
0 – 51.6	F	0 – 14

4 Resultados y discusión

Las pruebas SUS se llevaron a cabo con usuarios habituales de visualizadores moleculares y que residen en dos locaciones, la primera se realizó en la Universidad del Caribe, Cancún, México, del 8 al 13 de noviembre del 2015, y la segunda en la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Ciudad de México del 16 al 20 de noviembre. La información de ambas se ha combinado y se puede observar en la Tabla 3.

En la Figura 7 se puede apreciar la distribución de los datos para las tres características del DCU en la evaluación de la interfaz de RealMol. El valor de la mediana para la *percepción general* de la NUI y su *usabilidad* son semejantes, aproximadamente 78 puntos o B+, con una mayor variabilidad en la *usabilidad*, especialmente de la mediana hacia el tercer cuartil; por otro lado, el nivel de aprendizaje tiene una mediana aproximada de 55 puntos o D, pero la variabilidad es significativamente mayor hacia el tercer cuartil. Estos resultados pueden interpretarse como que nuestra propuesta es aceptable, pero con poco valor agregado al aprendizaje.

Tabla 3. Grupo de prueba de la NUI. Los usuarios con los que se realizó la prueba SUS pertenecen a dos instituciones de educación superior y ya habían ocupado en alguna medida visualizadores moleculares.

Número	Sexo	Edad	Grado de estudios	Percepción General	Aprendizaje	Usabilidad
1	F	45 – 65	Maestría	55	50	56
2	M	18 – 24	Licenciatura	65	50	69
3	M	18 – 24	Licenciatura	88	63	94
4	F	18 – 24	Maestría	100	100	100
5	M	45 – 65	Maestría	70	88	67
6	F	18 – 24	Licenciatura	80	63	84
7	F	18 – 24	Licenciatura	93	75	97
8	M	18 – 24	Licenciatura	75	63	78
9	M	18 – 24	Licenciatura	98	100	97
10	F	18 – 24	Licenciatura	88	63	94
11	M	18 – 24	Licenciatura	63	75	59
12	F	18 – 24	Licenciatura	95	100	94
13	M	18 – 24	Licenciatura	73	63	75
14	F	25 – 34	Licenciatura	78	88	75
15	M	25 – 34	Maestría	48	38	50
16	M	≥ 65	Doctorado	75	63	78
17	M	35 – 45	Doctorado	78	71	79

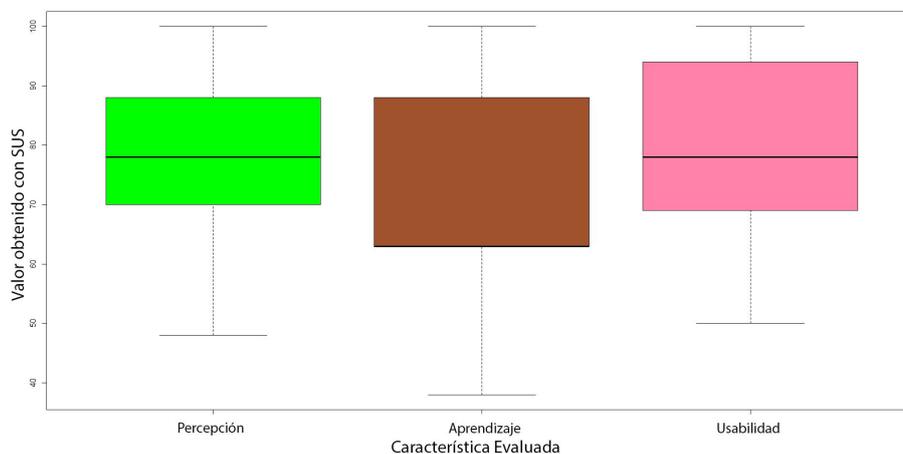


Fig. 7. Dispersión de los valores obtenidos con SUS. Los resultados de la evaluación a la NUI en las tres características del DCU se presentan en boxplots que indican una Percepción y Usabilidad aceptable y un grado de aprendizaje medio.

Para medir el impacto de la interfaz en términos académicos y de edad, se realizó una distribución de datos en dos grupos de usuarios: Universitarios con licenciatura (cuyas edades están entre 18 y 24 años) y usuarios con posgrado (con edades mayores de 30 años). Como se puede observar en la Figura 8A, la mediana de la percepción general de la interfaz es significativamente mejor entre los estudiantes con licenciatura que los de posgrado. Sin embargo, la sensación de aprendizaje derivado del prototipo es ligeramente mayor entre los usuarios con posgrado, aunque con mayor variabilidad (véase Figura 8B), lo que puede interpretarse como que los usuarios más experimentados en el área de visualización molecular avizoran un mayor potencial al prototipo como herramienta de aprendizaje. En contraste con las dos características previas, la evaluación de la usabilidad (Figura 8C) es mucho mayor entre estudiantes con licenciatura, este comportamiento puede deberse a la familiaridad que tiene el grupo de menor edad en el uso de interfaces de este tipo en las consolas de video juegos.

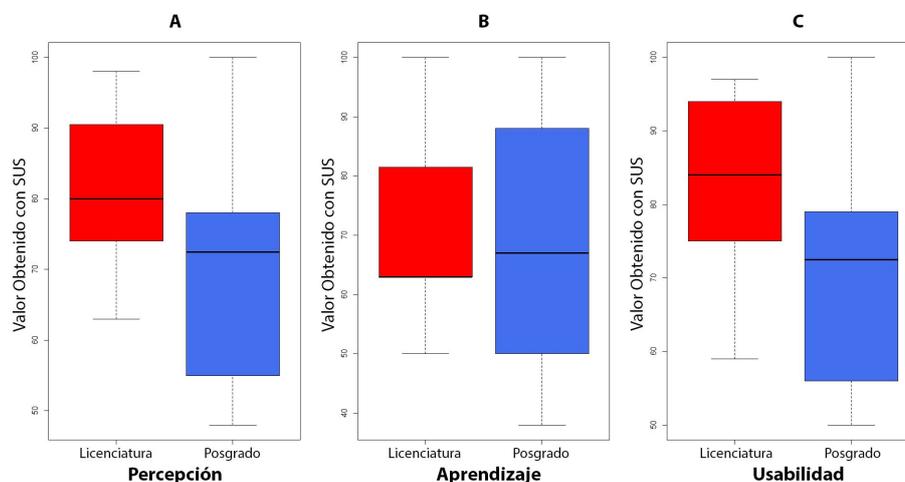


Fig. 8. Dispersión de características del DCU separadas de acuerdo al nivel educativo de los usuarios.

5 Conclusiones y trabajo a futuro

Tras las pruebas realizadas, podemos asegurar que RealMol es una interfaz que mejora la experiencia de los visualizadores moleculares con el uso de realidad virtual y facilita su uso para usuarios inexpertos. Se pueden ver algunos videos demostrativos en: <https://figshare.com/projects/RealMol/14579>. Sin embargo, notamos que, para los usuarios expertos, la interfaz propuesta les resulta más lenta en el proceso de introducir comandos a nivel gráfico que introducirlos por línea de comando, por lo que se puede concluir que en realidad resolvimos un problema de curva de aprendizaje a través de una interfaz intuitiva.

Notamos también que en la mayoría de pruebas, el control de consola de video juegos se tornó en una herramienta complementaria, principalmente porque con el uso de Kinect, el movimiento de brazos puede fatigar al usuario al mantener alzada la mano, este fenómeno se presenta también en el manejo de los menús, los usuarios se movían a través de los menús con la misma y en algunos casos con mayor velocidad que con los comandos de voz, exceptuando el caso de los dictados, los cuales siempre eran problemáticos con el uso del control. Finalmente, prevemos que este prototipo tiene un mayor impacto como aplicación didáctica y en menor grado para investigación.

Como trabajo a futuro, proponemos la implementación de una arquitectura cliente-servidor, la cual permita al servidor manipular, graficar o renderizar la información y después transmitir dicha grafica o render a los clientes. Utilizando esta técnica se podrían crear laboratorios de un costo menor al que supone el prototipo actual.

Otro trabajo a futuro será el desarrollo de una versión móvil, utilizando tecnologías de Realidad virtual móvil como Google Cardboard® o Samsung Gear VR®, procesamiento de comandos de voz y utilización de mandos para videojuegos de

tecnología Bluetooth, cuyo fin sea de igual forma la creación de laboratorios de bajo costo.

Finalmente, debe completarse el análisis cuantitativo de usabilidad para comparar tiempos y movimientos con el uso de nuestra interfaz y sin ella.

Agradecimientos

Agradecemos al Programa para el Desarrollo Profesional Docente de la Secretaría de Educación Pública de la República Mexicana por su apoyo en la adquisición de los insumos tecnológicos, a la Universidad del Caribe por las instalaciones y el apoyo administrativo, al Dr. Guillermo Rodríguez Abitia, director de la Dirección de Innovación y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Autónoma de México por las facilidades que nos proporcionó para culminar este proyecto con éxito.

Referencias

1. Hodges, M.: Xmakemol: a program for visualizing atomic and molecular systems, version 5.16, <http://www.nongnu.org/xmakemol/>
2. Herraéz, A.: Biomolecules in the computer Jmol to the rescue. *Biochemistry and Molecular Biology Education*, 34, vol. 4, 255 a 261 (2006)
3. Sayle, R. A., Milner-White, E. J.: RASMOL: Biomolecular graphics for all. *Trends in biochemical sciences*, 20, vol. 9, 374 a 376 (1995)
4. Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., y Hutchison, G. R.: Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *J. Cheminformatics*, 1, Vol. 4, 1 a 17 (2012)
5. Sanner, M. F., Stoffler, D., Olson, A. J.: Viper, a visual programming environment for python. En: *Proceedings of the 10th international python conference*, pp. 103 a 115 (2002)

6. Pettersen, E. F., Goddard, T. D., Huang, C. C., Couch, G. S., Greenblatt, D. M., Meng, E. C., y Ferrin, T. E.: Ucsf chimera – a visualization system for exploratory research and analysis. *Journal of computational chemistry*, vol. 25 (13), 1605 a 1612 (2004)
7. Berman, H. M., Westbrook, J., Feng, Z., Gilliland, G., Bhat, T., Weissig, H., Bourne, P. E.: The protein data bank. *Nucleic acids research*, vol. 28 (1), 235 a 242 (2000)
8. Gu, J., Bourne, P. E.. *Structural bioinformatics* (vol. 44). John Wiley & Sons (2009)
9. DeLano, W. L.: Pymol: An open-source molecular graphics tool. *CCP4 Newsletter On Protein Crystallography*. 40, 82 a 92 (2002)
10. Zhang, Z.: Microsoft kinect sensor and its effect. *MultiMedia, IEEE*, vol. 19 (2), 4 a 10 (2012)
11. Oculus rift-virtual reality headset for immersive 3d gaming, <https://www.oculus.com/en-us/rift/>
12. Samsung Gear VR. <http://www.samsung.com/global/microsite/gearvr/>
13. Sony Playstation VR. <https://www.playstation.com/es-es/explore/ps4/features/playstation-vr/>
14. Beck, K.: *Extreme programming explained: embrace change*. Addison-Wesley professional (2000)
15. Brooke, J.: SUS-A quick and dirty usability scale. *Usability evaluation in industry*, vol. 189 (194), 4 a 7 (1996)
16. Sánchez, J. En busca del Diseño Centrado en el Usuario (DCU): definiciones, técnicas y una propuesta. <http://www.nosolousabilidad.com/articulos/dcu.htm>
17. Jokela, T., Iivari, N., Matero, J., & Karukka, M.: The standard of user-centered design and the standard definition of usability: analyzing ISO 13407 against ISO 9241-11. En: *Proceedings of the Latin American conference on Human-computer interaction*, pp. 53 a 60. ACM (2003)