

Un Framework Aptico per lo Studio delle Interazioni Inter-Molecolari nella Didattica della Chimica

Sara Comai, Davide Mazza
Politecnico di Milano, Dipartimento di Elettronica e Informazione (DEI)
via Ponzio 34/5, I-20133 Milano
{sara.comai, davide.mazza}@polimi.it

Le tecnologie aptiche hanno ricevuto una sempre maggiore attenzione nel corso dell'ultimo decennio. In numerosi lavori le stesse sono state impiegate per la formazione di personale altamente specializzato, prima dell'impiego sul campo, o per la visualizzazione di dati di difficile comprensione. La sensazione del tatto e/o della forza provata dall'utente può essere utilizzata anche con scopi educativi. In particolare, in contesti didattici l'utilizzo di tecnologie aptiche può contribuire notevolmente nella simulazione di sensazioni non direttamente sperimentabili da un utente. In altri casi, invece, possono essere utilizzate per aiutare gli studenti a familiarizzare con nozioni altrimenti conoscibili solo attraverso libri di testo, con le difficoltà legate all'apprendimento. In questo lavoro, viene presentato un sistema aptico appositamente sviluppato per l'esplorazione tattile di molecole. Dopo una breve descrizione dell'architettura, l'articolo descrive come è stato introdotto nella consueta attività didattica. I feedback degli utenti e le impressioni sono inoltre riportati per una valutazione della bontà dell'innovazione.

1. Introduzione

La scienza e le tecnologie aptiche (ovvero, che permettono all'utente di provare sensazioni di forze, di attrazione o repulsione) hanno ricevuto una grande attenzione nel corso dell'ultimo decennio. Una delle principali tendenze dell'utilizzo di tali tecnologie è legata alla visualizzazione e al training di operatori altamente specializzati, prima dell'utilizzo sul campo. Si pensi, ad esempio, all'addestramento di chirurghi che, attraverso opportuni strumenti di simulazione possono prendere confidenza con le stesse sensazioni di tatto e di forza che si troverebbero ad affrontare nello svolgimento effettivo della professione. Tale utilizzo è completamente orientato alla formazione di personale.

Allo stesso modo, tali strumenti possono essere impiegati come una nuova tecnologia per scopi educativi, ad esempio nella spiegazione e per la comprensione di nozioni difficilmente assimilabili dagli studenti, o perché altrimenti solitamente spiegate con il solo utilizzo di libri di testo.

In questo lavoro, si presenta un framework basato su tecnologie aptiche che permette l'esplorazione tattile di molecole e la sperimentazione, in termini di forza, delle interazioni inter-molecolari. Una comprensione profonda di tali forze, che governano i processi di associazione e di composizione molecolare, è oggi di fondamentale importanza in molti settori, ad esempio nella progettazione di nuovi farmaci (*drug design*). Le interazioni tra le molecole sono di solito descritte in termini di enormi moli di dati, che descrivono l'attrazione o la repulsione tra i composti in gioco e la posizione dei siti di legame sulla superficie molecolare. Tali informazioni sono difficili da interpretare in questo formato, anche da esperti del settore ed addetti ai lavori. Gli studenti, per conto loro, possono solo contare sulla loro immaginazione per comprendere come avvengono tali interazioni, basandosi sulla descrizione della dinamica del fenomeno spiegata attraverso i libri. La simulazione dell'interazione e l'ausilio di un dispositivo aptico possono quindi essere di notevole aiuto nella comprensione. L'ambiente sviluppato e qui descritto è dotato sistema di elaborazione e di visualizzazione, cui viene affiancato un dispositivo aptico. Mentre una molecola da analizzare è visualizzata sullo schermo visto dall'utente in un ambiente tridimensionale, una sonda tattile avente associata una carica elettrica di valore noto viene utilizzata per esplorare la superficie elettronica della molecola. Informazioni accessorie per aiutare la navigazione e la comprensione dei concetti connessi sono contestualmente mostrati.

2. Stato dell'arte del settore

In letteratura esistono alcuni lavori che trattano l'associazione di strumenti aptici a simulazioni. Pochi però sono i lavori aventi finalità didattiche; la maggior parte è orientata alla ricerca.

[Laycock e Day, 2007] forniscono una rassegna sulle tecniche di renderizzazione aptica: la maggior parte degli algoritmi e le applicazioni si concentrano sulla rappresentazione di feedback tattili dovuti a contatti con superfici, piuttosto che sulla rappresentazione di forze distribuite in tutto lo spazio, come nel caso qui descritto. Nel campo della visualizzazione di dati applicata al settore chimico e della ricerca scientifica, lo strumento qui descritto si situa al confine tra la ormai classica chimica computazionale, che privilegia la gestione e la visualizzazione di grosse quantità di dati sottoforma di valori numerici a discapito dell'usabilità o dell'immediatezza nella comprensione, ed il recente settore della bioinformatica, che introduce una migliore gestione delle interfacce utente per la visualizzazione dei risultati.

La maggior parte degli strumenti sviluppati in ambito chimico, presentano l'interazione aptica come funzione collaterale, dovuta solitamente ad aggiunte successive di tale funzionalità a strumenti già esistenti in precedenza. Nel framework qui presentato, invece, tale modalità di interazione è quella

principale. Esempi di tali strumenti includono VMD, PyMOL, e altri [Laycock e Day, 2007], che offrono una vasta gamma di rappresentazioni grafiche, ma una non sempre semplice interpretazione dei dati, specialmente per gli addetti al settore, come nel caso di studenti. [ChemFF] presenta uno strumento simile, ma è fortemente progettato basandosi su modelli teorici e, rispetto al sistema qui descritto, non permette di utilizzare o di esplorare dati ottenuti da un'esperienza più diretta, di ricerca.

Dal punto di vista educativo, esistono alcune opere che coinvolgono tecnologie aptiche e la rappresentazione di molecole. In [Fjeld et al, 2003] viene presentata un'interfaccia utente fisica per la didattica della chimica. Tale sistema utilizza un dispositivo specifico, sviluppato in proprio dagli stessi autori del lavoro. Il sistema in esame, al contrario, si avvale di un dispositivo aptico disponibile sul mercato consumer e di facile reperibilità, oggi ancora più accessibile per quanto concerne i costi dell'utente finale. [Sato et al, 2008] propongono un lavoro simile al presente, ma che comunque soffre di mancanza di generalità, modellando solo l'interazione tra due molecole d'acqua.

Interfacce multi-modalità sono stati analogamente proposte in letteratura. [Richard et al, 2006] presentano un sistema multi-modale su una piattaforma di realtà virtuale per la simulazione e la sperimentazione dell'interazione molecolare che prevede l'interazione tattile con un'interfaccia olfattiva e feedback uditivo. In ogni caso tali soluzioni multi-modalità sono piuttosto complesse per essere replicate in ambienti educativi. Questo lavoro, invece, è scalabile e può essere riprodotto facilmente per essere messo a disposizione nei laboratori delle scuole.

3. Descrizione del sistema

Nell'architettura del sistema è presente un computer (un classico PC), cui è collegato uno strumento aptico associato. In questo caso si è utilizzato uno dispositivo molto comune e di facile reperibilità, quale il PHANToM[®] prodotto dall'azienda Sensable[™] [PHANToM].

La Fig.1 mostra il dispositivo utilizzato e la modalità di utilizzo. Il dispositivo è composto da un braccio mobile a 3 gradi di libertà cui è ancorato un pennino, la cui estremità puntiforme rappresenta il punto di contatto con superfici o ambienti virtuali.

La Fig.2 mostra uno schema logico dell'architettura del framework realizzato. Il sistema sviluppato mostra all'utente un ambiente virtuale 3D in cui una molecola da analizzare è mostrata nella sua struttura geometrica, e un cursore, associato al dispositivo aptico, che rappresenta la posizione attuale della sonda tattile. Una carica elettrica, la cui entità può essere arbitrariamente stabilita dall'utente, accettando sia valori positivi che negativi, è ancorata al cursore della sonda. L'utente può quindi spostare la sonda aptica tramite il braccio dello strumento, e navigare nello spazio 3D intorno alla molecola, avendo come ritorno la sensazione di forza generata dall'interazione elettrostatica tra la carica e la molecola.

Per modellare l'interazione, il sistema si basa su informazioni memorizzate in un repository di dati pre-costruito. Per la rappresentazione geometrica della molecola, viene adottato un formato di dati ampiamente adottato in chimica sperimentale. Tali dati vengono poi elaborati da software di chimica computazionale [Schmidt et al, 1993] e [wxMacMolPlot], utilizzati per la ricerca scientifica, che forniscono in uscita i valori del campo elettrico attorno alla molecola, dati necessari per modellare l'interazione tra molecole, ed in questo caso tra la molecola e la carica elettrica associata al dispositivo. Il campo elettrostatico è modellato come una griglia quantizzata di valori che circonda la molecola entro una certa distanza dalla stessa. La forza sentita dall'utente è quella associata al voxel della griglia entro il quale cade il cursore aptico nella posizione corrente.



Fig.1 - Il dispositivo aptico PHANToM ® dell'azienda Sensable™

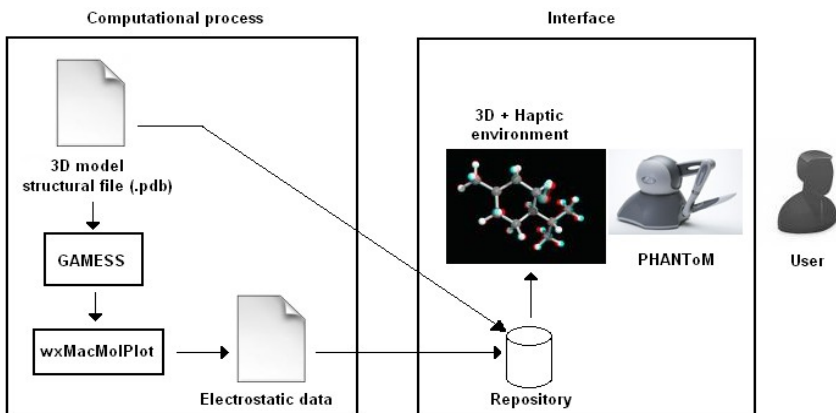


Fig.2 - L'architettura del sistema realizzato

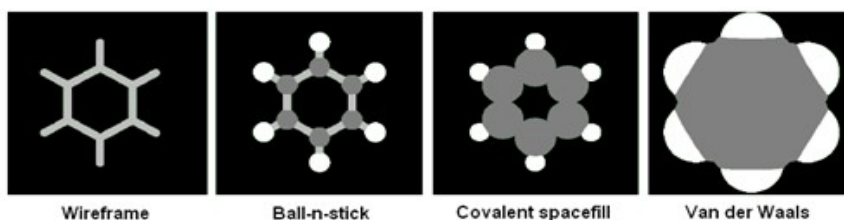


Fig.3 - Diverse modalità di rappresentazione di una molecola (benzene)

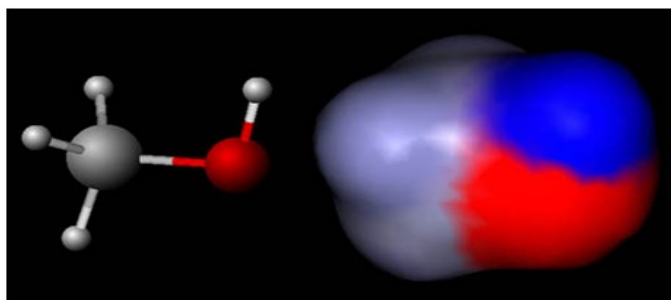


Fig.4 - Rappresentazione *ball-n-stick* e *Van der Waals* di una stessa molecola con il framework sviluppato

Le intensità delle forze in gioco sono naturalmente molto deboli, avendo a che fare con oggetti di scala nanometrica (atomica). Un operatore umano non sarebbe quindi in grado di sentire tali forze se le stesse venissero riprodotte con il valore calcolato dal sistema. Con una serie di prove di utilizzo, si è determinata una costante di amplificazione adeguata per scalare le forze in gioco in modo da preservarne le proporzioni reali.

Ulteriori informazioni accessorie vengono visualizzate unitamente alla rappresentazione dell'ambiente tridimensionale in cui è posizionata la molecola. Il sistema permette la visualizzazione di una stessa molecola utilizzando notazioni grafiche standard in ambito chimico. La Fig.3 fornisce una rassegna delle rappresentazioni molecolari più utilizzate. Ciascuna notazione pone l'accento su uno o più aspetti caratteristici della molecola: la notazione *wireframe* permette ad esempio di evidenziare la conformazione della molecola; la rappresentazione *ball-n-stick* mette in risalto la posizione degli atomi nello spazio, mentre le notazioni *covalent spacefill* e *Van der Waals* permettono di evidenziare rispettivamente lo spazio di interazione della molecola, nei casi di legame covalente o di interazione con cariche elettriche. Il framework permette tutte le visualizzazioni sopra riportate.

Fig.4 due rappresentazioni di una stessa molecola fornite dallo strumento realizzato. La molecola è rappresentata come oggetto tridimensionale. Per l'interazione qui descritta (carica-molecola) la rappresentazione di maggior interesse è quella di Van der Waals. La Fig.5 mostra l'interfaccia grafica del framework. Sulla superficie della molecola sono rappresentati i valori di

potenziale, discretizzati a intervalli: a ciascun intervallo è associato un differente colore in proporzione all'intensità e al segno (positivo o negativo). Il cursore, che rappresenta la carica elettrica associata allo strumento aptico, è visibile come disco giallo, di dimensioni estremamente ridotte.

Nella Fig.6 è mostrata la visualizzazione di informazioni accessorie: in basso a destra si vede un grafico che mostra l'andamento del campo elettrostatico lungo la direzione che collega la posizione del cursore aptico e il centro della molecola. Tale informazione permette di comprendere meglio il meccanismo di legame inter-molecolare: infatti, anche da un rapido sguardo al grafico l'utente può comprendere in che direzione si muoverà la carica elettrica, nell'interazione con la molecola visualizzata (evidenziata anche dal vettore grigio), e se la stessa sarà attratta o respinta. Di particolare rilevanza è la distanza alla quale avviene il legame. Tale punto dello spazio corrisponde infatti al minimo (una *buca* di potenziale) del grafico più vicino alla posizione corrente. In tale punto il cursore assume stabilmente quella posizione, dovuta a forze attrattive e repulsive di egual intensità e segno opposto: l'utente può così sperimentare la stessa sensazione delle molecole durante un legame.

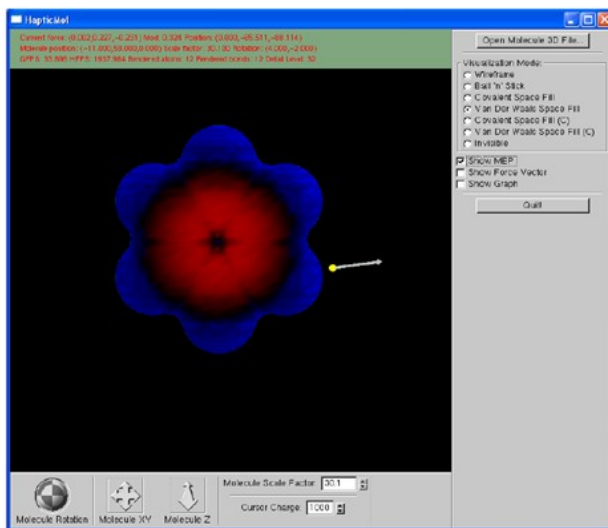


Fig.5 - L'interfaccia grafica del framework

La Fig.7 mostra ulteriori modalità di visualizzazione della molecola, specificatamente progettate per l'esplorazione dei valori di potenziale attorno alla molecola. In particolare, la Fig.7a mostra la visualizzazione di superfici equipotenziali di una molecola d'acqua (una volta che l'utente ha stabilito il valore di potenziale da visualizzare). Le Fig.7b e 7c rappresentano invece le modalità di navigazione dello spazio attorno alla molecola mediante espansione / riduzione del raggio dei suoi atomi. L'utente può modificare tale raggio di qualsiasi atomo della molecola a piacere. In tal modo è possibile avere la

rappresentazione a fasce colorate dei valori della griglia di potenziale che circonda la molecola. La Fig.7b mostra una molecola d'acqua dove il raggio di due atomi d'idrogeno è stato ingrandito, mentre la Fig.7c visualizza la stessa molecola d'acqua sulla quale si è agito per incremento del raggio dell'atomo centrale d'ossigeno.

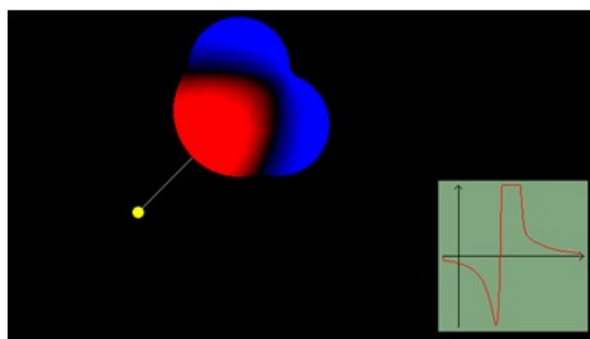


Fig.6 - Visualizzazione di informazioni ausiliare nell'ambiente 3D

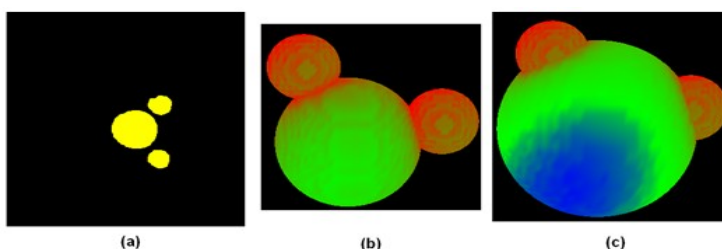


Fig.7 - Le visualizzazioni delle superfici di potenziale attorno alla molecola

4. Uso del framework nell'attività didattica

Con lo strumento qui descritto, gli studenti possono esplorare la superficie elettrostatica di varie molecole contenute nel repository, e sentire il loro campo elettrico, i valori tipici (minimi, massimi) e la posizione in cui si trovano le buche di potenziale, fondamentali per la creazione di legami. E' possibile, inoltre, comprendere come avviene il legame e come la molecola si orienta quando tale fenomeno accade o, viceversa, come la stessa deve essere orientata perché tale legame possa formarsi.

L'aver utilizzato un software impiegato nella ricerca chimica per l'ottenimento dei dati di simulazione implica che l'intero lavoro si basi su dati che simulano il comportamento delle interazioni in un modo quanto più realistico possibile, ovvero con la massima precisione nella descrizione dei fenomeni. Questo approccio è ben diverso dal considerare l'interazione tra una carica e una molecola basandosi su modelli prettamente teorici, come fatto ad esempio da

moltissimi applicativi che si possono facilmente trovare anche sul Web. L'affidabilità e la coerenza nella riproduzione dei fenomeni simulati hanno avuto fin dall'inizio la massima attenzione, date le specifiche finalità di didattica e di ricerca dello strumento realizzato.

Lo strumento è stato inserito come attività integrativa di laboratorio in associazione ad un corso di chimica curriculare. Tale attività può essere svolta da studenti che volontariamente decidono di parteciparvi per approfondire e meglio comprendere la conoscenza degli argomenti discussi a lezione. Il laboratorio consiste in sessioni assistite da un docente che spiega passo-passo ed in maniera estremamente guidata come utilizzare lo strumento per testare i comportamenti di interazione inter-molecolare spiegati in teoria. La Fig.8 mostra una foto scattata dal vivo durante l'utilizzo dello strumento dagli studenti.

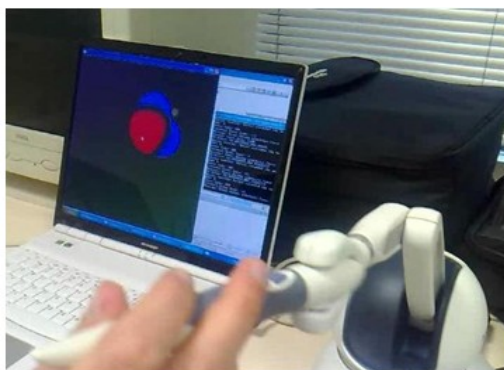


Fig.8 - Un utente alle prese con il framework realizzato

Gli argomenti affrontati durante tali attività riguardano lo studio di caratteristiche specifiche delle molecole, per le quali lo strumento mette bene in evidenza il comportamento dei fenomeni. 1) La prima attività consiste nello studio della *polarità* delle molecole, ovvero l'analisi delle differenti modalità di attrazione di aree diverse di una molecola polare (es. acqua) in base al segno della carica elettrica (positiva o negativa). Lo strumento aptico permette di far sentire all'utente le diverse forze (di attrazione o repulsione) in base alla posizione della carica rispetto alla molecola. 2) Una seconda attività consiste nello sperimentare come l'*anisotropia* dell'interazione, ovvero come una stessa carica elettrica possa risentire di forze di diversa intensità in base alla direzione di avvicinamento alla molecola. In relazione a questa attività è anche possibile determinare un'area di influenza della molecola, in base alla quale si può capire come l'effetto della molecola sulla carica sia dipendente dalla distanza di quest'ultima dalla molecola. Lo strumento aptico è qui rilevante per far sentire le diverse intensità di forza (trascurabile, lieve, forte) in base alla distanza e alla direzione. 3) Un'ulteriore esperienza consiste nel determinare i punti critici del campo elettrico attorno alla molecola. La localizzazione di tali punti nello spazio permette di comprendere il concetto di *distanza di legame* e l'uso dello strumento aptico aiuta a capire come le forze in gioco in tali punti conferiscano

stabilità alla posizione della carica. La visualizzazione del grafico del potenziale permette inoltre di verificare come tali punti coincidano con i minimi della funzione rappresentata.

5. Responso degli utenti

Lo strumento è stato testato da diversi tipi di utenti su molecole diverse e di crescente complessità in termini di numero di atomi e di legami coinvolti. Test sono stati fatti, ad esempio, con acqua, ammoniaca, metano, benzene. Il campione di utenti considerato era formato da 20 studenti e da 10 ricercatori, talvolta incaricati anche in attività di docenza di chimica. Gli studenti coinvolti nelle attività pratiche sono iscritti ai primi anni di corsi universitari di laurea di primo livello in ingegneria, per i quali i corsi di chimica appartengono alla categoria dei corsi di formazione di base. Gli studenti hanno provato le esperienze descritte nel paragrafo precedente e ci hanno fornito un loro feedback.

Essendo lo stesso strumento sviluppato anche con finalità di ricerca, anche tecnici del settore e ricercatori hanno provato lo strumento e lo hanno apprezzato e ritenuto un valido aiuto per migliorare la consapevolezza dei fenomeni da esso modellati, altrimenti di difficile comprensione a livello intuitivo. I ricercatori, in particolare, hanno provato a verificare come lo strumento sia in grado di riprodurre caratteristiche specifiche di alcune molecole, ben note agli addetti ai lavori. Questo test è stato prezioso, in quanto ha permesso di apprezzare la bontà e la correttezza della simulazione.

I feedback degli utenti sono stati raccolti attraverso questionari somministrati alla fine di ciascuna esperienza. In tali questionari si è richiesto agli utenti: a) se riuscivano ad ottenere con lo strumento il risultato loro richiesto attraverso la consegna all'inizio dell'attività, per avere in tale modo un'idea dell'usabilità dello strumento; b) se ritenevano di aver compreso con maggior dettaglio il fenomeno analizzato attraverso l'attività integrativa: in tale caso, si chiedeva all'utente di fornire un commento testuale che spiegasse come la conoscenza del fenomeno interessato era cambiata rispetto a prima dell'esperienza (nuove caratteristiche elementi del fenomeno, nuovi dettagli della sua dinamica e azione, ecc...) e quali erano le caratteristiche dello strumento che avevano permesso di migliorare le loro nozioni.

Dai responsi ottenuti si può concludere che il punto di forza di uno strumento come questo è la possibilità di combinare la visualizzazione di dati, solitamente disponibili solo in formato numerico, con la sensazione aptica della forza delle interazioni da essi rappresentate. Gli studenti hanno apprezzato questo nuovo approccio didattico, e ne hanno evidenziato la maggior facilità di apprendimento degli argomenti coinvolti nelle esperienze, rispetto all'assimilazione degli stessi mediante i classici libri di testo. Studenti e ricercatori/docenti hanno accolto positivamente la novità di un tale approccio in affiancamento alla regolare attività ex cathedra.

6. Conclusioni e direzioni future

Si è qui presentato un framework per sperimentazione di sensazioni di forza associate alle interazioni inter-molecolari. Il sistema è formato da un computer e da un dispositivo aptico, che permette di migliorare l'esperienza dell'utente e di rendere gli studenti in grado di provare quello che sono soliti studiare e conoscere solo attraverso i libri. Il sistema si basa fortemente su dati ottenuti mediante uno strumento di calcolo ampiamente utilizzato nella ricerca chimica, il che rende la simulazione delle interazioni molecolari basata non su modelli teorici, come è stato fatto largamente in passato in questi casi, ma su informazioni che permettono di rappresentare al meglio e con un elevato grado di dettaglio le caratteristiche salienti dei fenomeni reali rappresentati, come oggi considerato dalla ricerca del settore.

Estensioni future del lavoro vanno nella direzione dell'implementazione di altre tipologie di interazione, come ad esempio la simulazione di interazioni molecola-molecola, vista come estensione dell'interazione carica-molecola già realizzata con questo lavoro.

Bibliografia

[ChemFF] Chemical Force Feedback, Web site, <http://cff.itn.liu.se/public/> .

[ChemSurvey] Chemistry visualization software survey, Web site, <http://personal.cscs.ch/~mvalle/ChemViz/tools.html> .

[Fjeld et al, 2003] Fjeld M., Juchli P., Voegtli B., Chemistry education: a tangible interaction approach, Proc. of INTERACT 2003, Zurich, Switzerland, 2003, 287-294.

[Laycock e Day, 2007] Laycock, S. D., Day, A.M., A Survey of Haptic Rendering Techniques, COMPUTER GRAPHICS, 26, 1, 2007, 50-65.

[PDB] PDB file format specifications, Web site, http://deposit.rcsb.org/adit/docs/pdb_atom_format.html .

[PHANToM] Sensable PHANTOM Omni, <http://www.sensable.com/haptic-phantom-omni.htm> .

[Richard et al, 2006] Richard, E., Tijou, A., Richard, P., Multi-modal virtual environments for education with haptic and olfactory feedback, Virtual Reality, 10, 3-4, 2006, 207-225.

[Sato et al, 2008] Sato, M., Liu, X., Murayama, J., Akahane, K., Isshiki, M., A Haptic Virtual Environment for Molecular Chemistry Education, Transactions on Edutainment I, 5080, 2008, 28-39.

[Schmidt et al, 1993] Schmidt, M. W., Baldrige, K. K., Boatz, J. A., Elbert, S. T., Gordon, M. S., Jensen, J. H., Koseki, S., Matsunaga, N., Nguyen, K. A., Su, S., Windus, T. L., Dupuis, M., Montgomery J. A., Jr., General Atomic and Molecular Electronic Structure System, Journal of Computational Chemistry, 14, 1993, 1347-1363.

[wxMacMolPlot] wxMacMolPlot tool, Web site, www.scl.ameslab.gov/MacMolPlt/ .