

REALMOL: INTERFAZ NATURAL DE USUARIO CON REALIDAD VIRTUAL PARA VISUALIZACIÓN MOLECULAR

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

RealM 

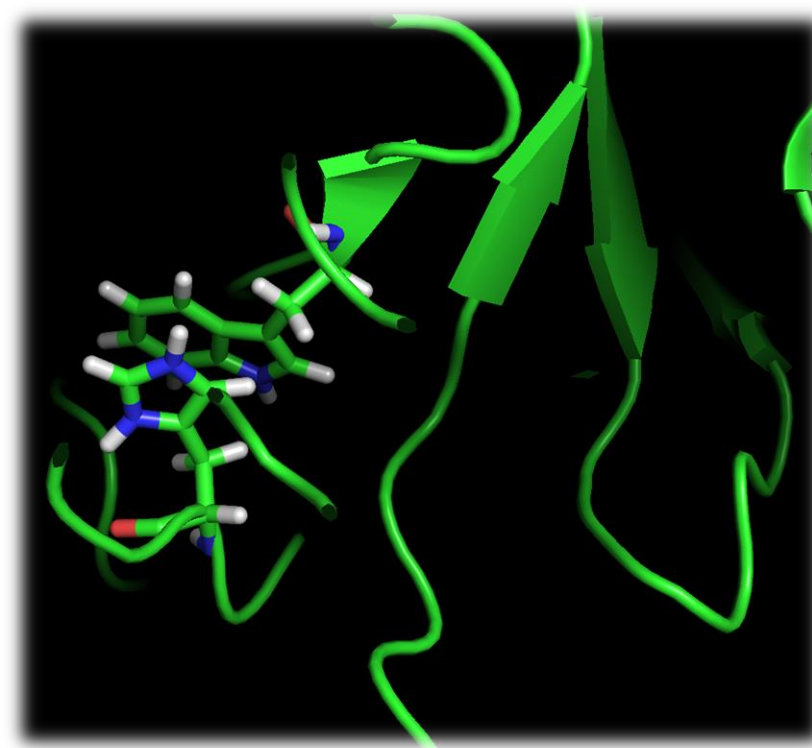
Contenido

1. Introducción
2. Problemática
3. Propuesta
4. Metodología
5. Resultados
6. Conclusiones
7. Referencias

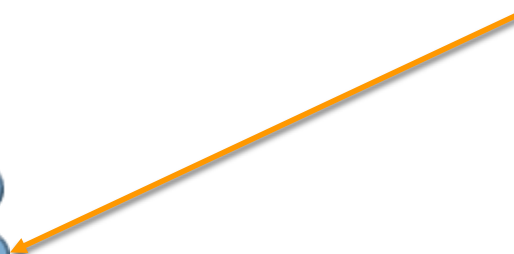
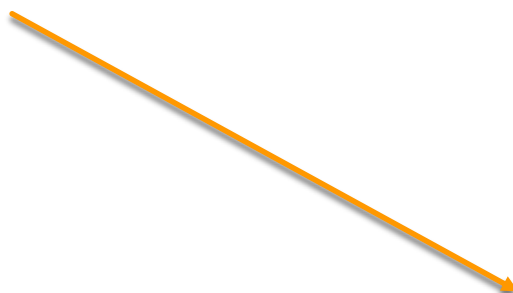
Introducción - Visualizador molecular

- Son programas capaces de proyectar estructuras tridimensionales de moléculas.
- Facilitan enormemente la interacción humano-computadora (García-Ruiz et al., 2008).
- Propósito :
 - La representación de características físicas.

(Bustos et al., 2008)



Introducción – Visualizadores moleculares



Introducción - ¿en qué destaca pymol ?



- Capacidad de generar imágenes de alta resolución.
- Soporte para modo estereoscópico.
- Integración con Python.
- Capacidad de realizar configuraciones complejas.

[Schrödinger, LLC, 2010].

Introducción - Principales tipos de realidad virtual

Realidad virtual aumentada

- Superposición de objetos virtuales sobre una escena real.
- Busca disminuir la brecha entre la escena real y los objetos virtuales.

(Fombona y cols., 2012).



Recuperado de: <https://educacioncuatropuntocero.wordpress.com>

Realidad virtual por inmersión

- Generación y despliegue de escenas generadas por computadora.
- Busca convencer al usuario de que lo que ve es real.

(Gálvez Mozo y cols., 2004).



Recuperado de: <https://rincondelatecnologia.com>

Introducción – Interfaz Natural de Usuario



Recuperado de: <https://www.ims.tuwien.ac.at>

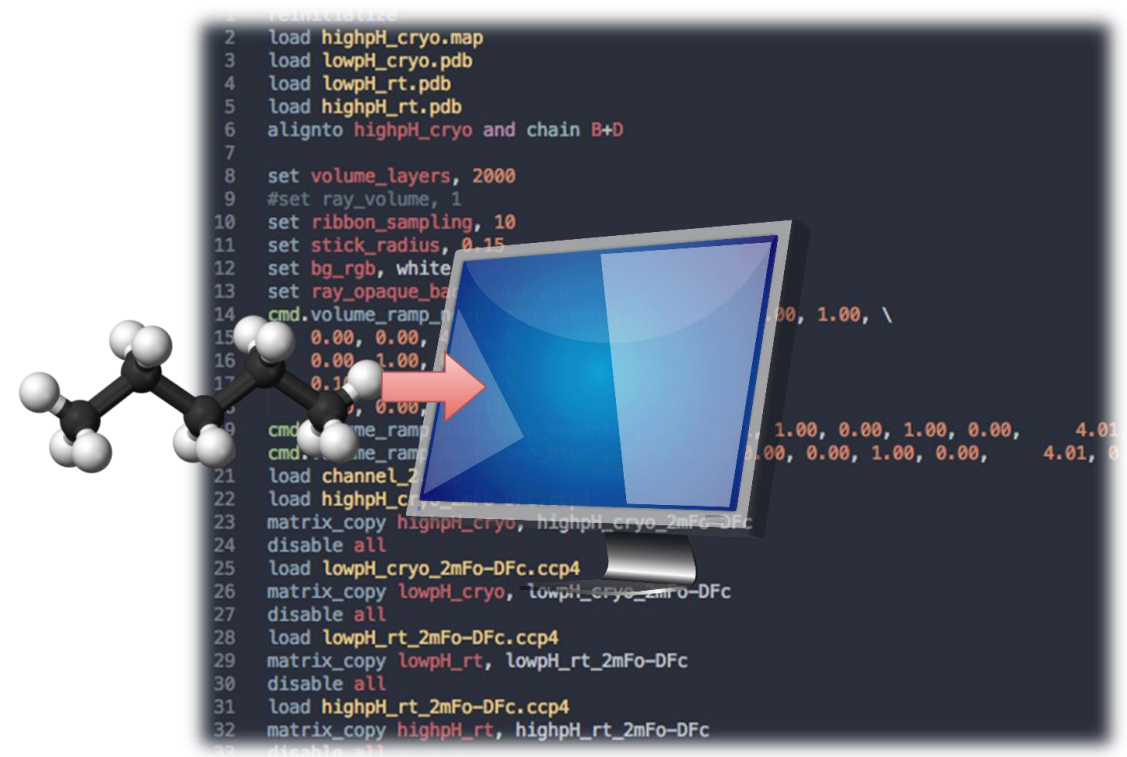
- Interfaz Natural de Usuario (NUI) por sus siglas en inglés.
- Interfaces de usuario que son efectivamente invisibles.
- Permanecen invisibles mientras el usuario aprende de forma continua interacciones más complejas.

(Wigdor y Wixon, 2011).

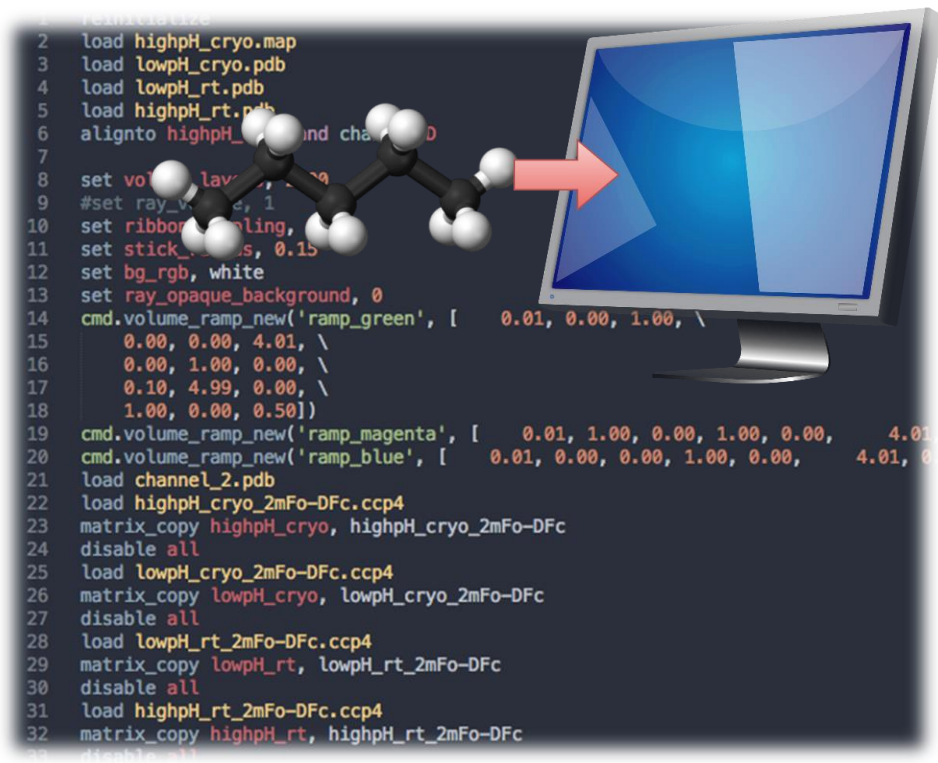
Problemática

- “Hemos constatado la dificultad que representa para los alumnos el aprendizaje de la estructura química de las moléculas, paso inicial fundamental para abordar su función y su transformación en el metabolismo; ambos, temas fundamentales en la enseñanza de la bioquímica.”

(Bustos et al., 2008)



Problemática



- El costo asociado a un alto nivel de sofisticación en la interfaz de PyMOL es la pérdida de intuición para ejecutar una acción.
- Dificultad para representar la profundidad en el despliegue de la estructura molecular en 3D en los dispositivos estándar de visualización bidimensional.
- hemos constatado la dificultad que representa para los alumnos el aprendizaje de la estructura química de las moléculas, paso inicial fundamental para abordar su función y su transformación en el metabolismo; ambos, temas fundamentales en la enseñanza de la bioquímica.

Problemática

Estado del arte (Ocumol Leap)

- Herramienta de manipulación y visualización tridimensional de moléculas.
- Integra a PyMOL con Leap Motion y Oculus Rift.
- Actualmente se encuentra en versión alpha.
- Carece de soporte técnico.
- Requiere conocimientos de programación avanzados para ser instalado.



Next Generation 3-D Molecular Visualization

Recuperado de: <http://challengepost.com>

[Jeliazkov y cols., 2015].

Propuesta a partir del estado del arte

OcuMOL Leap



PyMOL



Carencia de soporte
Instalación compleja



||

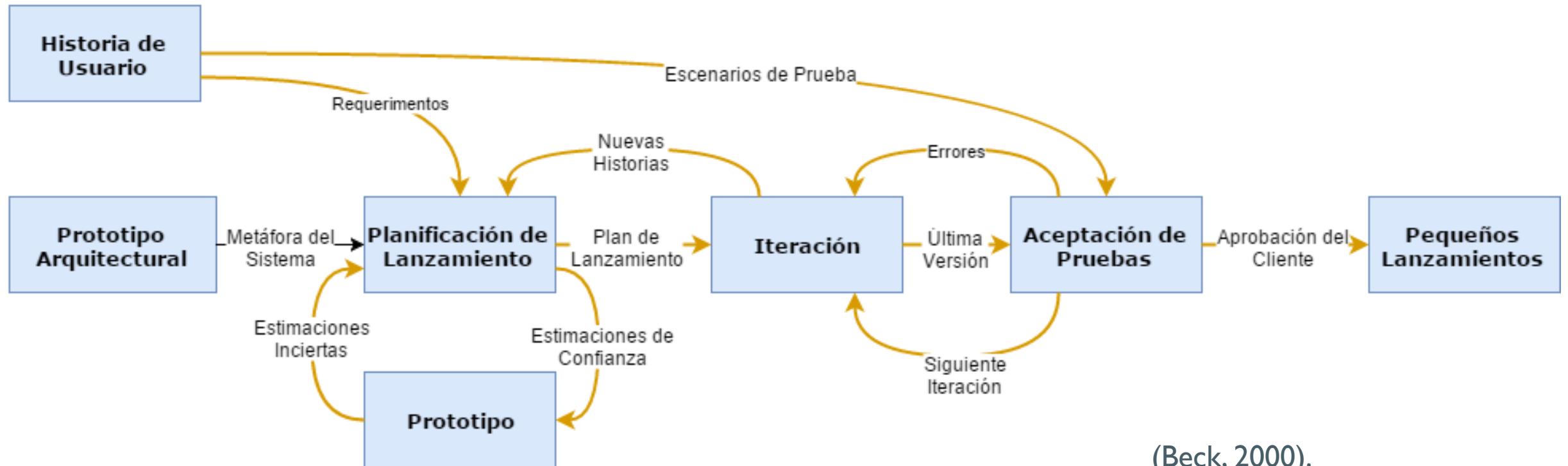
RealM CC(C)C(=O)Cc1ccc(O)cc1



Propuesta – Hipótesis de trabajo

La realidad virtual por inmersión junto con una interfaz natural de usuario mejora y facilita la manipulación de estructuras tridimensionales en los visualizadores moleculares.

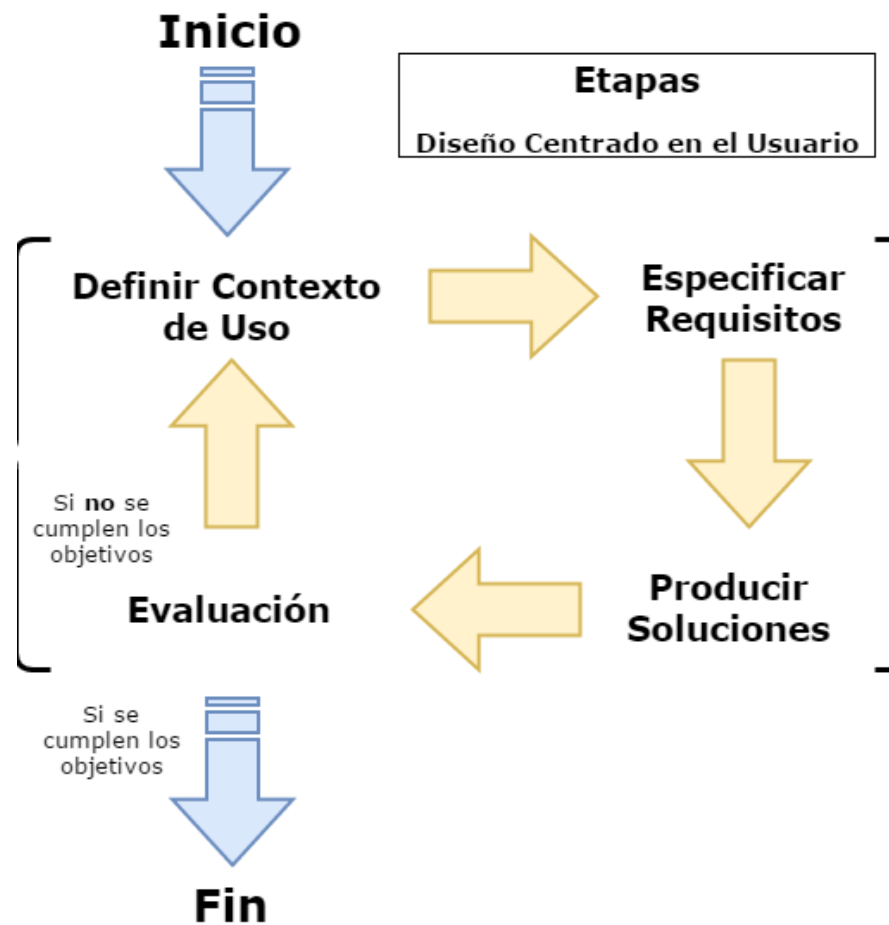
Metodología – Fases (XP)



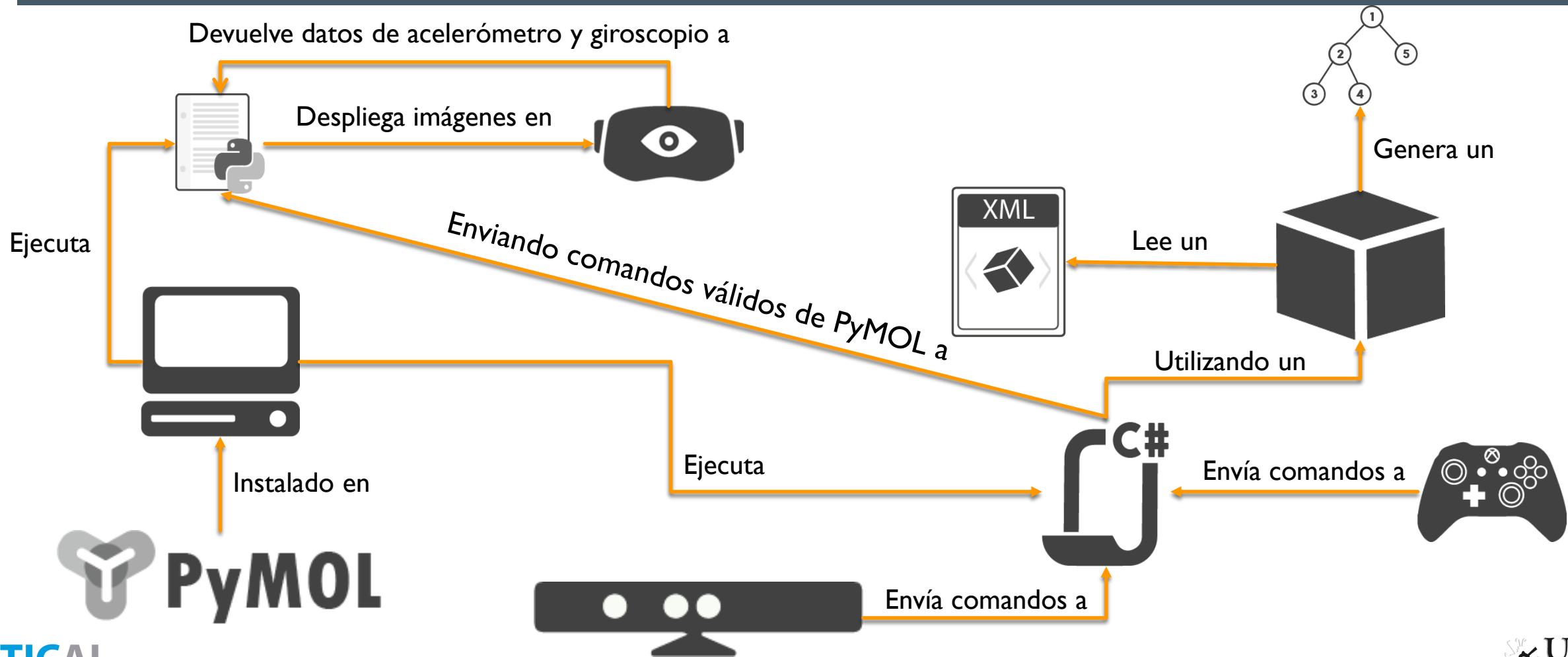
(Beck, 2000).

Metodología – Fases (DCU)

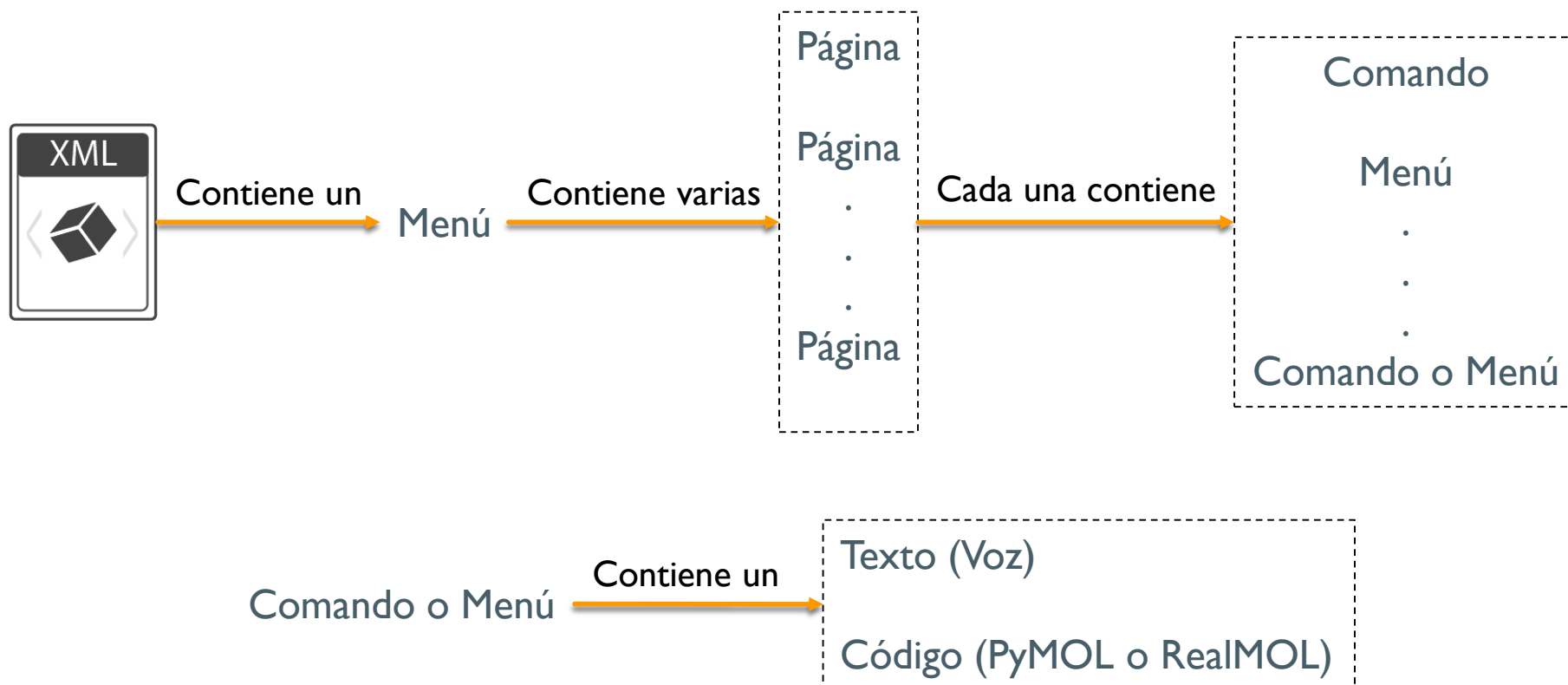
UCD
Process



Resultados – Diseño



Resultados – Estructura del XML

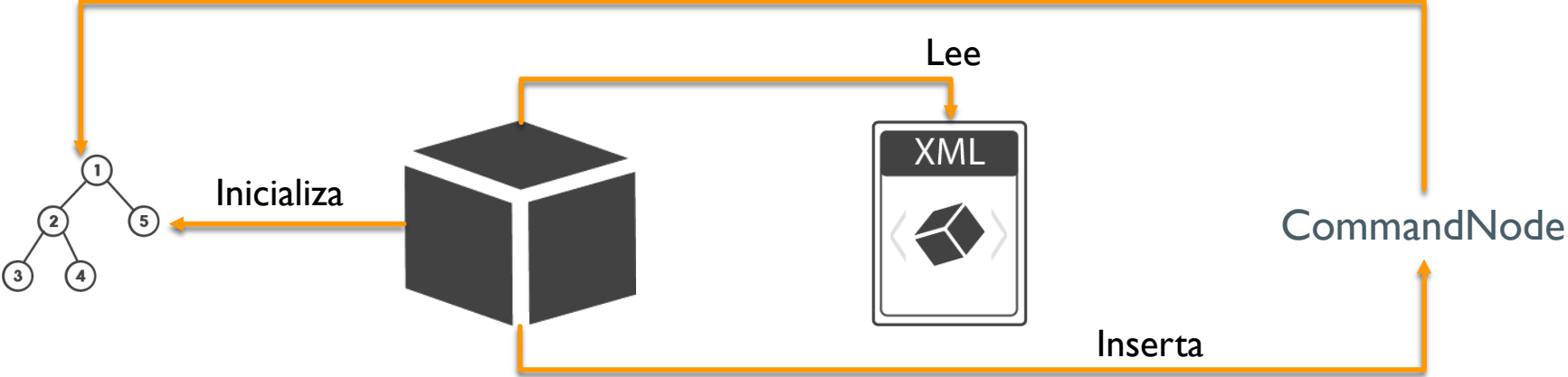


Resultados – Generación del árbol

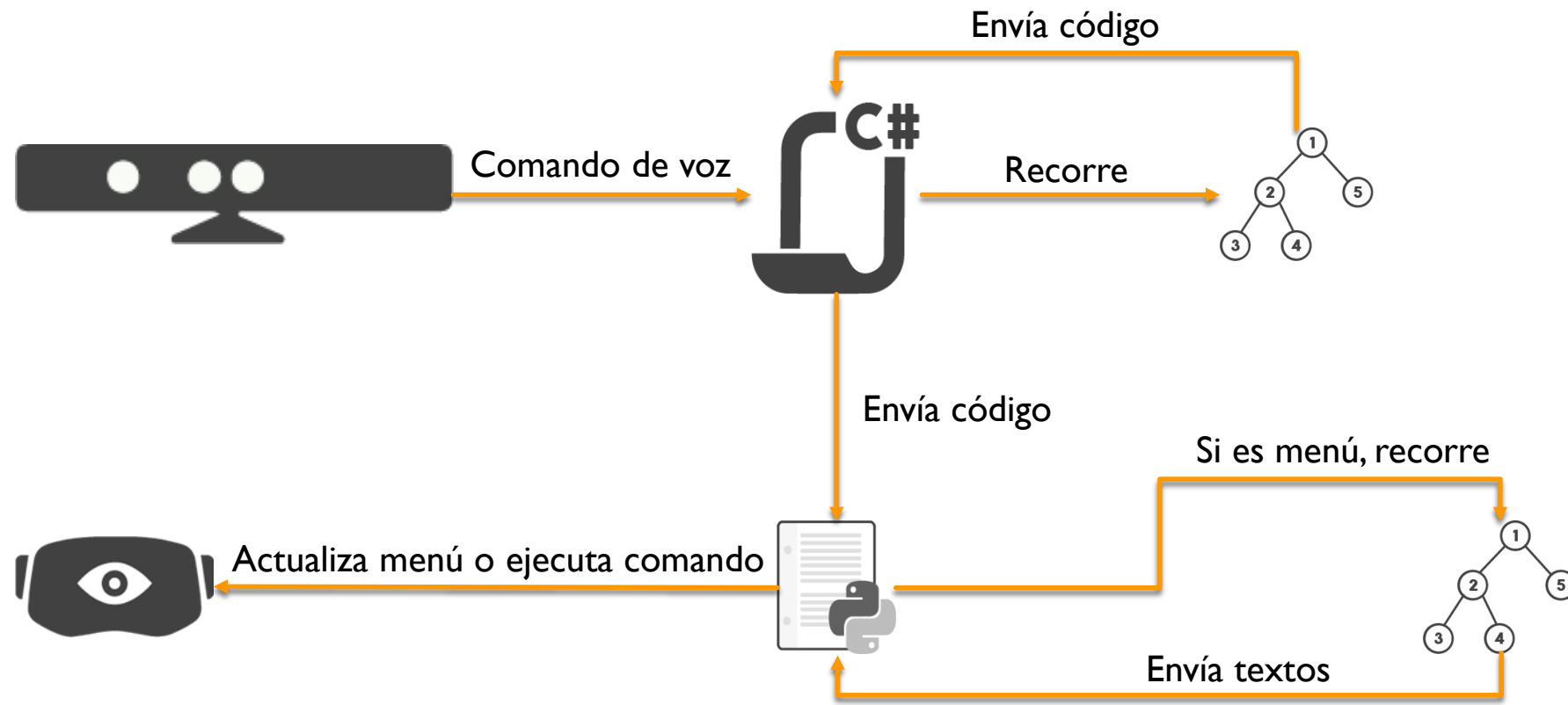
Programado para



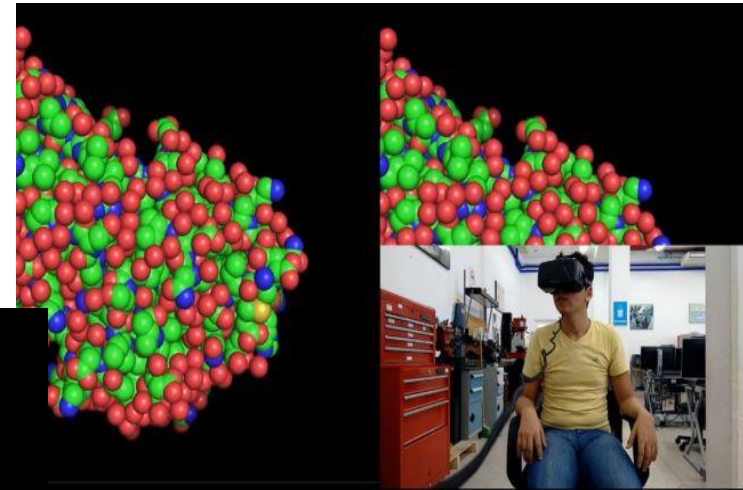
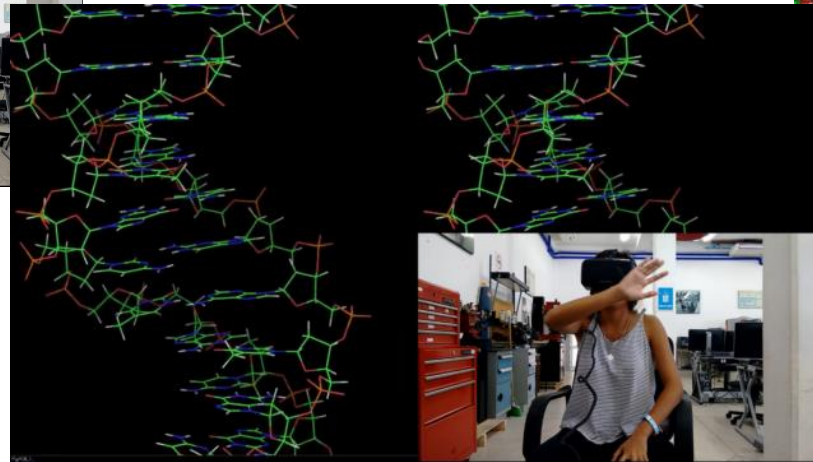
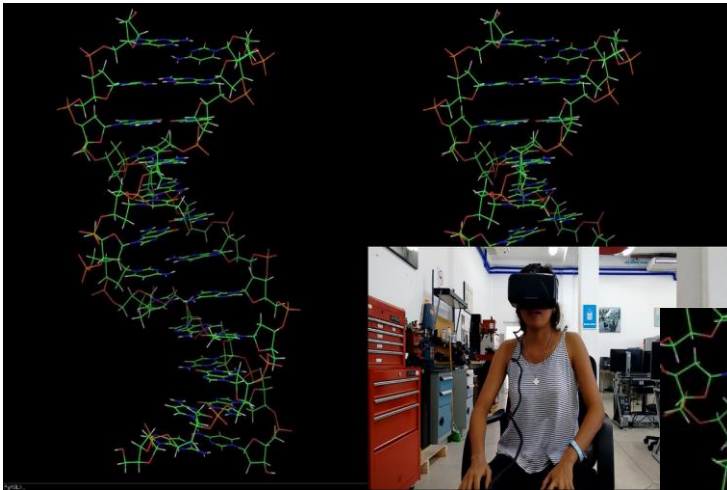
En



Resultados - Validación de los comandos de voz



Resultados - Videos



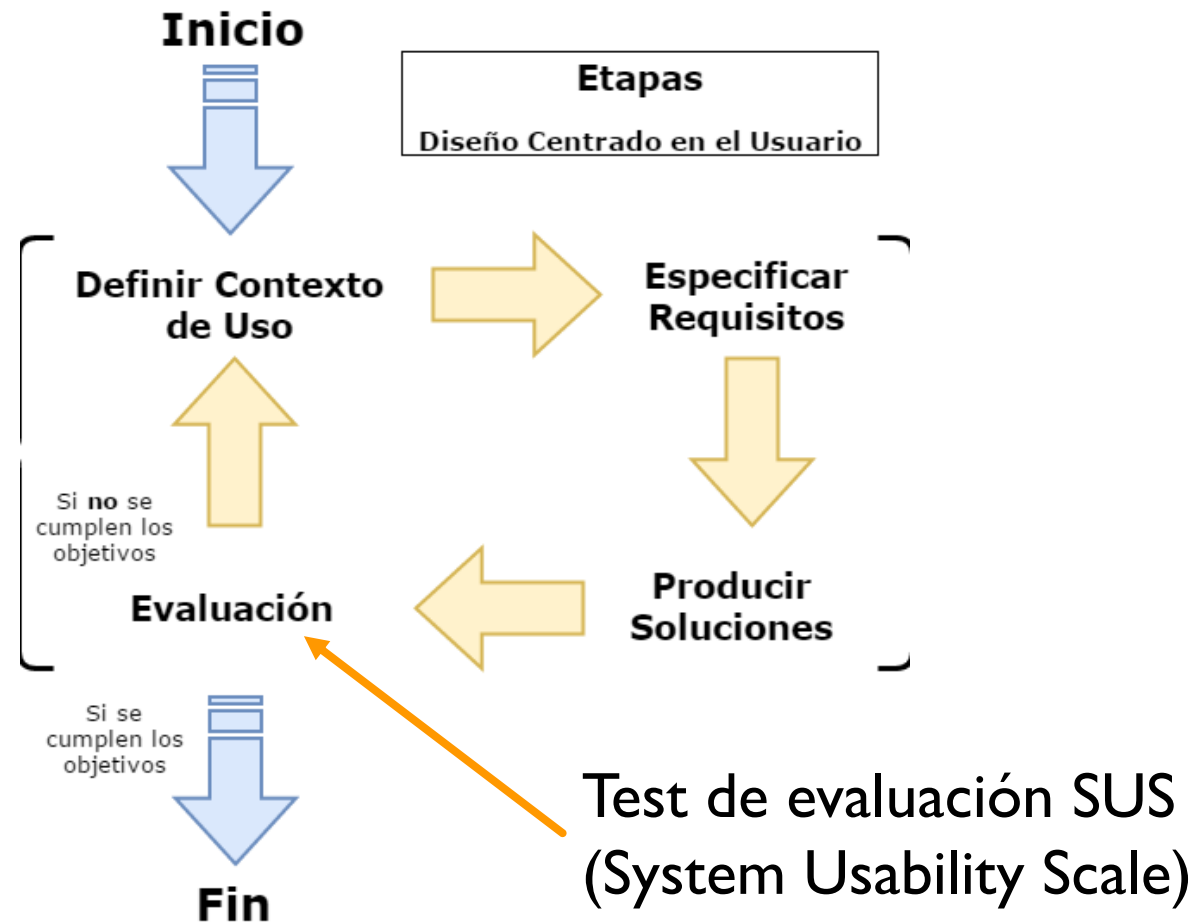
<https://figshare.com/s/1325e5eb713d76907144>

<https://figshare.com/s/1cc985c7e8777dacfac9>

<https://figshare.com/s/9d2707e73ff96267b970>

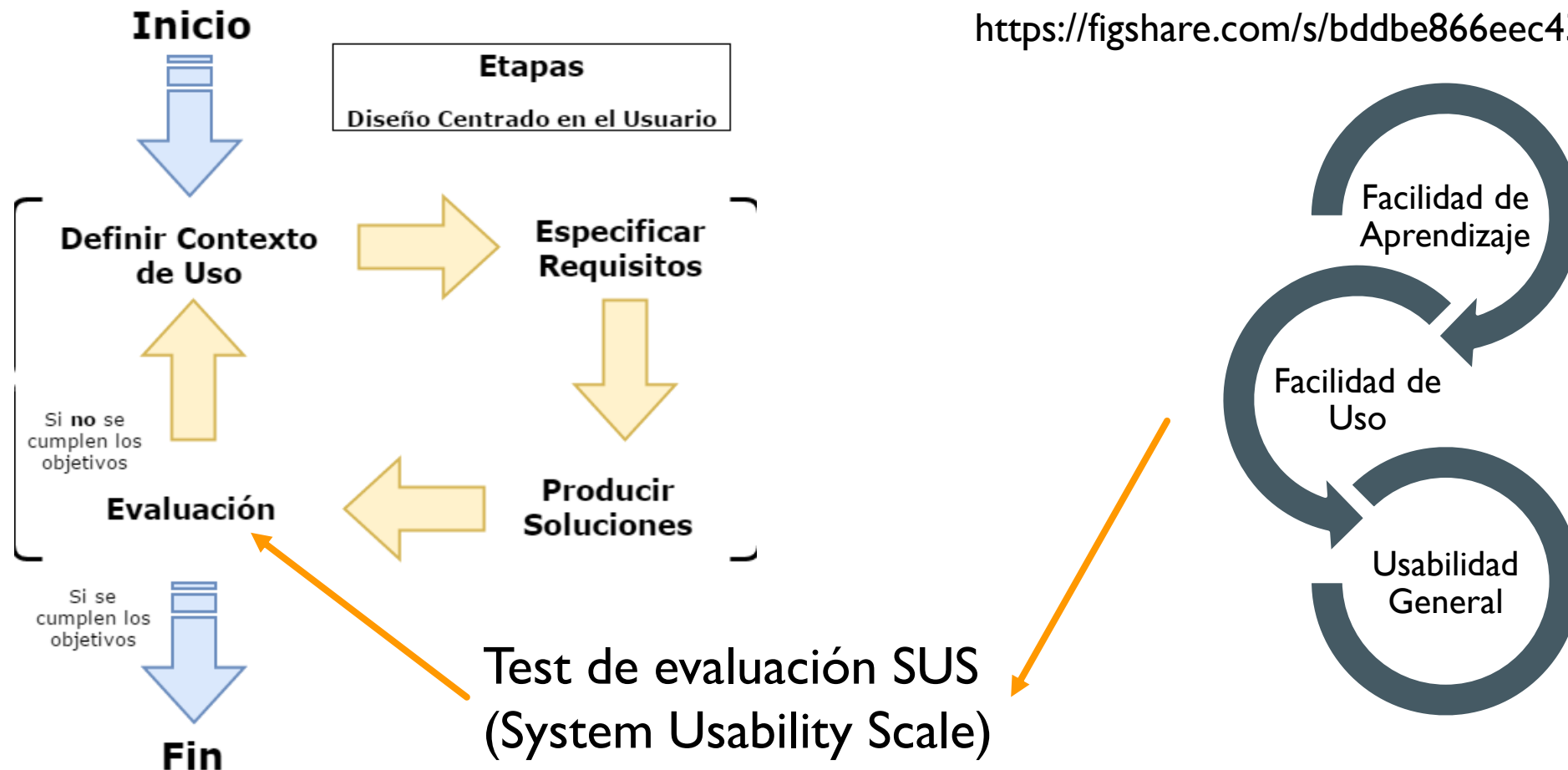
Resultados – Evaluación DCU

UCD Process



Resultados – Evaluación DCU

<https://figshare.com/s/bddbe866eec43e6138c9>

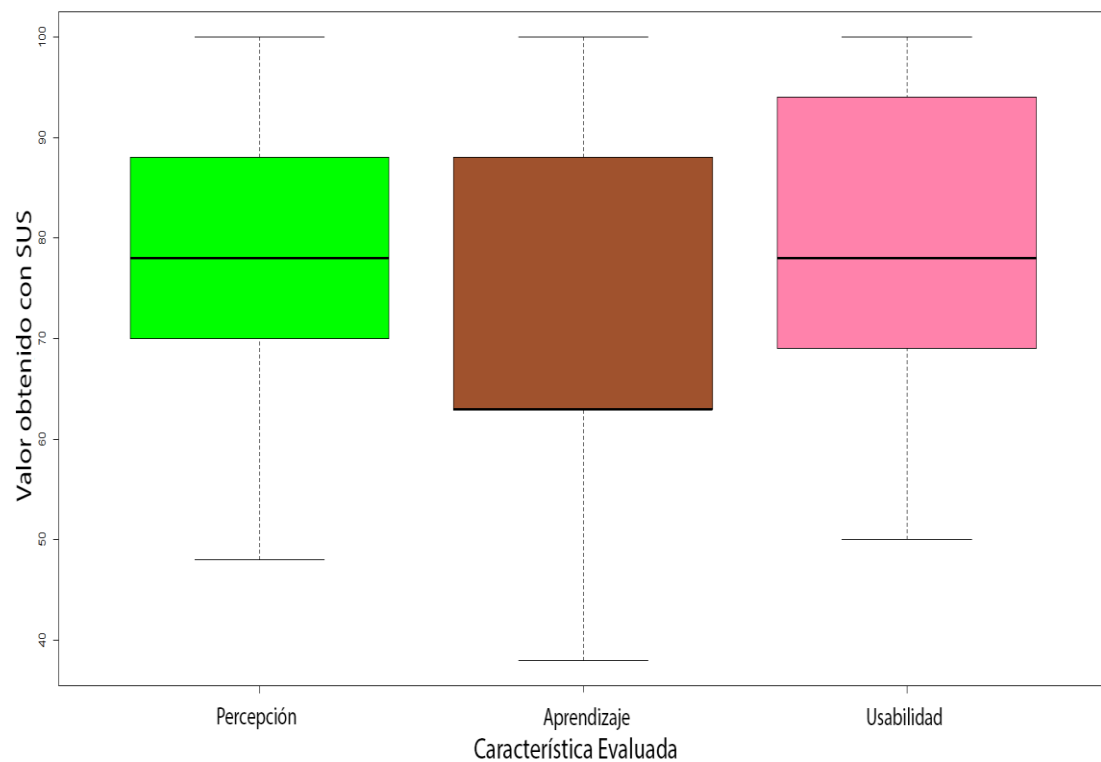


Resultados - Análisis preliminar de la evaluación SUS

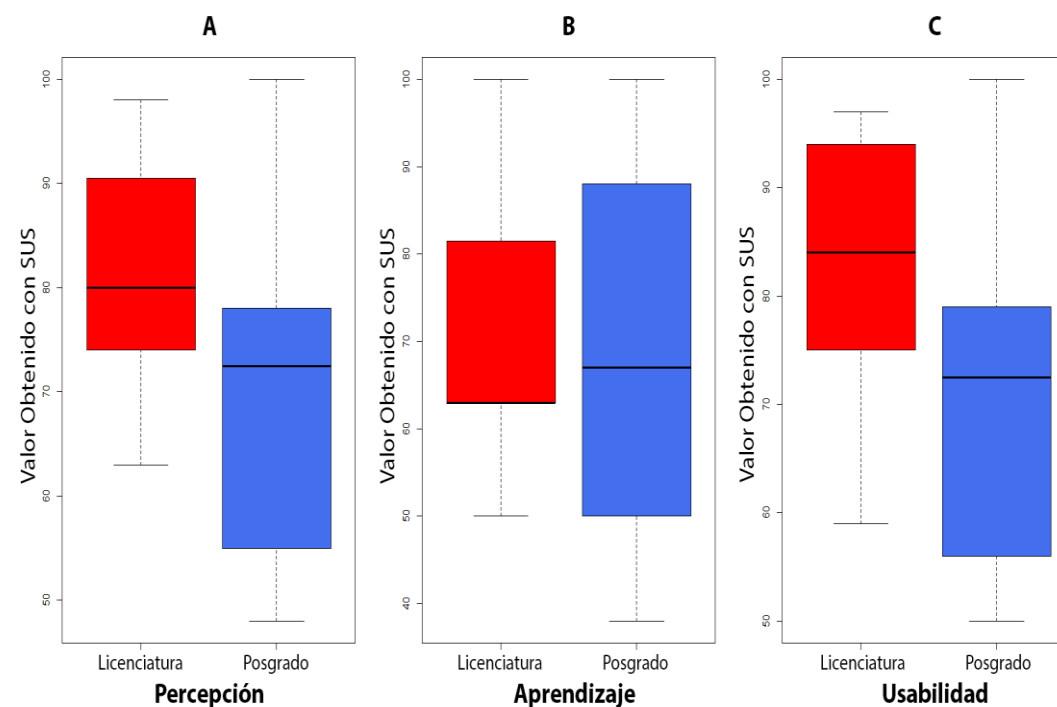
Calificación SUS	Calificación	Percentil
84.1 – 100	A+	96 – 100
80.8 – 84	A	90 – 95
78.9 – 80.7	A-	85 – 89
77.2 – 78.8	B+	80 – 84
74.1 – 77.1	B	70 – 79
72.6 – 74	B-	65 – 69
71.1 – 72.5	C+	60 – 64
65 – 71	C	41 – 59
62.7 – 64.9	C-	35 – 40
51.7 – 62.6	D	15 – 34
0 – 51.7	F	0 – 14

(Sauro, 2012).

Resultados - Análisis preliminar de la evaluación SUS



Dispersión de los valores totales obtenidos con SUS.



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

Conclusiones

- Prototipo funcional para el manejo de visualizadores moleculares que utiliza realidad virtual por inmersión y una interfaz natural de usuario (NUI).
 - 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.
 - Su implementación es relativamente económica.
 - Introduce un campo en crecimiento en la realidad virtual y la NUI a otras disciplinas.

Conclusiones - Trabajo a futuro

- Añadir soporte para Kinect 2.0.
- Añadir soporte para otros dispositivos de realidad virtual.
- Ampliar la lista de comandos.
- Añadir soporte para creación de animaciones o películas.
- Añadir soporte para otros visualizadores moleculares.
- Grabar sesiones para stand alone o con proyectores 3D

Referencias - I

- García-Ruiz, M. Á., Valdez-Velazquez, L. L., y Gómez-Sandoval, Z. (2008). Integration of molecular scientific visualization in the classroom. *Química Nova*, 31(8), 2184–2189.
- Bustos Jaimes, I., Castañeda Patlán, C., Oria Hernández, J., Rendón Huerta, E., Reyes Vivas, H., Romero Álvarez, I., & Universitaria, A. D. M. C. (2008). Herramientas de Visualización Molecular Para La Enseñanza. *Mensaje Bioquímico*, 32.
- Schrödinger, LLC. (2010, August). *The PyMOL molecular graphics system*, version 1.3r1.
- Fombona Cadavieco, J., Pascual Sevillano, M. Á., & Madeira Ferreira Amador, M. F. (2012). *Realidad aumentada, una evolución de las aplicaciones de los dispositivos móviles*.
- Gálvez Mozo, A. M., y cols. (2004). *Posicionamientos y puestas en pantalla. un análisis de la producción de sociabilidad en los entornos virtuales*.
- Oculus VR. (2014b). *Oculus rift-virtual reality headset for immersive 3d gaming*. See <https://www.oculus.com/en-us/rift/>. ([Online; accessed October 15, 2015])

Referencias - II

- Wigdor, D., y Wixon, D. (2011). *Brave nui world: designing natural user interfaces for touch and gesture*. Elsevier.
- Zhang, Z. (2012). *Microsoft kinect sensor and its effect*. MultiMedia, IEEE, 19(2), 4–10.
- Jeliaskov, J., Matyszewski, M., Lessen, H., y Klein, M. (2015). *Ocumol leap: 3-d molecular visualization and manipulation with pymol, oculus rift, and leap motion* (2015). See <http://challengepost.com/software/ocumol-leap> (accessed June 22, 2015).
- Beck, K. (2000). *Extreme programming explained: embrace change*. Addison-Wesley Professional.
- Jokela, T. (2002, October). Making user-centred design common sense: striving for an unambiguous and communicative UCD process model. In *Proceedings of the second Nordic conference on Human-computer interaction* (pp. 19-26). ACM.
- Sauro, J., & Lewis, J. R. (2012). *Quantifying the user experience: Practical statistics for user research*. Elsevier.