

MEMORIA FINAL

Compromisos y Resultados

Actuaciones Avaladas para la Mejora Docente

2021/2022

Identificación del proyecto	
Código	sol-202100203349-tra
Título	Adaptación de un software para visionar moléculas a los entornos de realidad virtual
Responsable	David Zorrilla Cuenca

1. Describa los resultados obtenidos a la luz de los objetivos y compromisos que adquirió en la solicitud de su proyecto¹. Copie en las dos primeras filas de cada tabla el título del objetivo y la descripción que incluyó en el apartado 2 de dicha solicitud e incluya tantas tablas como objetivos contempló.

Objetivo nº 1	Información, estudio y evaluación sobre las librerías involucradas en la programación de entornos con realidad virtual		
Indicador de seguimiento o evidencias:	<i>Búsqueda del software que existe en el mercado sobre la visualización y edición de sistemas moleculares</i>		
Valor numérico máximo que puede alcanzar el indicador (lo estableció en la solicitud del proyecto):	10	Valor numérico alcanzado por el indicador tras la ejecución del proyecto:	10
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:	<i>A los 2 meses aprox. desde el inicio del proyecto</i>	Fecha de medida del indicador:	<i>2 meses</i>
Actividades previstas:	<i>Se ha realizado un estudio sobre el software existente en el mercado con el objeto de visionar moléculas y otros tipos de sistemas químicos.</i>		
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<p><i>En nuestra búsqueda de software para la modelización de los sistemas químicos hemos encontrados dos categorías bien diferenciadas:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>Aquellos que permite el visionado de ficheros típicos en el ámbito de la mecánica cuántica, que describen, a grandes rasgos, la posición y el símbolo/número atómico de los átomos que forman el sistema química</i> - <i>Aquellos que consideran el sistema como una "multimalla" de polígonos que conforma los átomos y las moléculas.</i> <p><i>En el mercado existen varios del primer tipo (nombraré los que considero más</i></p>		

¹ La relación incluida en el documento *Actúa* que adjuntó en su solicitud a través de la plataforma de la Oficina Virtual.

	<p>relevantes):</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ “Nanome” (blog.matryx.ai) ▪ “AR VR Molecules Editor” (www.facebook.com/AR-VR-Molecules-Editor-738957049623424) ▪ “Molecule 2 VR” (www.appmindedapps.com/science.html) <p>Los dos primeros permiten, no sólo visualizar los sistemas, sino que también permiten modificarlos y/o crearlos desde cero. El último de ellos es sólo un visor. Todos ellos leen ficheros con extensión pdb (protein data bank - www.rcsb.org) que es un formato muy estandarizado en el ámbito de la química computacional. No obstante, existen conversores de formatos para los tipos más comunes, bien online como en www.webqc.org, o usando las librerías de OpenBabel (openbabel.org/wiki/Main_Page), lo que no sería impedimento para importar cualquier tipo de archivos.</p> <p>Las ventajas de este tipo de software es que ya están programados y nos es fácil de probar en sus versiones “free”, además nos sirven como banco de pruebas para futuro software realizado por nosotros. El mayor impedimento de usar este tipo de software es que son de pago y de código cerrado, lo cual no nos permite modificar su código para poder implementar otras características al programa.</p> <p>Por otro lado están el software que trata a todo el sistema como una maya 3d. Utiliza ficheros con extensión obj, que son muy extendidos en ficheros de dibujos 3d. Actualmente se puede transformar “nuestros” ficheros (xyz, pdb, etc.), en ficheros obj, que guarda sólo los puntos y uniones de una maya tridimensional.</p> <p>Un ejemplo de este tipo es “Gravity Sketch” (www.gravitysketch.com) que además es gratuito.</p> <p>El inconveniente de este software es que no maneja los tipos de ficheros que solemos usar en química computacional y es más útil en programas de dibujo 3d, a pesar que nos podría venir bien para visualizar superficies de energía (de distintos tipos) y objetos similares.</p>		
Objetivo nº 2	Adaptación del software a la VR		
Indicador de seguimiento o evidencias:	Instalación y uso del software que existe en el mercado sobre la visualización y edición de sistemas moleculares		
Valor numérico máximo que puede alcanzar el indicador (lo estableció en la solicitud del proyecto):	10	Valor numérico alcanzado por el indicador tras la ejecución del proyecto:	10
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:	A los 8 meses aprox. desde el inicio del proyecto	Fecha de medida del indicador:	6 meses
Actividades previstas:	Se ha instalado y probado todo el software comentado en el objetivo 1 (y alguno más) y se ha estudiado la viabilidad de modificar el código con el objetivo de personalizarlo a nuestro gusto.		
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	Una vez probado todo el software debemos destacar que ninguno de ellos permite la modificación del código fuente, es software propietario. Esto es el mayor		

impedimento, como ya hemos comentado, de todo este tipo de software, lo que no nos permitirá en un futuro crear nuestras propias aplicaciones a partir de ellos. No obstante no es inútil su uso, sino que nos sirve para crear los sistemas de químicos para su visualización, pero no nos permitirá crear elementos adicionales que pueden ser útiles en nuestros estudios (simetrías, planos de simetrías, centros de inversión, puntos críticos de la teoría de Bader para su análisis topológico, hipersuperficies de energía potencial, ...).

Por todo ello, considero que siempre es más interesante la creación de un código propio, para así poder modificarlo en cualquier momento. Ello lleva un esfuerzo "titánico" para grupos de investigación pequeños (como es el caso del nuestro) ya que deben atender a la docencia, la investigación, la publicación de artículos, y además incluir la programación de este tipo de software, que no sólo lleva el conocimiento de una programación "tradicional" (c, c++, fortran,...) sino que además debemos adentrarnos en lenguajes nuevos para la programación 3d (opengl, directx,...) y para la programación AR (augmented reality) o VR (virtual reality).

Con el objeto de no "desperdiciar" el tiempo aprendiendo lenguajes de VR que no fuesen lo más adecuado, o que se prevean que acabarán pronto su uso, hemos estudiado concienzudamente qué lenguaje o librería es más adecuado para la programación de estos entornos. En este punto se pueden hacer dos categorías:

- *Lenguajes web: se pueden programar estos entornos virtuales usando lenguajes basados en la web, como por ejemplo, javascript (es.wikipedia.org/wiki/JavaScript), que es un lenguaje que se programa en el cliente y que cuenta con toda la potencia de un lenguaje consolidado a lo largo de muchos años. Con este lenguaje se ha programado una librería para programar en 3d vía web: three.js (threejs.org) y a partir de esta librería se ha creado un lenguaje de programación para programar en VR: aframe (aframe.io). Este es un lenguaje idóneo, desde mi punto de vista, para programar en AR/VR, que con muy poco esfuerzo, cualquiera puede crear mundos virtuales (eso sí, si uno quiere profundizar, es necesario conocer bien three.js y por supuesto javascript, que ya no es tan evidente). Con este lenguaje se programa en y para el navegador web (a veces hay que particularizar para algunos de ellos, bien sea Chrome, Edge, firefox, Opera,...) que deben estar preparados para esta nueva tecnología. Esto nos permitirá que nuestros programas se vean no solo con las gafas AR o VR, sino que se verá en cualquier ordenador (aunque sin el efecto de inmersión de las gafas 3d).*
- *Motores gráficos: en el mercado existe infinidad de motores gráficos para programar en 3d (y aplicarlos a la AR/VR). Concretamente los más usados son Unity (unity.com) y Unreal Engine (www.unrealengine.com). Con estos lenguajes se puede programar directamente en las gafas VR (como las oculus quest 2), el inconveniente es que estos lenguajes son muy complejos y necesitan mucho tiempo de aprendizaje.*

En mi opinión, ya he estado probando tanto el aframe como unity, y por ahora me decanto por aframe. Ya he solicitado (y me han concedido) otro proyecto de "innovación y mejora docente" (sol-202200229625-tra) para poner en práctica la programación de un visor/editor 3d con este novedoso lenguaje de programación para la realidad virtual.

Objetivo nº 3	Evaluación de las competencias adquiridas o mejoradas por alumnos con el uso de la VR en el mundo de la química		
Indicador de seguimiento o evidencias:	<i>No ha sido posible la realización de este apartado porque debía ser a final del curso, y yo sólo tengo docencia en el primer semestre en la asignatura de Química Física, que es donde se llevaría a cabo estas pruebas</i>		
Valor numérico máximo que puede alcanzar el indicador (lo estableció en la solicitud del proyecto):	10	Valor numérico alcanzado por el indicador tras la ejecución del proyecto:	0
Valor numérico máximo que puede tomar el indicador:	10		
Fecha prevista para la medida del indicador:		Fecha de medida del indicador:	
Actividades previstas:	<i>Se intentará realizar las encuestas en el próximo curso si es posible, ya que antes hay que crear el software VR para la visualización de las moléculas, que está previsto en el nuevo proyecto de innovación ya concedido (proyecto).</i>		
Actividades realizadas y resultados obtenidos:			

2. Marque una X bajo las casillas que correspondan en la siguiente tabla. Describa las medidas a las que se comprometió en la solicitud y las que ha llevado a cabo.

Compromiso de compartición / difusión de resultados en el entorno universitario UCA adquirido en la solicitud del proyecto				
1. Sin compromisos	2. Compromiso de impartición de una charla o taller para profesores	3. Adicionalmente fecha y centro donde se impartirá	4. Adicionalmente programa de la presentación	5. Adicionalmente compromiso de retransmisión o grabación para acceso en abierto
<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Descripción de las medidas comprometidas				
<p><i>Se hará un seminario entre los profesores del departamento de Química Física, sobre el uso del software. Adicionalmente y bajo petición de otros profesores de otros departamentos se podrá realizar algún seminario para mostrar el proyecto a otros departamentos de la Facultad de Ciencias o de otras facultades si fuese necesario (Ciencias de Mar, EPSA, ESI).</i></p> <p><i>También se intentará hacer algunas charlas/ taller en eventos organizados por nuestra Universidad, como podría ser, "la noche Europea de los investigadores", "Ciencias Around You" o "Semanas de la Ciencia y la Tecnología".</i></p>				
Descripción de las medidas que se han llevado a cabo				
<p><i>Se ha realizado una charla informativa para profesores del departamento de Química Física para informar de la potencialidad de estas tecnologías de AR/VR enfocada a la docencia y a la investigación. Se ha valorado su utilidad y se ha tenido en cuenta la necesidad del profesorado con estas herramientas.</i></p>				