

4.3.1 Proposta final de especificação para a aplicação CrystalWalk

- (1) Requerimentos tecnológicos
 - (1.1) Nível de atividade
 - (1.1.1) Frequência de atualização: Ativo
 - (1.2) Portabilidade da aplicação: Alta
 - (1.2.1) Portabilidade da aplicação: Alta
 - (1.2.2) Plataforma de desenvolvimento: WebGL
 - (1.2.3) Sistemas operacionais compatíveis: Independente (HTML5 comp.)
 - (1.2.4) Requer instalação: Não
 - (1.2.5) Multiplataforma: Sim (desktop, *mobile*, *embeddable*)
 - (1.3) Uso, distribuição e modificação
 - (1.3.1) Licença de uso, distribuição e modificação: Software Livre MIT
 - (1.3.2) Modelo de desenvolvimento colaborativo: Sim
 - (1.4) Suporte a tecnologias de interface
 - (1.4.1) Dispositivos base (HID): Mouse, teclado, *trackable* (Leap Motion)
 - (1.4.2) Dispositivos avançados de interação: Sim (monitor 3D, *head-mounted display* – HMD)

- (2) Requerimentos de síntese
 - (2.1) Método de síntese: Rede + motivo
 - (2.2) Processo de síntese interativo: Sim
 - (2.3) Restrições ou limitações à síntese: Não
 - (2.4) Seleção e edição interativas de átomos: Sim

- (3) Requerimentos de visualização
 - (3.1) Representação
 - (3.1.1) Modelo de representação atômico molecular: Esferas rígidas
 - (3.1.2) Modelo de representação da célula unitária: Células unitárias inteiras, parciais e interstícios
 - (3.1.3) Planos de Miller: Sim

- (3.1.4) Direções de Miller: Sim
- (3.1.5) Artíficos de suporte
 - (3.1.5.1) Células múltiplas: Sim
 - (3.1.5.2) Cortes: Sim
 - (3.1.5.3) Vetores do eixo da rede: Cartesianos (xyz) e cristalográficos (abc)
 - (3.1.5.4) Recursos auxiliares de rede: Bordas e faces
- (3.2) Visualização
 - (3.2.1) Recursos de percepção visual: Formas e perspectiva, cor, opacidade e intensidade luminosa, nuvem de profundidade e som espacial.
 - (3.2.2) Tipo de projeção: Perspectiva cônica e axonométrica
 - (3.2.3) Suporte estereográfico: Sim (anaglifa, *side-by-side*, HMD)
 - (3.2.4) Modos de renderização: Sólido, ilustração, foto realístico
- (4) Requerimentos de navegação e interatividade
 - (4.1) Interface de usuário: Interface gráfica ordenada/amigável
 - (4.2) Interação base: Zoom, translação e rotação
 - (4.3) Interação avançada
 - (4.3.1) Rotações automáticas: Sim
 - (4.3.2) Animações guiadas: Sim
 - (4.3.3) Transição de escala: Sim
 - (4.3.4) Gerenciamento dinâmico de oclusões: Transparência, linhas ocultas
 - (4.3.5) Perspectiva/pontos de vista preconfigurados: Átomos, direções cristalográficas e perspectivas ortogonais
- (5) Requerimentos didáticos
 - (5.1) Conhecimentos requeridos do usuário: Ciência dos materiais básica (rede + motivo)
 - (5.2) Suporte a publicações

APÊNDICE B – Detalhamento dos critérios e parâmetros dos questionários de análise dos softwares cristalográficos

Este apêndice apresenta o detalhamento dos parâmetros que compõem o questionário de análise dos softwares cristalográficos selecionados para o procedimento de levantamento sistemático descrito na seção 2.4.1.3. Cada parâmetro é descrito conforme a seguinte estrutura:

- Descrição do critério: Explica o que se pretende avaliar e descreve termos e conceitos relevantes.
- Parâmetros utilizados: Listagem e descrição de cada alternativa e qual a lógica de avaliação.

(1) Parâmetros do questionário tecnológico

(1.1) Nível de atividade

Descrição do critério:

Descreve o nível da atividade do software com base na frequência de atualizações de software disponibilizadas. Um alto nível de atividade indica grande tendência de continuidade e de aprimoramento. Projetos altamente colaborativos indicam envolvimento de uma comunidade específica, além de maturidade e robustez.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (1.1.1) Frequência de atualização: Inativo, Ativo, Dinâmico.
 - Inativo: Não disponibilizaram nenhuma atualização nos últimos 4 anos (em relação ao momento da realização da análise).
 - Ativo: Disponibilizaram ao menos uma atualização nos últimos 4 anos (ou seja, versões disponibilizadas a no máximo 4 anos do momento da realização da análise).
 - Dinâmico: Disponibilizaram ao menos uma atualização nos últimos 2 meses ao longo dos últimos 6 meses (ou seja, 3 versões disponibilizadas entre os três últimos bimestres em relação ao momento da realização da análise).

(1.2) Portabilidade da aplicação

Descrição do critério:

Avalia o nível da portabilidade de aplicação do software com base em critérios de compilação, interpretação, execução e compatibilidade em diferentes sistemas operacionais e plataformas.

- Linguagens compiladas: a exemplo de C e C++, os programas produzidos rodam nativamente apenas em um sistema operacional e plataforma computacional específicos. É necessário, desta forma, que os desenvolvedores criem versões para cada sistema operacional e plataforma. Apesar de possuírem portabilidade bastante restrita, tendem a apresentar melhor acesso a recursos do sistema e desempenho de execução da aplicação.
- Linguagens interpretadas: a exemplo das plataformas Java, Python e Tcl, os programas produzidos rodam em uma máquina virtual, que funciona em diversas plataformas e sistemas operacionais. Neste caso, é a máquina virtual que é desenvolvida para cada plataforma, facilitando o desenvolvimento de código e o uso da aplicação. Apesar de possuírem alta portabilidade, ainda requerem a instalação prévia de interpretadores e tendem a comprometer o acesso a recursos do sistema e o desempenho de execução da aplicação. Uma discussão mais aprofundada sobre Java3D em particular é apresentada na seção 4.2.1.1.
- Linguagens interpretadas que não requerem instalação: nesse caso, o interpretador já está incorporado em um programa existente e amplamente disponível na maioria das plataformas. A maioria dos navegadores modernos suporta a linguagem WebGL, capaz de processamento de áudio, vídeo, renderização de gráficos e de conteúdo visual. Apesar de sua alta portabilidade, ainda é considerada uma tecnologia em processo de amadurecimento. Uma discussão mais aprofundada sobre esta tecnologia em particular é apresentada na seção 3.5.3.3.1.2.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (1.2.1) Portabilidade de aplicação: Baixa, Média, Alta.
 - Baixa: aplicações compatíveis com um único sistema operacional ou plataforma.
 - Média: aplicações compatíveis com mais de uma plataforma ou dispositivo, que requerem a instalação de binários para sua interpretação ou execução.
 - Alta: aplicações compatíveis com mais de uma plataforma e mais de um dispositivo, não requerendo a instalação de binários para sua interpretação ou execução.
- (1.2.2) Plataforma de desenvolvimento: Compilado (C, C++, Fortran, Pascal, Delphi), Interpretado (Java, Python, WebGL).
- (1.2.3) Sistemas operacionais compatíveis: Windows, Linux, Mac, Independente.
- (1.2.4) Requer instalação: Sim, Não.
- (1.2.5) Multiplataforma: Sim (especificar entre: Desktop, Móveis), Não.
 - Desktop, neste contexto, é um termo que designa programas voltados para computadores pessoais tradicionais e sistemas operacionais específicos. Já os móveis são produzidos especificamente para uma classe de dispositivos (celulares e tablets de marcas específicas).

(1.3) Uso, distribuição e modificação

Descrição do critério:

Descreve qual a licença de uso, modificação e distribuição dos arquivos binários do software aplicativo e, caso disponível, do código-fonte do software.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (1.3.1) Licença de uso, distribuição e modificação: Comercial, Demo, Shareware, Freeware, Livre, Outros (especificar).
 - Softwares licenciados ou comerciais: Designam todos os produtos para os quais sejam comercializadas licenças. Geralmente desenvolvidos por uma empresa com o objetivo de

lucrar com a venda de sua licença e seus termos de uso, normalmente incluem condições restritivas sob as quais o produto pode ser copiado, como o uso de uma única cópia e o uso gratuito por instituições educacionais.

- Software livre: Designa um tipo de licença que permite a qualquer um copiar, usar e distribuir com ou sem modificações, gratuitamente ou por um preço. Exemplos de licença de software livre são GNU, GNU2, MIT e BSD.
 - Demo: Esta designação não possui uma definição comumente aceita, apesar de frequentemente ser utilizada para caracterização de uma versão simplificada ou de "demonstração" de um produto maior com mais capacidades e recursos, lançado com a intenção de promover e dar a oportunidade de avaliação a possíveis futuros clientes. Geralmente, designa um tipo de licença que permite o livre uso e redistribuição, apesar de modificações serem restritas e seu código-fonte não ser disponibilizado.
 - Shareware: Designa um tipo de licença que permite a livre redistribuição, lançado com a intenção de promover e dar a oportunidade de avaliação do produto a possíveis futuros clientes, mas que, após certo período de tempo, exige a compra de uma licença para que seja possível continuar sua utilização. Modificações são restritas e seu código-fonte geralmente não é disponibilizado.
 - Freeware: Esta designação não possui uma definição comumente aceita, apesar de frequentemente ser utilizada para caracterização de licenças que permitam a livre redistribuição, ainda que modificações sejam restritas e seu código-fonte não seja disponibilizado.
- (1.3.2) Modelo de desenvolvimento colaborativo: Sim, Não.
 - Modelo de desenvolvimento colaborativo: Em um cenário de software livre ou aberto, indica se o software utiliza algum modelo de desenvolvimento de software colaborativo ou não. Em um modelo de desenvolvimento de software livre colaborativo,

dá-se aos usuários a liberdade de acesso ao código-fonte, sendo possível estudá-lo, modificá-lo e desenvolvê-lo, mas também permite a um grupo de voluntários colaborar com o aprimoramento do projeto de forma contínua e mais consistente. O acesso ao código-fonte e aos demais artefatos relacionados é disponibilizado, geralmente, por meio de ferramentas e plataformas de colaboração específicas, como o Git (Git Project, [s.d.]) e o Subversion (Apache Software Foundation, [2015]).

(1.4) Suporte a tecnologias de interface

Descrição do critério:

Descreve quais tecnologias de interface são compatíveis e suportadas pelo software, bem como suas respectivas opções de interação com os modelos. Uma discussão mais aprofundada sobre estas tecnologias e seu emprego em sistemas educacionais é apresentada na seção 4.3.3.4.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (1.4.1) Dispositivos base (HID): Teclado, Mouse, Rastreadores, Outros (especificar).
- (1.4.2) Dispositivos avançados de interação: HMD, Monitor 3D, Outros (especificar).

(2) Parâmetros do questionário de síntese de estruturas cristalinas

(2.1) Método de síntese

Descrição do critério:

Descreve, quando suportado, qual método e processo de síntese de estruturas cristalinas é utilizado pelo software, bem como eventuais limitações ou restrições, buscando avaliar a acessibilidade às funções de síntese do software.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (2.1) Método de síntese: Posições de Wyckoff, Rede + motivo.
 - Posições de Wyckoff: métodos de síntese fundamentados em grupos de simetria pontuais e espaciais geralmente possuem sua compreensão restrita cristalógrafos e pesquisadores da área, por serem extremamente específicos.
 - Rede + motivo: Métodos de síntese fundamentados na combinação de motivos e simetria de rede translacional são mais intuitivos e didáticos, facilitando sua compreensão por estudantes e sua utilização em sala de aula como ferramenta de ensino.

(2.2) Processo de síntese interativo

Descrição do critério:

Descreve, quando suportado, se o software possibilita a síntese através da direta manipulação de elementos gráficos e representações visuais.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (2.2) Processo de síntese interativo: Sim, Não.

(2.3) Restrições ou limitações à síntese

Descrição do critério:

Descreve, quando aplicável, se o software possui alguma limitação ou restrição específica, determinando se é capaz de representar qualquer estrutura cristalina a partir de dados ou parâmetros de entrada.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (2.3) Restrições ou limitações à síntese: Sim, Não,

(2.4) Seleção e edição interativas de átomos

Descrição do critério:

Descreve, quando suportado, se o software possibilita a seleção e edição de átomos por meio da manipulação direta de elementos gráficos e representações visuais.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (2.4) Seleção e edição interativas de átomos: Sim, Não.

(3) Parâmetros do questionário de visualização

(3.1) Representação

Descrição do critério:

Avalia a diversidade de opções de representação visual das estruturas cristalinas e o suporte a artifícios visuais clássicos em ciência dos materiais.

Parâmetros utilizados (quanto mais opções, melhor):

- (3.1.1) Modelo de representação atômico molecular: Esferas rígidas, Bolas e palitos, Espaço de preenchimento, Esquelético, Poliedro, Outros (especificar).
 - Modelos de representação atômico moleculares são representações geométricas ou topológicas capazes de ilustrar átomos e/ou moléculas com o objetivo de possibilitar a visualização e compreensão de uma aplicação específica, tais como disposição espacial dos diferentes elementos químicos, além de suas ligações químicas. As opções de modelos são apresentadas a seguir:
 - Esferas rígidas: Modelos nos quais os átomos são representados por esferas rígidas indivisíveis e impenetráveis. Elementos químicos diferentes são representados por esferas que possuem raios proporcionais ao íon representado. Apesar de existir uma grande variedade de modelos e aplicações, informações sobre aspectos como ligações, direcionalidade e propriedades nucleares, neurônicas e eletromagnéticas tendem a ser bastante simplificados ou não representados. Livros específicos de ciência dos materiais tendem a utilizar um modelo particular de esferas rígidas que, além de representar os pontos de tangência entre os átomos – utilizados para cálculo de parâmetros específicos de célula unitária, representam também a interseção entre a célula unitária e os átomos parciais nela

contidos, bem como a representação do vazio da célula unitária.

- Bolas e palitos: Modelos nos quais os átomos são representados por esferas que possuem raio e distância proporcionais ao seu número atômico, e as ligações químicas e respectivas direções são representadas por palitos. Apesar de existir uma grande variedade de modelos e aplicações, informações como ligações e direcionalidade, propriedades nucleares, neutrônicas e eletromagnéticas tendem a ser bastante simplificados ou não representados.
 - Espaço de preenchimento: Modelos nos quais os átomos são representados por esferas que possuem raio e distância proporcionais ao seu número atômico, bem como superfícies de distribuição eletrônica capazes de representar diferentes tipos de ligações e interações químicas. Existe uma grande variedade de modelos para aplicações bastante específicas, como representação de proteínas, carboidratos, moléculas inorgânicas etc.
 - Esqueléticos: Modelos nos quais as ligações químicas são representadas por hastes, cujas intersecções representam os átomos.
 - Poliedro: Modelos nos quais as esferas de atuação dos átomos eletronegativos são representadas por meio de poliedros.
- (3.1.2) Modelo de representação da célula unitária: Células unitárias inteiras, Células parciais, Interstícios.
 - Indica se o software é capaz de produzir representações alternativas das células unitárias, tais como as exploradas pelos livros didáticos para facilitar a compreensão do arranjo geométrico dos átomos, em especial, a detecção do ponto de tangência entre eles.

- (3.1.3) Planos de Miller: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de representar planos a partir da entrada dos respectivos índices (hkl) de Miller.

- (3.1.4) Direções de Miller: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de representar direções a partir da entrada dos respectivos índices [uvw] de Miller.

- (3.1.5) Artíficos de suporte
 - Indica quais recursos adicionais de apoio à visualização de estruturas cristalinas o software oferece.
 - Subcritérios e parâmetros utilizados:
 - (3.1.5.1) Células múltiplas: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de representar supercélulas de N estruturas cristalinas a partir da entrada de índices espaciais (xyz).
 - (3.1.5.2) Cortes: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de representar um ou mais cortes perpendiculares a um plano (hkl) a partir da entrada dos respectivos índices de Miller.
 - (3.1.5.3) Vetores do eixo da rede: Não, Cartesianos (xyz), Ortogonais (abc).
 - Indica se o software é capaz de representar os vetores ortogonais (xyz) e cristalográficos (abc) da rede de Bravais.
 - (3.1.5.4) Recursos auxiliares de rede: Não, Faces, Bordas, Outros (especificar).
 - Indica se o software é capaz de representar faces e bordas da rede de Bravais.

(3.2) Visualização

Descrição do critério:

Avalia a diversidade de meios de representação visuais, considerando possibilidades e limitações da computação gráfica.

Parâmetros utilizados (quanto mais opções, melhor):

- (3.2.1) Recursos de percepção visual: Formas e perspectiva, Cor, Opacidade e intensidade luminosa, Nuvem de profundidade (e som espacial).
 - Indica quais estímulos ambientais visuais o software é capaz de representar.
- (3.2.2) Tipo de projeção: Perspectiva cônica, Perspectiva axonométrica.
 - Descreve quais tipos de projeção técnica são utilizados pelo software.
 - Perspectiva cônica: é utilizada quando se quer dar um aspecto mais familiar a objetos em uma cena, análogo ao experimentado por um observador humano.
 - Perspectiva axonométrica: quando são assumidas simplificações que facilitam a manutenção das relações dimensionais entre os objetos de uma cena, mas que produzem projeções distorcidas quando comparadas com a perspectiva cônica.
- (3.2.3) Suporte estereográfico: Filtro (Anaglifo e/ou Polarizado), Estereograma, Outros (especificar).
 - Indica se o software é capaz de produzir imagens renderizadas em 3D estereográficas.
 - Estereoscopia é qualquer técnica capaz de criar a ilusão de profundidade por meio da geração e combinação de projeções bidimensionais independentes para cada olho, mimetizando a visão humana. Em computação gráfica, este efeito é obtido renderizando-se a mesma cena através de duas câmeras, separadas da distância média que um olho humano tem para o outro, a distância de paralaxe (aproximadamente 7 cm). A diferença principal entre as técnicas está no modo com que as projeções são orientadas para cada olho. As técnicas mais comuns são por Filtro (Anaglifo e Polarizado), Estereograma e para dispositivos específicos, como o Oculus Rift.

- (3.2.4) Modos de renderização: Realístico, Ilustração, Sólido.
 - Indica quais os modos de renderização suportados pelo software. Modos de renderização determinam a aparência das superfícies do modelo 3D.
 - Realístico: Objetiva a máxima qualidade na representação gráfica da luz, geometria e texturas.
 - Ilustração: Cria representações gráficas simplificadas, úteis em representações técnicas ou mídias que possuam restrições quanto ao número de cores e/ou resolução, tais como livros, impressos e jornais.
 - Renderização de sólidos: termo utilizado para caracterizar técnicas e algoritmos que utilizam projeções gráficas para criar a falsa impressão de tridimensionalidade. Apesar de mais rápidos, estes métodos não utilizam modelos 3D nem técnicas de renderização 3D (Z-Buffering), o que geralmente limita a representação da luz e da geometria espacial de diferentes perspectivas, comprometendo a representação gráfica da cena.

(4) Parâmetros do questionário de navegação e interatividade

(4.1) Interface

Descrição do critério:

Indica a implementação de interface de usuário e de interações básicas do software, buscando avaliar a facilidade de uso do sistema.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (4.1) Interface de usuário: Amigável (GUI – ordenada), Não amigável (CLI – não ordenada).
 - Amigável: Interface que contém mecanismos como menus e janelas e permite o controle por teclado, mouse e todos os outros canais de interação homem-máquina que possibilitem ao usuário manipular e produzir as respostas de suas ações. Seu objetivo é tornar fácil, eficiente e prazerosa a utilização do

computador, o que, geralmente, significa fazer com que o aplicativo produza os resultados desejados com a menor quantidade de interações e informações possíveis.

- Interface linha de comando (*command line interface* – CLI): Interface homem-máquina que utiliza linhas de texto digitado pelo usuário para introduzir comandos e informação no computador. CLIs geralmente exibem suas saídas por meios de um terminal de texto, apesar de também serem capazes de produzir gráficos. Seu uso foi o precursor das interfaces de usuário contemporâneas, e ainda são bastante difundidas entre programadores, administradores de sistema e técnicos avançados.
- Interface gráfica do usuário (*graphical user interface* – GUI): Interface homem-máquina em que dispositivos de entrada como mouse e teclado possibilitam outros tipos de interação além da digitação de texto. Em oposição às CLIs, as GUIs possibilitam a ação por meio da direta manipulação de elementos gráficos como janelas, ícones, menus e apontador (*windows, icons, menus, pointer* – WIMP). Seu uso é intuitivo e está intimamente ligado à popularização do uso do computador nas últimas décadas.

(4.2) Interação base

Descrição do critério:

Avalia a diversidade de meios e mecanismos de interação tradicionais.

Parâmetros utilizados (quanto mais, melhor):

- (4.2) Interação base: Rotação, Magnificação (zoom), Translação.
 - Interação: Possibilidade fornecida ao usuário de investigar e manipular os objetos do mundo virtual por meio dos sentidos. Utiliza-se do conhecimento intuitivo do usuário sobre o mundo físico para transpô-lo para dentro do mundo virtual por meio de interfaces (hardware). Rotação, translação e aproximação são alguns dos movimentos naturais tridimensionais do corpo que, através de dispositivos como teclado, mouse, HMDs, rastreadores de movi-

mento ou até mesmo esteiras de navegação, tornam possível a exploração do ambiente e a manipulação natural dos objetos.

(4.3) Interação avançada

Descrição do critério:

Avalia a presença de meios e mecanismos de interação inteligentes ou assistidos.

Parâmetros utilizados (quanto mais, melhor):

- (4.3.1) Rotações automáticas: Sim, Não.
 - Indica se o software suporta o recurso de rotação automática em torno de algum eixo ou objeto relevante.
- (4.3.2) Animações guiadas: Sim, Não.
 - Indica se existem meios de interação especificamente projetados para os modelos.
- (4.3.3) Transição de escala: Sim, Não.
 - Indica se existem mecanismos para suavização de transição entre escalas espaciais.
- (4.3.4) Gerenciamento dinâmico de oclusões: Sim (especificar), Não.
 - Indica se existem mecanismos para detecção visual de objetos relevantes, mesmo quando oclusos por outros objetos, ou para resolver conflitos causados por oclusão.
- (4.3.5) Perspectiva/pontos de vista preconfigurados: Sim (especificar), Não.
 - Indica se existem opções para visualização otimizada do modelo como um todo ou partes dele.

(5) Parâmetros do questionário didático

(5.1) Conhecimentos requeridos do usuário

Descrição do critério:

Avalia qual o tipo de conhecimento prévio necessário pelo software para criação e interpretação de estruturas cristalinas.

Parâmetros utilizados (do pior para o melhor):

- (5.1) Conhecimentos requeridos do usuário: Cristalografia (grupos espaciais), Ciência dos materiais.
 - Cristalografia (grupos espaciais): Pressupõe-se que o usuário conheça as posições de Wyckoff da estrutura cristalina em questão, ou que possua conhecimentos avançados em cristalografia para criação de estruturas experimentais.
 - Ciência dos materiais: Pressupõe-se que o usuário possua conhecimentos básicos das disciplinas de ciência dos materiais e de geometria analítica.

(5.2) Suporte a publicações

Descrição do critério:

Avalia o suporte à publicação dos modelos produzidos em diferentes tipos mídias, tanto estáticas como interativas.

Parâmetros utilizados (quanto mais parâmetros suportados, melhor):

- (5.2.1) Suporte à visualização/portabilidade externa: Não, Aplicativo Completo, Modelo 3D, Outros (especificar).
 - Indica o nível de portabilidade do software. Tecnologias como HTML ou Java possuem portabilidade de aplicação completa, o que torna possível a utilização de todos os recursos, independente do sistema operacional. Modelos tridimensionais podem ser exportados em formatos como o VRML, X3D ou QTVR, possibilitando visualização local dentro de navegadores, em programas como Acrobat Reader ou em qualquer programa de modelagem 3D.
- (5.2.2) Suporte à impressão 2D: Não, Sim (Imagem bitmap, Imagem vetorial).
 - Indica se o software é capaz de produzir imagens bitmap rasterizadas ou vetoriais.

Imagem bitmap: Uma imagem rasterizada, também chamada de bitmap, é uma estrutura de dados que representa uma matriz retangular de pixels ou pontos de cor.

Formatos de arquivo devem considerar requisitos de dimensão (altura e largura em pixels), quantidade de cores (em bits por pixel), e nível de compressão de dados. Imagens de baixa definição podem ser utilizadas em apresentações e websites. Entretanto, para mídias impressas, como painéis e revistas, é preciso gerar imagens de alta resolução – aproximadamente 600 pontos por polegada (*dots per inch* – DPI).

- Imagem vetorial: Um desenho vetorial é gerado a partir de vetores e funções geométricas que descrevem elementos como pontos, retas, curvas, polígonos, texto e outros elementos. Por armazenar apenas as definições geométricas dos objetos, são representações normalmente mais compactas que imagens rasterizadas. Pelo mesmo motivo, a qualidade não é alterada pelo tamanho, sendo, por isso, preferidas em aplicações em mídias impressas.
- (5.2.3) Suporte à impressão 3D: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de converter modelos atômico moleculares em modelos preparados para impressão 3D. O padrão de modelo mais utilizado é o STL, que utiliza facetas triangulares para descrever as superfícies do objeto e um vetor normal em cada face para distinguir o interior do exterior do objeto. Além do modelo, também são necessários ajustes e elementos auxiliares à impressão, determinados pela tecnologia utilizada.
- (5.2.4) Plataforma de publicação na internet: Sim, Não.
 - Indica se o software é capaz de salvar dados e variáveis de estado, publicá-las na internet e compartilhá-las por meio de uma URL.

(5.3) Funcionalidades didáticas

Descrição do critério:

Indica e avalia o suporte a funcionalidades didáticas que viabilizem expor conteúdo de acordo com os objetivos do professor. Em outras palavras, re-

cursos que permitam incorporar informações adicionais estruturadas seguindo a narrativa de ensino.

Parâmetros utilizados (quanto mais parâmetros suportados, melhor):

- (5.3.1) Suporte à narrativa didática (salvar preset didático integrado).
 - Descreve se o software oferece recursos de suporte à narrativa didática e, em caso afirmativo, quais são. Entre esses recursos, estão anotações de texto, desenhos espontâneos, referência a sites por hyperlinks, incorporação de imagens e gráficos e mecanismos para ordenar ou sequenciar tais informações.
- (5.3.2) Biblioteca de estruturas cristalográficas.
 - Indica se o software reúne exemplos ilustrativos de estruturas cristalinas comumente utilizadas no ensino de ciência dos materiais, metalurgia física e física do estado sólido.
- (5.3.3) Construção e visualização incremental de estruturas
 - Descreve se é possível eventualmente criar estruturas de maneira mais livre, manipulando os elementos diretamente, seja por interação ou manipulação de parâmetros puramente geométricos. Esta característica é útil no contexto didático para expor os estudantes aos desafios teóricos envolvidos na determinação das estruturas cristalinas.

(5.4) Suporte e documentação

Descrição do critério:

Avalia e indica, quando disponíveis, quais canais de suporte, documentações do projeto e do sistema são disponibilizadas pelo software.

Parâmetros utilizados (quanto mais parâmetros, melhor):

- (5.4.1) Suporte: Sim (especificar), Não.
- (5.4.2) Documentação: Sim, Não.
 - O fornecimento de documentação e suporte pós-venda para softwares comerciais é obrigatório por lei em certos países.

APÊNDICE D – Detalhamento dos problemas levantados junto aos atores sociais

Este apêndice apresenta o detalhamento dos problemas levantados pelos atores sociais, conforme descrito na seção 4.3. Trata-se de observações, percepções, comentários e expectativas dos participantes da pesquisa-ação, tanto sobre o entendimento do critério como sobre sua avaliação.

(1) Requerimentos tecnológicos

Na visão dos atores sociais, essas características suportam o modelo de acesso e de desenvolvimento definido para este projeto: aberto, democrático e colaborativo.

- (1.1) Nível de atividade: Estudantes e professores levantaram o problema de que muitos dos softwares cristalográficos utilizados em sala de aula são, em sua maioria, bastante antigos e, inclusive, estão abandonados. Além da questão da tecnologia ultrapassada, a interface e muitas das técnicas de interação utilizadas são antiquadas para os padrões atuais. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 1 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que apenas 3 dos softwares (1% do total), possuem frequência de atualização dinâmica (subcritério 1.1.1) e que 12 softwares (46% do total) foram descontinuados por seus autores. Isso torna evidente, neste requisito, um baixo atendimento às expectativas dos atores sociais.
- (1.2) Portabilidade da aplicação: Professores levantaram o problema de que o acesso a softwares cristalográficos comumente utilizados em sala de aula é, de maneira geral, bastante complicado, requerendo não apenas a compra de licenças, mas também a instalação e configuração da aplicação específica a uma plataforma e/ou dispositivo. Além da restrição ao custo da licença, torna-se bastante difícil assumir que todos os estudantes possuam acesso ao mesmo tipo de dispositivo e plataforma. As mesmas complicações são váli-

das também no acesso a materiais de suporte de pesquisadores em artigos científicos. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 1 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que nenhum (0%) dos softwares possuem portabilidade de aplicação (critério 1.2). Isso torna evidente, neste requisito, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.

- (1.3) Uso, distribuição e modificação: Estudantes e professores levantaram o problema de que softwares cristalográficos comumente utilizados em sala de aula possuem, de modo geral, licenças de uso e distribuição bastante restritivas, tradicionalmente comerciais, distribuídas apenas no formato binário sem o código-fonte e bastante custosas. Restringem-se, portanto, as liberdades dos usuários. Liberdades estas que trazem benefícios variados: para estudantes e professores, a possibilidade de acessar a ferramenta de suporte para estudo e investigação e para criar ilustrações destinadas a apresentações e publicações digitais ou impressas, e, por parte de usuários mais avançados, a possibilidade de estudarem e modificarem o código-fonte da aplicação, contribuindo, assim, de modo colaborativo com o desenvolvimento do projeto. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 1 – APÊNDICE C), é possível verificar que apenas 7 softwares possuem licença de uso, distribuição e modelo de desenvolvimento livres (subcritério 1.3.1), dentre os quais exclusivamente 4 (15% do total) possuem modelo de desenvolvimento colaborativo (subcritério 1.3.2). Isso torna evidente, neste requisito, um baixo atendimento às expectativas dos atores sociais.
- (1.4) Suporte a tecnologias de interface: Existe a percepção de que o suporte e a qualidade de interação com tecnologias de interface em softwares cristalográficos são, em geral, limitados a teclado e mouse. A diversidade de opções de interação traz flexibilidade e permite o acesso a pessoas com diferentes capacidades cognitivas. Devido à raridade esperada, a avaliação deste item exige uma busca mais minuciosa. Observando-se os resultados da análise siste-

mática (TAB. 1 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que apenas 1 software (3% do total) provê suporte a tecnologias de interface para além de mouse e teclado (subcritério 1.4.1), dentre os quais nenhum (0%) possui suporte a dispositivos ou interfaces de interação avançadas (subcritério 1.4.2). Isso torna evidente, neste requisito, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.

(2) Requerimentos de síntese de estruturas cristalinas

Na visão dos atores sociais, essas características facilitam o acesso ao conhecimento, especialmente para estudantes, professores e pesquisadores de áreas dependentes da ciência dos materiais, abordando o tema com a profundidade adequada a graduandos na área de ciência, tecnologia, engenharia e matemática (*science, technology, engineering, and mathematics* – STEM) e, até mesmo, a outros níveis e modalidades, como os cursos on-line massivos e abertos (*massive open online courses* – MOOCS), cursos técnicos, Ensino Fundamental e aprendizado autodidata.

- (2.1) Método de síntese: Estudantes e professores levantaram o problema de que softwares cristalográficos comumente utilizados em sala de aula não são alinhados com a didática adotada em cursos de ciência dos materiais. Isso porque o processo de síntese de estruturas cristalinas neles encontrado adota métodos baseados em grupos espaciais, pouco acessíveis a não especialistas em cristalografia. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 2 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que todos os softwares (100%) utilizam o mesmo método de síntese baseado em grupos espaciais (critério 2.1). Isso torna evidente, neste requisito, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.
- (2.2) Processo de síntese interativo: Estudantes e professores levantaram o problema de que o processo de síntese de estruturas cristalinas comumente adotado em softwares cristalográficos é, em geral, limitado à manipulação de parâmetros muito específicos e

pouco intuitivos, ligados de maneira muito rígida à teoria cristalográfica, o que impede o feedback imediato das alterações e a aplicação didática direta das ferramentas. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 2 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que nenhum dos softwares (0%) provê suporte ao processo de síntese interativo (critério 2.2). Isso torna evidente, neste requisito, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.

- (2.3) Restrições ou limitações à síntese: Estudantes e professores levantaram o problema de que o processo de síntese de estruturas cristalinas adotado em alguns softwares cristalográficos possui, em alguns casos, limitações e/ou restrições específicas, o que impede a representação de qualquer estrutura a partir de dados ou parâmetros de entrada. Em alguns casos, por exemplo, se representam estruturas apenas a partir de um arquivo cristalográfico com parâmetros predeterminados, ou que necessitam de uma aplicação suplementar para seu funcionamento. Existe a expectativa que softwares cristalográficos devam ser integrados para que possam ser utilizados em situações de aula de maneira autônoma e descomplicada. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 2 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que apenas 6 softwares (23% do total), possuem alguma restrição ou limitação no processo de síntese (critério 2.3). Isso torna evidente, neste requisito, o bom atendimento às expectativas dos atores sociais.
- (2.4) Seleção e edição interativas de átomos: Estudantes e professores levantaram o problema de que o processo de seleção e edição de átomos de estruturas cristalinas adotados em alguns softwares cristalográficos não possibilita a seleção e edição de átomos por meio da manipulação direta de elementos gráficos e representações visuais, o que restringe a representação de estruturas e modelos, bem como a aplicação didática direta das ferramentas. Existe a expectativa de que softwares cristalográficos modernos sejam interativos e flexíveis para que possam ser utilizados em salas

de aula de maneira didática. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 2 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que apenas 10 softwares (38% do total), provêm suporte à seleção e edição interativas de átomos (critério 2.4). Isso torna evidente, neste requisito, o baixo atendimento às expectativas dos atores sociais.

(3) Requerimentos de visualização

Na visão dos atores sociais, essas características suportam a compreensão visual de modelos de estruturas cristalinas, buscando a extração de conhecimento desse tipo de modelo.

- (3.1) Representação: Estudantes e professores levantaram o problema de que tanto o modelo de representação atômico molecular como a capacidade de representação de artifícios visuais típicos associados a estruturas cristalinas e a representação visual em geral em softwares cristalográficos não são alinhados com a didática adotada em cursos de ciência dos materiais. O modelo de esferas rígidas constitui característica fundamental na representação dos pontos de tangência entre os átomos – utilizados para cálculo de parâmetros específicos de célula unitária, na representação de intersecções entre a célula unitária e seus átomos parciais contidos, bem como na representação do vazio da célula unitária. Constatase também que, apesar de algumas ferramentas proverem suporte à representação de planos, direções e outros artifícios de suporte, por serem secundárias, estas funcionalidades são, em sua maioria, pouco acessíveis e de difícil manejo. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 3 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que nenhum dos softwares (0%) utilizam o modelo esferas rígidas (critério 3.1). Isso torna evidente, neste requisito, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.
- (3.2) Visualização: Estudantes e professores levantaram o problema de que softwares cristalográficos comumente utilizados em sala de

aula possuem recursos de visualização restritos em comparação às possibilidades da computação gráfica atualmente disponíveis. Espera-se que disponibilizar opções de visualização traga ganhos no processo de aprendizado, devido à possibilidade de personalização, fornecendo meios de visualização alternativos a indivíduos com perfis cognitivos variados. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 3 – APÊNDICE C) é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que, apesar de alguns softwares cristalográficos proverem suporte a uma quantidade variada de recursos de percepção visual e a técnicas de renderização relativamente recentes, estas funcionalidades são, segundo a expectativa dos atores sociais, negligenciadas quanto ao seu potencial no contexto didático e interativo.

(4) Requerimentos de navegação e interatividade

Na visão dos atores sociais, a visualização e a interação são aspectos interligados no que tange à experiência de aprendizado. Na especificação das características de interação, pretendeu-se que estas estivessem sintonizadas com as de visualização (APÊNDICE D seção 3) e que dessem suporte à compreensão visual de modelos de estruturas cristalinas, visando extrair conhecimento desse tipo de modelo e simplificar o entendimento de um tópico complexo. Além disso, meios avançados de interação permitem uma exploração mais rica dos modelos e podem atender às diferentes necessidades dos usuários do sistema. Ferramentas digitais com fins didáticos podem e devem oferecer bastante suporte na exploração de modelos complexos, especialmente a usuários inexperientes. As tecnologias modernas também devem ser exploradas para a evolução das práticas de ensino. O suporte oferecido deve considerar a natureza do modelo, as dificuldades de visualização inerentes e que tipo de informação se pretende extrair da visualização. Exemplos são animações guiadas e rotações automáticas com foco em objetos relevantes, transições de escala assistidas e mudanças dinâmicas de parâmetros de visualização. Esperava-se que características como essas fossem muito raras em softwares cristalográficos. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 4 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que, apesar de a interação

base ser bem suportada pela maioria dos softwares analisados, 18 (69,23% do total), apenas 9 (34,61% do total avaliado) possuem interface amigável (critério 4.1) e, não por coincidência, são os únicos a proverem suporte a algum recurso de interação avançado (critério 4.3), como rotações automáticas (subparâmetro 4.3.1), animações guiadas (subparâmetro 4.3.2), transições de escala (subparâmetro 4.3.3), perspectiva/pontos de vista preconfigurados (subparâmetro 4.3.5). O subparâmetro 4.3.4, gerenciamento dinâmico de oclusões não é contemplado por nenhum dos softwares (0%). Isso torna evidente, neste requisito, o baixo atendimento às expectativas dos atores sociais.

(5) Requerimentos didáticos

Na visão dos atores sociais, essas características têm como finalidade, no geral, adicionar preocupações didáticas negligenciadas pelos softwares cristalográficos existentes e dar maior suporte às atividades de docência, estudo e pesquisa. Isso se traduz em facilidade e flexibilidade de uso, tanto no que diz respeito à adequação ao tipo de usuário (professores, estudantes, pesquisadores) como ao aspecto utilitário (suporte a aulas, criação de imagens e modelos para publicações).

- (5.1) Conhecimentos requeridos do usuário: O processo de síntese de estruturas cristalinas em softwares cristalográficos é, em geral, bastante restrito aos parâmetros de estruturas previamente conhecidas e, portanto, seu uso é possível quase que exclusivamente por cristalógrafos e outros especialistas da área. Por esta razão, espera-se que a maioria das ferramentas adote métodos de síntese baseado em grupos espaciais, requerendo conhecimentos avançados de cristalografia para seu entendimento e compreensão. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 5 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que todos os softwares (100%) adotam métodos de síntese baseado em grupos espaciais, corroborando a percepção de que são necessários conhecimentos avançados de cristalografia para seu entendimento e compreensão.
- (5.2) Suporte a publicações: Essas propriedades possibilitam um uso mais amplo e flexível da ferramenta, mesmo para desenvolvi-

mento de aulas em contextos didáticos tradicionais. Existe a percepção de que o suporte à publicação em softwares cristalográficos é, em geral, limitado a formatos de saída para visualização em tela, devido à baixa resolução. Por esta razão, espera-se que muitas ferramentas ofereçam saída apenas em formato de imagem, algumas poucas capturem vídeos da interface e gerem modelos 3D e que quase nenhuma gere visualizações portáteis interativas para incorporação direta em documentos e websites. Com o advento da impressão 3D, é conveniente a produção de modelos que já incorporem modificações para impressão, mas espera-se que tal característica seja encontrada em poucos softwares, ou em nenhum deles. Finalmente, a possibilidade de recuperação de modelos diretamente por meio de uma URL pública na internet é fundamental para o incentivo à educação à distância e ao estudo independente, viabilizando o acesso e o compartilhamento descomplicados a modelos produzidos pelo professor e estudantes, além da realização de atividades educacionais em outros locais e horários. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 5 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que, apesar do recurso de impressão 2D (subcritério 5.2.2) por meio da exportação de imagens bitmap ser suportado por quase todos os softwares cristalográficos (96% do total), apenas 3 (11% do total), proveem suporte à visualização ou portabilidade externa (subcritério 5.2.1) e 2 (7% do total) proveem suporte à visualização ou portabilidade externa (subcritério 5.2.1) e nenhum (0%) fornece uma plataforma de publicação online na internet (subcritério 5.2.4). Isso torna evidente, nestes requisitos, o baixo atendimento às expectativas dos atores sociais.

- (5.3) Funcionalidades didáticas: Trata-se de um critério especial, considerando o contexto deste trabalho: a criação de uma nova ferramenta digital com ênfase didática, e que, portanto, deve prover suporte à narrativa didática. Por isso, deve possibilitar a contribuição do professor à compreensão do tópico, complementando os modelos gerados com conceitos teóricos relacionados e dicas ou referên-

cias adicionais. Tradicionalmente, isso é feito graficamente (desenhos manuais, gráficos) ou textualmente (anotações), usando quadro-negro e projeções. Atualmente, isso também pode ser feito por meio de inserção de hipertexto, links e incorporação de imagens. Ainda, essas ferramentas devem, idealmente, contar com bibliotecas de exemplos preconfigurados que incluam modelos e anotações, tanto para exemplificar o uso da ferramenta e demonstrar suas capacidades, como para facilitar as atividades didáticas. Finalmente, a abordagem construtivista de aquisição de conhecimento, que prega a participação ativa, pode ser viabilizada ao permitir um processo interativo de seleção e edição de átomos das estruturas cristalinas, onde o usuário exercita sua curiosidade nos primeiros contatos com o tema, ao invés de regular parâmetros obscuros ou pouco intuitivos para os estágios iniciais do aprendizado. Os modelos produzidos livremente podem ser comparados com as versões produzidas pela ferramenta ou pelo professor. No entanto, os softwares cristalográficos são, em geral, pouco didáticos, pois são voltados a cristalógrafos e especialistas. Por esta razão, espera-se que poucas ferramentas tenham amplo suporte a técnicas didáticas modernas. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 5 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que apenas 6 softwares (23% do total) proveem suporte a algum tipo de biblioteca de estruturas cristalográficas (subcritério 5.3.2) e nenhum (0%) provê suporte a técnicas didáticas modernas, como suporte à narrativa didática (subcritério 5.3.1) ou construção e visualização incremental de estruturas (subcritério 5.3.3). Isso torna evidente, nestes requisitos, o não atendimento às expectativas dos atores sociais.

- (5.4) Suporte e documentação: Qualquer software, por mais simples e amigável que seja, ainda coloca eventualmente os usuários em situações desafiadoras, seja por dificuldades técnicas ou instabilidades, seja mesmo por dificuldades de aprendizado e na condução de certas operações. Espera-se que suporte técnico esteja disponível para qualquer software comercial e, em menor grau, a usuários de

versões de teste ou educacionais. Para projetos de software livre com comunidades amplas e ativas, espera-se, além das liberdades de acesso ao código-fonte, aprimoramento contínuo do software e alguma documentação do projeto, que é fundamental não apenas para a compreensão e estudo do código-fonte, mas também para o desenvolvimento e continuidade da comunidade voluntária de desenvolvedores. Observando-se os resultados da análise sistemática (TAB. 5 – APÊNDICE C), é possível verificar dados que corroboram estas percepções. Destes dados, pode-se inferir que quase todos os softwares cristalográficos (92% do total) proveem algum tipo de suporte e documentação a seus usuários. Isso torna evidente, nestes requisitos, o atendimento às expectativas dos atores sociais.