

Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart

Universität Stuttgart
Allmandring 19
D-70569 Stuttgart

Bachelorarbeit

Entwicklung eines SenseGlove -
basierten Programms zur Erstellung
und Manipulation von Molekülmodellen
via VR

Patrick Gebhardt

| | |
|--------------|---------------------------------------------|
| Studiengang: | Medieninformatik |
| Prüfer/in: | Jun.-Prof. Dr. Michael Sedlmair |
| Betreuer/in: | M. Sc. Xingyao Yu Prof. Dr. Andreas Köhn |
| Beginn am: | 25. September 2019 |
| Beendet am: | 25. März 2020 |

Kurzfassung

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines Molekülbaukastens für Virtual Reality (VR) mit der Nutzung der SenseGlove. Bei bisherigen Systemen fehlt durch die zweidimensionale Betrachtung der räumliche Aspekt, wobei die visuelle Erfassung der modellierten Objekte erschwert wird. Außerdem ist es bei gewöhnlichen PC Anwendungen nicht möglich die virtuellen Strukturen haptisch zu erfassen, wodurch die Kräfte zwischen den Atomen für den Nutzer nicht spürbar sind. Durch die Verwendung der SenseGlove soll dabei ein intuitives Greifen und Interagieren mit virtuellen Objekten möglich gemacht werden. Der VR Molekülbaukasten unterstützt alle nötigen Grundtransformationen, um Kohlenstoffmodelle zu erstellen. Dabei stellt er vereinfachte Formen der intermolekularen Kräfte dar. Die erstellten Modelle können nach dem Erstellen exportiert und wieder verwendet werden.

In einer Studie wurde der entwickelte VR Molekülbaukasten mit anderen bereits bestehenden Systemen verglichen.

Die Ergebnisse dieser Studie belegen, dass der VR Molekülbaukasten ein innovatives Programm ist, welches ein überdurchschnittliches Nutzerfeedback liefert. Verglichen mit einem Handbaukasten, bewegt sich der VR Molekülbaukasten in Sachen natürlicher Interaktion mit diesem auf einem Level. Zusätzlich enthält er sämtliche Vorteile eines PC Programms.

Für den Prototypen bedeutet das, dass eine Weiterentwicklung in der Zukunft sinnvoll wäre. Durch das Feedback der Studienteilnehmer wurden bereits einige mögliche Richtungen aufgezeigt, in die sinnvolle Weiterentwicklungen stattfinden könnten.

Eine denkbare Innovation wäre eine portable Version ohne SenseGlove. Jedoch erscheint das Hinzufügen von neuen Funktionen, wie beispielsweise einer Skalierungsmöglichkeit oder ein vollständiges Periodensystem an nutzbaren Atomen, als mindestens genauso sinnvoll.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|----------------------------------------------|----|
| 1. Einleitung | 7 |
| 2. Verwandte Arbeiten | 8 |
| 3. Verwandte Programme | 10 |
| 3.1. Avogadro | 11 |
| 3.2. TmoleX | 11 |
| 3.3. Nanome | 13 |
| 4. VR Molekülbaukasten Prototyp | 14 |
| 4.1. SenseGlove | 15 |
| 4.2. Aufbau der Software | 16 |
| 4.3. Funktionen und Steuerung | 19 |
| 5. Nutzerstudie | 25 |
| 5.1. Studiendesign | 25 |
| 5.2. Hypothesen | 29 |
| 5.3. Evaluation | 30 |
| 6. Limitierungen | 40 |
| 7. Fazit und Ausblick | 41 |
| 7.1. Fazit | 41 |
| 7.2. Ausblick | 42 |
| Literaturverzeichnis | 43 |
| Appendices | 45 |
| A. Tabellarische Ergebnisse der Nutzerstudie | 46 |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|-------------------------------------------------------------|----|
| 3.1. TmoleX Client | 12 |
| 4.1. Zeigegeste im VR Molekülbaukasten | 20 |
| 4.2. Verbindungen zwischen Atomen erstellen | 21 |
| 4.3. Bearbeitungsmodus | 22 |
| 4.4. Interface Speichermenü des Molekülbaukastens | 23 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|---------------------------------------------------------------|----|
| 5.1. System Usability Score Diagramm | 31 |
| 5.2. Mental Demand Diagramm | 32 |
| 5.3. Physical Demand Levene-Test | 33 |
| 5.4. Temporal Demand Diagramm | 34 |
| 5.5. Overall Performance Levene-Test | 35 |
| 5.6. Effort Diagramm | 36 |
| 5.7. Frustration Level Diagramm | 37 |
| 5.8. Presence Diagramm | 38 |
| | |
| A.1. System Usability Score Deskriptive Statistiken | 46 |
| A.2. System Usability Score ANOVA | 46 |
| A.3. System Usability Score Mehrfachvergleiche | 47 |
| A.4. System Usability Score Levene-Test | 47 |
| A.5. Mental Demand Deskriptive Statistiken | 47 |
| A.6. Mental Demand ANOVA | 48 |
| A.7. Mental Demand Mehrfachvergleiche | 48 |
| A.8. Mental Demand Levene-Test | 48 |
| A.9. Physical Demand Deskriptive Statistiken | 49 |
| A.10. Physical Demand ANOVA | 49 |
| A.11. Temporal Demand Deskriptive Statistiken | 49 |
| A.12. Temporal Demand ANOVA | 50 |
| A.13. Temporal Demand Mehrfachvergleiche | 50 |
| A.14. Overall Performance Statistiken | 50 |
| A.15. Effort Deskriptive Statistiken | 51 |
| A.16. Effort ANOVA | 51 |
| A.17. Effort Levene-Test | 51 |
| A.18. Effort Mehrfachvergleiche | 52 |
| A.19. Frustration Level Deskriptive Statistiken | 52 |
| A.20. Frustration Level ANOVA | 52 |
| A.21. Frustration Level Levene-Test | 53 |
| A.22. Frustration Level Mehrfachvergleiche | 53 |

Abkürzungsverzeichnis

ANOVA Varianzanalyse. 29

AR Augmented Reality. 8

GUI Graphical User Interface. 19

RCSB Protein Datenbank. 13

SUS System Usability Scale. 28

VR Virtual Reality. 2

1. Einleitung

Für die Forschung in der Chemie ist es von breitem Interesse Moleküle modellieren zu können, um komplexe räumliche Strukturen zu verstehen [ADF+13]. Diese räumliche Strukturen können aufgrund von Hardwarebeschränkungen meistens nur zweidimensional dargestellt werden. Gewöhnliche Systeme bilden also eine dreidimensionale Struktur auf einem zweidimensionalen Monitor ab. Somit ergibt sich ein Informationsverlust, der den Nutzer in seinen Handlungsfreiheiten einschränkt. Durch das Nutzen von VR können sämtliche Strukturen aus allen Blickrichtungen im dreidimensionalen Raum betrachtet werden. Dadurch eröffnen sich auch neue Möglichkeiten für Interaktionen mit den Nutzern. Die bisherigen Interaktionsmöglichkeiten waren lediglich auf Maus und Tastatur beschränkt.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Fragestellung, ob durch das neu entwickelte Programm eine echte dreidimensionale Erfahrbarkeit und eine natürlichere Manipulation der Molekülmodelle im Vergleich zu gewöhnlichen Programmen realisiert werden kann.

Zu Beginn wurden in Kapitel 2 unterschiedliche Systeme und Prototypen verwandter Arbeiten betrachtet. Daraufhin folgen in Kapitel 3 ähnliche bereits existierende Programme, in denen Modelle von Molekülen erstellt und bearbeitet werden können. Kapitel 4 bezieht sich dann auf den neu entwickelten Molekülbaukasten mit all seinen Funktionen und dem dazu nötigen Setup. In einer Nutzerstudie, welche in Kapitel 5 dokumentiert ist, wurden dann die Vor- und Nachteile evaluiert. Dadurch kann ein klares Ergebnis aufzeigen, wie sich die Änderungen auf die Nutzerinteraktion auswirken. Mögliche Limitierungen, die die Funktionen des Molekülbaukastens oder andere wichtige Komponenten einschränken, wurden in Kapitel 6 betrachtet. Das abschließende Fazit in Kapitel 7 beendet die Arbeit.

Zur Entwicklung des Molekülbaukastens, welcher dem Nutzer bessere Interaktionsmöglichkeiten gibt, wird ein VR Setup mit der HTC VIVE¹ verwendet. Zusätzlich dazu sollen die virtuellen Objekte greifbar gemacht werden, weshalb die SenseGlove² noch in das System integriert wurde. Die SenseGlove ermöglicht es den Nutzern durch Motoren an den Fingergelenken, virtuelle Objekte zu greifen und so eine bessere Präsenz zu bieten als mit gewöhnlichen Controllern [KHF+19]. Nutzer des im Zuge dieser Arbeit entwickelten Molekülbaukastens sollen durch das natürliche Greifen, Halten und Manipulieren ein besseres Verständnis der Kräfte und der Struktur bekommen. Der Prototyp des Molekülbaukastens beschränkt sich auf Kohlenstoffverbindungen. Er wurde leicht wartbar und erweiterbar programmiert. Es können also in der Zukunft mit geringem Aufwand weitere Atome oder andere Funktionen, wie beispielsweise die Skalierbarkeit der Modelle, hinzugefügt werden.

¹<https://www.vive.com/de/product/>

²<https://www.senseglove.com/>

2. Verwandte Arbeiten

Eine Möglichkeit, zur Steigerung der Immersion in VR Systemen, ist das Einbinden von haptischem Feedback. Laut Ramsamy et al. [RHJA06] erhöht sich die Präsenz und Effizienz, wenn die Nutzer virtuelle Objekte fühlen und anfassen können.

Die Mittel, die genutzt werden, um haptisches Feedback zu erzeugen, reichen von Geräten, die auf Fingerspitzen gesetzt werden bis zu exoskelettartigen Handschuhen. Die speziell in einer Studie von Schorr und Okamura [SO17] entwickelten Geräte, die auf die Fingerspitzen von Daumen und Zeigefinger gesetzt werden, bestehen aus kleinen Motoren, die Druck auf die darunterliegende Haut an der Fingerspitze ausüben. Dadurch wird die Oberfläche der Haut leicht deformiert, sobald der Nutzer ein virtuelles Objekt greift. So können unterschiedliche Massen realitätsnah dargestellt werden und die Nutzer bekommen ein besseres Gefühl über die Stärke ihrer Griffkraft [SO17].

Exoskelettartige Handschuhe, wie die SenseGlove, welche für die folgende Studie und die Applikation verwendet wird, können zwar kein Gefühl über die Masse der virtuellen Objekte vermitteln, in diesem Anwendungsgebiet steht jedoch die Form der Objekte im Vordergrund. Diese Art von haptischen Eingabegeräten sind aber noch verbesserungsfähig in den Punkten Komfort und Performance [SZA+18].

Shor et al. [SZA+18] versuchten erfolgreich diese Schwachstellen mit der Entwicklung der SoftGlove zu verbessern. Die SoftGlove, eine Weiterentwicklung der SenseGlove, enthält zusätzlich zu dem Exoskelett, das über der Hand liegt einen in der Größe verstellbaren Handschuh, an dem Vibrationsmotoren angebracht sind wodurch gleichzeitig das Force Feedback, also die Kräfte, welche auf die einzelnen Finger wirken und die Passform zu verbessern. Außerdem wurden stabilere Kappen für die Fingerspitzen angebracht, die den Druck gleichmäßig verteilen. Dieser Prototyp zeigt, dass die Immersion in VR durch haptisches Feedback verbessert werden kann, aber auch noch an vielen Stellen verfeinert werden muss. Um VR greifbar realitätsnah zu machen, sollten in der Zukunft auch Empfindungen, wie die Textur oder Temperatur der gegriffenen Objekte nachgestellt werden können.

Darüber hinaus gibt es noch andere Möglichkeiten, die Interaktion mit VR oder auch Augmented Reality (AR) Systemen zu verbessern, wie beispielsweise elektro-taktile Tattoos, die auf die Finger aufgebracht werden. Diese haben den Vorteil, kaum spürbar zu sein, können jedoch bedingt durch ihre minimale Größe auch kein Feedback an den Nutzer geben.

Die sogenannten SkinMarks werden vorübergehend auf der Haut aufgebracht und können dann als Eingabegerät verwendet werden. Durch Drücken und Biegen der Gelenke oder auch Runzeln der Haut an der verwendeten Körperstelle werden die Eingaben an das Computersystem übertragen. Aufgrund des schwierigen Herstellungsprozesses, des komplizierten Anbringens von größeren SkinMarks und der schlechten Wiederverwendbarkeit sind diese jedoch noch nicht für die alltägliche Arbeit geeignet [WNOS17].

Diese Prototypen könnten in der Zukunft für das Wirkstoffdesign am Computer nützlich sein. In dieser Forschungsrichtung werden medizinische Wirkstoffe auf Molekularbasis am PC entwickelt und speziell angepasst, bevor sie dann umgesetzt werden. Dazu werden dreidimensionale Modelle

der Moleküle erstellt, was eine teure Suche im Labor und komplizierte Zulassungsverfahren für neue Substanzen erspart [ADF+13].

Schon im Jahr 1996 gab es Prototypen, in denen Moleküle in der virtuellen Umgebung erstellt werden konnten. Mit dem Programm VRMol¹ konnte man Stäbchenmodelle oder auch die Oberflächenbeschaffenheit großer Moleküle untersuchen. Haase et al. [HSD96] hatten schon damals die Idee, Eingabegeräte mit Force Feedback zu nutzen, welche zu dieser Zeit jedoch noch nicht existierten.

¹<https://vrmol.net/>

3. Verwandte Programme

Neben den klassischen Molekülbaukästen, bei denen die Nutzer die Teile von Hand zusammenstecken, gibt es inzwischen auch einige Computerprogramme, um Moleküle zu modellieren. In diesem Kapitel werden die ausgewählten Programme vorgestellt und in ihren Grundfunktionen beschrieben. Ebenso wird ein VR Programm betrachtet.

Die Computerprogramme haben im Vergleich zu den gewöhnlichen Molekülbaukästen alle den Nachteil, dass eine dreidimensionale Struktur auf einem zweidimensionalen Bildschirm angezeigt wird. Hier findet also ein Informationsverlust statt, der das räumliche Verständnis der modellierten Struktur schwieriger macht.

Trotzdem haben die Computerprogramme den Vorteil, dass Moleküle gespeichert und exportiert werden können. Gerade bei größeren Strukturen können Arbeitsschritte hier einfacher dokumentiert und festgehalten werden.

Will man den Informationsverlust, der durch die Abbildung auf einen zweidimensionalen Bildschirm geschieht, verringern, so muss man ein Computerprogramm in VR wählen. Hier spielt wieder der Aspekt des räumlichen Betrachtens eine wichtige Rolle, jedoch sind die momentanen Anwendungen in VR und die Möglichkeit der Steuerung mit einem haptischen Eingabegerät sehr gering.

Trotz der räumlichen Ansicht in VR gibt es daher eine zusätzliche Abstraktionsebene bei bisherigen Programmen. Kommerzielle Molekülbaukästen werden in VR mit den jeweiligen Controllern des VR Systems gesteuert.

Es ist also trotz der virtuellen Welt kein direktes Anfassen der Objekte möglich. Das bedeutet, ein Nutzer kann keine Eingabe durch realitätsnahe Hand- oder Fingerbewegungen machen, sondern nur über Tastendrücke oder Gesten mit den jeweiligen Controllern.

Diese Abstraktionsebene wird durch die SenseGlove eliminiert und somit soll der im Zuge dieser Arbeit entwickelte VR Molekülbaukasten dem Nutzer ein realitätsnahes Gefühl vermitteln.

Computerprogramme zur Modellierung von Molekülen sind je nach Umfang und Funktionen kostenlos oder käuflich erwerbbar. Unterschiedliche Programme haben unterschiedliche Schwerpunkte, weshalb sie sich für bestimmte Aufgaben besser beziehungsweise schlechter eignen. Auf die jeweiligen Vor- und Nachteile wird jeweils bei den einzelnen Programmen eingegangen.

Da sich der im Zuge dieser Arbeit entwickelte VR Molekülbaukasten auf Kohlenstoffatome beschränkt, sollen zum Vergleich auch nur frei verfügbare Computerprogramme herangezogen werden, die einfach bedienbare Werkzeuge für Transformationen wie das Rotieren oder Verschieben enthalten.

3.1. Avogadro

Ein bekanntes Open Source Programm ist Avogadro¹. Avogadro ist ein einfach zu erweiterndes Programm. Über dynamisch geladene Plugins lässt sich Avogadro stets erweitern oder modifizieren und der Nutzer kann dadurch neue Visualisierungsarten betrachten.

Der standardmäßige Editor enthält eine schlicht gehaltene Ansicht über das gebildete Molekül. Die gewünschten Moleküle können durch Klicken schnell modelliert werden. Nach dem Einschalten des Kraftfelds berechnet Avogadro die intermolekularen Kräfte und arrangiert das Modell automatisch durch Verändern der Bindungslängen auf die optimale Distanz und das damit verbundene Verschieben der Atome. So bekommt der Nutzer einen guten Eindruck davon, wie viel Energie notwendig ist, um eine bestimmte Bindung aufrecht zu erhalten.

Avogadro unterstützt das Herunterladen von gemeinsamen Datenbanken, wie beispielsweise der PubChem² und hat eine native Unterstützung für das CML - Dateiformat. Damit will Avogadro die semantische Zugänglichkeit von chemischen Datentypen verbessern [HCL+12].

Neben den vergleichsweise einfach aufgebauten Molekülen kann man mit Avogadro auch komplexe Kristallstrukturen in wenigen Schritten modellieren. Weitere Funktionen sind außerdem das Verändern der Oberflächenstruktur eines Moleküls und das Bilden von anderen Strukturen, wie beispielsweise einer DNA Sequenz [HCL+12].

Von den Funktionen ist Avogadro dem Prototypen des VR Molekülbaukasten ebenso wie die anderen Programme aufgrund der kurzen Entwicklungszeit überlegen. Jedoch ist es wie schon erwähnt mit gewöhnlichen PC Programmen wie Avogadro nicht möglich eine realitätsnahe Interaktion zwischen dem Nutzer und dem Programm zu schaffen. Diese Lücke versucht der VR Molekülbaukasten durch das VR System und die SenseGlove zu schließen.

3.2. TmoleX

TmoleX³ ist ein kostenloser Client, um schnelle Turbomole⁴ Berechnungen durchzuführen. Der TmoleX Client sendet die gewünschten Berechnungen an einen Linux Server und erfordert somit keine vollständige Turbomole Installation auf dem eigenen Gerät.

Mit TmoleX können sämtliche Grundtransformationen zum Erstellen von Molekülen realisiert werden. Es werden unterschiedliche Bindungstypen unterstützt und dem Nutzer eine einfache Übersicht über die grundlegenden Funktionen geboten.

¹<http://avogadro.cc/>

²<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

³<http://www.cosmologic.de/turbomole/tmolex.html>

⁴<http://www.cosmologic.de/turbomole/home.html>

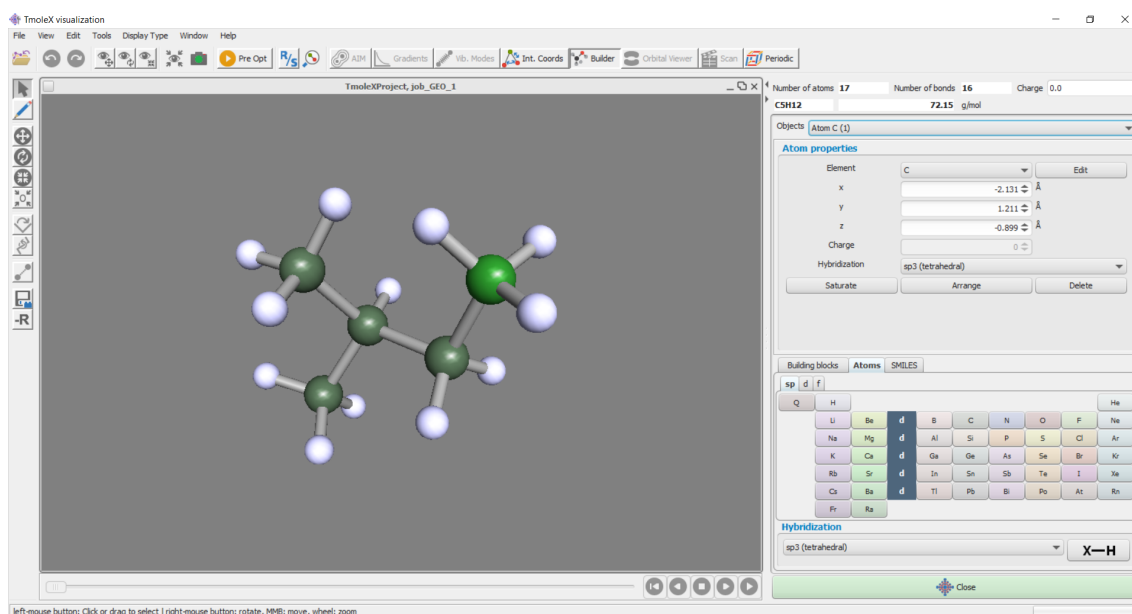


Abbildung 3.1.: Isopentan räumlich dargestellt in TmoleX.

Quelle: Eigener Screenshot aus einem aktiven TmoleX Client

Auf der linken Seite des TmoleX Client sind die Grundtransformationen sichtbar. Hier können einzelne Atome oder auch das ganze Molekül verschoben, rotiert oder transformiert werden. Informationen über ein ausgewähltes Atom und dessen Bindungen sind in der oberen rechten Hälfte sichtbar. Neue Atome aus dem Periodensystem in der Ecke unten rechts lassen sich durch einfaches Klicken an das Molekül anknüpfen.

Eine praktische Hilfe, die sich in dem Reiter neben dem Periodensystem befindet und mit der sich die Arbeit häufig genutzte Moleküle zu erstellen sparen lässt, sind die sogenannten Building Blocks. Damit lassen sich vorgefertigte, eben diese Moleküle in den Editor laden und sind direkt nutzbar. Diese Building Blocks enthalten neben den Kohlenwasserstoffen nicht nur häufig verwendete Alkohole, sondern beispielsweise auch Nukleinbasen für die Arbeit mit DNA Strängen.

Weitere Funktionen, die über die Leiste am oberen Bildschirmrand zugänglich und für fortgeschrittene Nutzer unumgänglich sind, lassen den Nutzer nicht nur aufwändige Kraftfelder visualisieren, sondern TmoleX erkennt ebenfalls Symmetrien der Moleküle.

Die Einzelpunktberechnungen und Geometrieoptimierungen können sowohl im Grundzustand als auch im angeregten Zustand erfolgen. Außerdem können die Molekülorbitale automatisch erzeugt und besetzt werden [STH+10].

TmoleX bietet noch unzählige weitere Funktionen, welche die Funktionen eines Molekülbaukastens weit überschreiten, jedoch in Bezug auf diese Arbeit irrelevant sind und deshalb hier nicht betrachtet werden.

Jedoch kann TmoleX keine echte dreidimensionale Erfahrbarkeit möglich machen. Die Abbildung auf einem zweidimensionalen Monitor erschwert das räumliche Verständnis, welches beim Prototypen des VR Molekülbaukastens gegeben ist.

3.3. Nanome

Nanome⁵ ist eines von wenigen VR Programmen zur Modellierung von Molekülen. Das Programm ist in unterschiedlichen Ausführungen zu verschiedenen Preisen erhältlich.

Die Grundfunktion, die Nanome als Alleinstellungsmerkmal bietet, ist ein virtueller Arbeitsplatz als Team. Das bedeutet, das Programm ist darauf ausgelegt, mehrere Mitarbeiter in einem virtuellen Raum an einer Struktur arbeiten zu lassen.

In der kostenlosen Version sind das Beitreten und Arbeiten in öffentlichen virtuellen Arbeitsräumen enthalten, sowie einfache Ansichten und Bearbeitungsmöglichkeiten des erstellten Moleküls. Darüber hinaus können zwei Moleküle nebeneinander betrachtet und Strukturen aus der Protein Datenbank (RCSB)⁶ geladen werden.

Neben der kostenlosen Variante gibt es noch die Academic Version käuflich zu erwerben, sowie die Commercial Version, die ebenfalls kostenpflichtig ist. Die kommerzielle Version enthält alle Funktionen der akademischen Variante und einige weitere Zusätze, ist aber für Geschäftskunden gedacht und erfordert somit eine Anfrage an die Nanome Inc.

Die akademische Version bietet gegenüber der kostenfreien Version die Vorteile, private virtuelle Arbeitsplätze zu erstellen und eben auch diese mit den darin erarbeiteten Fortschritten zu speichern. Hier können auch unlimitiert viele Moleküle nebeneinander bearbeitet und in gängigen Formaten exportiert werden, um sie in anderen Programmen zu verwenden.

Ein weiterer Vorteil ist, dass Daten nicht nur aus der RCSB geladen werden können, sondern chemische Modelle ebenso aus PubChem und der DrugBank⁷ bezogen werden können.

Darüber hinaus gibt es ebenso noch Funktionen für fortgeschrittene Nutzer, wie beispielsweise das Visualisieren von Elektronenkonzentrationen.

Diese breite Kompatibilität soll vor allem Wissenschaftler dazu anregen, das Programm gemeinsam zu nutzen und so neue Ideen entwickeln zu können. Der virtuelle Raum kann reale räumliche Barrieren überwinden und so eine effektivere Arbeit möglich machen.

Kurz gefasst ist Nanome eine Software mit Bedienelementen über handelsübliche VR Controller, die mithilfe eines Tutorials beim ersten Start des Programms schnell beherrschbar ist. Nanome ist auf die Bedürfnisse von Wissenschaftlern hauptsächlich in der Medikamentenentwicklung aus verschiedenen Disziplinen und mit unterschiedlichem Hintergrund zugeschnitten und ermöglicht eine strukturbasierte Zusammenarbeit beim Design in Echtzeit [KBL+19].

Trotzdem kann Nanome kein direktes haptisches Feedback der Strukturen ermöglichen, welches der im Zuge dieser Arbeit entwickelte VR Molekülbaukasten möglich macht. Hier hebt sich also der entwickelte Prototyp von Nanome ab.

⁵<https://nanome.ai/nanome/>

⁶<https://www.rcsb.org/>

⁷<https://www.drugbank.ca/>

4. VR Molekülbaukasten Prototyp

Der VR Molekülbaukasten ist ein im Zuge dieser Arbeit entwickeltes VR Programm um Molekülmodelle zu Erstellen. Er wurde mit der Zielsetzung entwickelt, eine möglichst realitätsnahe dreidimensionale Erfahrbarkeit und eine natürliche Manipulation der Modelle zu bieten. Daraus ergibt sich dann die Fragestellung: Was sind natürliche Manipulationsarten und wie können diese auf den Molekülbaukasten angewendet werden?

Just as speech is our natural means of communication, the human hand is our natural means of manipulating the physical world.

Die Aussage, dass die Hand das natürliche Mittel ist, um mit physischen Dingen zu interagieren, machten Zimmerman et al. [ZLB+86] bei der Untersuchung verschiedener Eingabemöglichkeiten für virtuelle Umgebungen. Daraus lässt sich auch ableiten, dass Controller nicht die optimale Eingabemöglichkeit in einer virtuellen Umgebung sind.

Nutzt man einen Controller als Steuerungsoption für eine Anwendung, ergibt sich dadurch eine weitere Abstraktionsebene. Der Nutzer muss seine Aktion beispielsweise durch das Drücken eines Knopfes in die Tat umsetzen und erhält somit keine natürliche Interaktion mit einem physischen Objekt, wie es mit einer direkten Handbewegung möglich wäre. Der Fokus sollte daher auf einer Eingabemethode bestehend aus Gesten und anderen natürlichen Bewegungen der Hand, wie dem Greifen, liegen.

Angewandt auf den Molekülbaukasten sind hier viele Interaktionen durch Greifen realisierbar, da dieser die Moleküle als Stäbchenmodelle darstellt und diese mit der SenseGlove greifbar gemacht werden. Stäbchenmodelle sind vereinfacht gesehen Kugeln, die Atome darstellen und Zylinder als deren Verbindungen. Die Kugeln eignen sich sehr gut zum Greifen und können dadurch bewegt und beispielsweise miteinander verbunden werden. Weitere Funktionen des Molekülbaukastens, die nichts mit den Atomen zu tun haben, werden dann weitestgehend durch Gestensteuerung bedient.

Der Molekülbaukasten unterstützt im Moment aufgrund der zeitlichen Beschränkung dieses Projekts und dem damit verbundenen Status als Prototyp nur Kohlenstoffatome. Für die Zukunft ist angedacht, diese Auswahl zu erweitern und andere Atome wie Wasserstoff und Sauerstoff einzubinden. Hierzu müssen dann jedoch verschiedene Kräfte und Bindungseigenschaften neu berechnet werden.

Sämtliche Funktionen, die der Molekülbaukasten unterstützt, sind ebenfalls erweiterbar. Hier würde in der Zukunft beispielsweise eine Skalierungsfunktion dem Nutzer helfen, um große Moleküle kleiner zu skalieren und dadurch handlicher zu machen. Der Molekülbaukasten bietet dem Nutzer die Möglichkeit Moleküle zu erstellen, einzelne Atome oder auch ganze Moleküle zu löschen, sowie fertige Moleküle zu speichern und zu laden. In dem Editiermodus können dazu noch zusätzliche Informationen vom Nutzer eingesehen und bearbeitet werden. Der Nutzer kann hier den Rotationswinkel einer Atombindung bearbeiten. Dies ermöglicht es ihm, die Moleküle weiter zu individualisieren oder auch verschiedene Ringbindungen zu erstellen.

4.1. SenseGlove

Die SenseGlove, die von einem Exoskelett inspiriert ist, dient als haptisches Eingabegerät hauptsächlich für Anwendungen in VR. Die Einsatzmöglichkeiten sind aber nicht nur auf greifbare Nutzerschnittstellen begrenzt, man kann damit ebenso über eine Remoteverbindung Systeme aus der Distanz bedienen.

Die haptischen Aspekte, die die SenseGlove ausmachen, sind das Force Feedback, das taktile Feedback und Motiontracking. Kleine Elektromotoren an den Fingern sind für das Force Feedback verantwortlich. Diese können abhängig von dem gegriffenen virtuellen Objekt die Fingerbewegungen begrenzen und so unterschiedlich weiche oder harte Objekte simulieren.

Das taktile Feedback wird durch Vibrationsmotoren gewährleistet, die jeden Finger einzeln ansteuern können. Mithilfe verschiedener Vibrationsstärken kann die SenseGlove unterschiedliche Oberflächen simulieren. Um diese Arten von Feedback präzise gewährleisten zu können, muss die SenseGlove auch Motiontracking unterstützen, was bedeutet, dass sämtliche Fingerbewegungen getrackt und naturgetreu auf das virtuelle Modell der Hand abgebildet werden.

Will man als Nutzer die Position im Raum nutzen, sind hierfür separat erhältliche VIVE Tracker ¹ vorgesehen. Diese werden auf die Halterung am Handrücken angebracht und erlauben es dann, die Hände frei im Raum zu bewegen zu können.

4.1.1. Setup

Die Installation der SenseGlove funktioniert in wenigen Schritten. Zuerst wird die LinkBox an ihrer Rückseite über den Netzstecker mit dem Strom verbunden, sowie per USB mit dem Computer. Abhängig davon welche Version der SenseGlove genutzt wird, müssen hier entweder ein oder bei der älteren Version zwei USB Kabel mit dem Computer verbunden werden, da die ältere SenseGlove die Signale für jede Hand einzeln an den Computer sendet.

Auf der Vorderseite der LinkBox ist Platz für zwei weitere USB Kabel, mit denen die jeweiligen Hände verbunden werden. Hier sollten nur die mitgelieferten USB Kabel verwendet werden, da die SenseGlove eine höhere Stromzufuhr benötigt. Handelsübliche Kabel können diese eventuell nicht liefern und so Schäden verursachen.

Falls VIVE Tracker verwendet werden, wird dazu eine kleine Halterung hinter dem Mittelfinger auf dem Handrücken angeschraubt, auf welcher der VIVE Tracker dann montiert werden kann.

4.1.2. Kalibrierung

Vor der ersten Nutzung sollte die SenseGlove für jeden Nutzer individuell kalibriert werden, um die Genauigkeit der Fingerbewegungen zu verbessern. Die Kalibrierung besteht aus mehreren Schritten, beginnend mit der optionalen Kalibrierung des Handgelenks. Danach findet die Kalibrierung der Fingergelenke statt. Wenn Bewegungen der Handgelenke nicht benötigt werden oder Tracker montiert sind, kann dieser Schritt übersprungen werden.

¹<https://www.vive.com/de/vive-tracker/>

Die Fingerkalibrierung kann manuell, semi-automatisch oder automatisch durchgeführt werden. Bei der manuellen Kalibration kann der Nutzer selbst die Methode aufrufen, um einen Snapshot zu erstellen und so den nächsten Kalibrierungsschritt aufrufen.

Mit der semi-automatischen Variante erzeugt der Computer die Kalibrierungspunkte selbst, sobald der Nutzer die Hand still hält und die aktuelle Haltung genügend von bisher gespeicherten Haltung abweicht. Das erfordert jedoch eine starke Rechenleistung des verwendeten Computers.

Die dritte Methode, die automatische Kalibrierung, macht durchgehend Snapshots und wählt automatisch die besten Snapshots daraus aus. Zwar kann diese Variante im Hintergrund laufen und zwingt den Nutzer nicht dazu seine Hand in verschiedenen Positionen zu halten, jedoch ist der Nachteil daran, dass mit den vielen Kalibrierungspunkten, die durchgehend erzeugt werden, eine hohe Speicherauslastung einher geht [19].

4.1.3. SenseGlove SDK

Die SenseGlove hat ein frei zugängliches Software Development Kit, das dem Entwickler Zugang zu sämtlichen benötigten Skripten gewährt. Darin sind auch unterschiedliche vorgefertigte Modelle für die virtuelle Hand enthalten, so dass diese vom Nutzer nicht selbst erstellt werden müssen.

Die Skripte sind in vier verschiedene Klassen gegliedert, die erste Gruppe für interne Berechnungen, die zweite Gruppe behandelt Events, eine weitere Gruppe für die Interaktionen und letztlich noch Skripte, die an die gehaltenen Objekte geknüpft werden müssen, um diese greifbar zu machen.

Die Skripte, welche die Oberflächenbeschaffenheit von gehaltenen Objekten verändern, lassen sich durch den Entwickler individualisieren. Einerseits kann hier der empfundene Härtegrad verändert werden, sowie durch Vibrationsfeedback eine raue Oberfläche simuliert werden kann.

Der andere Aspekt, der dem Nutzer auffällt ist, dass die Form eines gehaltenen Objektes durch Eindrücken verändert werden kann. Das Skript berechnet dafür Kräfte, die durch den Druck der virtuellen Finger auf das Objekt wirken und kann dann anhand der eingestellten Härte oder Elastizität des Objekts dessen Form verändern.

4.2. Aufbau der Software

Die Software des VR Molekülbaukasten setzt sich aus mehreren Skripten zusammen. Dieser Abschnitt gewährt sowohl einen Überblick über die Verwendung des Programms als auch über die Entwicklung der Algorithmen.

4.2.1. Aufbau

Der Molekülbaukasten wurde mit Unity programmiert. Dazu wurde die Unity Version 2018.3.12f1 verwendet. Für eine fehlerfreie Nutzung sollte das Programm immer mit dieser Version gestartet werden, da sonst möglicherweise Kompatibilitätsprobleme auftreten. Zusätzlich muss auf dem verwendeten Computer die aktuelle Version von Steam VR² installiert sein.

²<https://store.steampowered.com/app/250820/SteamVR/?l=german>

Die Plugins der VIVE Tracker und der SenseGlove wurden nach der Installation automatisch eingebunden und bieten dadurch die Möglichkeit, die Geräte zu steuern oder Informationen von diesen zu erhalten. Außerdem wurden noch einige frei nutzbare Assets aus dem Asset Store geladen, die aber alle nur dem Design dienen und keinen funktionalen Kontext besitzen.

Virtuelle Gegenstände, mit denen interagiert wird, wie beispielsweise die Atome wurden im Rahmen dieser Arbeit erstellt. Die Atome wurden als Prefab, einem wiederverwendbaren Modell aus Unity, gespeichert um so leicht während der Programmlaufzeit neue Instanzen davon erstellen zu können. Atome bestehen aus einer Kugel mit vier Verbindungspunkten. Die vier Verbindungspunkte befinden sich pyramidenförmig verteilt auf der Oberfläche der Kugel, da die Verbindungspunkte den maximalen Abstand zueinander haben müssen.

Die Hintergrundlogik wurde durch eingebundene C# Skripte realisiert. Hier gibt es ein „Global Control“ Skript, welches die gesamte Programmlogik enthält und in dem die Hauptfunktionen des Programms gesteuert werden. Dieses Skript liegt auf dem GameObjekt, einem in einer Unity Umgebung aktiven Objekt, der rechten Hand, da diese für sämtliche Interaktionen verwendet wird und somit auch der Controller ist, mit dem das Programm gesteuert wird. Weitere Skripte enthalten nur Hintergrundinformationen oder Abläufe, die passiv ausgeführt werden und keine Interaktion vom Nutzer fordern, wie beispielsweise die Berechnung der Kräfte zwischen den verbundenen Atomen.

4.2.2. Atome verbinden

Atome werden verbunden, indem der Nutzer sie nahe aneinander hält und bei beiden Atomen noch freie Bindungspunkte vorhanden sind. Um zu erkennen, ob der Mindestabstand unterschritten wurde, müssen mehrere Abstandsberechnungen durchgeführt werden.

Zuerst werden die Abstände zwischen den Atomen berechnet. Unterschreitet das gehaltene Atom den Schwellwert zu einem anderen Atom, blinkt dieses als Indikation für den Nutzer grün auf. Die Verbindung wird erst hergestellt, sobald der Nutzer das gehaltene Atom loslässt. Dann werden zwischen allen Verbindungspunkten der beiden Atome die Abstände berechnet und die Punkte mit dem geringsten Abstand werden verbunden.

Diese Steuerung soll einer klassischen „Drag’n’Drop“ Aktion nachempfunden sein, da der Nutzer diese Interaktion mit am häufigsten durchführen wird und daher eine möglichst einfache und intuitive Steuerung realisiert wurde.

4.2.3. Intermolekulare Kräfte

Um die intermolekularen Kräfte zu realisieren, wurde ein Algorithmus entwickelt, der die Positionen und Bewegungen der Atome im Molekül reguliert. Ein Molekül kann vom Nutzer auseinander gezogen werden. Dadurch verändern sich kurzzeitig die Abstände der Atome, welche dann bei realen Molekülen durch die intermolekularen Kräfte wiederhergestellt werden. Der selbst entwickelte Algorithmus imitiert dieses Verhalten.

Ausgehend von einem im Raum fixierten Atom werden alle verbundenen Atome in einer Liste gespeichert. Das funktioniert nur nach dem Prinzip der Breitensuche, da die Positionsveränderung der verbundenen Atome gleichmäßig passieren soll. Die Breitensuche besucht alle Kindknoten, bevor einer von ihnen expandiert wird. Das wird hier auf die Atome angewandt. Nachdem alle verbundenen

Atome erkannt wurden, werden von dieser nach Breitensuche sortierten Liste, ausgehend für jede existierende Verbindung, die Kräfte vereinfacht nach der folgenden Formel berechnet:

$$f = \frac{1}{2} * k * (d - d_0)^2$$

Die Konstante k bestimmt hier, wie stark die Anziehungskraft zwischen den Atomen ist und somit auch das Verhalten der Atome. Diese wird dann halbiert, da die Kräfte von beiden Atomen ausgehen und mit dem Quadrat der Abstandsdifferenz zum Standardabstand multipliziert. Die daraus berechnete Kraft bestimmt den Weg pro Zeiteinheit, den das Atom dann zurücklegt, um den Standardabstand wiederherzustellen.

Allein diese Kräfte zu berechnen reicht jedoch nicht aus, da sich durch das Verschieben von Atomen in großen Molekülen auch Atome nahe kommen können, die nicht direkt miteinander verbunden sind. Deshalb wird die Kräfteberechnung gleichzeitig auch zu allen umliegenden Atomen durchgeführt, mit denen das Atom nicht verbunden ist. Kommen sich diese Atome zu nahe, stoßen sie sich durch die realitätsnah implementierten Kräfte wieder voneinander ab.

Der entwickelte Algorithmus ist möglichst realitätsnah, berücksichtigt jedoch noch nicht alle Kräfte, die in der Realität wirken. Hier wirken noch Winkelkräfte zwischen den Atombindungen, diese sind jedoch in einem vereinfachten Modell wie diesem aufwändig darzustellen und wurden deshalb nicht berücksichtigt.

4.2.4. Rotationswinkel einer Atombindung

Nutzer sollen auch die Rotationswinkel einer Bindung zwischen zwei Atomen sehen und bearbeiten können. In der Natur haben die Atombindungen häufig Bindungswinkel in 30° Schritten, das bedeutet diese müssen einfach zugänglich sein, um so schnell vom Nutzer eingestellt werden zu können. Nutzer können die Atome also frei rotieren. Da es aber diffizil ist, von Hand eine genaue Gradzahl einzustellen, springt der Winkel zwischen den Atomen immer auf den nächstliegenden durch Zehn teilbaren Wert.

Der dafür entwickelte Algorithmus besteht aus mehreren Formeln. Als erster Schritt muss der Winkel zwischen den beiden verbundenen Atomen berechnet werden. Für jedes Atom wird daher ein Vektor zwischen seinem ersten Verbindungspunkt und dem Atommittelpunkt berechnet. Danach wird eine Ebene berechnet, deren Normalenvektor identisch ist mit der Verbindung zwischen den Atomen. Die Vektoren der beiden Atome werden nun auf die Ebene projiziert, um so den Winkel zwischen den Projektionen berechnen zu können.

Der daraus resultierende Winkel muss nun angepasst werden, um auf einen durch Zehn teilbaren Wert zu gelangen. Folglich muss auch ein Atom um den angepassten Wert rotiert werden. Diese Rotation findet um die Bindungsachse statt. Die Komplexität hierbei ist die Rotationsrichtung, da diese abhängig ist von der Ausgangsrotation des Atoms und deshalb in einem extra Schritt angepasst werden muss.

4.2.5. Import und Export von Modellen

Eine weitere Funktion des Molekülbaukastens ist das Importieren und Exportieren von erstellten Modellen. Dazu wurde unter anderem ein XML Parser genutzt. Von den vom Nutzer erstellten Molekülen werden die wichtigsten Informationen extrahiert und so in XML Format gespeichert

zugänglich gemacht. Diese gespeicherten Dateien kann der Nutzer dann zu jeder Zeit wieder laden und auch an anderen Computern wiederverwenden.

Gespeichert werden für jedes im Molekül enthaltene Atom die Position und Rotation. Zusätzlich dazu werden für jeden Verbindungspunkt auf den Atomen die Informationen gespeichert, ob dieser mit einem anderen Atom verbunden ist, die ID des verbundenen Atoms und die ID des Verbindungspunktes auf dem verbundenen Atom. Diese Informationen können dann, sobald der Nutzer ein gespeichertes Molekül laden will, wieder zu diesem hergestellt werden. Dazu werden dann für jedes Atom das GameObject aus dem Prefab für Kohlenstoff Atome erstellt und die Parameter entsprechend den gespeicherten Werten angepasst. Ein GameObject ist die Basisklasse für alle Entitäten in Unity.

Um das Speichern und Laden für den Nutzer anschaulich zu gestalten, wurde ein dazu passendes Graphical User Interface (GUI) entwickelt, welches sich in das Umgebungsbild einfügt. In Abbildung 4.4 ist die virtuelle Tastatur zu erkennen.

Beim Speichern wird dem Nutzer eine virtuelle Tastatur auf dem im Raum stehenden Tisch eingeblendet. Diese kann er im Sinne einer echten Tastatur durch Berühren der einzelnen virtuellen Tasten bedienen. Im Hintergrund läuft hier eine Kollisionserkennung zwischen den Tasten und der virtuellen Hand des Nutzers, um festzustellen, welche Taste der Nutzer gedrückt hat und ihm dann den geschriebenen Text anzuzeigen. Beim Laden von Molekülen sieht das Interface ähnlich aus, nur dass hier anstelle der Tastatur eine Liste der bereits gespeicherten Molekülmodelle auf dem Tisch angezeigt wird, aus welcher der Nutzer dann das gewünschte Modell auswählen kann. Die Funktion dahinter ist gleich und auch hier wird wieder eine Kollisionserkennung verwendet.

4.3. Funktionen und Steuerung

Der Molekülbaukasten soll alle Grundfunktionen mit einer für den Nutzer einfachen Handhabung unterstützen. Dazu muss also beachtet werden, wie eine möglichst einfache und intuitive Arbeitsweise in VR realisierbar ist. Die Technik um die SenseGlove lässt dem Entwickler durch die vielen verschiedenen adressierbaren Werte freien Spielraum bei der Entwicklung. Da jeder Finger einzeln angesteuert werden kann, können beispielsweise Gesten mit taktilem Feedback kombiniert werden.

Was dazu beiträgt, die Steuerung möglichst einfach und leicht verständlich zu halten, haben Cutler et al. [CFH97] in ihrem Artikel über beidhändige Manipulation an einer virtuellen Werkbank erörtert. Sie konnten belegen, dass Nutzer oft beidhändige Interaktionen durch die Kombination von sonst unabhängigen einhändigen Interaktionsmöglichkeiten ausgeführt haben. Beidhändige Interaktionen entstehen also im besten Fall auf natürliche Weise.

Für den Molekülbaukasten bedeutet das, dass er komplett mit einer Hand steuerbar sein soll und der Nutzer dadurch mehr Freiheiten in der Interaktion und Manipulation erlangt. Die für ihn passenden Interaktionsmethoden kann sich also jeder Nutzer in einem gewissen Freiheitsgrad, den die einhändige Steuerung zulässt, selbst definieren.

4.3.1. Zeigegeste

Mit der Zeigegeste werden sämtliche Grundfunktionen des Programms gesteuert. Sie bildet mit dem Greifen der Atome die meistgenutzte Art der Interaktion. Da der Großteil der Bevölkerung Rechtshänder ist, können die Nutzer mit der rechten Hand aller Voraussicht nach präziser arbeiten und die Geste leichter nutzen [Sat]. Unter dieser Voraussetzung und da sie als meistgenutzte Steuerungsart essentiell wichtig ist für das Programm, wurde Sie auf die rechte Hand festgelegt.

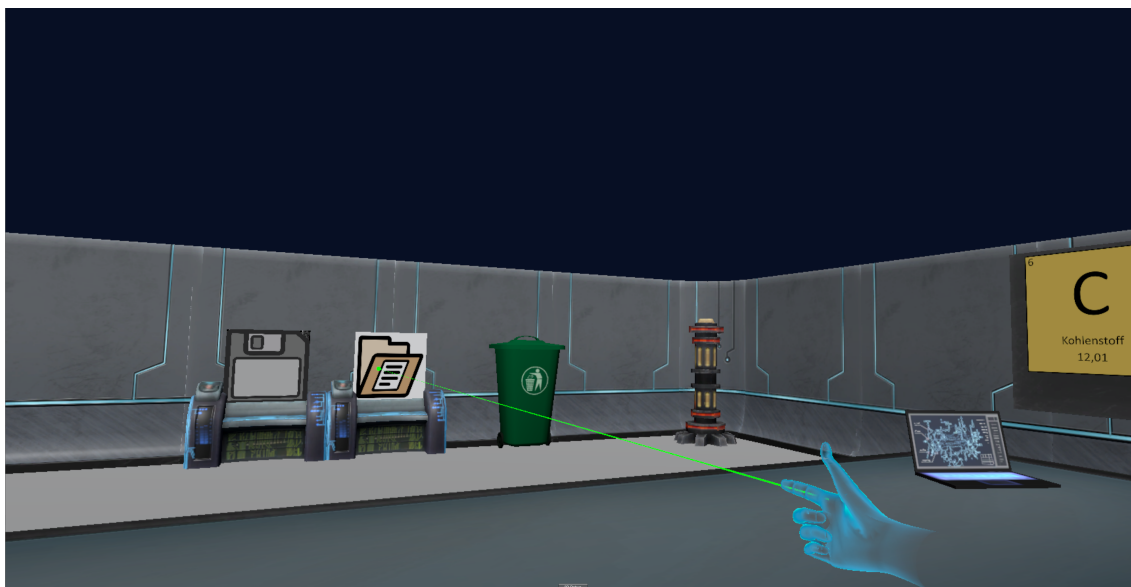


Abbildung 4.1.: Die Zeigegeste zeigt auf die Kachel mit dem Ordnersymbol, um ein gespeichertes Molekül zu laden. Der Laserpointer vereinfacht es dem Nutzer das gewünschte Ziel zu treffen.

Quelle: Eigene Abbildung

Die Zeigegeste wird durch Einrollen des kleinen, Ring- und Mittelfingers gebildet. Daumen und Zeigefinger werden, wie im Bild zu erkennen, ausgestreckt. Dadurch wird ein Laserpointer in Richtung des Zeigefingers angezeigt. Mit ihm kann man dann auf bestimmte Objekte, wie im Bild 4.1 zu sehen ist, zeigen. Wenn der Laserpointer auf eine Fläche auftrifft, bildet sich am Zielpunkt eine kleine Kugel, um dem Nutzer einen Treffer zu signalisieren.

Durch Einrollen des Daumens kann die Auswahl nun bestätigt werden und die gewünschte Funktion wird ausgeführt.

4.3.2. Neues Atom

Um ein neues Atom zu erstellen, wird die eben genannte Zeigegeste benötigt. Der Nutzer zeigt auf die Kachel am rechten Seitenrand, auf der das Kohlenstoff Symbol abgebildet ist. Diese ist auch in Bild 4.1 zu sehen. Durch bestätigen der Auswahl erscheint direkt neben der Hand des Nutzers ein neues Kohlenstoffatom. Das kann er nun greifen, frei im Raum bewegen und damit ein Molekül bilden. Es sollte immer nur ein neues Kohlenstoffatom erzeugt werden, da mehrere frei im Raum liegende Atome den Nutzer bei der Steuerung beeinträchtigen könnten.

4.3.3. Atome verbinden

Zwei Atome werden nach dem „Drap & Drop“ Prinzip miteinander verbunden. Wenn der Nutzer noch kein bestehendes Molekül hat, greift er ein beliebiges Atom und hält es nahe an ein anderes Atom im Raum. Sobald der Mindestabstand unterschritten ist, beginnt das nicht gehaltene Atom grün zu blinken.

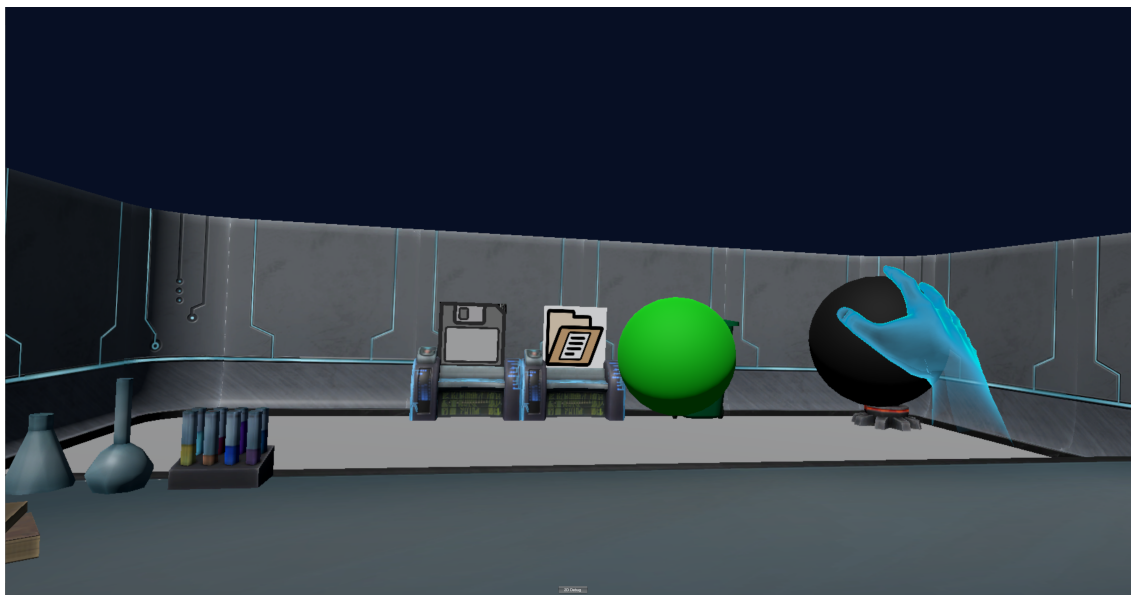


Abbildung 4.2.: Das gewählte Atom, mit dem die Verbindung erstellt werden soll, blinkt grün auf und signalisiert dem Nutzer eine freie Bindungsmöglichkeit.

Quelle: Eigene Abbildung

Wenn schon ein Molekül im Raum existiert, muss immer das neue Atom, welches hinzugefügt wird, gehalten werden und den Mindestabstand unterschreiten. Sobald dieser unterschritten ist und das zur Verbindung ausgewählte Atom noch eine freie Bindungsstelle hat, beginnt es auch hier grün zu leuchten.

Lässt man das gehaltene Atom los, wird in beiden Fällen automatisch eine Bindung erstellt und das davor gehaltene Atom bewegt sich an die richtige Position, um eine optimale Bindungslänge zu erzeugen.

4.3.4. Bearbeitungsmodus

Der Bearbeitungsmodus enthält mehrere Funktionen und Zusatzinformationen, die der Nutzer in der gewöhnlichen Ansicht nicht zu sehen bekommt. Um in den Bearbeitungsmodus zu gelangen, muss der Nutzer die Zeigegeste nutzen und damit ein Atom in einem bestehenden Molekül auswählen. Das ausgewählte Atom wird dadurch rot markiert und im Raum fixiert. Es kann sich also nicht mehr bewegen, bis es durch erneutes Auswählen mit der Zeigegeste wieder freigegeben wird.

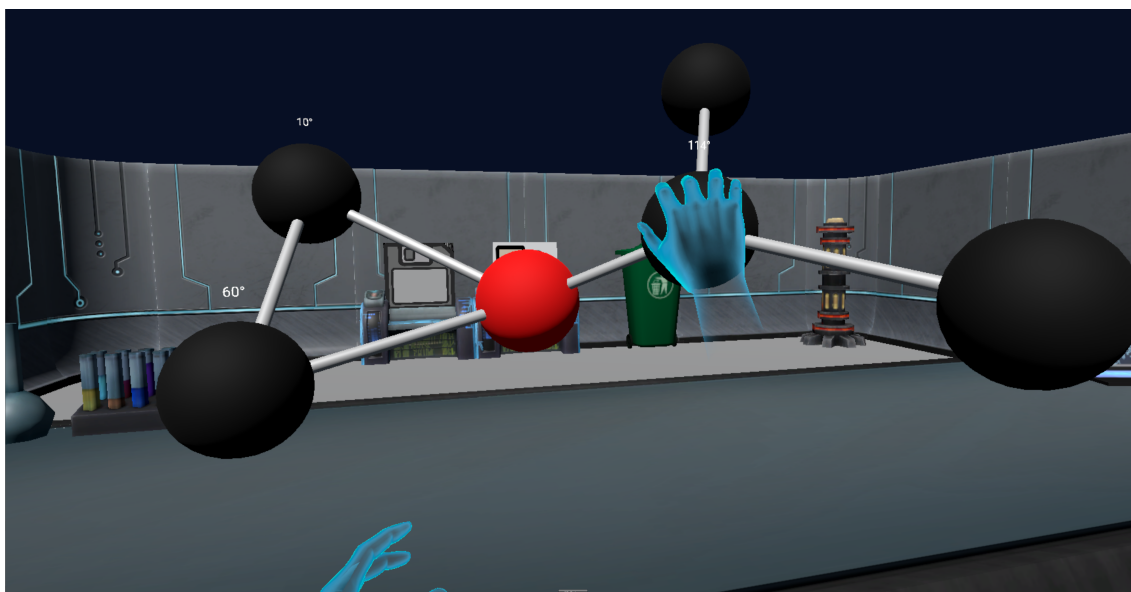


Abbildung 4.3.: Ein Atom wurde im Raum fixiert, die Bindungswinkel zu diesem Atom sind nun einsehbar.

Quelle: Eigene Abbildung

Während das gewählte Atom im Raum fixiert und damit der Bearbeitungsmodus aktiv ist, kann der Nutzer die anderen Atome trotzdem noch greifen und im Raum verschieben. Dadurch werden dann die Bindungsabstände und Winkel verändert. Verändert der Nutzer hier die Anordnung der Atome, werden diese, sobald er kein Atom mehr greift, durch den Algorithmus, der die intermolekularen Kräfte beschreibt, wieder korrekt angeordnet und in Position geschoben. Dieser Algorithmus wird in Abschnitt 4.2.3 beschrieben.

Der Nutzer kann im Bearbeitungsmodus ebenso neue Bindungen zwischen Atomen erstellen. Das ist nötig, wenn die Molekülstruktur Ringe enthalten soll. Ein bereits im Molekül verbundenes Atom kann also einfach gegriffen und nahe genug an ein anderes Atom gehalten werden, um die Verbindungsoption und das grüne Leuchten zu aktivieren. Nach der erstellten Verbindung verschieben sich die Atome wieder durch die intermolekularen Kräfte, um alle Bindungslängen optimal zu halten.

Eine weitere Funktion des Bearbeitungsmodus ist das Anzeigen der Bindungswinkel. Von dem im Raum fixierten Atom werden die Bindungswinkel zu den direkt verbundenen Atomen angezeigt. Wie in Abbildung 4.3 zu sehen ist, stehen diese jeweils über den verbundenen Atomen. Die Bindungswinkel können durch Rotieren der verbundenen Atome in 10° Schritten verändert werden. Diese Abstufung ist beabsichtigt, um die Nutzerfreundlichkeit zu verbessern, da bei einer freien Rotation das genaue Einstellen von exakten Werten sehr diffizil ist.

4.3.5. Atome und Moleküle löschen

Um Atome oder sogar ganze Moleküle zu löschen, wird wieder die Zeigegeste benutzt. In Abbildung 4.1 ist der Mülleimer zu sehen, auf den dafür gezeigt werden muss. Die Auswahl muss auch hier durch Einrollen des Daumens bestätigt werden.

Will der Nutzer das gesamte Molekül und alle bisher erstellten Kohlenstoffatome löschen, dann muss er die eben beschriebene Geste in der normalen Ansicht des Moleküls durchführen.

Will er hingegen nur ein einzelnes Atom mit allen seinen abgehenden Bindungen löschen, dann muss er davor noch einen Zwischenschritt beachten. Das Atom, welches er löschen will, muss zuerst ausgewählt werden. Diese Auswahl funktioniert durch das Wechseln in den Bearbeitungsmodus. Wie in Abschnitt 4.3.4 beschrieben, wird durch das Markieren eines bestimmten Atoms in den Bearbeitungsmodus gewechselt und dabei das ausgewählte Atom im Raum fixiert. Macht der Nutzer nun nach diesem Zwischenschritt die Geste auf den Mülleimer, so wird nur das rot markierte und fixierte Atom mit seinen Bindungen gelöscht. Der Bearbeitungsmodus schließt sich nun automatisch und der Nutzer befindet sich in der normalen Ansicht.

4.3.6. Speichern und Laden

Erstellte Moleküle können als XML Datei gespeichert und so wiederverwendet werden. Die Datei kann auch auf andere Computer kopiert und auch hier genutzt werden.

Der Nutzer kann ein Molekül speichern, indem er die Zeigegeste, wie in Abbildung 4.1 zu sehen, auf die Speichern Kachel anwendet. Dann öffnet sich ein einfaches User Interface, in dem der Nutzer die Datei benennen kann.



Abbildung 4.4.: Die virtuelle Tastatur wird vor dem Nutzer angezeigt und dieser kann den gewünschten Namen eingeben.

Quelle: Eigene Abbildung

Der Nutzer kann nur mit dem Zeigefinger der rechten Hand tippen, um ungewollte Eingaben weitestgehend zu vermeiden. Während der Nutzerstudie wird aber Feedback der Teilnehmer gefordert, ob eine Erweiterung auf alle zehn Finger sinnvoll erscheint. Das Ergebnis zu dieser Frage ist in Abschnitt 5.3.9 erläutert.

Das virtuelle Tippen funktioniert analog zu einer realen Tastatur. Sobald der Finger den gewünschten Buchstaben berührt, wird dieser in das Textfeld geschrieben. Mit der Taste „OK“ kann der Nutzer seine Eingabe speichern, mit „EXIT“ verlässt er das Menü ohne sein erstelltes Molekül zu speichern.

5. Nutzerstudie

Dieses Kapitel behandelt die um den VR Molekülbaukasten entwickelte Nutzerstudie und deren Ergebnisse. Zuerst wird das Studiendesign beschrieben und die Aufgabenstellung für die Teilnehmer erläutert. Die Evaluationsmethoden werden ebenso wie die Fokusgruppe vorgestellt. Danach werden die Hypothesen aufgestellt und anschließend mit einem Überblick über die Ergebnisse ausgewertet.

Grundlegend soll also getestet werden, ob der VR Molekülbaukasten eine nutzbare Alternative zu gewöhnlichen Systemen ist und welche Vorteile er bietet.

Da der VR Molekülbaukasten dennoch ein Prototyp ist und aufgrund der kurzen Entwicklungszeit einen geringeren Funktionsumfang hat als professionell entwickelte PC Programme, werden auch nur die implementierten Funktionen getestet und die weiteren Funktionen, die für den Vergleich herangezogenen Systeme nicht betrachtet.

5.1. Studiendesign

Die Entwicklung der Studie war vollständig von den Funktionen des VR Molekülbaukastens abhängig. Da einerseits nur die vorhandenen Funktionen getestet werden sollten aber andererseits auch alle verfügbaren Funktionen getestet werden mussten, musste die Aufgabenstellung sehr präzise gestellt werden und den Teilnehmern konnte keinen Spielraum für Kreativität gelassen werden.

Außerdem mussten die Systeme, die für den Vergleich herangezogen wurden, jeweils ein Merkmal haben, welches vollständig entwickelt ist und der VR Molekülbaukasten als Zielsetzung ebenfalls hat. Der VR Molekülbaukasten hat zum Ziel, eine möglichst realitätsnahe Interaktion bei der Arbeit mit Molekülen zu bieten.

Dieses Ziel gliedert sich in die Unterpunkte der natürlichen Interaktion und der Implementierung aller wichtigen Funktionen eines Molekülbaukastens, welche durch die zum Vergleich herangezogenen Systeme einzeln evaluiert werden sollen.

Zum Vergleich der vielfältigen Funktionen wurde daher das PC Programm TmoleX, welches in Abschnitt 3.2 beschrieben ist, verwendet.

Der wichtigste Aspekt bei der Auswahl ist, dass es ein vergleichsweise unbekanntes Programm ist. Das hat den Vorteil, dass sämtliche Probanden das Programm vor der Studie noch nie genutzt haben und dadurch keinen unfairen Vorteil bei der Lösung der gestellten Aufgaben hatten, welcher die Ergebnisse verfälschen würde.

Das Programm musste natürlich außerdem frei verfügbar sein und trotzdem alle nötigen Funktionen unterstützen.

Die Teilnehmer bekamen sowohl für das TmoleX Programm als auch für den VR Molekülbaukasten eine kurze Eingewöhnungsphase mit einer Erklärung der wichtigsten Funktionen. So entstand also auch kein Nachteil und die Grundbedingungen waren für alle Teilnehmer gleich.

Zusätzlich zu diesem Vergleich bekamen die Teilnehmer auch einen gewöhnlichen Handbaukasten, mit dem sie die gestellten Aufgaben erfüllen sollten. Für diesen Handbaukasten benötigten die Teilnehmer keine Eingewöhnungszeit, da dieser intuitiv durch zusammenstecken der Bauteile funktioniert.

Mit diesem Handbaukasten soll also die möglichst natürliche Interaktion verglichen werden, welche im VR Molekülbaukasten durch die SenseGlove realisiert wird.

5.1.1. Aufgabenstellung

Die Teilnehmer sollten eine vorgegebene Reihenfolge an Aufgaben durchführen. Diese wurde so gewählt, dass damit sämtliche Funktionen und Interaktionen mit dem VR Molekülbaukasten genutzt werden müssen und die Teilnehmer einen vollständigen Überblick über das Programm erlangen. Wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, unterstützen das PC Programm TmoleX und der Handbaukasten diese Funktionen ebenso und damit gelten gleiche Voraussetzungen, da die zusätzlichen Funktionen von TmoleX für die Studie nicht betrachtet wurden.

Die Aufgabenstellung, die den Teilnehmern vorgelegt wurde, sieht folgendermaßen aus:

1. Erstelle das Kohlenstoffgerüst von Isopentan
2. Rotiere das eben erstellte Molekül in eine andere Konformation
3. Lösche das Molekül / Baue das Molekül auseinander
4. Verwende das vorgefertigte Kohlenstoffgerüst von Cyclopentan
5. Lösche min. ein Atom und erstelle dann das Kohlenstoffgerüst von Norbornan
6. Speichere das Molekül / Lege das Molekül in der Box ab (äquivalent zum Speichern für den Handbaukasten)

Die Gesamtzeit, die jeder Teilnehmer pro System benötigte, wurde für spätere Vergleiche gestoppt. Trotzdem sollten die Teilnehmer sich nicht beeilen oder dadurch eine höhere Fehlertoleranz haben. Es wurde explizit darauf hingewiesen, ein normales Arbeitstempo einzuhalten und die Aufgaben gewissenhaft zu erfüllen. Bei möglichen Fehlern in der Ausführung wurden die Teilnehmer ebenfalls zur Korrektur aufgefordert.

Nach jeder Durchführung der Aufgaben wurden den Teilnehmern Fragebögen vorgelegt, welche in Abschnitt 5.1.3 beschrieben sind, mit denen sie das jeweilige System und die damit verbundene Erfahrung bewerten sollten. Um einen unerwünschten Gewohnheitseffekt zu verhindern, wurde nach jedem Teilnehmer die Reihenfolge der Systeme rotiert und damit eine über die Fokusgruppe verteilt faire Bewertung möglich gemacht.

5.1.2. Fokusgruppe

Insgesamt gab es 18 Probanden, die an der Studie teilgenommen haben. Wichtig war dabei, dass die Teilnehmeranzahl durch sechs teilbar ist, da wie eben erwähnt die Reihenfolge der Systeme rotiert wurde und mit den 3 Systemen insgesamt 6 mögliche Reihenfolgen existieren.

Zusätzlich wurden die Teilnehmer nach ihrem Wissensstand gruppiert. Es wurden 12 Teilnehmer eingeladen, die Studenten mit der Fachrichtung Chemie waren oder einen höheren akademischen Abschluss in dieser Fachrichtung hatten. Sie hatten also einen hohen Wissensstand und konnten zum Lösen der Aufgaben ihr Fachwissen anwenden. Die restlichen 6 Probanden hatten nur schulische Grundkenntnisse oder keine chemischen Kenntnisse.

Um die Kohlenstoffgerüste der jeweiligen Moleküle zu bauen, wurde jedem der Probanden eine Skizze vorgelegt, an die er sich halten konnte. Dadurch wurden die Aufgaben auch für Personen ohne chemisches Vorwissen lösbar.

Für die Studie wurde keine Altersbeschränkung festgelegt. Das Durchschnittsalter der Teilnehmer war 24,8 Jahre mit einer Standardabweichung von 4,48.

Auch anhand des Geschlechts wurde keine Gruppierung vorgenommen. Es haben 13 Männer und 5 Frauen teilgenommen.

Die durchschnittliche Erfahrung der Teilnehmer mit VR wurde vor der Studie erfragt und lag genau im mittleren Bereich, deshalb mussten auch hier keine Anpassungen oder Gruppierungen vorgenommen werden.

5.1.3. Evaluationsmethoden

Nachdem die Teilnehmer alle Aufgaben für das jeweilige System erfüllt hatten, wurden ihnen mehrere Fragebögen vorgelegt. Der erste Fragebogen, den die Teilnehmer ausfüllen mussten, war der Nasa-TLX Fragebogen.

Dieser Fragebogen beschäftigt sich mit den unterschiedlichen Beanspruchungen, die durch die Aufgabenstellung entstehen. Die Skala geht von 0 bis 100 und kann von den Teilnehmern in Fünfschritten angekreuzt werden. Es werden nacheinander die folgenden Kategorien auf linearen Skalen abgefragt:

- Mentale Beanspruchung
- Physische Beanspruchung
- Temporale Beanspruchung
- Gesamtperformance
- Anstrengung
- Frustrationslevel

Seit der Entwicklung des Fragebogens in den 1980er Jahren wurde der NASA-TLX Fragebogen in sämtlichen Mensch-Computer Interaktionssystemen mehrfach erfolgreich getestet. Dadurch ist das NASA-TLX zum höchsten Standard für die Messung der subjektiven Arbeitsbelastung in einem breiten Spektrum von Anwendungen geworden [HS88]. Der Fragebogen ermittelt aus den einzelnen Unterskalen einen Gesamtscore, der die Arbeitsbelastung angibt [HS88].

In dieser Studie soll mit dem Fragebogen erforscht werden, ob die genutzten Systeme einen Einfluss auf die Arbeitsbelastung oder einzelne der oben genannten Unterskalen haben. Da die Aufgabenstellung für jedes System identisch war, sollte, falls die Systeme eine gleiche Arbeitsbelastung haben, auch die Auswertung der Fragebögen keine signifikanten Unterschiede aufzeigen.

Wenn sich die Systeme jedoch in einzelnen Subskalen der Arbeitsbelastung unterscheiden, kann das mit einem Signifikanzniveau von 5% festgestellt werden.

Der zweite Fragebogen beschäftigt sich mit dem System selbst, unabhängig von der Aufgabenstellung. Die System Usability Scale (SUS) beschreibt die Benutzerfreundlichkeit und damit auch die Nutzbarkeit eines Systems [Bro].

Die von Brooke (1996) entwickelte SUS spiegelt den starken Bedarf wider, schnell und einfach die subjektive Bewertung der Usability eines Produkts durch den Benutzer zu erfassen [BKM08]. In einer Studie von Bangor et al. [BKM08] wurde eine große Anzahl an Ergebnissen analysiert mit dem Ergebnis, dass die SUS eine äußerst robuste und vielseitig einsetzbare Skala ist.

Das macht die SUS zur idealen Skala im Vergleich des VR Molekülbaukastens zu den anderen beiden Systemen. Hiermit kann also festgestellt werden, ob der VR Molekülbaukasten in seinem aktuellen Entwicklungsstand ein nutzbares System ist und auf welchem Level er im Vergleich zu TmoleX und einem gewöhnlichen Handbaukasten steht.

Auf der SUS Skala können die Nutzer ganzzahlige Werte zwischen eins und fünf ankreuzen, die dann zu einer Gesamtpunktzahl verrechnet werden.

Nach dem Bearbeiten der Aufgaben mit dem VR Molekülbaukasten gab es nur für dieses System noch einen extra Fragebogen. Der Presence Fragebogen wird genutzt, um die Immersion und Präsenz in virtuellen Umgebungen zu evaluieren [Sin13]. Da er sich ausschließlich mit virtuellen Umgebungen beschäftigt, kann er auch nicht auf die anderen Systeme angewendet werden. Er basiert auf dem ursprünglichen Presence Fragebogen von Witmer und Singer aus dem Jahr 1994 [WS98].

Der Presence Fragebogen unterteilt sich in verschiedene Subskalen, die jeweils einzeln oder im Gesamten evaluiert werden können. Jede dieser Subskalen ist in 7 Felder unterteilt, die den Wertebereich von „überhaupt nicht“ bis „vollständig“ abdecken. Die Subskalen lauten:

- Realismus
- Interaktionsmöglichkeiten
- Qualität des Interface
- Erforschungsmöglichkeiten
- Selbstevaluierung der Performance
- Haptik und Sound (wird nicht in die Bewertung mit eingeschlossen)

Der VR Molekülbaukasten kann so mit durchschnittlichen Werten aus validierten Tests des UQO Cyberpsychologischen Labors mit anderen virtuellen Umgebungen verglichen werden. Die einzelnen Subskalen liefern genaue Möglichkeiten, um den VR Molekülbaukasten zu evaluieren.

Zum Ende der Studie wurden den Probanden noch zusätzliche Fragen gestellt. Hier ist keine statistische Auswertung möglich, da es sich um keinen validierten Fragebogen handelt. Trotzdem gelingt so ein fundierter Überblick über die individuellen Eindrücke der Teilnehmer.

Die zusätzlich gestellten Fragen decken unterschiedliche Programmteile des VR Molekülbaukastens ab. Zum einen wurde nach Verbesserungsvorschlägen an der SenseGlove und an dem VR Molekülbaukasten gefragt, welche in zukünftige Arbeiten mit einfließen können.

Zum anderen wurde nach der subjektiven Meinung der Teilnehmer gefragt, welches der drei Systeme sie am liebsten nutzen würden und ob sie überhaupt Systeme wie diese für Bildungszwecke oder während ihres Studiums nutzen.

5.2. Hypothesen

Das Aufstellen der Hypothesen geht Hand in Hand mit den genutzten Fragebögen. Die verschiedenen Subskalen der Fragebögen, die einzeln ausgewertet werden können, können jeweils mit einzelnen Hypothesen auf signifikante Ergebnisse getestet werden.

Deshalb gibt es für jede getestete Subskala eine Hypothese um eine möglichst detaillierte Auswertung zu ermöglichen.

Bei den durchgeführten Tests der Varianzanalyse (ANOVA) wird jeweils auf Gleichheit getestet, das bedeutet, die Nullhypothese zu jeder ANOVA geht von einer Gleichheit der Varianzen aus. Diese kann dann je nach Ausgang des Tests unter dem Signifikanzniveau von 5% widerlegt werden oder es wird kein signifikanter Unterschied sichtbar.

5.2.1. System Usability Scale

Die SUS liefert nur eine Hypothese, die getestet werden kann, da dieser Fragebogen keine Subskalen hat sondern nur ein Gesamtwert zur Nutzbarkeit des Systems ermittelt wird.

Hypothese 1: Es gibt keinen Unterschied zwischen den drei Systemen in Bezug auf den System Usability Score.

5.2.2. NASA-TLX

Der NASA-TLX Fragebogen enthält einige Subskalen, weshalb hier mehrere Hypothesen aufgestellt und individuell getestet werden können.

Hypothese 2: Die Subskala des „Mental Demand“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

Hypothese 3: Die Subskala des „Physical Demand“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

Hypothese 4: Die Subskala des „Temporal Demand“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

Hypothese 5: Die Subskala der „Overall Performance“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

Hypothese 6: Die Subskala des „Effort“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

Hypothese 7: Die Subskala des „Frustration Level“ weist keine Unterschiede zwischen den drei Systemen auf.

5.2.3. Presence

Da der Presence Fragebogen sich nur mit virtuellen Umgebungen befasst, gibt es dazu nur die Ergebnisse des VR Molekülbaukasten und Durchschnittswerte, mit denen der VR Molekülbaukasten verglichen werden kann.

Da es hier keine Datensammlung an Vergleichswerten gibt sondern nur die Werte des VR Molekülbaukasten, kann hier keine genaue statistische Analyse durchgeführt werden. Dennoch können aus den gesammelten Daten für den VR Molekülbaukasten Durchschnittswerte ermittelt werden, die dann mit den Standardwerten des UQO Cyberpsychologischen Labors verglichen werden können.

Hat der VR Molekülbaukasten einen ähnlich hohen Presence Wert wie die gegebenen Standardwerte erreicht, so ist das für ein neu entwickeltes Programm ausreichend. Die Subskalen können Aufschluss darüber geben, in welchen Bereichen der VR Molekülbaukasten eventuell eine Verbesserung benötigt.

5.3. Evaluation

Durch den Aufbau der Studie muss beachtet werden, dass drei unabhängige Variablen existieren. Die unabhängigen Variablen sind die jeweiligen Systeme, namentlich der VR Molekülbaukasten, TmoleX und der Handbaukasten.

Um diese drei unabhängigen Variablen anhand einem Faktor, also den Ergebnissen der jeweiligen Subskala zu vergleichen, werden einfaktorielle Varianzanalysen durchgeführt, kurz ANOVA.

Zusätzlich werden pro ANOVA noch Levene-Tests ausgeführt. Ein Levene-Test stellt sicher, dass sich die Varianzen der Gruppen nicht unterscheiden. Wenn der auf dem Median basierende Levene-Test bei dieser Überprüfung der Nullhypothese ein signifikantes Ergebnis liefert, ist eine Grundvoraussetzung der Varianzanalyse verletzt und damit sind auch die Ergebnisse des F-Tests verzerrt [GGM09]. Das bedeutet für die Auswertung: Um ein signifikantes Ergebnis einer ANOVA anerkennen zu können, darf der Levene-Test nicht signifikant sein.

5.3.1. Hypothese 1: System Usability Score

Die deskriptiven Statistiken geben zu Beginn einen groben Überblick über die Mittelwerte, deren Standardabweichung und den dazu gehörigen Standardfehler sowie über einige andere Werte.

Die Minima und Maxima der drei Systeme zeigen in der Tabelle A.1 erhebliche Unterschiede auf. Während der Handbaukasten fast identische Werte zu dem VR Molekülbaukasten liefert, ist der Wertebereich für TmoleX und der damit verbundene Score verschoben. Das wird auch am Mittelwert des Systemscores deutlich, der bei TmoleX mit 33,4 deutlich geringer als der vom VR Molekülbaukasten (81,9) und dem Handbaukasten (84,3) ist.

Die auf diesen Daten basierende ANOVA untersucht, ob diese beobachteten Unterschiede signifikant sind. In der dazugehörigen Tabelle A.2 kann man erkennen, dass die ANOVA signifikant ist, da der Signifikanzwert mit 0% das Signifikanzniveau von 5% nicht überschreitet.

Der F Wert gibt uns Auskunft über die Effektgröße. Mit 98,3 handelt es sich hier um einen starken Effekt.

Um herauszufinden, zwischen welchen Systemen dieser Effekt existiert, werden die Mehrfachvergleiche mit Bonferroni-Korrektur angewandt. Die Tabelle A.3 zeigt, bei welchen Systemen die Differenz der Mittelwerte signifikante Unterschiede hat.

TmoleX weist hier große Differenzen und jeweils signifikante Unterschiede zu den anderen beiden Systemen auf. Zwischen dem Handbaukasten und dem VR Molekülbaukasten gibt es keine signifikanten Differenzen.

Der Levene-Test in Tabelle A.4 verwirft diese Aussagen nicht, da der auf dem Median basierende Test nicht signifikant und somit die Homogenität der Varianzen gewährleistet ist.

Damit wird auch die Nullhypothese abgelehnt, da es mit einem Signifikanzniveau von 5% belegt ist, dass es einen Unterschied zwischen den drei Systemen gibt.

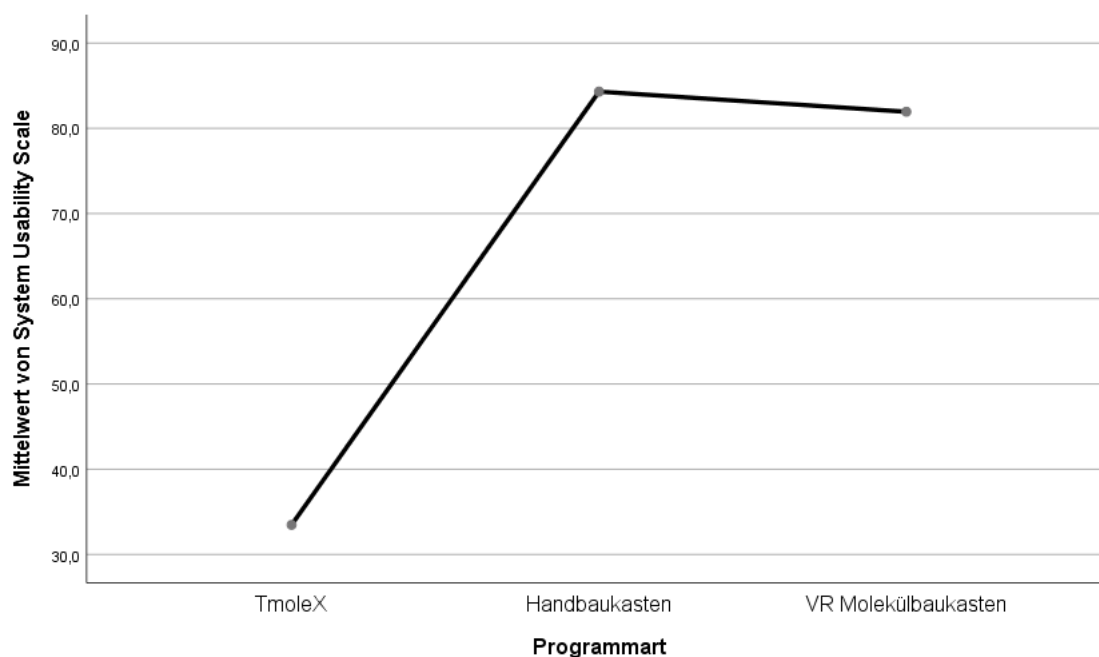


Tabelle 5.1.: Dieses Diagramm zeigt die signifikanten Unterschiede zwischen TmoleX und den anderen Systemen für den System Usability Score.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Dieses Diagramm veranschaulicht die eben beschriebenen signifikanten Unterschiede zwischen TmoleX und dem VR Molekülbaukasten, sowie dem Handbaukasten.

Für den VR Molekülbaukasten bedeutet dieser hohe System Usability Score eine überdurchschnittliche Benutzerfreundlichkeit, was für ein neues Programm sehr wichtig ist. Im Vergleich zum Handbaukasten, kann der VR Molekülbaukasten einen sehr ähnlichen Score aufweisen. Da der Handbaukasten nur mit natürlichen Interaktionen bedient wird, also dem Greifen echter Objekte,

wird dessen Usability Score hauptsächlich durch eben diese natürliche Interaktion festgelegt. Andere Komponenten, wie die Art und Weise, wie sich die Einzelteile zusammenstecken lassen, haben ebenso Einfluss auf diesen Score, sind aber für den Vergleich mit dem VR Molekülbaukasten nicht von Interesse.

Durch den VR Molekülbaukasten sollte eben diese natürliche Interaktion des Handbaukastens möglich gemacht werden, was durch den hohen Usability Score erfolgreich bestätigt wird.

5.3.2. Hypothese 2: Mental Demand

In der Tabelle der deskriptiven Statistiken des Mental Demand A.5 sind die meisten Werte der drei Systeme gleich verteilt und unauffällig. Nur der Mittelwert der mentalen Beanspruchung ist für TmoleX im Vergleich zu den anderen Systemen erhöht.

Die ANOVA A.6, sowie die Mehrfachvergleiche A.7 bestätigen diese Beobachtung. Das Signifikanzniveau von 0,7% zeigt einen eindeutigen Effekt zwischen den Gruppen. Außerdem weist der F Wert von 5,405 auf einen starken Effekt hin.

In der Tabelle der Mehrfachvergleiche wird sichtbar, dass wie aus den deskriptiven Statistiken A.5 zu vermuten war, der signifikante Unterschied bezüglich der mentalen Beanspruchung zwischen TmoleX und den anderen beiden Systemen liegt. In dem nachfolgenden Diagramm wird dieser dann deutlich

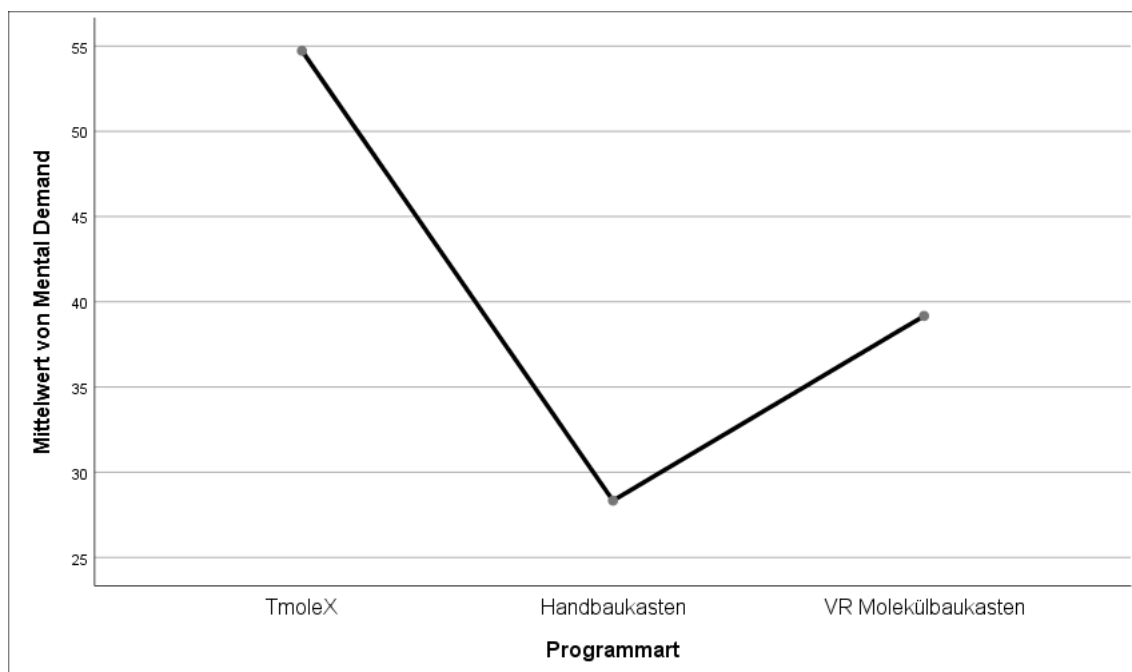


Tabelle 5.2.: Dieses Diagramm zeigt die signifikanten Unterschiede zwischen TmoleX und den anderen Systemen für die Subskala Mental Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Zwischen dem Handbalkasten und dem VR Molekülbalkasten lassen sich keine signifikanten Unterschiede feststellen, auch wenn der Mittelwert eine höhere mentale Beanspruchung beim Nutzen des VR Molekülbalkastens suggeriert. Vermutlich liegt der leicht erhöhte Mittelwert an der Eingewöhnungsphase, die die Nutzer benötigen um sämtliche Interaktionen zu verstehen. Da die Unterschiede aber nicht signifikant sind, ist damit auch das Ziel eines leicht zu verstehenden Programms erreicht.

Der Levene-Test, der in Tabelle A.8 veranschaulicht ist, ist nicht signifikant, deshalb können die betrachteten Ergebnisse akzeptiert werden.

Damit wird die Nullhypothese abgelehnt, da es einen Unterschied zwischen den drei Systemen in Bezug auf die mentale Beanspruchung gibt.

5.3.3. Hypothese 3: Physical Demand

Bezogen auf die physische Beanspruchung unterscheiden sich die Systeme beim Betrachten der deskriptiven Statistiken in Tabelle A.9 leicht. Zu erkennen ist, dass der Mittelwert des VR Molekülbalkastens doppelt so hoch ist wie der des TmoleX Programms. Der Handbalkasten liegt mittig dazwischen.

Dieser Unterschied lässt sich sehr wahrscheinlich auf die SenseGlove zurückführen. Die Interaktion und Bewegungen des gesamten Arms um das erstellte Molekül im Raum zu bewegen wird ebenfalls eine Rolle spielen.

Die ANOVA, die in Tabelle A.10 sichtbar ist, zeigt auf, dass der Unterschied signifikant ist. Der Levene Test in der nachfolgenden Tabelle ist jedoch signifikant.

| Test der Homogenität der Varianzen | | | | | |
|------------------------------------|----------------------------------------------------|------------------|-----|--------|-------------|
| | | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz |
| Physical Demand | Basiert auf dem Mittelwert | 4,732 | 2 | 51 | ,013 |
| | Basiert auf dem Median | 4,340 | 2 | 51 | ,018 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepassten df | 4,340 | 2 | 50,281 | ,018 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | 4,798 | 2 | 51 | ,012 |

Tabelle 5.3.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für die Subskala Physical Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Wie in der Tabelle zu erkennen ist, gibt es bei allen Tests zur Homogenität der Variablen ein signifikantes Ergebnis. Wie in Abschnitt 5.3 erwähnt, ist dabei das Ergebnis basierend auf dem Median besonders wichtig, da dieser Test die höchste Genauigkeit liefert. Das Ergebnis dieses Levene-Tests zeigt also, dass man nicht von homogenen Varianzen ausgehen kann. Damit ist eine Grundvoraussetzung der Varianzanalyse verletzt, wogegen eine ANOVA nicht robust ist.

Bezogen auf die Hypothese bedeutet das, man kann die Nullhypothese trotz der signifikanten ANOVA nicht verwerfen und damit keine signifikanten Unterschiede der physischen Beanspruchung feststellen.

5.3.4. Hypothese 4: Temporal Demand

Für die zeitliche Beanspruchung der Nutzer gab es nicht nur die Skala auf dem NASA-TLX Fragebogen, sondern ebenfalls die gestoppte Zeit, die die Nutzer zum Erfüllen der Aufgaben benötigten. Aus den gemessenen Zeiten lassen sich jedoch keine signifikanten Unterschiede herleiten, weswegen diese hier nicht weiter betrachtet werden und keinen Einfluss haben.

Die deskriptiven Statistiken in Tabelle A.11 zeigen erneut einen hohen Mittelwert bei TmoleX, der VR Molekülbaukasten verhält sich zum wiederholten Mal fast identisch zum Handbaukasten.

Die aus diesen Daten erstellte ANOVA (siehe Tabelle A.12) bestätigt die damit aufgestellte Vermutung und zeigt signifikante Unterschiede auf. Diese sind auch gültig, da die Levene-Tests unauffällig verlaufen. Es werden also keine Grundvoraussetzungen der ANOVA verletzt.

In den Mehrfachvergleichen in Tabelle A.13 wird wieder deutlich, zwischen welchen der drei Systemen die signifikanten Unterschiede liegen.

Das veranschaulicht das nachfolgende Diagramm der zeitlichen Beanspruchung ebenso.

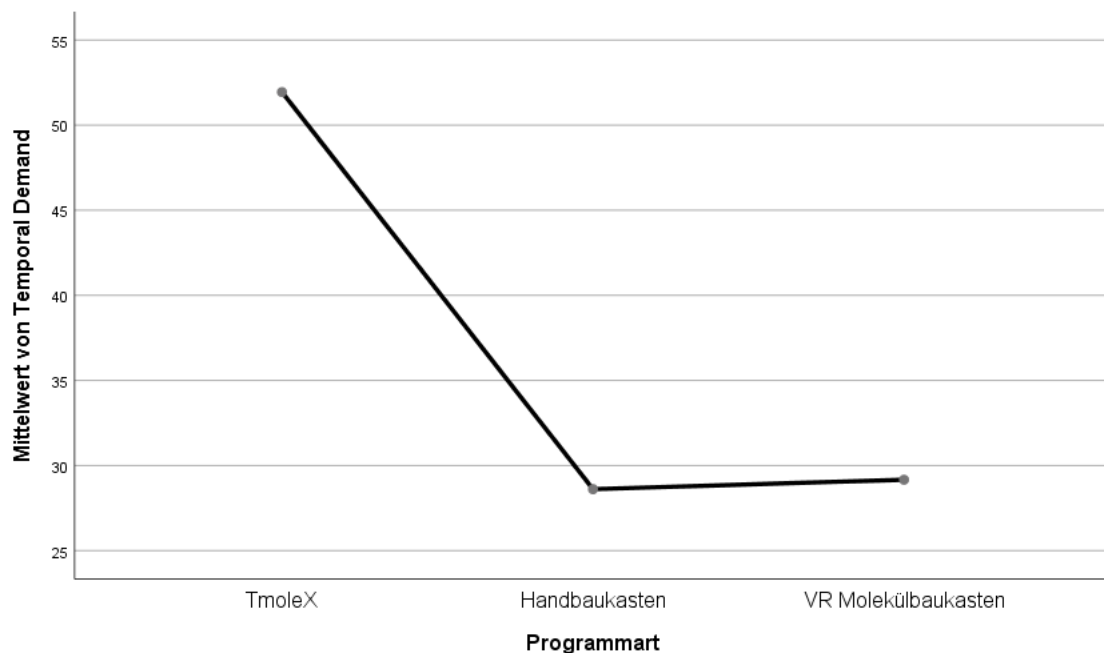


Tabelle 5.4.: Dieses Diagramm zeigt die signifikanten Unterschiede für die Subskala Temporal Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Hier wird klar sichtbar, dass sich der VR Molekülbaukasten nahezu identisch mit dem Handbaukasten verhält. TmoleX verursacht bei den Nutzern jedoch eine deutlich höhere zeitliche Beanspruchung. Für den VR Molekülbaukasten zeigt diese geringe zeitliche Beanspruchung auch wieder einen Faktor der Nutzerfreundlichkeit auf.

Aufgrund dieser Ergebnisse kann die Nullhypothese verworfen werden. Es bestehen mit einem Signifikanzniveau von 5% signifikante Unterschiede zwischen den drei Systemen bezüglich des Temporal Demand.

5.3.5. Hypothese 5: Overall Performance

Bei der Gesamtperformance lassen sich aus der Tabelle A.14 der deskriptiven Statistiken wenige Schlüsse ziehen. Der Mittelwert des Programms TmoleX ist im Vergleich zum VR Molekülbaukasten und dem Handbaukasten zwar erhöht, hat aber auch eine deutlich größere Standardabweichung.

Test der Homogenität der Varianzen

| | | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz |
|---------------------|----------------------------------------------------|------------------|-----|--------|-------------|
| Overall Performance | Basiert auf dem Mittelwert | 17,385 | 2 | 51 | ,000 |
| | Basiert auf dem Median | 16,595 | 2 | 51 | ,000 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepassten df | 16,595 | 2 | 35,147 | ,000 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | 17,306 | 2 | 51 | ,000 |

Tabelle 5.5.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für die Subskala Overall Performance.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Der Levene-Test zeigt aufgrund seiner Signifikanz auch bei dieser Subskala eine Verletzung der Homogenitätseigenschaften. Damit ist das Ergebnis einer möglichen ANOVA nicht aussagekräftig.

Das bedeutet auch, dass die Nullhypothese nicht verworfen werden kann, da in Bezug auf die Gesamtperformance anhand dieses Datensatzes keine signifikanten Unterschiede zwischen den drei Systemen festgestellt werden können.

5.3.6. Hypothese 6: Effort

Die deskriptiven Statistiken zu der Subskala Effort, welche in Tabelle A.15 zu sehen sind, weisen starke Ähnlichkeiten zu denen des Mental Demand (siehe Tabelle A.5) auf. Die Mittelwerte sind vergleichbar und lassen somit auf ein ähnliches Ergebnis schließen.

Die ANOVA zu dieser Subskala in Tabelle A.16 bestätigt die eben gestellte Vermutung und zeigt ein signifikantes Ergebnis. Der Levene-Test, dessen Ergebnisse in Tabelle A.17 sind, verläuft nicht signifikant und damit sind die Ergebnisse der ANOVA gültig.

Die Mehrfachvergleiche in Tabelle A.18 zeigen jedoch, dass es mehrere signifikante Differenzen als bei der mentalen Beanspruchung gibt.

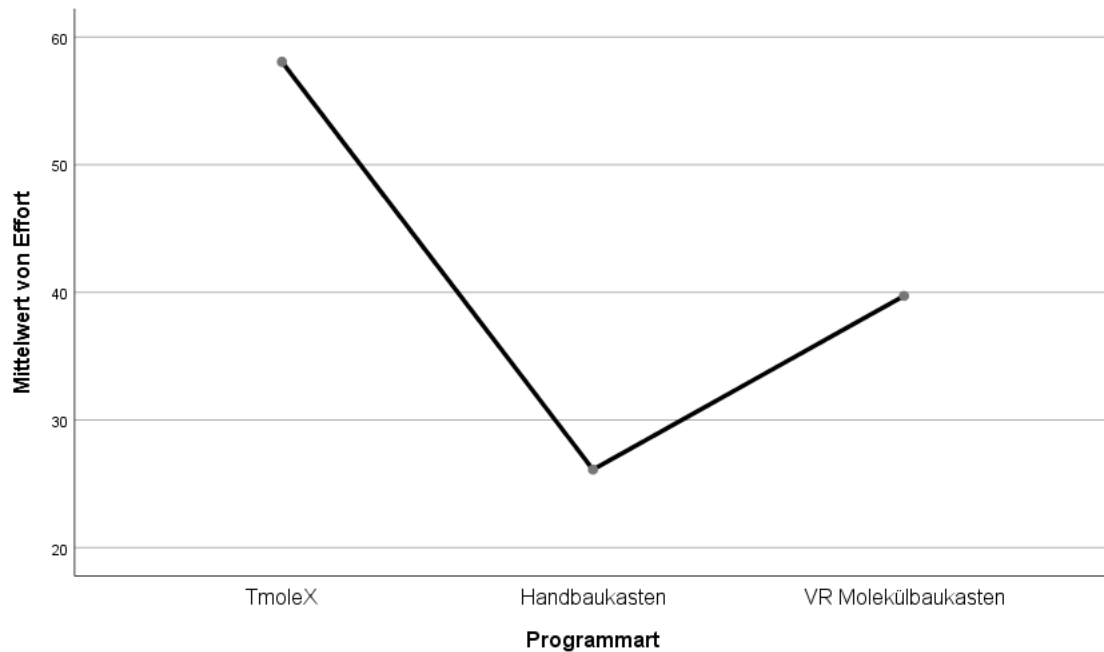


Tabelle 5.6.: Dieses Diagramm zeigt die signifikanten Unterschiede zwischen TmoleX und den anderen Systemen für die Subskala Effort.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

In dem dazugehörigen Diagramm wird ebenfalls sichtbar, dass sich die drei Systeme voneinander unterscheiden. TmoleX weist sowohl zu dem Handbaukasten, als auch zu dem VR Molekülbaukasten signifikante Unterschiede auf. Zwischen dem VR Molekülbaukasten und dem Handbaukasten gibt es bezüglich der Anstrengung des Nutzers keine signifikanten Unterschiede, obwohl das Diagramm hier einen erhöhten Effort-Wert des VR Molekülbaukasten zeigt.

Damit wird auch hier die Nullhypothese verworfen und es steht mit einem Signifikanzniveau von 5% fest, dass es signifikante Unterschiede zwischen den drei Systemen gibt.

5.3.7. Hypothese 7: Frustration Level

Das Frustrationslevel der Nutzer ist ein wichtiger Faktor bei der Entwicklung eines neuen Programms. Daher sind die deskriptiven Statistiken in Tabelle A.19 umso informativer. Der VR Molekülbaukasten hat einen deutlich niedrigeren Mittelwert als TmoleX, was auf eine deutlich geringere Frustration bei den Nutzern schließen lässt. Der Handbaukasten ist nur minimal besser als der VR Molekülbaukasten.

Dass diese Beobachtung signifikant ist, zeigt die darauf basierende ANOVA in Tabelle A.20. Auch der auf dem Median basierende Levene-Test, welcher in Tabelle A.21 sichtbar ist, ist sehr deutlich nicht signifikant und lässt uns damit die Ergebnisse der ANOVA akzeptieren.

Die Ergebnisse der Mehrfachvergleiche in Tabelle A.22 belegen die signifikanten Unterschiede, welche in dem dazugehörigen Diagramm veranschaulicht sind.

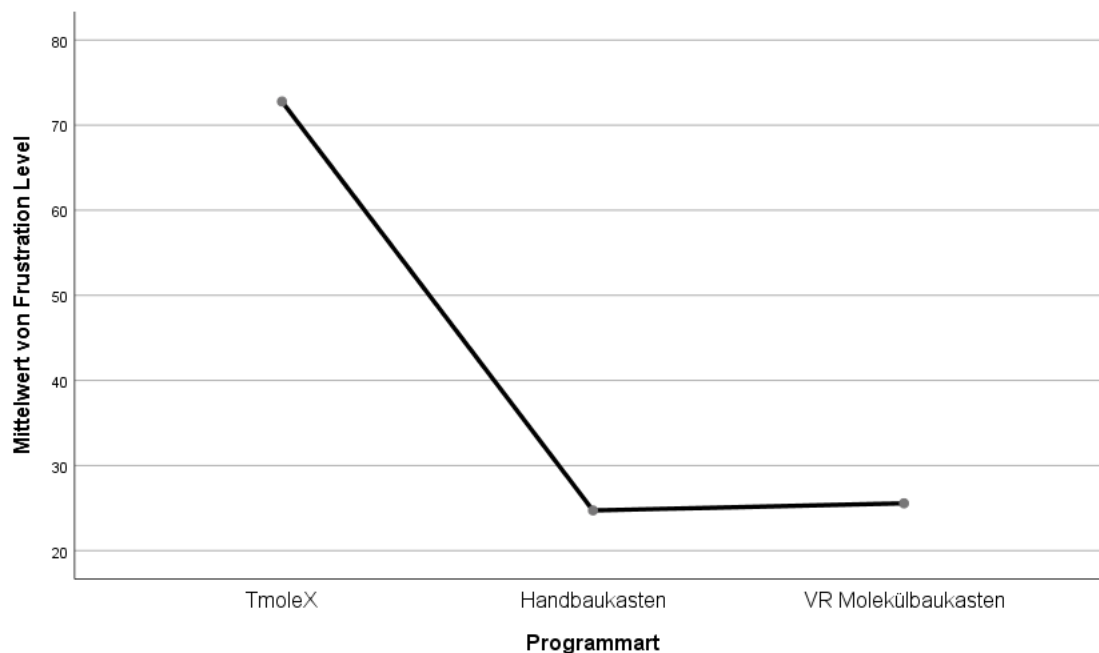


Tabelle 5.7.: Dieses Diagramm zeigt die signifikanten Unterschiede für die Subskala Frustration Level.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

TmoleX hebt sich deutlich von den anderen beiden Systemen mit einem signifikant höheren Frustrationslevel ab. Wie in dem Diagramm zu sehen ist, unterscheidet sich der VR Molekülbaukasten nur minimal vom Handbaukasten und erreicht damit ein im Vergleich sehr niedriges Frustrationslevel bei den Nutzern.

Die Nullhypothese wird damit verworfen, denn es gibt signifikante Unterschiede zwischen den getesteten Systemen.

5.3.8. Presence des VR Molekülbaukasten

Aus den Ergebnissen der Fragebögen wurden für die jeweiligen Subskalen Mittelwerte gebildet. Diese sind im nachfolgenden Diagramm mit den Standardwerten verglichen.

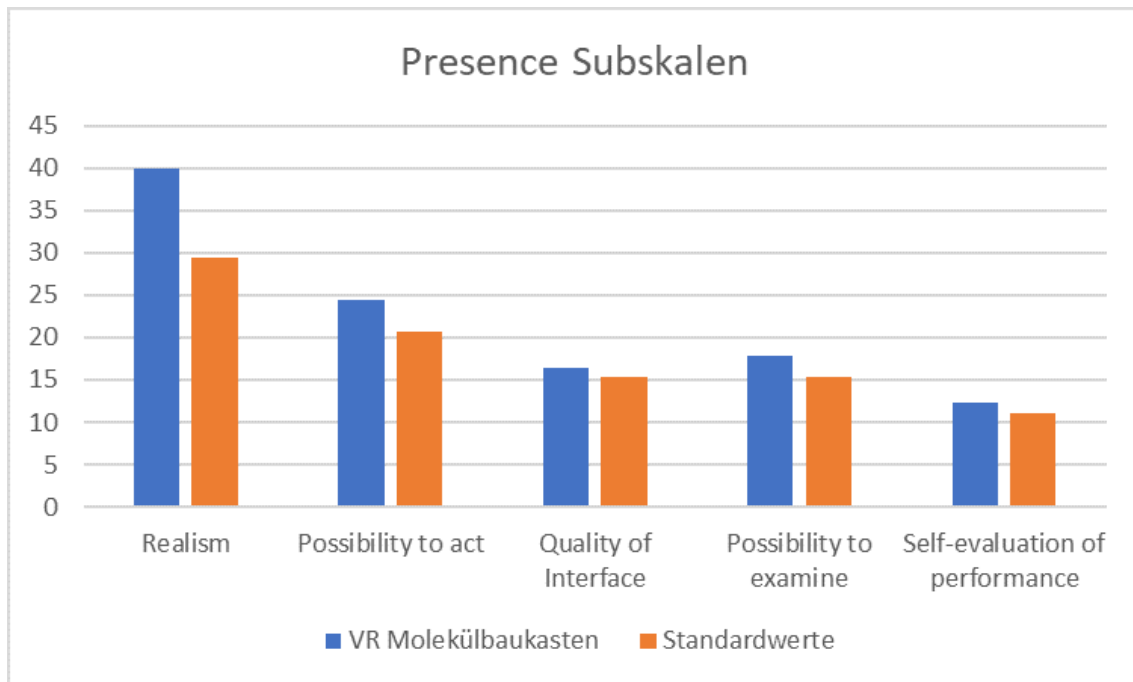


Tabelle 5.8.: Dieses Diagramm zeigt die Durchschnittswerte des VR Molekülbaukastens, verglichen mit den Standardwerten für die Subskalen des Presence Fragebogen.

Für die Subskala Realismus erhält der VR Molekülbaukasten eine um mehr als 30% höhere Wertung als ein Standardprogramm. Das weist auf ein überdurchschnittliches Design und der dazu gestalteten Umgebung hin.

Die anderen Subskalen unterscheiden sich nur geringfügig von den Standardwerten. Jedoch ist auffällig, dass der VR Molekülbaukasten in keiner Skala unter den vorgegebenen Werten liegt sondern immer minimal darüber.

Für den Gesamtscore bedeutet das, dass der VR Molekülbaukasten mit einer Wertung von 110,83 auch über den Standardwerten von 91,96 liegt.

Die Subskala Haptik kann in diese Rechnung nicht einbezogen werden und ist deshalb in diesem Diagramm auch nicht enthalten, da es für diese Subskala keinen vergleichbaren Standardwert gibt. Die letzte Subskala Sound wurde ebenfalls nicht betrachtet, da der VR Molekülbaukasten keine Sounds enthält und es für diese Subskala ebenfalls keine Standardwerte gibt.

Im Gesamten betrachtet, verhält sich der VR Molekülbaukasten bei Betrachtung der Presence also positiv unauffällig, da keine schlechteren Werte als die Standardwerte vorhanden sind. Um zu evaluieren, ob die positive Abweichung der Scores signifikant ist, wären mehr Details zu den Standardwerten nötig. Nur mit den kompletten Versuchsreihen des UQO Cyberpsychologischen Labors könnte hier ein F-Test durchgeführt werden.

5.3.9. Feedback der Teilnehmer

Zum Abschluss der Nutzerstudie bekamen die Teilnehmer einige zusätzliche Fragen, die als Feedback für den aktuellen VR Molekülbaukasten dienen sollten und ebenso bei einer Weiterentwicklung hilfreich sein können. Die Nutzer wurden gefragt, was sie speziell an dem VR Molekülbaukasten schlecht oder verbesserungswürdig fanden. Außerdem sollten sie sich festlegen, welches der drei Systeme sie zu Lern- und Arbeitszwecken am liebsten nutzen würden. Zusätzlich dazu gab es noch die Frage, was die Nutzer speziell an der SenseGlove gestört hat, mit dem Ziel, deren Feedback abzugrenzen, getrennt zu betrachten und ein reines Feedback für den VR Molekülbaukasten zu erhalten.

Zu der Frage, welche Komponenten an dem VR Molekülbaukasten verbessert werden sollten, gab es nur sehr wenige konkrete Punkte. Vielmehr wurden Ziele genannt, wie er in der Zukunft weiterentwickelt werden sollte und welche Funktionen noch hinzugefügt werden sollten.

Dennoch gab es auch Kritik an den bestehenden Funktionen. Beispielsweise die Tastatureingabe zum Speichern oder das Menü zum Laden von Molekülen, welches nach dem selben Prinzip funktioniert, war für manche Nutzer nach deren Aussage schwer zu bedienen.

In der Entwicklung wurde dabei Wert darauf gelegt, dieses Menü nur mit einem Finger bedienen zu können, um versehentliche Eingaben zu minimieren. Die Nutzer hätten sich aber trotzdem eher eine mit allen Fingern bedienbare Tastatur gewünscht. Hier muss also in der Zukunft eine versehentliche Eingabe anderweitig verhindert werden und die virtuelle Tastatur sollte mit allen Fingern bedienbar sein.

Dieser Punkt geht Hand in Hand mit dem nächsten Kritikpunkt. Nämlich die zweite Hand besser einzubinden oder einige Zweihandinteraktionen möglich zu machen. Aus Entwicklersicht ist man hier durch die SenseGlove limitiert, die es nicht ermöglicht, ein und dasselbe Objekt mit zwei Händen gleichzeitig zu halten. Trotzdem kann dieser Punkt auch auf anderem Weg verwirklicht werden und beispielsweise eine Geste mit einer anderen Interaktion kombiniert werden.

Der letzte Kritikpunkt, den die Nutzer nannten, war, dass es in manchen Situationen sinnvoll wäre, mehrere Moleküle gleichzeitig betrachten zu können. Im Moment ist es nur möglich, ein einzelnes Molekül zu bilden. Ob diese Änderung dem damit verbundenen Aufwand gerechtfertigte Vorteile bringt, da dazu eine größere Umstrukturierung des Systems notwendig wäre, bleibt zu diesem Zeitpunkt noch offen und kann in der Zukunft weiter evaluiert werden.

Die positive Kritik zum VR Molekülbaukasten fiel weitaus größer aus. Die Nutzer waren nach eigenen Aussagen größtenteils begeistert von der innovativen Technik und konnten mit Spaß an der Arbeit die Molekülmodelle im virtuellen Raum bearbeiten. Das wird auch durch die Antworten auf die Frage, welches der drei in der Studie genutzten Systeme sie am liebsten zur Visualisierung der Moleküle nutzen würden, belegt.

Diese Frage beantworteten alle 18 Teilnehmer der Studie mit dem VR Molekülbaukasten. Damit hat der VR Molekülbaukasten fast ausschließlich einen positiven Eindruck hinterlassen und eine Weiterentwicklung wäre definitiv sinnvoll.

6. Limitierungen

Die Limitierungen dieser Arbeit sind unterschiedlicher Herkunft, jedoch beziehen sich sämtliche Punkte auf die Entwicklung des VR Molekülbaukastens und nicht zur dazugehörigen Nutzerstudie oder anderen behandelten Themen.

Da der strukturierte Aufbau des VR Molekülbaukastens vollständig nach Plan verlief, ist die zeitliche Begrenzung die mit Abstand größte Limitierung für dieses Programm. Einige weitere Funktionen, die die Studienteilnehmer sich ebenfalls gewünscht hätten, konnten trotz der Planung der einzelnen Funktionen aufgrund der zeitlichen Beschränkung nicht implementiert werden und müssen in der Zukunft hinzugefügt werden.

Trotz der genannten Limitierungen konnte der VR Molekülbaukasten seinen Ansprüchen gerecht werden. Einige zusätzliche Funktionen wie beispielsweise das Speichern und Laden von erstellten Molekülen sind für ein Programm dieser Größenordnung wichtig und sollen auch in der Zukunft für einen besseren Überblick weiter spezifiziert werden.

Andere Limitierungen betreffen größtenteils die verwendete Hardware. Viele Nutzer gaben als Kritik einige Teile der SenseGlove an, die sie während der Interaktion gestört haben. So stimmen beispielsweise die Fingerspitzen der virtuellen Hand trotz Kalibrierung nicht genau mit den echten Fingern überein, was den Nutzer irritiert und so seine Erfahrung verschlechtert.

Außerdem ist das Force Feedback an einigen Stellen zu schwach und limitiert so die Kräfte, die dargestellt werden können.

Ein weiterer Punkt betrifft die Handinnenflächen. Durch den Aufbau der SenseGlove als Exoskelett und nicht als Handschuh, kann an der Handinnenfläche kein für den Nutzer spürbares Gefühl erzeugt werden. Der Aufbau der SenseGlove hat noch einen weiteren limitierenden Nebeneffekt. Es sollte immer eine weitere Person anwesend sein, die beim Anziehen helfen kann, da es alleine fast unmöglich ist, die SenseGlove perfekt auf den Händen zu fixieren.

Der letzte limitierende Punkt betrifft nicht nur die SenseGlove sondern ebenso das VR System der HTC VIVE. Durch die vielen Kabel zu den unterschiedlichen Komponenten ist man als Nutzer an einen festen Ort gebunden und hat kaum Bewegungsfreiraum, ohne sich in den Kabeln zu verfangen, was auch manche Studienteilnehmer anmerkten. Außerdem benötigt die HTC VIVE immer Empfang zu ihren Basisstationen, welche fest in einem Raum aufgebaut sind. Es ist also äußerst aufwändig, das gesamte System an einen anderen Ort zu transportieren und zu nutzen.

7. Fazit und Ausblick

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Studie und das Feedback der Teilnehmer zusammengefasst. Daraus lässt sich ein Fazit sowie ein Ausblick in die Zukunft des VR Molekülbaukasten bilden.

7.1. Fazit

Nach Abschluss der Studie und dem Vergleich mit anderen Systemen, lässt sich ein durchaus aufschlussreiches Fazit für den VR Molekülbaukasten ziehen.

Die verwandten Arbeiten zeigen, dass die virtuelle Welt immer greifbarer wird. Durch unterschiedliche Ansätze, wie beispielsweise die in dieser Studie verwendete SenseGlove, aber auch elektro-taktile Tattoos oder ähnliche Prototypen, soll die Interaktion verbessert werden.

In zweckdienliche Anwendungen hat diese Innovation ihren Weg bisher jedoch nur sehr schwer gefunden. Bisher gibt es neben dem im Zuge dieser Arbeit entwickelten VR Molekülbaukasten kein vergleichbares Programm, welches ein ähnliches Maß an greifbarer Interaktion durch die SenseGlove oder andere exoskelettartige Handschuhe bietet.

Das in den verwandten Programmen betrachtete System Nanome ist noch am ehesten vergleichbar mit dem VR Molekülbaukasten. Jedoch funktioniert hier die Steuerung über handelsübliche VR Controller, welche das Gefühl des Greifens und einer natürlichen Interaktion nicht im gleichen Maße der SenseGlove vermitteln können.

Die Studie zur Evaluation des VR Molekülbaukastens hat gezeigt, dass der Prototyp bezogen auf die evaluierten Skalen eine konkurrenzfähige Basis eines Programms ist. Betrachtet man die während der Studie aufgestellten Hypothesen und die dazugehörigen statistischen Daten, zeigen sich nahezu perfekte Ergebnisse. Bei fast allen der evaluierten Subskalen ist der VR Molekülbaukasten auf einem Level mit dem Handbaukasten. Das zeigt, dass die natürliche Interaktion, welche auch das Ziel des VR Molekülbaukastens ist, gelungen ist.

Der VR Molekülbaukasten vereint also die Vorteile eines PC Programms, wie beispielsweise das Speichern und Weiterverwenden von Molekülen mit der praktischen und natürlichen Interaktion, die der Handbaukasten bietet. Diese Aussage wird durch den ermittelten System Usability Score belegt, der sich ebenfalls auf einem sehr hohen Level befindet.

Das alles wird durch einen überdurchschnittlichen Presence Score abgerundet, welcher beweist, dass die virtuelle Welt des VR Molekülbaukastens intuitiv und praktisch gestaltet ist.

Trotz den Limitierungen und dem Fakt, dass der VR Molekülbaukasten in seinem aktuellen Stand noch ein Prototyp ist, steht einer Weiterentwicklung nichts im Wege. Weitere Evaluationen in der Zukunft können dann richtungsweisend sein.

7.2. Ausblick

Der VR Molekülbaukasten kann in der Zukunft in einigen Bereichen, welche in den Limitierungen in Kapitel 6 beschrieben sind noch weiterentwickelt werden. Eine Weiterentwicklung scheint aufgrund des häufig positiven Feedbacks auch als sehr sinnvoll.

Dabei sollte die Kritik der Studienteilnehmer eine richtungsweisende Rolle spielen, da diese das System distanziert als Nutzer betrachten und damit unvoreingenommen ihr Feedback geben konnten.

Eine oft genannte Idee ist, dass unterschiedliche Strukturen und Ansichten in der Zukunft möglich sein sollten.

Genauer spezifiziert sind Kristallstrukturen mit die für den Nutzer wichtigste Komponente. Aber auch ein Kugelmodell oder Ellipsoide wären laut den Studienteilnehmern sinnvoll.

Diese neuen Funktionen hängen aber von anderen Neuerungen ab, die davor noch eine wichtige Rolle spielen. So sollten unterschiedliche Bindungsarten, Bindungslängen sowie andere Atome oder sogar das vollständige Periodensystem davor hinzugefügt werden.

Bei der Erweiterung der Bindungen sollte auch über eine Verbesserung der zwischenmolekularen Kräfte nachgedacht werden. Nur wenn diese perfekt berechnet sind, kann dauerhaft eine optimale Geometrie des Moleküls gewährleistet werden.

Eine weitere zusätzliche Option wäre eine Zoom Funktion. Diese wird vor allem bei größeren Molekülen hilfreich, um sie in ihrer Gesamtstruktur zu betrachten.

Dem VR Molekülbaukasten stehen also einige Optionen offen, sich in verschiedene Richtungen weiter zu entwickeln.

Auch eine portable Version ohne die SenseGlove, welche nur mit der HTC VIVE und deren Controllern funktioniert, wäre denkbar, müsste jedoch genau durchdacht sein, um sich von bereits bestehenden Programmen abzugrenzen.

Diese portable Version oder neue Änderungen müssen dann auch wieder kritisch in neuen Studien evaluiert werden um eine tatsächliche Verbesserung zu bieten.

Literaturverzeichnis

- [19] *The latest stable Unity SDK for the SenseGlove. Contribute to Adjuvo/SenseGlove-Unity development by creating an account on GitHub.* original-date: 2017-07-12T10:07:51Z. Juni 2019. URL: <https://github.com/Adjuvo/SenseGlove-Unity> (besucht am 23. 12. 2019) (zitiert auf S. 16).
- [ADF+13] K. Andrae, V. Durmaz, K. Fackeldey, O. Scharkoi, M. Weber. „Medizin aus dem Computer“. de. In: *Der Anaesthesist* 62.7 (Juli 2013), S. 557–561. ISSN: 1432-055X. DOI: [10.1007/s00101-013-2202-x](https://doi.org/10.1007/s00101-013-2202-x). URL: <https://doi.org/10.1007/s00101-013-2202-x> (besucht am 03. 10. 2019) (zitiert auf S. 7, 9).
- [BKM08] A. Bangor, P. T. Kortum, J. T. Miller. „An Empirical Evaluation of the System Usability Scale“. In: *International Journal of Human–Computer Interaction* 24.6 (2008), S. 574–594. DOI: [10.1080/10447310802205776](https://doi.org/10.1080/10447310802205776). eprint: <https://doi.org/10.1080/10447310802205776>. URL: <https://doi.org/10.1080/10447310802205776> (zitiert auf S. 28).
- [Bro] J. Brooke. „SUS - A quick and dirty usability scale“. en. In: (), S. 7 (zitiert auf S. 28).
- [CFH97] L. D. Cutler, B. Frölich, P. Hanrahan. „Two-handed direct manipulation on the responsive workbench“. en. In: *Proceedings of the 1997 symposium on Interactive 3D graphics - SI3D '97*. Providence, Rhode Island, United States: ACM Press, 1997, 107–ff. ISBN: 978-0-89791-884-8. DOI: [10.1145/253284.253315](https://doi.org/10.1145/253284.253315). URL: <http://portal.acm.org/citation.cfm?doid=253284.253315> (besucht am 08. 01. 2020) (zitiert auf S. 19).
- [GGM09] J. L. Gastwirth, Y. R. Gel, W. Miao. „The Impact of Levene’s Test of Equality of Variances on Statistical Theory and Practice“. In: *Statistical Science* 24.3 (2009). Publisher: Institute of Mathematical Statistics, S. 343–360. ISSN: 0883-4237. URL: <https://www.jstor.org/stable/25681315> (besucht am 06. 03. 2020) (zitiert auf S. 30).
- [HCL+12] M. D. Hanwell, D. E. Curtis, D. C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G. R. Hutchison. „Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform“. en. In: *Journal of Cheminformatics* 4.1 (Dez. 2012), S. 17. ISSN: 1758-2946. DOI: [10.1186/1758-2946-4-17](https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17). URL: <https://jcheminf.biomedcentral.com/articles/10.1186/1758-2946-4-17> (besucht am 10. 02. 2020) (zitiert auf S. 11).
- [HS88] S. G. Hart, L. E. Staveland. „Development of NASA-TLX (Task Load Index): Results of Empirical and Theoretical Research“. In: *Human Mental Workload*. Hrsg. von P. A. Hancock, N. Meshkati. Bd. 52. Advances in Psychology. North-Holland, 1988, S. 139–183. DOI: [10.1016/S0166-4115\(08\)62386-9](https://doi.org/10.1016/S0166-4115(08)62386-9). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0166411508623869> (zitiert auf S. 27).

- [HSD96] H. Haase, J. Strassner, F. Dai. „VR techniques for the investigation of molecule data“. In: *Computers & Graphics* 20.2 (1996). Techniques for Virtual Environments, S. 207–217. ISSN: 0097-8493. DOI: [https://doi.org/10.1016/0097-8493\(95\)00127-1](https://doi.org/10.1016/0097-8493(95)00127-1). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0097849395001271> (zitiert auf S. 9).
- [KBL+19] L. J. Kingsley, V. Brunet, G. Lelais, S. McCloskey, K. Milliken, E. Leija, S. R. Fuhs, K. Wang, E. Zhou, G. Spraggon. „Development of a virtual reality platform for effective communication of structural data in drug discovery“. en. In: *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 89 (Juni 2019), S. 234–241. ISSN: 1093-3263. DOI: [10.1016/j.jmgl.2019.03.010](https://doi.org/10.1016/j.jmgl.2019.03.010). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1093326318303929> (besucht am 06. 03. 2020) (zitiert auf S. 13).
- [KHF+19] J. Kreimeier, S. Hammer, D. Friedmann, P. Karg, C. Bühner, L. Bankel, T. Götzelmann. „Evaluation of Different Types of Haptic Feedback Influencing the Task-Based Presence and Performance in Virtual Reality“. In: *Proceedings of the 12th ACM International Conference on Pervasive Technologies Related to Assistive Environments*. PETRA '19. Rhodes, Greece: Association for Computing Machinery, 2019, S. 289–298. ISBN: 9781450362320. DOI: [10.1145/3316782.3321536](https://doi.org/10.1145/3316782.3321536). URL: <https://doi.org/10.1145/3316782.3321536> (zitiert auf S. 7).
- [RHJA06] P. Ramsamy, A. Haffegge, R. Jamieson, V. Alexandrov. „Using Haptics to Improve Immersion in Virtual Environments“. In: *Computational Science – ICCS 2006*. Hrsg. von V. N. Alexandrov, G. D. van Albada, P. M. A. Sloot, J. Dongarra. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006, S. 603–609. ISBN: 978-3-540-34382-0. DOI: https://doi.org/10.1007/11758525_81 (zitiert auf S. 8).
- [Sat] J. B. Sattler. „Links und Rechts in der Wahrnehmung des Menschen“. de. In: (), S. 6 (zitiert auf S. 20).
- [Sin13] M. J. Singer. „PRESENCE QUESTIONNAIRE“. en. In: (2013), S. 5 (zitiert auf S. 28).
- [SO17] S. B. Schorr, A. M. Okamura. „Fingertip Tactile Devices for Virtual Object Manipulation and Exploration“. In: *Proceedings of the 2017 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*. CHI '17. Denver, Colorado, USA: Association for Computing Machinery, 2017, S. 3115–3119. ISBN: 9781450346559. DOI: [10.1145/3025453.3025744](https://doi.org/10.1145/3025453.3025744). URL: <https://doi.org/10.1145/3025453.3025744> (zitiert auf S. 8).
- [STH+10] C. Steffen, K. Thomas, U. Huniar, A. Hellweg, O. Rubner, A. Schroer. „TmoleX—A graphical user interface for TURBOMOLE“. en. In: *Journal of Computational Chemistry* 31.16 (2010), S. 2967–2970. ISSN: 1096-987X. DOI: [10.1002/jcc.21576](https://doi.org/10.1002/jcc.21576). URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jcc.21576> (besucht am 05. 03. 2020) (zitiert auf S. 12).
- [SZA+18] D. Shor, B. Zaaijer, L. Ahsmann, S. Immerzeel, M. Weetzel, D. Eikelenboom, J. Hartcher-O'Brien, D. Aschenbrenner. „Designing Haptics: Comparing Two Virtual Reality Gloves with Respect to Realism, Performance and Comfort“. In: *2018 IEEE International Symposium on Mixed and Augmented Reality Adjunct (ISMAR-Adjunct)*. Okt. 2018, S. 318–323. DOI: [10.1109/ISMAR-Adjunct.2018.00095](https://doi.org/10.1109/ISMAR-Adjunct.2018.00095) (zitiert auf S. 8).

- [WNOS17] M. Weigel, A. S. Nittala, A. Olwal, J. Steimle. „SkinMarks: Enabling Interactions on Body Landmarks Using Conformal Skin Electronics“. In: *Proceedings of the 2017 CHI Conference on Human Factors in Computing Systems*. CHI '17. Denver, Colorado, USA: Association for Computing Machinery, 2017, S. 3095–3105. ISBN: 9781450346559. DOI: [10.1145/3025453.3025704](https://doi.org/10.1145/3025453.3025704). URL: <https://doi.org/10.1145/3025453.3025704> (zitiert auf S. 8).
- [WS98] B. G. Witmer, M. J. Singer. „Measuring Presence in Virtual Environments: A Presence Questionnaire“. en. In: *Presence: Teleoperators and Virtual Environments 7.3* (Juni 1998), S. 225–240. ISSN: 1054-7460, 1531-3263. DOI: [10.1162/105474698565686](https://doi.org/10.1162/105474698565686). URL: <http://www.mitpressjournals.org/doi/10.1162/105474698565686> (besucht am 05.03.2020) (zitiert auf S. 28).
- [ZLB+86] T. G. Zimmerman, J. Lanier, C. Blanchard, S. Bryson, Y. Harvill. „A Hand Gesture Interface Device“. In: *SIGCHI Bull.* 17.SI (Mai 1986), S. 189–192. ISSN: 0736-6906. DOI: [10.1145/30851.275628](https://doi.org/10.1145/30851.275628). URL: <https://doi.org/10.1145/30851.275628> (zitiert auf S. 14).

Alle URLs wurden zuletzt am 23.03.2020 geprüft.

A. Tabellarische Ergebnisse der Nutzerstudie

ONEWAY deskriptive Statistiken

System Usability Scale

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 33,472 | 14,9543 | 3,5248 | 26,036 | 40,909 | 12,5 | 75,0 |
| Handbaukasten | 18 | 84,306 | 10,1389 | 2,3898 | 79,264 | 89,348 | 62,5 | 95,0 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 81,944 | 11,1986 | 2,6395 | 76,376 | 87,513 | 60,0 | 97,5 |
| Gesamt | 54 | 66,574 | 26,5345 | 3,6109 | 59,332 | 73,817 | 12,5 | 97,5 |

Tabelle A.1.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für den System Usability Score.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

System Usability Scale

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|--------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 29634,954 | 2 | 14817,477 | 98,381 | ,000 |
| Innerhalb der Gruppen | 7681,250 | 51 | 150,613 | | |
| Gesamt | 37316,204 | 53 | | | |

Tabelle A.2.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für den System Usability Score.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Mehrfachvergleiche

Abhängige Variable: System Usability Scale

Bonferroni

| (I) Programmart | (J) Programmart | Mittlere Differenz | Std.-Fehler | Signifikanz | 95%-Konfidenzintervall | |
|---------------------|---------------------|-----------------------|-------------|-------------|------------------------|------------|
| | | (I-J) | | | Untergrenze | Obergrenze |
| TmoleX | Handbaukasten | -50,8333 [*] | 4,0908 | ,000 | -60,960 | -40,706 |
| | VR Molekülbaukasten | -48,4722 [*] | 4,0908 | ,000 | -58,599 | -38,345 |
| Handbaukasten | TmoleX | 50,8333 [*] | 4,0908 | ,000 | 40,706 | 60,960 |
| | VR Molekülbaukasten | 2,3611 | 4,0908 | 1,000 | -7,766 | 12,488 |
| VR Molekülbaukasten | TmoleX | 48,4722 [*] | 4,0908 | ,000 | 38,345 | 58,599 |
| | Handbaukasten | -2,3611 | 4,0908 | 1,000 | -12,488 | 7,766 |

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Tabelle A.3.: Diese Tabelle zeigt die Post-hoc-Tests mit Bonferroni-Korrektur für den System Usability Score.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Test der Homogenität der Varianzen

| | | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz |
|------------------------|-------------------------------------------------|------------------|-----|--------|-------------|
| System Usability Scale | Basiert auf dem Mittelwert | 1,171 | 2 | 51 | ,318 |
| | Basiert auf dem Median | ,850 | 2 | 51 | ,433 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepassten df | ,850 | 2 | 44,662 | ,434 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | 1,128 | 2 | 51 | ,332 |
| | | | | | |

Tabelle A.4.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für den System Usability Score.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Mental Demand

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 54,72 | 24,463 | 5,766 | 42,56 | 66,89 | 20 | 90 |
| Handbaukasten | 18 | 28,33 | 23,389 | 5,513 | 16,70 | 39,96 | 5 | 80 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 39,17 | 24,749 | 5,833 | 26,86 | 51,47 | 5 | 80 |
| Gesamt | 54 | 40,74 | 26,142 | 3,557 | 33,61 | 47,88 | 5 | 90 |

Tabelle A.5.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Mental Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

Mental Demand

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|-------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 6334,259 | 2 | 3167,130 | 5,405 | ,007 |
| Innerhalb der Gruppen | 29886,111 | 51 | 586,002 | | |
| Gesamt | 36220,370 | 53 | | | |

Tabelle A.6.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für die Subskala Mental Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Mehrfachvergleiche

Abhängige Variable: Mental Demand

Bonferroni

| (I) Programmart | (J) Programmart | Mittlere Differenz (I-J) | Std.-Fehler | Signifikanz | 95%-Konfidenzintervall | |
|---------------------|---------------------|--------------------------|-------------|-------------|------------------------|------------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze |
| TmoleX | Handbaukasten | 26,389* | 8,069 | ,006 | 6,41 | 46,36 |
| | VR Molekülbaukasten | 15,556 | 8,069 | ,178 | -4,42 | 35,53 |
| Handbaukasten | TmoleX | -26,389* | 8,069 | ,006 | -46,36 | -6,41 |
| | VR Molekülbaukasten | -10,833 | 8,069 | ,556 | -30,81 | 9,14 |
| VR Molekülbaukasten | TmoleX | -15,556 | 8,069 | ,178 | -35,53 | 4,42 |
| | Handbaukasten | 10,833 | 8,069 | ,556 | -9,14 | 30,81 |

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Tabelle A.7.: Diese Tabelle zeigt die Post-hoc-Tests mit Bonferroni-Korrektur für die Subskala Mental Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Test der Homogenität der Varianzen

| | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz | |
|---------------|-------------------------------------------------|------|-----|-------------|------|
| Mental Demand | Basiert auf dem Mittelwert | ,603 | 2 | 51 | ,551 |
| | Basiert auf dem Median | ,633 | 2 | 51 | ,535 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepassten df | ,633 | 2 | 46,848 | ,535 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | ,694 | 2 | 51 | ,504 |

Tabelle A.8.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für die Subskala Mental Demand.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Physical Demand

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 22,22 | 15,551 | 3,665 | 14,49 | 29,96 | 5 | 60 |
| Handbaukasten | 18 | 37,50 | 19,346 | 4,560 | 27,88 | 47,12 | 5 | 80 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 44,44 | 26,059 | 6,142 | 31,49 | 57,40 | 5 | 80 |
| Gesamt | 54 | 34,72 | 22,433 | 3,053 | 28,60 | 40,85 | 5 | 80 |

Tabelle A.9.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Physical Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

Physical Demand

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|-------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 4652,778 | 2 | 2326,389 | 5,389 | ,008 |
| Innerhalb der Gruppen | 22018,056 | 51 | 431,727 | | |
| Gesamt | 26670,833 | 53 | | | |

Tabelle A.10.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für die Subskala Physical Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Temporal Demand

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 51,94 | 25,561 | 6,025 | 39,23 | 64,66 | 10 | 90 |
| Handbaukasten | 18 | 28,61 | 19,082 | 4,498 | 19,12 | 38,10 | 5 | 75 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 29,17 | 20,526 | 4,838 | 18,96 | 39,37 | 5 | 65 |
| Gesamt | 54 | 36,57 | 24,123 | 3,283 | 29,99 | 43,16 | 5 | 90 |

Tabelle A.11.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Temporal Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

Temporal Demand

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|-------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 6381,481 | 2 | 3190,741 | 6,653 | ,003 |
| Innerhalb der Gruppen | 24459,722 | 51 | 479,602 | | |
| Gesamt | 30841,204 | 53 | | | |

Tabelle A.12.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für die Subskala Temporal Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Mehrfachvergleiche

Abhängige Variable: Temporal Demand

Bonferroni

| (I) Programmart | (J) Programmart | Mittlere Differenz | | Signifikanz | 95%-Konfidenzintervall | |
|---------------------|---------------------|--------------------|-------------|-------------|------------------------|------------|
| | | (I-J) | Std.-Fehler | | Untergrenze | Obergrenze |
| TmoleX | Handbaukasten | 23,333* | 7,300 | ,007 | 5,26 | 41,40 |
| | VR Molekülbaukasten | 22,778* | 7,300 | ,009 | 4,71 | 40,85 |
| Handbaukasten | TmoleX | -23,333* | 7,300 | ,007 | -41,40 | -5,26 |
| | VR Molekülbaukasten | -,556 | 7,300 | 1,000 | -18,63 | 17,52 |
| VR Molekülbaukasten | TmoleX | -22,778* | 7,300 | ,009 | -40,85 | -4,71 |
| | Handbaukasten | ,556 | 7,300 | 1,000 | -17,52 | 18,63 |

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Tabelle A.13.: Diese Tabelle zeigt die Post-hoc-Tests mit Bonferroni-Korrektur für die Subskala Temporal Demand.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Overall Performance

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 55,83 | 25,044 | 5,903 | 43,38 | 68,29 | 15 | 95 |
| Handbaukasten | 18 | 16,39 | 10,545 | 2,485 | 11,15 | 21,63 | 5 | 35 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 21,39 | 10,820 | 2,550 | 16,01 | 26,77 | 5 | 45 |
| Gesamt | 54 | 31,20 | 24,242 | 3,299 | 24,59 | 37,82 | 5 | 95 |

Tabelle A.14.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Overall Performance.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Effort

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 58,06 | 22,304 | 5,257 | 46,96 | 69,15 | 15 | 90 |
| Handbaukasten | 18 | 26,11 | 16,764 | 3,951 | 17,77 | 34,45 | 5 | 75 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 39,72 | 21,657 | 5,105 | 28,95 | 50,49 | 5 | 80 |
| Gesamt | 54 | 41,30 | 23,973 | 3,262 | 34,75 | 47,84 | 5 | 90 |

Tabelle A.15.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Effort.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

Effort

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|--------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 9250,926 | 2 | 4625,463 | 11,123 | ,000 |
| Innerhalb der Gruppen | 21208,333 | 51 | 415,850 | | |
| Gesamt | 30459,259 | 53 | | | |

Tabelle A.16.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für die Subskala Effort.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Test der Homogenität der Varianzen

| | | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz |
|--------|------------------------------------------------|------------------|-----|--------|-------------|
| Effort | Basiert auf dem Mittelwert | 1,549 | 2 | 51 | ,222 |
| | Basiert auf dem Median | 1,511 | 2 | 51 | ,230 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepaßten df | 1,511 | 2 | 48,637 | ,231 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | 1,618 | 2 | 51 | ,208 |

Tabelle A.17.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für die Subskala Effort.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Mehrfachvergleiche

Abhängige Variable: Effort

Bonferroni

| (I) Programmart | (J) Programmart | Mittlere Differenz | Std.-Fehler | Signifikanz | 95%-Konfidenzintervall | |
|---------------------|---------------------|----------------------|-------------|-------------|------------------------|------------|
| | | (I-J) | | | Untergrenze | Obergrenze |
| TmoleX | Handbaukasten | 31,944 [*] | 6,797 | ,000 | 15,12 | 48,77 |
| | VR Molekülbaukasten | 18,333 [*] | 6,797 | ,028 | 1,51 | 35,16 |
| Handbaukasten | TmoleX | -31,944 [*] | 6,797 | ,000 | -48,77 | -15,12 |
| | VR Molekülbaukasten | -13,611 | 6,797 | ,152 | -30,44 | 3,22 |
| VR Molekülbaukasten | TmoleX | -18,333 [*] | 6,797 | ,028 | -35,16 | -1,51 |
| | Handbaukasten | 13,611 | 6,797 | ,152 | -3,22 | 30,44 |

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Tabelle A.18.: Diese Tabelle zeigt die Post-hoc-Tests mit Bonferroni-Korrektur für die Subskala Effort.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

ONEWAY deskriptive Statistiken

Frustration Level

| | N | Mittelwert | Std.-Abweichung | Std.-Fehler | 95%-Konfidenzintervall für den Mittelwert | | Minimum | Maximum |
|---------------------|----|------------|-----------------|-------------|-------------------------------------------|------------|---------|---------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze | | |
| TmoleX | 18 | 72,78 | 15,361 | 3,621 | 65,14 | 80,42 | 45 | 95 |
| Handbaukasten | 18 | 24,72 | 16,492 | 3,887 | 16,52 | 32,92 | 5 | 65 |
| VR Molekülbaukasten | 18 | 25,56 | 15,614 | 3,680 | 17,79 | 33,32 | 5 | 65 |
| Gesamt | 54 | 41,02 | 27,479 | 3,739 | 33,52 | 48,52 | 5 | 95 |

Tabelle A.19.: Diese Tabelle zeigt die Deskriptiven Statistiken für die Subskala Frustration Level.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Einfaktorielle ANOVA

Frustration Level

| | Quadratsumme | df | Mittel der Quadrate | F | Signifikanz |
|-----------------------|--------------|----|---------------------|--------|-------------|
| Zwischen den Gruppen | 27239,815 | 2 | 13619,907 | 54,355 | ,000 |
| Innerhalb der Gruppen | 12779,167 | 51 | 250,572 | | |
| Gesamt | 40018,981 | 53 | | | |

Tabelle A.20.: Diese Tabelle zeigt die ANOVA für die Subskala Frustration Level.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Test der Homogenität der Varianzen

| | | Levene-Statistik | df1 | df2 | Signifikanz |
|-------------------|------------------------------------------------|------------------|-----|--------|-------------|
| Frustration Level | Basiert auf dem Mittelwert | ,066 | 2 | 51 | ,936 |
| | Basiert auf dem Median | ,099 | 2 | 51 | ,906 |
| | Basierend auf dem Median und mit angepaßten df | ,099 | 2 | 45,864 | ,906 |
| | Basiert auf dem getrimmten Mittel | ,075 | 2 | 51 | ,928 |

Tabelle A.21.: Diese Tabelle zeigt den Levene-Test für die Subskala Frustration Level.
Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Mehrfachvergleiche

Abhängige Variable: Frustration Level

Bonferroni

| (I) Programmart | (J) Programmart | Mittlere Differenz (I-J) | Std.-Fehler | Signifikanz | 95%-Konfidenzintervall | |
|---------------------|---------------------|-----------------------------|-------------|-------------|------------------------|------------|
| | | | | | Untergrenze | Obergrenze |
| TmoleX | Handbaukasten | 48,056 [*] | 5,276 | ,000 | 34,99 | 61,12 |
| | VR Molekülbaukasten | 47,222 [*] | 5,276 | ,000 | 34,16 | 60,28 |
| Handbaukasten | TmoleX | -48,056 [*] | 5,276 | ,000 | -61,12 | -34,99 |
| | VR Molekülbaukasten | -,833 | 5,276 | 1,000 | -13,90 | 12,23 |
| VR Molekülbaukasten | TmoleX | -47,222 [*] | 5,276 | ,000 | -60,28 | -34,16 |
| | Handbaukasten | ,833 | 5,276 | 1,000 | -12,23 | 13,90 |

*. Die Differenz der Mittelwerte ist auf dem Niveau 0.05 signifikant.

Tabelle A.22.: Diese Tabelle zeigt die Post-hoc-Tests mit Bonferroni-Korrektur für die Subskala Frustration Level.

Erstellt mit IBM SPSS Statistics 25

Erklärung

Ich versichere, diese Arbeit selbstständig verfasst zu haben. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommene Aussagen als solche gekennzeichnet. Weder diese Arbeit noch wesentliche Teile daraus waren bisher Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens. Ich habe diese Arbeit bisher weder teilweise noch vollständig veröffentlicht. Das elektronische Exemplar stimmt mit allen eingereichten Exemplaren überein.

Stuttgart, 23.03.2020

P. Gebhardt

Ort, Datum, Unterschrift