

# MEMORIA FINAL<sup>1</sup>

## Compromisos y Resultados

### Proyectos de Innovación y Mejora Docente

#### 2022/2023

Identificación del proyecto	
Código	sol-202200229625-tra
Título	Desarrollo de un software para el diseño de estructuras moleculares en un entorno de realidad virtual como material didáctico de apoyo en laboratorios de alumnos
Responsable	<b>David Zorrilla Cuenca</b>

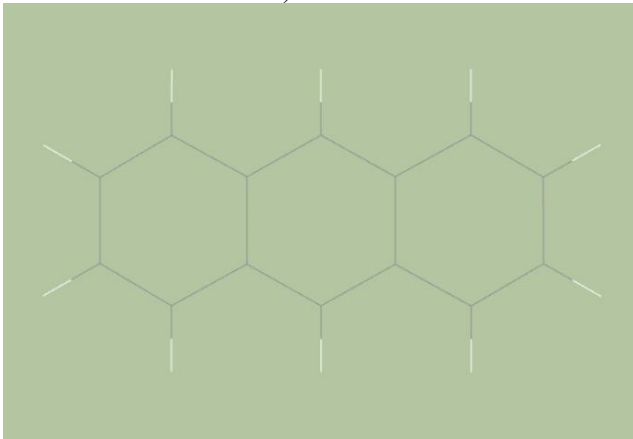
1. Describa los resultados obtenidos a la luz de los objetivos y compromisos que adquirió en la solicitud de su proyecto. Incluya tantas tablas como objetivos contempló.

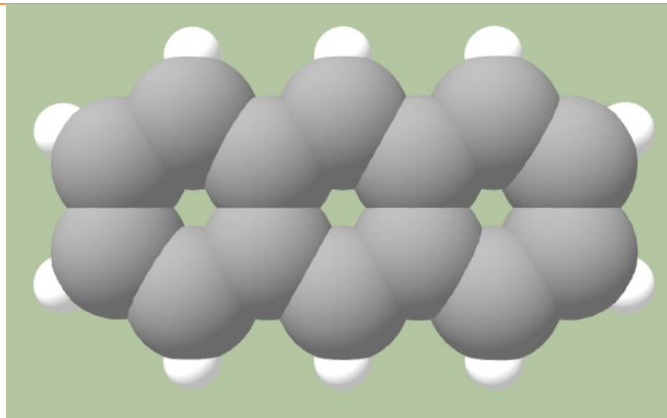
Objetivo nº 1	<i>Información, estudio y evaluación sobre que lenguaje de programación es adecuado en la programación de entornos con realidad virtual</i>
Actividades que había previsto en la solicitud del proyecto:	<i>Elección del software de programación que se va a utilizar</i>
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<p><i>Este apartado no es baladí ya que hay que estar seguro de donde queremos llegar y sobre todo, para qué se va a programar.</i></p> <p><i>Como se ha comentado en la solicitud, para programar en entornos de Realidad Virtual (VR) existen dos categorías:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>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.</i></li> <li>- <i>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</i></li> </ul>

<sup>1</sup> Esta memoria no debe superar las 6 páginas.

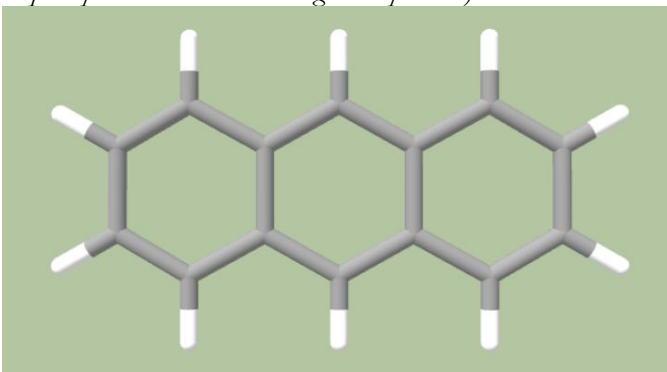
*three.js y por supuesto javascript, que ya no es tan evidente). Con este lenguaje se programa en y para el navegador web (a veces hay que particularizar para algunos de ellos, bien sea Chrome, Edge, firefox, Opera,...) que deben estar preparados para esta nueva tecnología. Esto nos permitirá que nuestros programas se vean no solo con las gafas AR o VR, sino que se verá en cualquier ordenador y con cualquier sistema operativo, bien sea Windows, Linux o Mac, ya que es el navegador el que renderiza en 3D (por supuesto es necesario tener las gafas 3d para una total inmersión).*

*Por tanto, en este proyecto de innovación hemos optado por usar aframe para hacer un visor molecular.*

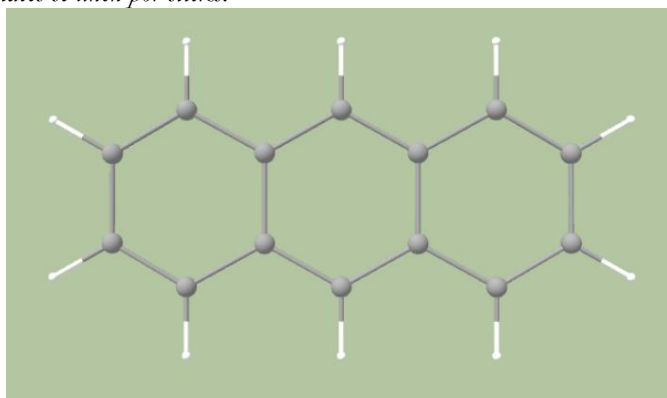
Objetivo nº 2	Programación del software para el visionado y creación de sistemas moleculares
Actividades que había previsto en la solicitud del proyecto:	<b>Programación del software</b>
Actividades realizadas y resultados obtenidos:	<p><i>Como primer punto se ha programado (en aframe con javascript) un código de lectura de los ficheros de datos para los sistemas moleculares. Existen multitud de ellos, pero el más sencillo viene dado por el símbolo o número atómico de cada elemento y sus coordenadas cartesianas (ficheros *.xyz). Se ha programado una subrutina para ello y se ha dejado libertad para ampliar a otros formatos. Se han programado subrutinas para “dibujar” en 3D (renderizar) los sistemas. Se han creado varias opciones de visionado:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>Sticks (son líneas que unen los átomos que forman enlaces entre sí, la mitad con el color correspondiente al átomo de partida y la otra mitad de la línea con el color del otro átomo).</i></li> </ul> <div data-bbox="762 1272 1398 1709" data-label="Chemical-Block">  </div> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <i>Bolas (cada átomo se representa por bolas, escaladas al radio atómico de las mismas, o bien dejando a todas con el mismo radio).</i></li> </ul>



- Cápsulas (cada átomo se representa por una semicapsula que va unida a otra que representa el otro átomo ligado al primero).



- Bolas y sticks (cada átomo se representa por bolas y aquellos que forman enlaces se unen por sticks).



*Ni que decir tiene que esto hay que verlo en un entorno VR con las gafas 3D. Además, se han programado multitud de opciones, agrupadas en menús contextuales, para ir variando las características de la representación.*



Options

Geometry Axes Colors

Seleccionar archivo Ninguno archivo selec.

Show/Hide Geometry

Bonding tolerance: 1.2 Å

Type:

Bonds  Balls

Tubular  Balls and sticks

Scale balls with covalent radius

Ball radius factor: 7.5

Tube width factor: 1.5

Ball/Stick factor: 2.0

Show/Hide hydrogens

Show/Hide atom symbol

Show/Hide atom index

Clear

Options

Geometry Axes Colors

Show/Hide axes

Show/Hide axes label

Axes length factor: 3.0

Axes width factor: 1.5

Arrow length factor: 3.0

Arrow width factor: 5.0

Clear

Options

Geometry Axes Colors

Atoms Color

Color:  CPK  JMOL

Background Color

Red: 180

Green: 142

Blue: 107

Clear

Todo ello nos lleva a una aplicación completa para visionar en VR cualquier molécula dada en el formato xyz (que será ampliado posteriormente a otros formatos).

### Objetivo nº 3

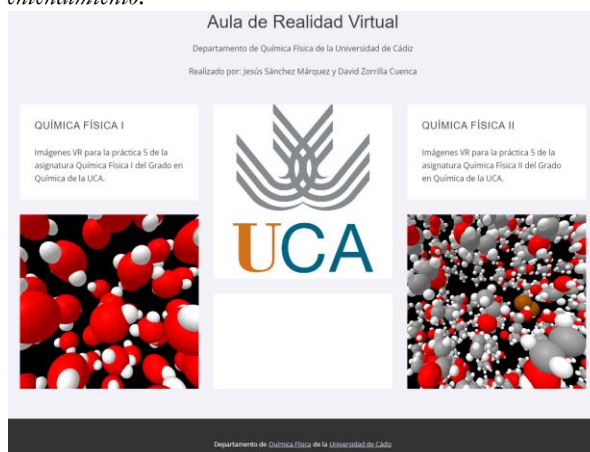
*Evaluación de las competencias adquiridas o mejoradas por alumnos con el uso de la VR en el mundo de la química*

Actividades que había previsto en la solicitud del proyecto:

*Creación de material necesario para la aplicación en el laboratorio de estas técnicas*

Actividades realizadas y resultados obtenidos:

*Se ha creado, además de los cuestionarios, una página web (alojada en un servidor interno del departamento de Química-Física: <http://tesla.uca.es>, que se puede acceder desde la UCA sin problema y desde fuera de la UCA con VPN), donde se han programado algunos ejemplos asociados a las prácticas que ya existían para mejorar su entendimiento.*



**Practicas de Química Física II**  
Imágenes VR para la práctica 5 de la asignatura QFII

**ETANOL + I<sub>2</sub> (VR-ESTÁTICA)**

Esta experiencia-VR se ha obtenido partiendo de una dinámica molecular de 1 ns de duración a 300 K donde se ha empleado un campo de fuerzas OPLS. La experiencia consiste en el punto final de la dinámica.



**ETANOL + I<sub>2</sub> (OPTIMIZACIÓN OPLS)**

Esta experiencia-VR consiste en una optimización de geometría de 50 moléculas de etanol y una de I<sub>2</sub> (un total de 506 átomos). Se ha empleado un campo de fuerzas OPLS y el método de optimización ha sido Powell-Fletcher (gradientes conjugados).

**ETANOL + I<sub>2</sub> (ESFERA DINÁMICA)**

Se ha tomado el último ps de la dinámica anterior y se ha construido una experiencia-VR dinámica. Se ha escogido solo una esfera de unos 8 Å de radio y el resto se ha borrado. Esto se hace para facilitar el visionado de la animación en unas gafas tipo "Cardboard" ya que estos dispositivos son muy limitados, sin embargo, la dinámica molecular de partida ha sido la del ejemplo anterior con 359 moléculas de etanol y una de I<sub>2</sub> (un total de 2223 átomos). También se ha utilizado un modelo PBC con una caja de dimensiones 47 Åx47 Åx31,6 Å.



Departamento de Química Física de la Universidad de Cádiz

*La aceptación de los alumnos fue muy positiva, ya que mejoraba significativamente la comprensión de los procesos que ocurrían en las reacciones químicas, de una forma visual (y sobre todo en VR).*

- Realice una breve valoración sobre la influencia del proyecto ejecutado en la evolución de las asignaturas implicadas.

**Análisis del impacto de la innovación en las asignaturas relacionadas con el proyecto**

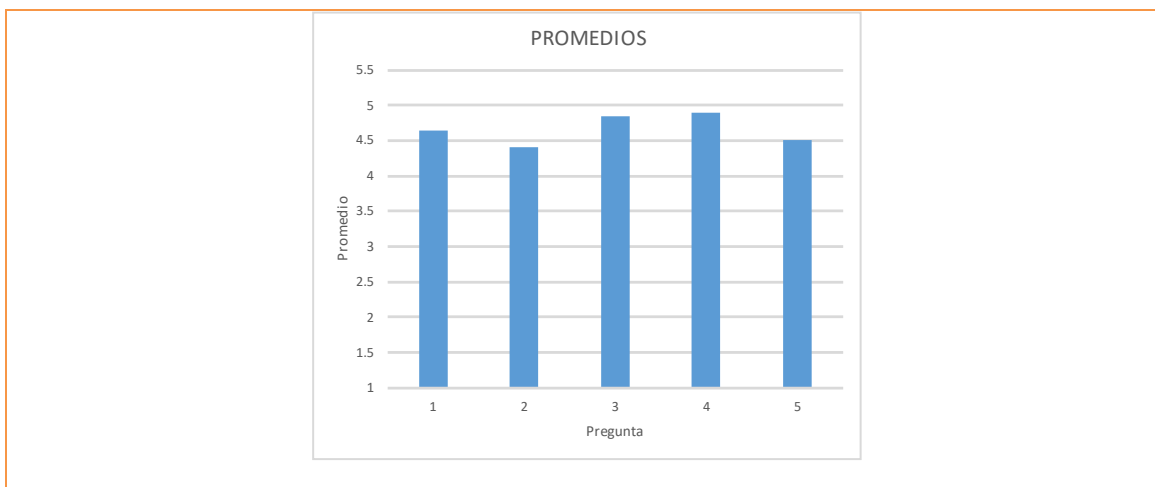
La valoración por parte del profesorado ha sido muy positiva, ya que a veces teníamos el problema de que se “viera” qué era lo que teníamos entre manos en nuestras prácticas. Con este software queda totalmente solventado ese problema.

Sobre el impacto en la innovación, que sepamos, actualmente no se usan este tipo de software VR (y que, por cierto, son escasos y no gratuitos) en las clases prácticas de química (que son las que nos compete, aunque se puede usar en muchas áreas de las ciencias). Por eso nos parece una herramienta muy útil e innovadora.

- Incluya en la siguiente tabla el número de alumnos matriculados y el de respuestas recibidas en cada opción y realice una valoración crítica sobre la influencia que el proyecto ha ejercido en la opinión de los alumnos.

Opinión de los alumnos al inicio del proyecto				
Número de alumnos matriculados: <b>74</b>				
Valoración del grado de dificultad que cree que va a tener en la comprensión de los contenidos y/o en la adquisición de competencias asociadas a la asignatura en la que se enmarca el proyecto de innovación docente				
Ninguna dificultad	Poca dificultad	Dificultad media	Bastante dificultad	Mucha dificultad
			X	
Opinión de los alumnos en la etapa final del proyecto				
Valoración del grado de dificultad que ha tenido en la comprensión de los contenidos y/o en la adquisición de competencias asociadas a la asignatura en la que se enmarca el proyecto de				

<i>innovación docente</i>				
Ninguna dificultad	Poca dificultad	Dificultad media	Bastante dificultad	Mucha dificultad
	X			
<i>Los elementos de innovación y mejora docente aplicados en esta asignatura han favorecido mi comprensión de los contenidos y/o la adquisición de competencias asociadas a la asignatura</i>				
Nada de acuerdo	Poco de acuerdo	Ni en acuerdo ni en desacuerdo	Muy de acuerdo	Completamente de acuerdo
			X	
En el caso de la participación de un profesor invitado				
<i>La participación del profesor invitado ha supuesto un gran beneficio en mi formación</i>				
Nada de acuerdo	Poco de acuerdo	Ni en acuerdo ni en desacuerdo	Muy de acuerdo	Completamente de acuerdo
Valoración crítica sobre la influencia que ha ejercido el proyecto en la opinión de los alumnos				
<p>A la vista de los resultados obtenidos en la encuesta (que se incluye a continuación), los alumnos salieron en general, muy satisfechos con el proyecto e incluso se atrevieron a sugerir algunas mejoras.</p> <p>El formulario de encuesta que se les realizó a los alumnos fue el siguiente:</p>				
<p>Encuesta sobre Realidad Virtual (Práctica 5)</p>				
<p><b>Valora de 1 a 5 de menos a más satisfacción:</b></p>				
<p>1. ¿Te ha parecido interesante el uso de la Realidad Virtual como herramienta complementaria para la docencia?</p> <p style="text-align: center;"><b>1      2      3      4      5</b></p>				
<p>2. ¿Te ha ayudado a entender conceptos relacionados con la práctica?</p> <p style="text-align: center;"><b>1      2      3      4      5</b></p>				
<p>3. ¿Las experiencias visualizadas, se han visto con claridad?</p> <p style="text-align: center;"><b>1      2      3      4      5</b></p>				
<p>4. ¿Te ha parecido adecuado en el contexto de la práctica?</p> <p style="text-align: center;"><b>1      2      3      4      5</b></p>				
<p>5. ¿Te resultó sencillo de manejar?</p> <p style="text-align: center;"><b>1      2      3      4      5</b></p>				
<p>Sugerencias y opinión para la mejora de este recurso.</p>				
<p>Y los promedios por preguntas (ver gráfico) que se obtuvieron fueron superiores a 4.4/5 en todos los casos, lo que nos indica un alto grado de satisfacción por parte de los alumnos con este tipo de iniciativa.</p>				



4. Describa las medidas de difusión a las que se comprometió en la solicitud y las que ha llevado a cabo<sup>2</sup>.

#### Descripción de las medidas comprometidas en la solicitud

Compromiso de impartición de una charla o taller para profesores

#### Descripción de las medidas que se han llevado a cabo

En las sesiones prácticas de la asignatura de la que soy responsable ( Química Física II del Grado en Química), se han invitado a otros profesores del departamento para que vieran una aplicación del programa (página web: <http://tesla.uca.es>, desde la UCA y desde fuera habría que utilizar la VPN), los cuales terminaron muy satisfechos con los resultados.

También se ha realizado un seminario con los profesores del departamento al que pertenezco (Química Física) y el resultado ha sido sobresaliente, ya que esta es una herramienta que se echaba en falta desde hace mucho tiempo, y ahora con la irrupción de la realidad virtual ha sido posible.

Se hicieron muchas sugerencias de mejoras que se han anotado para futuros proyectos.

<sup>2</sup> Si en la solicitud no indicó compromiso de difusión de resultados este criterio no se tendrá en cuenta en la evaluación