

SistematX:

estudo de caso sobre a usabilidade da plataforma web de quimioinformática

Emmanuella Faustino Albuquerque



CENTRO DE INFORMÁTICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

João Pessoa, 2023

Emmanuella Faustino Albuquerque

SistematX:
estudo de caso sobre a usabilidade da plataforma web de
quimioinformática

Monografia apresentada ao curso Ciência da Computação
do Centro de Informática, da Universidade Federal da Paraíba,
como requisito para a obtenção do grau de Bacharel em Ciência da Computação

Orientador: Valdecir Becker

Novembro de 2023

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

A345s Albuquerque, Emmanuella Faustino.

Sistemax: estudo de caso sobre a usabilidade da
plataforma web de quimioinformática / Emmanuella
Faustino Albuquerque. - João Pessoa, 2023.
112 f. : il.

Orientação: Valdecir Becker.
TCC (Graduação) - UFPB/CI.

1. Avaliação heurística. 2. Metabólitos secundários.
3. Quimioinformática. 4. Teste de usabilidade. 5.
Usabilidade. I. Becker, Valdecir. II. Título.

UFPB/CI

CDU 004.45



CENTRO DE INFORMÁTICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

Trabalho de Conclusão de Curso de Ciência da Computação intitulado ***Sistemática: estudo de caso sobre a usabilidade da plataforma web de quimioinformática*** de autoria de Emmanuella Faustino Albuquerque, aprovada pela banca examinadora constituída pelos seguintes professores:

Prof. Dr. Valdecir Becker
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Marcus Tullius Scotti
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Danielle Rousy Dias Ricarte
Universidade Federal da Paraíba

Coordenador(a) do Departamento Ciência da Computação
Leandro Carlos de Souza
CI/UFPB

João Pessoa, 14 de novembro de 2023

Centro de Informática, Universidade Federal da Paraíba
Rua dos Escoteiros, Mangabeira VII, João Pessoa, Paraíba, Brasil CEP: 58058-600
Fone: +55 (83) 3216 7093 / Fax: +55 (83) 3216 7117

“O nitrogênio em nosso DNA, o cálcio em nossos dentes, o ferro em nosso sangue, o carbono em nossas tortas de maçã... Foram feitos no interior de estrelas em colapso, agora mortas há muito tempo. Nós somos feitos de poeira das estrelas.” - Carl Sagan

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a todas as pessoas que estiveram ao meu lado ao longo desta jornada acadêmica.

AGRADECIMENTOS

Gostaria de expressar meus sinceros agradecimentos a todos que desempenharam um papel fundamental na conclusão deste trabalho. Em primeiro lugar, agradeço à minha tia Cláudia por todo o suporte e por me acolher em sua casa. A minha querida mãe, Josilene, meu querido pai, Luciano, e minha amada irmã, Vitória, pelo encorajamento e carinho. Agradeço também à minha tia Lúcia pelas palavras de compreensão e apoio. Além disso, estendo meus agradecimentos a Valdecir Becker, que me orientou durante o desenvolvimento deste trabalho, bem como aos professores do Centro de Informática. Por fim, expresso meu agradecimento ao professor Marcus Tullius por ter depositado sua confiança em meus esforços na participação do projeto do SistematiX, a toda a equipe de desenvolvimento e ao laboratório de quimioinformática.

RESUMO

Com o avanço da tecnologia e o progresso no campo da química, surgiu uma nova área, conhecida como quimioinformática. A química de produtos naturais, quando combinada com a informática, desempenha um papel essencial na otimização das pesquisas farmacêuticas, uma vez que fornece métodos para o gerenciamento e identificação de compostos químicos. É importante notar que isso se traduz em avanços significativos na descoberta e desenvolvimento de novos medicamentos. Dessa forma, o SistematiX foi criado para contribuir nos estudos de pesquisadores de produtos naturais, provendo acesso a diversas informações de metabólitos secundários. Este trabalho apresenta uma análise de usabilidade do SistematiX, realizando uma avaliação por inspeção, através da avaliação heurística, e por observação, por meio do teste de usabilidade. Este estudo foi desenvolvido com o intuito de melhorar a experiência de uso do público-alvo do sistema. Os resultados revelam várias violações heurísticas com uma média de 4 violações por tela. Isso destaca a necessidade de melhorias no sistema para proporcionar uma experiência mais satisfatória para o usuário. Além disso, através do teste de usabilidade, foi possível obter insights significativos sobre os feedbacks dos usuários, e compreender a necessidade de melhorias no detalhamento das pesquisas existentes.

Palavras-chave: Avaliação Heurística. Metabólitos Secundários. Quimioinformática. Teste de Usabilidade. Usabilidade.

ABSTRACT

With the advance of technology and progress in the field of chemistry, a new area has emerged, known as chemoinformatics. The chemistry of natural products, when combined with computer science, plays an essential role in optimizing pharmaceutical research, since it provides methods for managing and identifying chemical compounds. It is important to note that this translates into significant advances in the discovery and development of new drugs. SistematiX was therefore created to contribute to the studies of natural product researchers by providing access to a wide range of secondary metabolite information. This work presents a usability analysis of SistematiX, carrying out an evaluation by inspection, through heuristic evaluation, and by observation, through usability testing. This study was carried out with the aim of improving the user experience of the system's target audience. The results reveal several heuristic violations with an average of 4 violations per screen. This highlights the need for improvements to the system in order to provide a more satisfactory user experience. In addition, through usability testing, it was possible to gain significant insights into user feedback, and understand the need for improvements in the detail of existing surveys.

Key-words: Chemoinformatics. Heuristic evaluation. Secondary metabolites. Usability. Usability testing.

LISTA DE FIGURAS

1	Página Inicial do SistematoX	26
2	Página de detalhes de um composto	27
3	Página de gerenciamento de dados	28
4	Modelo de qualidade para qualidade externa e interna	29
5	Mensuração da emoção	36
6	System Usability Scale	39
7	Estrutura da metodologia	40
8	Gráfico que ilustra a distribuição de dispositivos que acessam o site	44
9	Gráfico da porcentagem de usuários Desktop	44
10	Relação das páginas mais acessadas do SistematoX	45
11	Captura de tela da página inicial do SistematoX	48
12	Captura de tela da página inicial com enfoque nas guias/tabs	48
13	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por estrutura	49
14	Captura de tela ampliada na guia de pesquisa por estrutura através de similaridade	51
15	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por estrutura através de similaridade	51
16	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por Composto . . .	53
17	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por Classe	53
18	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por LogP	54
19	Captura de tela da página de resultados obtidos a partir de uma pesquisa por LogP	54
20	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa Search All	55
21	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por massa relativa .	57
22	Captura de tela do erro na pesquisa por massa relativa	57
23	Captura de tela da pesquisa por massa relativa com campos negativos . . .	58
24	Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por nox	58
25	Captura de tela do modal de ajuda (Help) da página inicial	60
26	Captura de tela do modal “How to cite”	61

27	Captura de tela da página de resultados	62
28	Captura de tela do modal com filtros da página de resultados	63
29	Captura de tela da página de detalhes de um composto	64
30	Captura de tela da página de detalhes de um composto com destaque para visualização da tabela de dados botânicos	65
31	Captura de tela da página de detalhes de um composto no final da página	66
32	Captura de tela do modal de dados referentes ao PLATO	67
33	Captura de tela da página de Login	69
34	Captura de tela das guias do menu da página de gerenciamento de dados .	70
35	Captura de tela da página de cadastro de Moléculas	70
36	Captura de tela da página de cadastro de Moléculas, ao carregar dados automáticos	71
37	Captura de tela do cadastro de dados de uma Molécula	72
38	Captura de tela do cadastro de dados de uma Molécula	73
39	Captura de tela do modal de erro ao salvar Molécula	74
40	Captura de tela do modal de seleção da página de gerenciamento de Moléculas	75
41	Captura de tela da página de gerenciamento de Moléculas	76
42	Captura de tela do modal de exclusão um tipo de atividade da página de Atividade Biológica	77
43	Captura de tela do modal de exclusão de uma classe	78
44	Captura de tela do modal de exclusão de uma parte de planta	79
45	Resultados da 1° questão do Questionário Pré-Teste	82
46	Resultados da 2° questão do Questionário Pré-Teste	82
47	Resultados da 3° questão do Questionário Pré-Teste	83
48	Resultados da 4° questão do Questionário Pré-Teste	83
49	Resultados da 5° questão do Questionário Pré-Teste	84
50	Resultados da 6° questão do Questionário Pré-Teste	84
51	Resultados da 1° questão do Questionário Pós-Teste	86
52	Resultados da 2° questão do Questionário Pós-Teste	87
53	Resultados da 3° questão do Questionário Pós-Teste	87

54	Resultados da 4ª questão do Questionário Pós-Teste	88
55	Resultados da 5ª questão do Questionário Pós-Teste	88
56	Resultados da 6ª questão do Questionário Pós-Teste	89
57	Resultados da 7ª questão do Questionário Pós-Teste	89
58	Resultados da 8ª questão do Questionário Pós-Teste	90
59	Captura de tela do modal de exclusão de uma parte de planta	91
60	Gráfico de barras: Tela Avaliada X Quantidade de Heurística Violações . .	91
61	Gráfico de barras: Tela Avaliada X Gravidade da Violação Heurística . . .	92
62	Gráfico de barras: Heurística X Quantidade de Violações	93

LISTA DE TABELAS

1	Escala de Severidade	33
2	Tabela de Viabilidade	34
3	Modelagem de usuários	46

LISTA DE QUADROS

1	Preparação - Criação das Personas: Persona 1	46
2	Preparação - Criação das Personas: Persona 2	47
3	AH referente a Figura 12	49
4	AH referente a Figura 13	50
5	AH referente a Figura 15	52
6	AH referente a Figura 17 e a Figura 18	55
7	AH referente a Figura 20	56
8	AH referente a Figura 21, 22, 23 e 24	59
9	AH referente a Figura 25	60
10	AH referente a Figura 26	61
11	AH referente a Figura 27	62
12	AH referente a Figura 28	63
13	AH referente a Figura 30	66
14	AH referente a Figura 32	68
15	AH referente a Figura 33	69
16	AH referente a Figura 35	71
17	AH referente a Figura 36	72
18	AH referente a Figura 37	73
19	AH referente a Figura 39	74
20	AH referente a Figura 41	76
21	AH referente a Figura 42	78
22	AH referente a Figura 43, 44 e outros	80
23	Definição dos papéis e tarefas	81

LISTA DE ABREVIATURAS

AH – Avaliação Heurística

FAQs – Frequently Asked Questions

IHC – Interação Humano-Computador

InChI – Identificador Químico Internacional

InChIKey – Identificador Químico Internacional baseado em Chave

ISO - International Organization for Standardization

IUPAC – União Internacional de Química Pura e Aplicada

NOX – Número de Oxidação

SAM – Self-Assessment Manikin

SISTEMAT X Web – SISTEMAT eXtended Webservices

SMILES – Simplified Molecular-Input Line-Entry System

SUS – System Usability Scale

TCLE – Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

TPSA – Topological Polar Surface Area

Sumário

1	INTRODUÇÃO	22
1.1	Definição do Problema	22
1.1.1	Objetivo geral	23
1.1.2	Objetivos específicos	23
1.2	Estrutura da monografia	23
2	CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DA LITERATURA	25
2.1	Química de Produtos Naturais	25
2.1.1	Matéria	25
2.1.2	Compostos Orgânicos	25
2.1.3	Metabólitos Secundários	25
2.2	Sistemática	26
2.3	Qualidade de uso de um Software	28
2.3.1	Usabilidade	29
2.3.1.1	Medidas de usabilidade	30
2.4	Métodos de Avaliação de Software	30
2.4.1	Método de Avaliação através de Investigação	31
2.4.2	Método de Avaliação através de Inspeção	31
2.4.2.1	Avaliação Heurística	31
2.4.3	Método de Avaliação através de Observação	34
2.4.3.1	Teste de Usabilidade	34
2.4.3.1.1	Termo de consentimento livre e esclarecido	34
2.4.3.1.2	Questionário Pré-Teste	34
2.4.3.1.3	Questionário Pós-Teste	35
2.4.3.1.4	Self-Assessment Manikin	35
2.4.3.1.5	System Usability Scale	36
3	METODOLOGIA	40
3.1	A avaliação de software	40

3.1.1	Avaliação Heurística	41
3.1.1.1	Preparação	41
3.1.1.2	Coleta de dados	41
3.1.1.3	Consolidação dos resultados	41
3.1.2	Teste de usabilidade	42
3.1.2.1	Preparação	42
3.1.2.2	Coleta de dados	42
3.1.2.3	Consolidação dos resultados	42
4	SISTEMATX	43
4.1	Compreensão do Sistema e do Público-Alvo	43
4.2	Revisão Heurística da Interface	47
4.2.1	Página Inicial	48
4.2.1.1	Pesquisa por Estrutura	49
4.2.1.1.1	Através de similaridade	50
4.2.1.2	Pesquisa por Classe e LopP	52
4.2.1.3	Pesquisa Search All	55
4.2.1.4	Pesquisa por Filtros	56
4.2.1.4.1	Por Massa Relativa e TPSA	57
4.2.1.4.2	Por Nox, PH e LogP	58
4.2.2	Modal de Ajuda	59
4.2.3	Modal “How to Cite”	60
4.2.4	Página de Resultados	61
4.2.4.1	Filtros	63
4.2.5	Página de Detalhes do Composto	64
4.2.5.1	PLATO Data	67
4.2.6	Página de Login	68
4.2.7	Página de Gerenciamento dos Dados	69
4.2.7.1	Cadastro de Molécula	70
4.2.7.2	Edição de Molécula	74

4.2.7.3	Exclusão de Atividade Biológica	77
4.2.7.4	Exclusão de uma Classe, do Skeleton, entre outros	78
4.3	Visão Geral do Teste de Usabilidade	80
4.3.1	Pré-Teste	81
4.3.1.1	TCLE	81
4.3.1.2	Resultados	81
4.3.2	Experimento de Uso	84
4.3.2.1	Fluxo (Pesquisador)	85
4.3.2.2	Fluxo (Gerenciador)	85
4.3.3	Pós-Teste	86
4.3.3.1	Resultados	86
5	ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS	91
5.1	Análise das Violações Heurísticas	91
5.2	Análise do Teste de Usabilidade	93
5.3	Discussão dos Resultados	93
5.4	Notas para o Redesign do Sistema	94
6	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	96
6.1	Trabalhos Futuros	96
	REFERÊNCIAS	97
	APÊNDICE 1 - TCLE: Termo de Consentimento Livre e Esclarecido	101
	APÊNDICE 2 - Questionário Pré-Teste	102
	APÊNDICE 3 - Questionário Pós-Teste (Pesquisador)	103
	APÊNDICE 4 - Questionário Pós-Teste (Gerenciador)	105
	APÊNDICE 5 - Lista de <i>Issues</i>	107

1 INTRODUÇÃO

Considerado um dos primeiros pesquisadores da quimioinformática, Frank Brown impactou positivamente o desenvolvimento da área de química computacional. A quimioinformática, um ramo de conhecimento relativamente novo, relaciona a química e a informática, conforme o próprio termo sugere [2]. Assim como outras áreas associadas à informática, a quimioinformática busca prover auxílio, minimizando o tempo útil necessário para realizar tarefas [1]. Com o uso da tecnologia, os cientistas e pesquisadores da química conseguem otimizar os processos rotineiros e ter maior agilidade no desenvolvimento de seus experimentos.

Desde os primórdios, elementos vindos da natureza são utilizados pelos seres humanos das mais variadas formas, inclusive para tratamento de doenças [3]. Na química, os produtos naturais são compostos que foram produzidos de forma natural por seres vivos, como as plantas, por exemplo [4]. Tais produtos naturais, em especial os conhecidos como metabólitos secundários ou especializados, podem ser utilizados na descoberta e no desenvolvimento de novos medicamentos e, são muito importantes para a indústria farmacêutica [5] pela diversidade química desses compostos bioativos.

Unindo os dois ramos e considerando que as ferramentas computacionais podem auxiliar na descoberta de novos medicamentos, surgiu o SistematiX. O SistematiX é uma ferramenta web que busca contribuir, ajudando no desenvolvimento dos experimentos realizados pelos pesquisadores de produtos naturais.

1.1 Definição do Problema

Normalmente, o trabalho de um pesquisador da área de produtos naturais, consiste em realizar experimentos que demandam um certo tempo, nos quais eles coletam e analisam dados de extratos para identificar os metabólitos [25, 26].

Com a evolução da humanidade e o desenvolvimento da tecnologia, tarefas repetitivas e que requerem bastante esforço foram sendo substituídas gradativamente por outras, de forma a agilizar, melhorar o desempenho das atividades e manter o foco no que realmente é importante. Com isso, áreas como a quimioinformática surgiram ao longo do tempo com o objetivo de resolver problemas no campo da química, buscando formas de facilitar o acesso a uma gama de informações de compostos químicos para pesquisadores da área e para a indústria, através das empresas de farmacologia.

A usabilidade é um aspecto crucial em qualquer sistema. Ela se refere à facilidade com que os usuários podem navegar e interagir com a interface do sistema. O SistematiX busca uma forma de prover acesso rápido e eficiente para pesquisadores da área de produtos naturais. Para prover isso, a usabilidade deve ser garantida. Aspectos como a

eficácia, eficiência e satisfação do usuário com o uso do site devem ser mensuradas. Com o intuito de facilitar esse acesso e fornecer melhor experiência e interação dos usuários com a interface, este trabalho busca determinar os principais problemas de experiência do usuário encontrados que interferem, ou não, na interação e analisar como esses problemas impactam na utilização do site.

1.1.1 Objetivo geral

Realizar uma avaliação de usabilidade do site do SistematoX, analisando e compreendendo os principais problemas encontrados na experiência do usuário.

1.1.2 Objetivos específicos

- Analisar os dados coletados pela plataforma Google Analytics.
- Verificar a experiência do usuário realizando a avaliação heurística e os testes de usabilidade.
- Identificar possíveis melhorias em termos de usabilidade para o site do SistematoX.

1.2 Estrutura da monografia

Os capítulos desta monografia estão divididos da seguinte forma:

No capítulo 1 (i.e. Introdução), será realizada uma contextualização sucinta sobre o tema escolhido, apresentando o problema de pesquisa, o objetivo geral e os objetivos específicos do trabalho e a organização dos capítulos.

No capítulo 2 (i.e. Conceitos Gerais e Revisão da Literatura), serão definidos conceitos-chaves da química orgânica, para prover melhor entendimento da plataforma web SistematoX, a própria plataforma também será contextualizada, e serão expostos conceitos da área de Interação Humano-Computador. Desta forma, estabeleceremos a fundamentação teórica do trabalho.

No capítulo 3 (i.e. Metodologia), será apresentada a metodologia do trabalho, esclarecendo os aspectos de como foi desenvolvida a avaliação de usabilidade do sistema, e o passo a passo para definição e obtenção dos resultados almejados.

No capítulo 4 (i.e. SistematoX), são detalhadas a plataforma web a ser avaliada, o público-alvo do sistema e as revisões de interface, isto é, as avaliações heurísticas e o teste de usabilidade.

No capítulo 5 (i.e. Análise e Discussão dos Resultados), será apresentada uma breve análise dos resultados obtidos, e detalhada a possível intenção de redesign do sistema.

No capítulo 6 (i.e. Conclusões e Trabalhos Futuros), será apresentada as conclusões da presente monografia, e descritos os possíveis trabalhos futuros.

2 CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Química de Produtos Naturais

Ao longo dos anos e com o crescente avanço da ciência, o estudo da química foi naturalmente evoluindo e se aprimorando progressivamente, assim como as suas subáreas, como a química orgânica. A área de estudo da química de produtos naturais é um tópico de estudos da química orgânica. Ela, por sua vez, também foi fragmentada em áreas mais específicas, com o objetivo de realizar investigações mais profundas acerca de cada tema.

Um desses temas são a fitoquímica e a farmacognosia. A fitoquímica se caracteriza pelo estudo dos compostos químicos existentes nos organismos do reino vegetal (*Plantae*, isto é, plantas). E a farmacognosia se concentra no estudo dos produtos criados a partir dos compostos químicos presentes nas diversas origens naturais (vegetal, animal e mineral) [4]. Dessa forma, produtos naturais tem suma importância na criação e descoberta de novos medicamentos.

2.1.1 Matéria

O estudo da química abrange a área de estudo das ciências da natureza, tal área busca compreender a matéria com o intuito de entender mais sobre o universo que vivemos, assim como sobre os fenômenos naturais e artificiais [7]. É importante saber que: “Matéria é tudo que ocupa espaço e tem massa. Este livro, a sua mesa, a sua cadeira e até o seu corpo são todos constituídos de matéria.” (TRO, Nivaldo J., 2017).

2.1.2 Compostos Orgânicos

Originalmente, acreditava-se que compostos orgânicos eram substâncias químicas criadas exclusivamente por organismos vivos, contanto, com o passar dos anos e com o desenvolvimento dos estudos envolvendo a área, tal ideia foi ampliada.

Atualmente, podemos definir que compostos orgânicos são moléculas que contêm carbono em sua estrutura. De acordo com Nivaldo (2017), compostos orgânicos são “os principais componentes da maior parte dos nossos combustíveis, como a gasolina, o petróleo e o gás natural, e são os ingredientes ativos na maioria dos produtos farmacêuticos, como a aspirina e o ibuprofeno.”

2.1.3 Metabólitos Secundários

Metabólitos secundários são compostos orgânicos encontrados em alguns organismos vivos, sendo as plantas as mais comumente conhecidas por os produzirem.

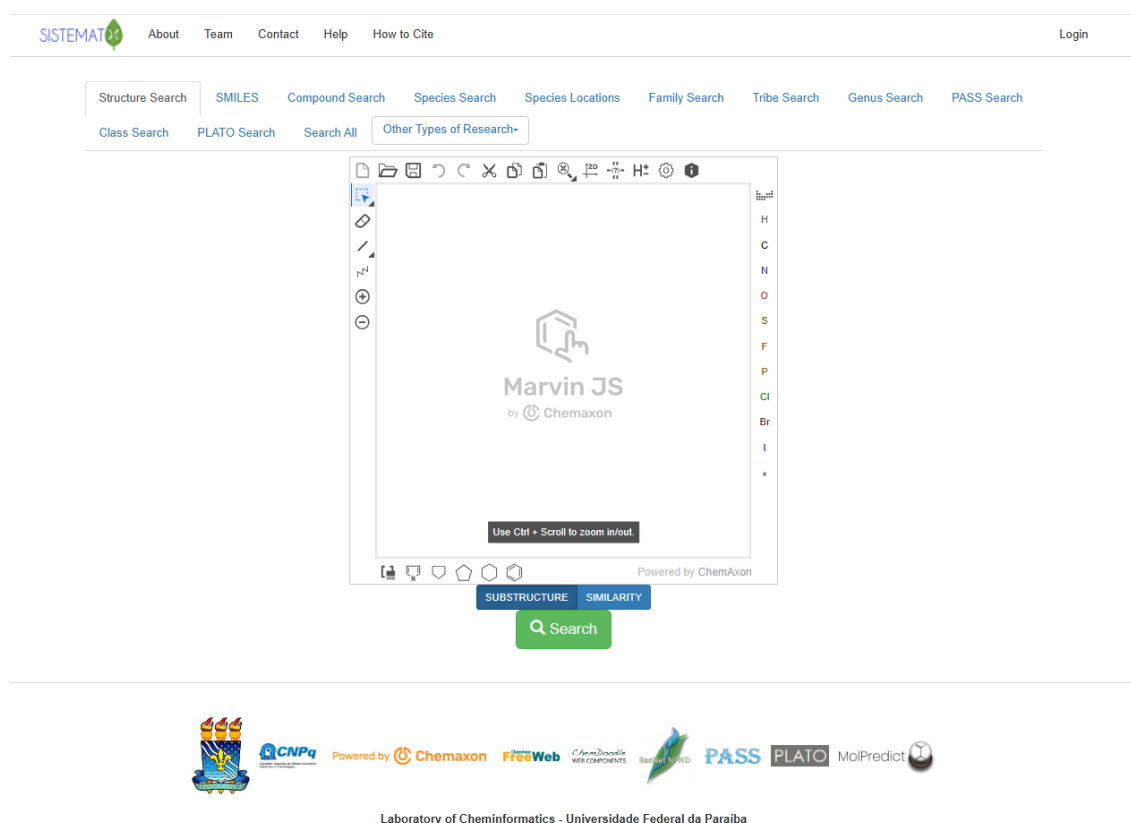
Eles possuem propriedades que auxiliam no desenvolvimento, atuando nos mecanismos de defesa e ajudando na prevenção de doenças das plantas [6]. Tais compostos naturais (fitoquímicos) podem auxiliar na área medicinal, já que possuem bioativos fundamentais na produção de fármacos.

2.2 SistematoX

O SistematoX é um software baseado na web, no qual é possível realizar buscas específicas e fazer gerenciamento de dados de metabólitos secundários. Tais buscas incluem pesquisar pela estrutura molecular, pelos *SMILES*, pelo nome, pela espécie, pela família, pela tribo, pelo gênero e pela classe a que pertencem os compostos orgânicos disponíveis no sistema através do gerenciamento. Veja a Figura 1.

Como foi dito anteriormente, na interface é possível realizar pesquisas por estruturas moleculares. Nesse caso, o sistema utiliza uma ferramenta de desenho de estrutura externa, chamada MarvinJS da Chemaxon, onde é possível adicionar a estrutura química do composto orgânico. Além disso, também é possível realizar pesquisas através do *SMILES*, que é uma forma de representar estruturas químicas por notações utilizando o computador.

Figura 1: Página Inicial do SistematoX



Fonte: <https://sistematox.ufpb.br>

2.

Figura 2: Página de detalhes de um composto

SISTEMAT

Data management About Team Contact Help How to Cite

Logout

lavai

< Back

⚡ Amplify

📊 NMR 1H Data

📊 NMR 1H by SPINUS WEB

📊 NMR 13C Data

📊 PASS Data

📊 PLATO Data

📖 PubChem Reference

📖 ChEMBL Reference

📖 ChemSpider Reference

📖 MolpredictX Reference

Compound Identification

Common Name	lavai
SMILES	<chem>NC1=CC(N)=CC(N)=C1</chem>
IUPAC	benzene-1,3,5-triamine
InChI	1S/C6H9N3/c7-4-1-5(8)3-6(9)2-4/h1-3H,7-9H2
InChIKey	RPHKINMPYJSCF-UHFFFA4DYSA-N
CAS	108-72-5

Compound Data

Class	Skeleton	NOX	Exact Mass
Alkaloid	12, 13-Sec-13-Nor-Totarane	0	123.079647302
Solubility at pH 7.4	Intrinsic Solubility	Acid pKa	Basic pKa
-0.813	-0.839	0	6.19
Relative Mass	LogP	Hydrophilic-lipophilic Balance	Topological Polar Surface Area(Å²)
123.159	-0.51	7.95	78.06

Botanical Data

Family	Subfamily	Tribe	Subtribe	Genus	Species	Reference	Part
Asteraceae	Unknown	Anthemideae	Matricariinae	Achillea	depressa	Acta Chem. Scand. Ser.B, v. 1, p. 2, 2000	Not informed

Biological Activity

Activity	System	System Type	Value	Reference
antitrypanosomal	T. Cruzii	IC50	8.5	Acta Chem. Scand. Ser.B, v. 5, p. 6, 2002

Geographic Data

Species	Journal	Latitude	Longitude	Approximate Location
Annona foetida	Unknown reference	9.10209674	18.6328125	412M+R4 Mahims, Chade

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br/search/molecule?id=14362>

O usuário administrador do sistema pode acessar a área de gerenciamento dos dados e realizar as operações de adição, edição e remoção de uma molécula, dos dados botânicos, da atividade biológica e de vários outros dados do metabólito disponível para consulta. Veja a Figura 3.

Figura 3: Página de gerenciamento de dados

The screenshot shows the 'Data Management' section of the SISTEMATX web application. At the top, there is a navigation bar with links: 'Data management', 'About', 'Team', 'Contact', 'Help', 'How to Cite', and a 'Logout' button. Below this, there are two buttons: 'Admin Area' and 'Manager Area'. The main heading is 'Data Management', followed by a sub-menu with 'Molecules' (selected), 'Class and Skeleton', 'Plant Part', 'Solvent', 'Botanical Data', 'Journals and References', 'Biological Activity', 'Other Data', 'Origin', and 'Biomass'. Under 'Molecules', there are 'Presentation' and 'Project' options. A toolbar contains icons for adding (+), editing (pencil), saving (floppy disk), and deleting (trash). The 'Basic Data' form is displayed, featuring a 'Molecule' image placeholder on the left and a grid of input fields on the right. The fields include: Name (Common Name), SMILES, IUPAC Name, InChI, InChIKey, CAS, NOX, Exact Mass, Relative Mass, LogP, Solubility at pH 7.4, Intrinsic Solubility, Acid pKa, Basic pKa, Hydrophilic-lipophilic Balance, Topological Polar Surface Area, and Spectrum JCAMP.

Fonte: <https://sistematx.ufpb.br/management/admin/molecule>

2.3 Qualidade de uso de um Software

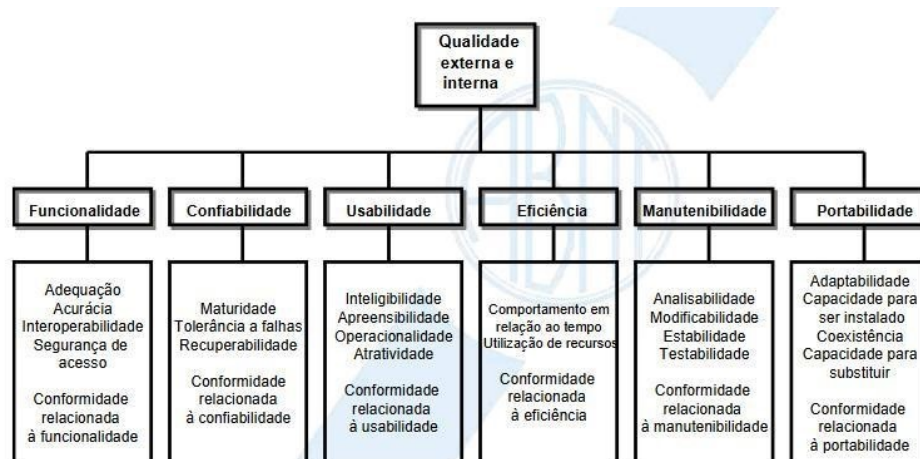
A maioria dos softwares existentes possuem interação com o usuário independentemente de o software ser um sistema web, desktop ou mobile. A interação pode ocorrer das mais diversas formas, como um clique do mouse na interface gráfica, a edição de um campo de texto utilizando o teclado, o toque em um componente da tela no smartphone, a captura de uma imagem com a câmera do dispositivo computacional, entre outros.

Todas essas interações podem, dependendo do conhecimento do usuário, serem mais fáceis ou mais complicadas. Em decorrência disso, que surge a necessidade de se ter um entendimento sobre a qualidade de uso de um software, e com isso, determinar se ele atende aos mais diversos públicos existentes. Portanto, o estudo da qualidade de uso

de um software, busca encontrar soluções para melhorar o uso por parte dos usuários do sistema, provendo interações mais adequadas para todos que o utilizam.

Como é possível observar na Figura 4, segundo as Normas Regulamentadoras (NR) existem seis características no modelo de qualidade, sendo elas: funcionalidade, confiabilidade, usabilidade, eficiência, manutenibilidade e portabilidade. Tais características e sub-características em conjunto determinam a competência do software através de mensurações. A usabilidade é um desses atributos de qualidade existentes que iremos abordar a seguir, ela se refere a qualidade externa do software, isto é, aos aspectos de utilização (relacionado a inteligibilidade e operacionalidade), ao aspecto de aprendizagem (relacionada a apreensibilidade) e ao aspecto de atratividade e satisfação do usuário [13].

Figura 4: Modelo de qualidade para qualidade externa e interna



Fonte: NBR ISO/IEC 9126

2.3.1 Usabilidade

Nos estudos da área de Interação Humano-Computador (IHC), a usabilidade é um critério da qualidade de uso de um software. Tal conceito se associa ao quão fácil é para o usuário aprender a utilizar o sistema, se ele precisa de ajuda externa, ou se ele consegue exercer tudo o que o sistema propõe de forma efetiva [9]. Além disso, dado um sistema e sua interface, compreender a satisfação do usuário em relação às operações realizadas no mesmo, isto é, se a experiência de uso é positiva ou negativa.

Com o intuito de promover uma regulamentação e padronização mais rigorosa de diversos campos, como a indústria e a tecnologia, foi criada a Organização Internacional para Padronização (ISO), de acordo com as normas da entidade e com o que está disposto no item ISO/IEC 9126, a usabilidade se refere ao esforço que é preciso realizar para conseguir executar determinada atividade no sistema, bem como a opinião pessoal de cada indivíduo que o utiliza [12].

2.3.1.1 Medidas de usabilidade

Para Jakob Nielsen existem cinco fatores de usabilidade para definir se determinado produto atende ou não ao que ele se propõe. São eles [9]:

- *Facilidade de aprendizado (learnability)*: Está relacionado ao quão descomplicado é para familiarizar-se com o sistema, independente do conhecimento do usuário, isto é, o quanto de tempo e esforço é preciso para o usuário utilizar a funcionalidade.
- *Facilidade de recordação (memorability)*: Normalmente, para executar operações iguais (como salvar, editar e deletar algo de um sistema) são utilizados ícones nos botões, que são comuns na maioria das aplicações. Isso ocorre, devido a já estarmos acostumados (na maioria dos casos) com aquele padrão. Assim, tal ação, irá demandar menos esforço cognitivo do usuário.
- *Eficiência (efficiency)*: Está relacionada ao tempo necessário para realizar determinada funcionalidade no sistema, isto é, o desempenho do usuário para concluir a atividade da forma mais ágil possível, dada a quantidade de etapas para executar a operação.
- *Segurança no uso (safety)*: Busca prover formas de recuperação de erros, como os botões de desfazer e refazer, o de cancelar uma ação e os modais para confirmação de operações que costumam evitar que operações críticas, como deletar algo, sejam executadas de maneira errônea pelo usuário.
- *Satisfação do usuário (satisfaction)*: Essa medida é baseada no ponto de vista de cada pessoa, dependendo das necessidades dos usuários, a satisfação em realizar determinada operação pode ser diferente para cada público (usuários experientes e inexperientes).

2.4 Métodos de Avaliação de Software

A avaliação de um sistema de software é uma atividade primordial para garantir a melhor qualidade de uso possível. Com ela é possível localizar falhas no sistema, dada a interação com o usuário através da interface, e diagnosticar casos que prejudiquem o fluxo de execução de determinada atividade ou funcionalidade que o sistema propõe e por conseguinte, atrapalhar a experiência de uso do usuário.

Considerando um contexto de uso específico, a avaliação permite verificar se o sistema realmente possibilita o usuário a atingir seu objetivo. É importante ressaltar que tais avaliações possuem maior eficácia quando são executadas por avaliadores que

não participaram das etapas de desenvolvimento do software, já que dessa forma, não possuíram o seu ponto de vista enviesado na análise [10].

Os métodos de avaliação de software podem ser classificados em três, sendo eles, o método de investigação, o método de observação de uso e o método de inspeção [10]. Normalmente, após identificar os problemas na interação e na interface de um software, eles são classificados dado seu grau de severidade.

2.4.1 Método de Avaliação através de Investigação

O método de avaliação através de investigação, ou inquiry, é uma abordagem da IHC que busca compreender a usabilidade do sistema através de questionários, entrevistas, análise de métricas, feedback do usuário, estudos e pesquisas. O objetivo é identificar problemas comuns [9], analisando as expectativas de uso sobre como o software deveria se comportar, revelando insights e informações importantes para descobrir problemas de interação.

2.4.2 Método de Avaliação através de Inspeção

O método de avaliação através de inspeção, ou método analítico, é uma abordagem na qual, normalmente, o usuário não está ativamente participando da atividade de avaliação, nesse caso, existe um avaliador que se coloca no lugar do usuário e desempenha a tarefa [11]. Esse método costuma ser mais rápido e barato, dessa forma, se o objetivo da avaliação for analisar toda a interface e julgar os problemas de IHC encontrados, esse é o método que deve ser utilizado.

2.4.2.1 Avaliação Heurística

A Avaliação Heurística representa uma das abordagens de avaliação por meio da inspeção. Este método foi inicialmente concebido por Jakob Nielsen e Rolf Molich, estabelecendo certos critérios para a avaliação da usabilidade. Foram então propostas as denominadas Heurísticas de Nielsen, que são um conjunto de 10 orientações (i.e heurísticas) de usabilidade que buscam delinear as qualidades que são desejáveis tanto na interação, quanto na interface dos sistemas [11].

1. Visibilidade de estado do sistema: O sistema deve fornecer aos usuários uma forma de mantê-los constantemente informados sobre determinada operação que está sendo realizada pelo mesmo. O objetivo primordial desse feedback imediato é para que o usuário não se sinta perdido ao realizar a tarefa. Exemplos: indicadores de progresso, etapas de um checkout de um pedido, entre outros.

2. Correspondência entre o sistema e o mundo real: O sistema deve apresentar uma linguagem de fácil compreensão para todas as diferentes categorias de usuários. Além disso, possuir referências do mundo real que são convenções para determinadas ações. Exemplos: o ícone da lixeira (que representa deletar algo), o ícone do disquete (que representava salvar algo, porém agora está obsoleto), entre outros.
3. Controle e liberdade do usuário: O sistema deve prover maneiras de desfazer e refazer as operações, de uma forma não custosa ao usuário. Tal ação é importante, pois, caso o usuário realize alguma operação por engano, ele terá a possibilidade de voltar ao seu estado anterior. Exemplos: desfazer a exclusão acidental de algum item, voltar para uma versão anterior de um documento, entre outros.
4. Consistência e padronização: O sistema deve ter mecanismos de padronização e uniformidade próprias ou já existentes para evitar dúvidas em relação as operações realizadas. Exemplos: padrão visual (de texto, cor) de um botão salvar e deletar, ícones comuns nas mais diversas aplicações, entre outros.
5. Reconhecimento em vez de memorização: Em um sistema, a praticidade e a visibilidade são primordiais, portanto, é mais viável o usuário reconhecer padrões no sistema do que memorizar. Exemplos: menus de navegação e barra de busca sempre no topo da página, autocomplete baseado no histórico de pesquisa de um navegador, hovers para lembrar aos usuários as ações de certos botões, entre outros.
6. Flexibilidade e eficiência de uso: É muito importante o sistema atender os diversos tipos de usuários, desde os mais leigos aos mais experientes, mantendo, assim, opções flexíveis para a escolha do usuário. Dessa forma, é possível oferecer métodos para realizar as tarefas de forma mais rápida e eficaz. Exemplos: comandos de atalhos no teclado (Ctrl + C, Ctrl + V, Ctrl + X), opções de play, pause, avanço e retrocesso de um vídeo utilizando o teclado, entre outros.
7. Projeto estético e minimalista: Quanto mais simples e objetiva a interface for, mais fácil será para o usuário executar o que foi proposto a ele com o sistema. Informações irrelevantes somente atrapalham a experiência do usuário e o distanciam de executar a tarefa principal. Exemplos: uso de cores, fontes e espaçamento apropriados, interface com foco específico e especializado.
8. Prevenção de erros: Busca evitar que o usuário cometa erros, fornecendo formas de prevenção. Por exemplo, modais de confirmação de ações (modal de confirmação de exclusão de um elemento, modal indicando que o usuário não salvou ou finalizou uma tarefa), o ato de salvar um texto rascunho, entre outros.
9. Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperarem de erros: O sistema deve fornecer ao usuário mensagens de erros claras e compreensíveis. Deve-

se evitar completamente, mensagens vagas, mensagens com códigos e mensagens com erros de banco de dados. Exemplos: mensagens de erro no preenchimento incorreto de formulários, mensagem de erro ao realizar login com a senha errada, entre outros.

10. Ajuda e documentação: Deve existir uma documentação simples e completa focada em auxiliar o usuário a executar determinada tarefa. Exemplos: Tutoriais, seções de ajuda com as dúvidas frequentes (Frequently Asked Questions - FAQs), e o passo a passo de execução, campos pouco comuns em formulários com tooltips (Ex.: imagem de cartão de crédito com a área do código de segurança ressaltada), suporte técnico, entre outros.

Para Jakob Nielsen, uma boa avaliação heurística deve ter entre três e cinco avaliadores e pode ser julgada em uma escala de severidade que avalia os fatores de frequência (na qual o problema ocorre), impacto (na conclusão do objetivo do sistema) e persistência (se ocorre repetidas vezes) [11].

Logo, compreender a gravidade de um problema em uma AH é fundamental para analisar qual a prioridade e dificuldade em questão, e assim conseguir definir o escopo de custo na sua resolução. Observe na Tabela 1, a definição de escala de severidade proposta por Nielsen.

Tabela 1: Escala de Severidade

Gravidade do problema	Prioridade	Justificativa
1 - cosmético	inexistente	funciona e os usuários não estão insatisfeitos. Deve ser resolvido se sobrar tempo.
2 - pequeno	baixa	funciona, mas os usuários podem ficar insatisfeitos.
3 - grande	alta	funciona, mas os usuários estão insatisfeitos.
4 - catastrófico	extrema	muitos usuários não conseguem atingir seus objetivos.

Além disso, a tabela de viabilidade é uma ferramenta essencial para avaliar a possibilidade de sucesso ou fracasso de uma alteração, dada as conclusões do relato de uma AH na análise de usabilidade de um projeto, temos que, para mitigar os riscos de inviabilidade na solução do problema, também se faz necessário analisar o aspecto de viabilidade da alteração. Logo, para definir o escopo de viabilidade, temos a Tabela de Viabilidade (Tabela 2).

Tabela 2: Tabela de Viabilidade

Viabilidade do problema	Descrição
totalmente viável	a alteração é trivial, de fácil adaptação
viável	a alteração é realizável, mas pode exigir algum esforço adicional
inviável	a alteração não é realizável, mas pode ser reconsiderada com mudanças significativas
totalmente inviável	a alteração é impraticável e não pode ser realizada nas condições atuais

2.4.3 Método de Avaliação através de Observação

Diferentemente do método de inspeção que busca prever problemas que podem acontecer em determinado momento, o método de avaliação através de observação identifica problemas concretos que já acontecem na interface. Assim, os cenários que possuem entraves identificados, representam dados reais de uso que os usuários enfrentam [11].

2.4.3.1 Teste de Usabilidade

Os testes de usabilidade buscam avaliar a experiência do usuário alvo através de medições. Assim, dado um conjunto de atividades, o usuário irá preferencialmente executar o teste em um ambiente supervisionado. Dessa forma, será possível medir dados de desempenho, opiniões pessoais acerca do sistema (se ele faz o que se propõe de forma adequada), suas percepções e emoções ao realizar a tarefa.

2.4.3.1.1 Termo de consentimento livre e esclarecido

Na IHC, o termo de consentimento livre e esclarecido (TCLE) é um documento que precisa ser aceito pelo usuário avaliador antes de se iniciar o processo de teste. Nele, o usuário assegura que os dados referentes a pesquisa podem e devem ser utilizados a favor de melhorar o sistema. É importante ressaltar aspectos de transparência do estudo e dos dados coletados, assim como, a proteção da privacidade do usuário avaliador. O TCLE deve apresentar as informações de maneira clara e compreensível [14].

2.4.3.1.2 Questionário Pré-Teste

Em um teste de usabilidade, também é necessário definir o questionário pré-teste, ele, por sua vez, tem como propósito adquirir informações acerca do usuário e do sistema

para verificar se suas características pessoais, suas experiências prévias com tecnologia [10], seu estado físico ou seu estado emocional (como cansaço, preocupação, fome), podem ou não impactar no processo de teste durante a execução do experimento.

2.4.3.1.3 Questionário Pós-Teste

Já o questionário pós-teste tem como intuito obter informações acerca da experiência de uso após a execução do experimento [10], isto é, ele busca adquirir os insights sobre a usabilidade do sistema, se diante das tarefas testadas, ele faz o que propõe (sua utilidade) e se a qualidade na resolução das tarefas é eficaz.

2.4.3.1.4 Self-Assessment Manikin

O Manequim de Autoavaliação ou Self-Assessment Manikin (SAM) é uma técnica de avaliação que utiliza imagens para entender como os usuários avaliadores se sentem ao realizar determinadas atividades propostas. Essa técnica busca medir a inclinação emocional da pessoa no momento através de três escalas: prazer, excitação e dominância [15]. Ela foi criado por Bradley e Lang em 1994, baseada no estudo de escalas de diferencial semântico de Mehrabian e Russell em 1974. Tal estudo, é descrito no livro "An Approach to Environmental Psychology", este por sua vez, explora a psicologia relacionada aos estímulos ambientais e o comportamento gerado a partir desses estímulos [16]. Assim, o estudo busca examinar como o ambiente ao nosso redor impacta o nosso comportamento e as nossas emoções.

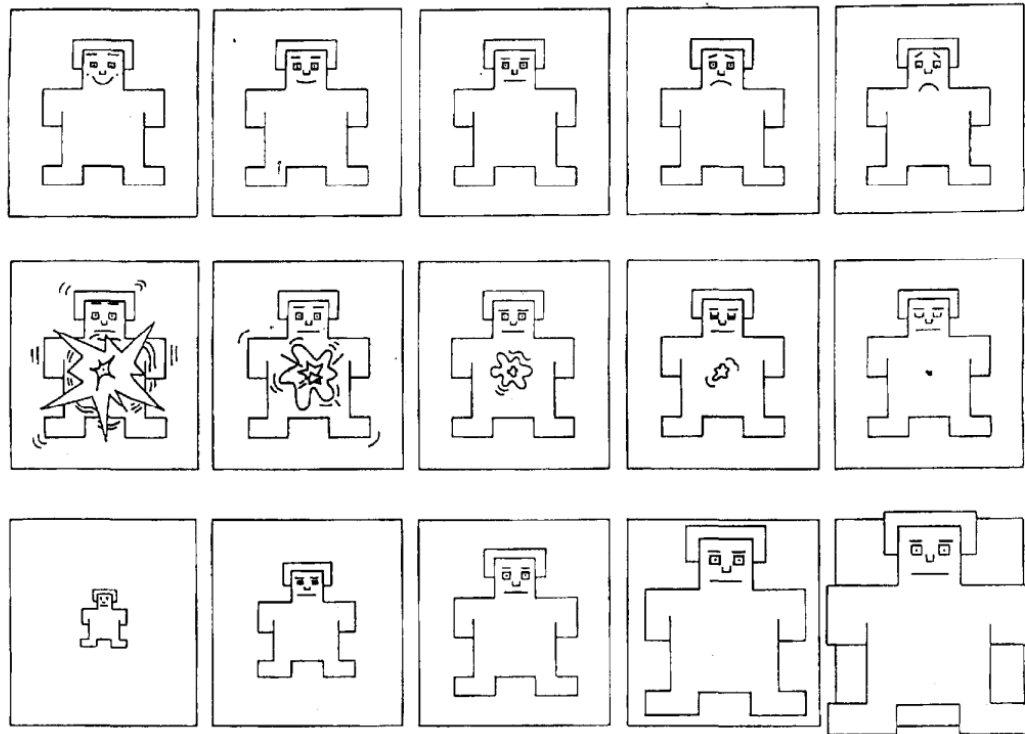
Para Lang, uma resposta emocional pode ser medida com base em uma generalização do comportamento humano, onde as reações afetivas são medidas de modo a representar as três escalas citadas anteriormente baseadas nos sentimentos expressos, nas respostas corporais e nas ações comportamentais. Logo, o SAM busca determinar a experiência subjetiva da emoção associada.

Originalmente, o artefato SAM foi criado como sendo um programa de computador, porém, mais tarde, foi ampliado por Lang para uma versão de papel e caneta (Figura 5) com o intuito de torná-lo o mais viável possível para ser utilizado em grandes experimentos sociais. Como é possível observar, ainda na Figura 5, o SAM varia de agradável a desagradável na escala prazer (figura sorridente e feliz a figura carrancuda e infeliz - topo), entre ativo e calmo na escala excitação (figura excitada e de olhos arregalados a figura relaxada e sonolenta - meio) e entre sem controle e com controle total na escala de dominância (figura pequena e figura grande, onde a figura grande representa o máximo de controle da situação - baixo).

Em sua pesquisa Lang destaca que o SAM provoca um julgamento mais consistente, uma vez que as figuras utilizadas para classificação são semelhantes ao ser humano. Isso,

o torna mais intuitivo para os usuários facilitando e melhorando a precisão das avaliações de softwares.

Figura 5: Mensuração da emoção



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51

2.4.3.1.5 System Usability Scale

De acordo com a ISO 9241 (parte 11) não existe nenhuma propriedade específica que se traduza em usabilidade. A usabilidade é quando algo é utilizável dentro de um contexto apropriado [12]. Essa adequação se refere ao contexto da tarefa que está sendo realizada, isto é, o ambiente, as experiências anteriores, tudo pode mudar dependendo da circunstância em questão dado um cenário e situações diferentes [20], algo que era útil antes pode não ser tão mais útil em outro momento (mais moderno), ou seja, a adequação também varia conforme o tempo.

Para John Brooke, a usabilidade depende de um contexto, porém dada a necessidade de um sistema de avaliação de baixo custo que fosse rápido e eficaz para determiná-la e medi-la em termos gerais, ele criou o SUS. O System Usability Scale (SUS) é uma escala utilizada para medir a usabilidade de um sistema ou produto, e assim analisar a facilidade de uso do mesmo [19].

Em um contexto industrial normalmente não é viável realizar uma análise minuciosa de métricas para avaliar a usabilidade de um produto, já que o esforço necessário

para realizá-la e o custo-benefício associado a ela não seriam compatíveis. Por isso, uma ferramenta capaz de definir uma indicação geral do nível de usabilidade de um sistema é muito útil para evitar esforços e despesas desnecessárias [19]. O SUS foi então concebido para suprir essa necessidade de forma simples e viável.

O SUS utiliza a escala Likert. A Escala Likert, por sua vez, foi criada por Rensis Likert na década de 1930 e foi introduzida no seu artigo "A Technique for the Measurement of Attitudes" (no português, Uma técnica para medição de atitudes). Ela utiliza conceitos de estatística e psicologia para tentar tratar aspectos qualitativos (como o do comportamento humano), em aspectos quantitativos [17]. Dessa forma, seu objetivo é conseguir extrair insights qualitativos, isto é, insights que buscam compreender as complexidades subjetivas dos indivíduos e seus comportamentos, através de perguntas formuladas de maneira quantitativa. Essa escala é muito utilizada em pesquisas de opinião e satisfação para analisar as diferentes variações de intensidade relacionadas ao quão contente o cliente está com o resultado produzido pelo produto avaliado.

O SUS busca apresentar ao avaliador afirmações com as quais ele pode ativamente concordar com veemência ou discordar [18]. Dessa forma, ela utiliza a escala original de cinco pontos de Likert para avaliar o grau de concordância (observação: a escala pode variar de 5 a 7 pontos).

1. Completamente positivo (++)
2. Parcialmente positivo (+)
3. Neutro (+-)
4. Parcialmente negativo (-)
5. Completamente negativo (-)

O SUS foi construído buscando cobrir uma ampla variedade de aspectos de usabilidade, entre eles, frequência de uso, suporte, treinamento e complexidade [19]. Essa escala é geralmente utilizada no questionário pós-teste para obter insights sobre a utilização do sistema analisado.

A versão originalmente proposta por John Brooke, chamada por ele de SUS Clássico, possui em sua totalidade dez questões que alternam entre uma forte concordância e uma forte discordância. Elas estão divididas igualmente em cinco questões cada. Sendo assim, temos 5 questões onde o usuário teria que marcar forte concordância e 5 questões onde o teria que marcar forte discordância. Se isso ocorresse, seria considerado o alcance máximo da pontuação do SUS para analisar a usabilidade. O motivo das questões estarem apresentadas de forma alternada no questionário, se dá para tentar evitar enviesar

as respostas, já que ao alternar entre questões positivas e negativas, o usuário precisará necessariamente ler cada afirmação com um certo esforço cognitivo [20].

Observe abaixo, a descrição de alguns dos aspectos analisados nas questões:

- A questão de frequência de uso busca analisar se os usuários voltariam a utilizar o sistema, dado o que ele oferece no momento.
- As questões que envolvem suporte tem o intuito de verificar e garantir se os usuários avaliadores do sistema, ou os usuários finais do sistema, possuem formas de obter assistência na realização da atividade que o foi proposta.
- As questões de treinamento procuram verificar a capacitação dos usuários para realizar as atividades, isto é, se eles precisaram de ajuda ou não na realização das mesmas.
- Por fim, a complexidade procura identificar aspectos onde o usuário tem dificuldade na utilização da interface do software e que estão tornando sua experiência mais complicada.

Após a aplicação do SUS (Figura 6), a pontuação pode ser obtida. Ela varia entre 0 a 100 e a quantidade de pontos ideal no mínimo possível para ser considerado “Ok”, seria de 68 pontos, que correspondem a um percentil de 50%. Uma pontuação de 68 pontos no SUS, é considerada como sendo a média. Se o produto ou sistema analisado recebe uma pontuação menor que essa, provavelmente, possui problemas de usabilidade. Para cada resposta do usuário avaliador será atribuído um valor entre 0 a 4 [20], o cálculo por sua vez, será realizado conforme é descrito abaixo:

1. Primeiramente, será calculada a pontuação individual de cada questão, dada a resposta do usuário. Dessa forma, temos que [19]:
 - (a) para as perguntas ímpares, isto é, as questões 1, 3, 5, 7 e 9, o valor atribuído é igual a resposta individual do usuário para a questão menos um.
 - (b) para as perguntas pares, isto é, as questões 2, 4, 6, 8 e 10, o valor atribuído é igual a cinco menos a resposta individual do usuário para a questão.
2. Por fim, para calcular o valor global do SUS é realizada a soma das pontuações obtidas no item 1, e então essa soma é multiplicada por 2,5.

Na realização de uma avaliação SUS para ter um resultado que chegue em um valor de conclusão “Correto”, é necessário apenas uma pequena parcela de usuários, entre 8 a 12, para ser exato. Considerando uma amostra de 8 a 10 usuários avaliadores teremos

Figura 6: System Usability Scale

	Strongly disagree						Strongly agree
1. I think that I would like to use this system frequently	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
2. I found the system unnecessarily complex	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
3. I thought the system was easy to use	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
4. I think that I would need the support of a technical person to be able to use this system	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
5. I found the various functions in this system were well integrated	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
6. I thought there was too much inconsistency in this system	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
7. I would imagine that most people would learn to use this system very quickly	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
8. I found the system very cumbersome to use	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
9. I felt very confident using the system	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		
10. I needed to learn a lot of things before I could get going with this system	☐	☐	☐	☐	☐		
	1	2	3	4	5		

Fonte: BROOKE, 1996, pp.189-194

uma porcentagem entre 70+% e 80% de conclusão “correta”, e entre 10 a 12 usuários, uma porcentagem entre 80% e 100% de conclusão “correta” [20]. É importante destacar também que com base na retrospectiva de uso do SUS salientada por Sauro, o SUS é confiável e válido, mas não pode ser considerado diagnóstico [20].

No presente trabalho, o SUS serviu como base para a elaboração do questionário pós-teste. Ele foi adaptado e personalizado para se adequar melhor ao contexto específico do sistema em questão. No entanto, em vez de usar a abordagem quantitativa tradicional do SUS, o questionário foi modificado para coletar informações qualitativas.

3 METODOLOGIA

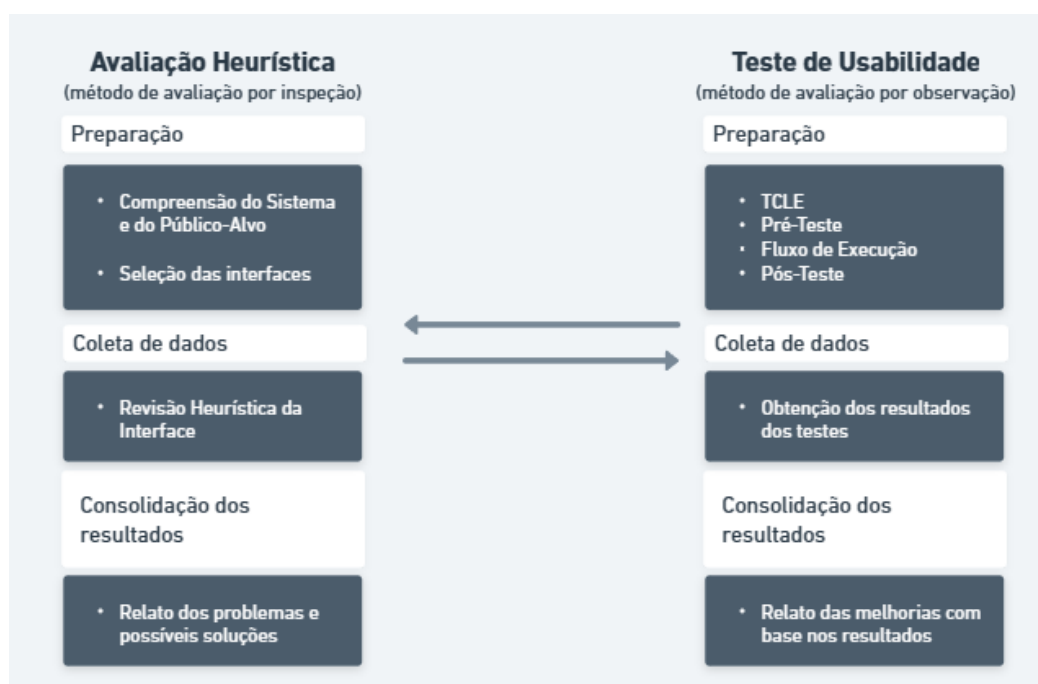
O intuito central deste trabalho é realizar um estudo de usabilidade da ferramenta web Sistemax em busca de melhorar o sistema e aprimorar a experiência do usuário, reduzindo erros e problemas de design que podem afetar os usuários na realização das tarefas e explorando formas de proporcionar um uso mais eficaz e eficiente para os mesmos.

Dessa forma, dado os métodos de avaliação de software discutidos anteriormente, através de inspeção, foi realizada a avaliação heurística do sistema, onde, dadas as 10 heurísticas de Jakob Nielsen foram analisadas cada infração, de modo a classificar a gravidade do problema e definir uma recomendação de solução. Além disso, através do método de observação, também foi realizado o teste de usabilidade aplicando os questionários pré-teste e pós-teste e realizando o experimento de usabilidade com os usuários avaliadores utilizando o sistema.

3.1 A avaliação de software

Com o objetivo de realizar a avaliação de usabilidade do software no sistema especificado, a ferramenta web de quimioinformática Sistemax, foram utilizados a avaliação heurística e o teste de usabilidade para gerar resultados significativos referentes ao estudo de caso. Assim, unindo os dois métodos, de inspeção e observação para realizar uma avaliação mais completa da qualidade de uso do software em questão. Consulte a Figura 7 para visualizar o esquema resumido da metodologia.

Figura 7: Estrutura da metodologia



Fonte: Elaborado pela Autora

3.1.1 Avaliação Heurística

Os métodos de avaliação de IHC abrangem um conjunto de etapas essenciais para a condução de uma avaliação completa e eficaz. Essas atividades básicas incluem a preparação, a coleta de dados e a interpretação e consolidação dos resultados. Para realizar a avaliação heurística, algumas tarefas, que são definidas de forma padrão para cada atividade, foram seguidas e serão descritas abaixo. É importante destacar que, cada etapa foi conduzida de maneira independente, uma vez que ao longo da elaboração desta monografia houve apenas um responsável pela avaliação heurística, que foi a própria autora.

3.1.1.1 Preparação

Primeiramente, os avaliadores de usabilidade do sistema, aqueles que realizaram a avaliação heurística, se instruíram sobre o sistema, isto é, estudaram os usuários alvos da qual a ferramenta se destina a ser utilizada para compreendê-lo melhor e obter maior entendimento do sistema analisado. O avaliador de usabilidade deve conhecer os perfis dos usuários (as personas), seus objetivos e as atividades para com o sistema, logo, foi realizado o aprofundamento nesses tópicos em questão. Além disso, também nessa etapa, foram selecionadas as partes da interfaces a serem avaliadas.

3.1.1.2 Coleta de dados

Durante essa etapa, cada avaliador do sistema inspecionou as interfaces selecionadas na etapa anterior da forma como preferiu, encadeada por interface analisada ou por heurística analisada, ou seja, o avaliador poderia analisar a primeira interface e procurar a infração dentre as 10 heurísticas, ou, analisar a primeira interface procurando problemas apenas na heurística 1 e depois nas demais heurísticas, e assim por diante.

Ao inspecionar as interfaces em busca de violações, os avaliadores de usabilidade listaram os problemas encontrados, indicando o local da violação, o problema em questão, a heurística violada, a gravidade do problema, a recomendação de solução e a análise de viabilidade para resolver o problema.

3.1.1.3 Consolidação dos resultados

Por fim, nesta etapa, todos os avaliadores do sistema se uniram para revisar os problemas encontrados e entrar em consenso sobre o que foi definido na etapa anterior, unificando suas opiniões (subjetivas) em um relatório geral dos relatos dos resultados.

3.1.2 Teste de usabilidade

Tais etapas também se fazem presentes no desenvolvimento do teste de usabilidade, elas constituem um ciclo de organização preparativa e sequencial para o estudo de caso. Com o intuito de obter uma visão geral sobre a usabilidade do sistema, primeiro, foi aplicado o pré-teste para adquirir informações pessoais acerca dos usuários que participaram do teste, informações essas, que poderiam influenciar nas respostas do mesmo. Além disso, foi utilizada uma adaptação do SUS com o SAM para criar o questionário pós-teste. Esse questionário visa focar especificamente na obtenção de informações sobre a necessidade de suporte ou treinamento, dificuldades específicas e complexidade de uso, além de realizar a avaliação subjetiva dada as percepções do usuário após a realização do experimento. O teste de usabilidade foi realizado seguindo as tarefas básicas definidas abaixo.

3.1.2.1 Preparação

Foram definidos os questionário de usabilidade pré-teste e pós-teste, o termo de consentimento livre e esclarecido (TCLE), as tarefas a serem executadas e o seu fluxo de execução. Esse fluxo, apresenta as instruções para orientar os participantes sobre as tarefas a serem realizadas, ele deve guiar os usuários de forma clara e minimamente detalhada para que os mesmo consigam executar a tarefa que lhe foi proposta.

3.1.2.2 Coleta de dados

Nesta etapa, foi realizada o registo dos dados das experiências reais vivenciadas pelos usuários. O experimento do teste foi efetuado, obtendo-se as respostas dos testes, os questionários pré-teste e pós-teste, referentes as funcionalidades do sistema que foram definidas para serem analisadas.

3.1.2.3 Consolidação dos resultados

Por fim, nesta etapa, foi realizada a interpretação e análise dos dados, os avaliadores de usabilidade com base nos resultados obtidos anteriormente durante a coleta, identificaram os problemas nas experiências dos usuários observando as recorrências no relato dos problemas e propuseram melhorias para o projeto.

4 SISTEMATX

Neste capítulo, será introduzido o objeto de estudo desta monografia. Serão apresentados os resultados da avaliação heurística realizada pelos avaliadores com base nas diretrizes vistas anteriormente no capítulo de “Conceitos Gerais e Revisão da Literatura”, para identificar possíveis problemas de usabilidade do sistema. Além disso, também será realizado o teste de usabilidade para quantificar a usabilidade do sistema.

A ferramenta web analisada, o SistematiX, já se encontra no ambiente de produção desde 2016, dessa forma, com esse estudo será possível analisar pontos que necessitam de melhoria, contribuindo para melhor adequação de usabilidade dos usuários já existentes e que utilizam da ferramenta para seus trabalhos de pesquisa na área de quimioinformática.

4.1 Compreensão do Sistema e do Público-Alvo

Nesta seção, procederemos à realização de uma análise dos objetivos e do perfil dos usuários do sistema, com o intuito de detalhar as necessidades que a ferramenta se propõe a resolver por meio do software desenvolvido. A compreensão abrangente desses aspectos desempenha um papel crucial no desenvolvimento do estudo de caso de usabilidade, para conhecer às demandas dos usuários, bem como os potenciais conflitos e aspirações que eles podem ter em relação ao sistema.

Considerando que o sistema já está em uso e dada a necessidade de aprimorá-lo através de manutenções recorrentes. Pretendendo atender tanto aos usuários antigos do sistema, que já possuem um certo domínio no nicho específico da quimioinformática para produtos naturais, quanto aos novos usuários, que são menos experientes e não foram considerados anteriormente, algumas ponderações são necessárias. Para adaptar as mudanças necessárias a esses cenários de uso, como parte desse processo, adotaremos a estratégia de criação de personas, que consiste em representações fictícias de tipos de usuários construídas com base em dados empíricos e teóricos. Essas personas servirão como modelos representativos dos diferentes perfis de usuários. Dessa forma, a seção irá apresentar uma análise do perfil dos usuários do sistema e detalhar os problemas que a ferramenta se propõe a solucionar com o software.

O SistematiX é uma ferramenta especializada em quimioinformática voltada para o campo dos produtos naturais. Sua principal função é atuar como um recurso fundamental no suporte à pesquisa nessa área, com foco na aquisição, armazenamento e gerenciamento de dados relativos aos experimentos de coleta e análise de extratos de metabólitos secundários. O sistema se dedica a fornecer uma solução eficaz e ágil para a correta catalogação e preservação dos dados oriundos desses estudos, facilitando assim, o processo de pesquisa neste nicho e a obtenção das informações científicas envolvidas.

Analisando alguns relatórios de dados obtidos pelo Google Analytics foi possível observar alguns aspectos importantes sobre o uso do sistema analisado, o Sistemax. Como é possível observar na Figura 8, dadas as 3 categorias de exibição da interface do sistema, sendo elas, desktop, mobile e tablet, temos que a grande maioria dos usuários do Sistemax, utilizam o desktop, para acessar a ferramenta web.

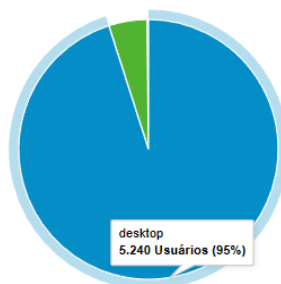
Figura 8: Gráfico que ilustra a distribuição de dispositivos que acessam o site

Categoria do dispositivo ?	Aquisição			Comportamento		
	Usuários ? ↓	Novos usuários ?	Sessões ?	Taxa de rejeição ?	Páginas / sessão ?	Duração média da sessão ?
	5.510 Porcentagem do total: 100,00% (5.510)	5.530 Porcentagem do total: 100,07% (5.526)	7.941 Porcentagem do total: 100,00% (7.941)	58,99% Média de visualizações: 58,99% (0,00%)	4,96 Média de visualizações: 4,96 (0,00%)	00:04:54 Média de visualizações: 00:04:54 (0,00%)
1. desktop	5.240 (95,05%)	5.255 (95,03%)	7.447 (93,78%)	59,14%	5,13	00:05:05
2. mobile	263 (4,77%)	265 (4,79%)	479 (6,03%)	56,58%	2,45	00:02:09
3. tablet	10 (0,18%)	10 (0,18%)	15 (0,19%)	60,00%	2,40	00:01:39

Fonte: Relatório de Análise do Google Analytics do site Sistemax (2020 - 2023)

As Figuras 8, 9, 10 consideram os dados de acesso à plataforma do ano de 2020 a 2023, detalhando informações sobre o público alvo do sistema em porcentagem e sobre o comportamento dos usuários no site.

Figura 9: Gráfico da porcentagem de usuários Desktop



Fonte: Relatório de Análise do Google Analytics do site Sistemax (2020 - 2023)

É importante também destacarmos alguns fatos sobre as páginas mais acessadas do site, tendo em consideração que para realizar a melhoria de usabilidade, identificar as páginas mais acessadas é de supra importância para a tomada de decisões estratégicas relacionadas a melhoria do sistema e a definição das prioridades nas mudanças a serem realizadas. Assim como, analisar aspectos que podem melhorar o desempenho do sistema garantindo que o site continue funcionando de maneira eficiente e evitando lentidões.

Como é possível observar na Figura 10, a página mais acessada pelos usuários do sistema é a página inicial, onde são realizadas as pesquisas. Isso faz bastante sentido já

que a maioria dos usuários busca obter acesso aos dados cadastrados no sistema. É importante destacar também, que a área de administrador é terceira mais acessada, perdendo apenas para a “Search Results”, que é onde são listadas os metabólitos obtidos durante as pesquisas no sistema. Dessa forma, o enfoque principal da análise de usabilidade e da perspectiva para a resolução dos problemas, deve considerar esse fato.

Figura 10: Relação das páginas mais acessadas do SistematoX

Título da página	Visualizações de página	Porcentagem do Visualizações de página
1. Sistemato X - Database of secondary metabolites	15.106	 38,34%
2. Search Results Sistemato X	10.750	 27,29%
3. Data Management Sistemato X	5.701	 14,47%
4. Error Sistemato X	1.342	 3,41%
5. About Sistemato X	722	 1,83%
6. Team Sistemato X	634	 1,61%
7. Contact Sistemato X	329	 0,84%
8. COSTUNOLIDE Sistemato X	258	 0,65%
9. TELEKIN Sistemato X	178	 0,45%
10. 123 Sistemato X	136	 0,35%

Fonte: Relatório de Análise do Google Analytics do site SistematoX (2020 - 2023)

No que diz respeito à modelagem dos usuários, a incorporação da análise de casos extremos é uma prática importante para garantir o entendimento das necessidades e limitações de todos os tipos de usuários. Neste caso, optamos por fazer uma distinção entre dois principais grupos de usuários: os pesquisadores de produtos naturais e os estudantes de química.

- No primeiro grupo temos os pesquisadores, profissionais experientes e altamente qualificados na área de produtos naturais. Mesmo especialistas, por mais capacitados que sejam, podem enfrentar desafios ao usar a plataforma. Eles utilizam a plataforma como uma ferramenta essencial em suas investigações permitindo-lhes acessar informações cruciais relacionadas aos metabólitos, suas estruturas químicas e dados de pesquisa anteriores de forma eficaz e eficiente.
- Já no segundo grupo, encontramos os estudantes que podem incluir estudantes de graduação em química e áreas afins. Para eles, a plataforma desempenha um papel importante no suporte à aprendizagem e pesquisa, oferecendo uma fonte valiosa de informações para suas atividades acadêmicas, ajudando-os a compreender e explorar os metabólitos e suas estruturas químicas de maneira mais acessível.

Essa segmentação dos usuários nos permite adaptar e otimizar a plataforma para

Tabela 3: Modelagem de usuários

Usuários	Descrição do perfil
Estudantes	Não conhecem muito a ferramenta e precisam de ajuda para utilizá-la
Pesquisadores	Conhecem a ferramenta e conseguem, na maioria dos casos, se virar para utilizá-la

atender às necessidades específicas de cada grupo garantindo uma experiência mais relevante e eficaz para ambos os perfis de usuários. Observe o Quadro 3 para verificar a descrição de perfil desses dois tipos extremos de usuários. Agora, para ampliar a definição do perfil do público alvo, foram definidas duas personas (Quadros 1 e 2), sendo elas, a primeira um pesquisador da área, chamado André Gonzalez, e a segunda, um estudante chamado Lucas Rodrigues.

Quadro 1: Preparação - Criação das Personas: Persona 1

Persona 1	Descrição
Pesquisador; André Gonzalez; 45 anos.	• já é acostumado em utilizar ferramentas que fazem gerenciamento de banco de dados de estruturas químicas • busca novas formas que o auxiliem no seu trabalho de pesquisador de produtos naturais • tem um bom conhecimento em informática

Quadro 2: Preparação - Criação das Personas: Persona 2

Persona 2	Descrição
Estudante; Lucas Rodrigues; 20 anos.	• participa de um projeto de extensão no qual saber se tal composto é conhecido ou não, é fundamental para o desenvolvimento da pesquisa • é sua primeira experiência com esse tipo de ferramenta • tem um bom conhecimento em informática

Dados os problemas que esta ferramenta foi concebida para resolver, temos que estes usuários alvos estão em busca de maneiras de otimizar e simplificar o acesso a essas informações. Dessa forma, o objetivo fundamental deste sistema é viabilizar o armazenamento preciso e sistemático dos dados referentes aos metabólitos descobertos, facilitar o trabalho e a colaboração de toda a comunidade científica, almejando tornar essas informações prontamente acessíveis para contribuir com o avanço do conhecimento na área de produtos naturais.

4.2 Revisão Heurística da Interface

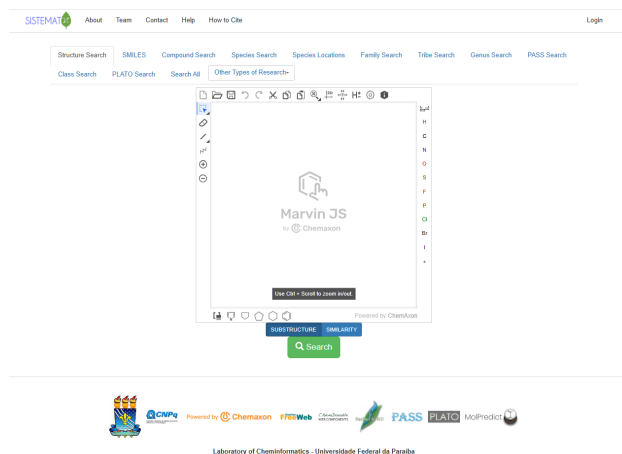
De modo geral, o usuário pode realizar diversas pesquisas, sendo elas, pesquisa por estrutura, *SMILES*, nome do composto, por classe, espécie, família, tribo e gênero da molécula, além de realizar pesquisas por filtros específicos como o nox, a massa exata, entre outros. Na visualização dos dados de metabólitos secundários, os usuários têm acesso a informações detalhadas relacionadas à classificação taxonômica das plantas, indo desde a categoria de família até a de espécie. Além disso, são fornecidas as coordenadas geográficas relacionadas ao Sistema de Posicionamento Global (GPS) com o intuito de destacar os locais de isolamento das espécies responsáveis por esses compostos. Além disso, na parte de gerenciamento, um usuário administrador pode por sua vez alterar todas as informações referentes.

No que diz respeito às partes das interfaces que foram selecionadas para serem analisadas e avaliadas pelos critérios de usabilidade das heurísticas de Jakob Nielsen, temos que, para elencar os problemas encontrados durante a avaliação heurística, as seções foram subdivididas em diferentes subtópicos, como é possível observar abaixo. A avaliação heurística foi realizada por somente uma pessoa, a autora do presente trabalho.

4.2.1 Página Inicial

Atualmente, na página inicial do SistematoX (Figura 11) são apresentadas todas as opções de pesquisa disponíveis por meio da ferramenta, no entanto, a disposição das abas no momento não segue uma organização clara e intuitiva (Figura 12).

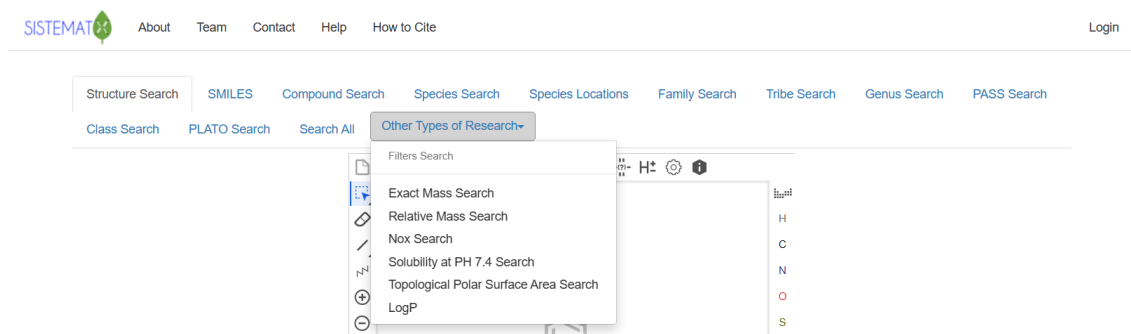
Figura 11: Captura de tela da página inicial do SistematoX



Fonte: <https://sistematox.ufpb.br>

Com o objetivo de aprimorar a experiência do usuário e promover um design mais minimalista e eficiente, é necessário reorganizar e simplificar a forma como as abas são apresentadas e agrupadas, como é especificado no Quadro 3.

Figura 12: Captura de tela da página inicial com enfoque nas guias/tabs



Fonte: <https://sistematox.ufpb.br>

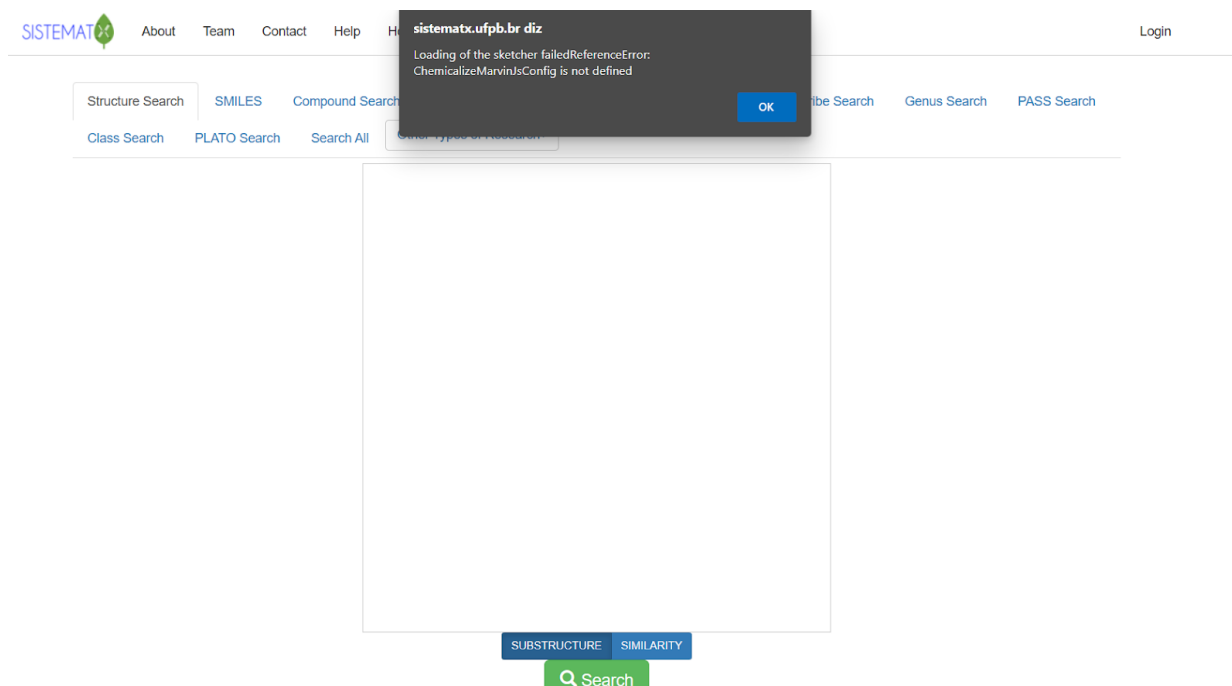
Quadro 3: AH referente a Figura 12

Heurística Violada	– 7ª Heurística: Projeto estético e minimalista
Local	Nas abas de pesquisa da página inicial
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Agrupar as abas de forma mais lógica e intuitiva, separando-as em categorias e priorizando os tipos de pesquisa mais utilizados.
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.1.1 Pesquisa por Estrutura

Para realizar a pesquisa por estrutura, o sistema faz uso de uma ferramenta externa da empresa de desenvolvimento de software de quimioinformática denominada Chemaxon. A ferramenta utilizada, se chama Marvin JS, e com ela é possível desenhar a estrutura química que será pesquisada no sistema. Quando a ferramenta fica inacessível por razões externas, ao usuário tentar acessar o site, o erro exibido na Figura 13 aparece.

Figura 13: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por estrutura



Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

Ao realizar a análise heurística deste alerta foi possível perceber que a partir dela podemos extrair duas possíveis violações, conforme especificadas do Quadro 4. Esta

análise destaca formas em que o alerta pode ser otimizado para aprimorar a usabilidade, tornando-o mais eficaz na prevenção de erros e, ou, no auxílio aos usuários para conseguirem identificar melhor o erro em questão e se recuperarem do mesmo.

Quadro 4: AH referente a Figura 13

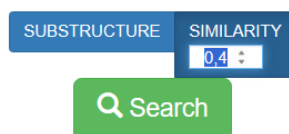
Heurística Violada	– 8^a Heurística: Prevenção de erros – 9^a Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperarem de erros
Local	Na ferramenta externa de desenho de estrutura na página inicial
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Fornecer ao usuário uma comunicação mais precisa acerca da indisponibilidade da ferramenta, removendo jargões de desenvolvimento de software. Além disso, também é possível considerar a possibilidade de remover a funcionalidade de pesquisa que atualmente se encontra inacessível, e, ou, alertar ao usuário sobre outro método de pesquisa no qual se pode chegar ao mesmo resultado (de obter as informações da molécula).
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.1.1.1 Através de similaridade

Quando o usuário, através da interface, altera o valor da similaridade pelo input numérico utilizando as setas, observadas na Figura 14, ele pode modificar seu valor de 0.1 até 1, que seria quão mais próxima a estrutura molecular do composto dos resultados teriam de similaridade com a estrutura inserida na ferramenta de desenho. Porém, quando o usuário altera esse valor manualmente, ele consegue inserir valores negativos e acima de 1, observe a Figura 15. Portanto, a situação descrita destaca um erro funcional no sistema, devido a uma falha no desenvolvimento e nos testes, configurando uma violação da heurística de “Prevenção de Erros” no design do sistema, neste caso, ao permitir que o usuário insira um valor de similaridade maior que 1, o sistema não está prevenindo um erro lógico, já que valores de similaridade válidos não podem exceder 1.

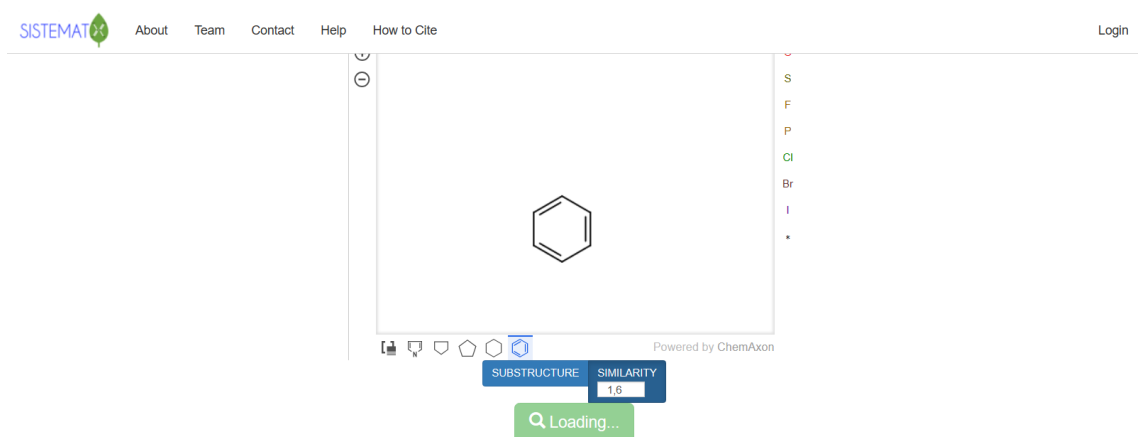
Como o usuário pode inserir um valor de similaridade inválido, manualmente, mas não através das setas do input, a consistência também é afetada na operação realizada,

Figura 14: Captura de tela ampliada na guia de pesquisa por estrutura através de similaridade



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Figura 15: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por estrutura através de similaridade



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

podendo levar a resultados incorretos e frustrar o usuário.

Seria apropriado implementar validações que restrinjam a entrada do usuário para valores válidos, evitando ambiguidades, e fornecer um feedback caso ele tente inserir um valor inválido, explicando que o valor de similaridade não pode ser maior que 1.

Quadro 5: AH referente a Figura 15

Heurística Violada	– 4^a Heurística: Consistência e padronização – 8^a Heurística: Prevenção de erros
Local	Na aba de pesquisa por estrutura através de similaridade na página inicial
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Limitar a inserção manual acima de 1 para o valor de similaridade. E retornar um alerta de erro para o preenchimento inválido, caso o usuário insira valores que não estão dentro dos limites válidos.
Análise de Viabilidade	Viável

Dessa forma, a AH do Quadro 5 foi definida.

4.2.1.2 Pesquisa por Classe e LopP

Como mencionado anteriormente, na página inicial, os usuários têm a capacidade de realizar várias pesquisas distintas. Na pesquisa por estrutura, os usuários desenham uma estrutura usando a ferramenta da Chemaxon e obtêm resultados correlacionados com a estrutura desenhada ou com estruturas similares. Na pesquisa por *SMILES*, os usuários inserem o código *SMILES* (por exemplo, C1=CC=CC=C1) da molécula, e o sistema retorna os compostos registrados no sistema que possuem semelhanças com o *SMILES* inserido, seja por similaridade ou estrutura.

Já na pesquisa por composto, os usuários informam o nome do composto e o sistema retorna o composto correspondente que está cadastrado no sistema. Na pesquisa por espécie, os usuários inserem o nome do gênero associado ao composto desejado e selecionam uma espécie da lista existente. Por fim, nas pesquisas por família, tribo, gênero e classe, os usuários fornecem o valor correspondente e o resultado traz os compostos associados. Dessa forma, considerando todas as outras pesquisas, elas têm em comum um padrão que é seguido, no qual o usuário fornece informações específicas para obter resultados. No entanto, ao analisá-las, foi possível observar que duas delas não seguem esse padrão, e consequentemente, possuem resultados que descaracterizam o que foi proposto inicialmente para a pesquisa associada.

Como é possível observar na Figura 16, para continuar com a pesquisa o usuário precisa obrigatoriamente inserir o nome do composto, no entanto, essa mesma exigência

Figura 16: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por Composto

The screenshot shows the top navigation bar with links: About, Team, Contact, Help, How to Cite, and Login. Below this is a search menu with options: Structure Search, SMILES, Compound Search (selected), Species Search, Species Locations, Family Search, Tribe Search, Genus Search, PASS Search, Class Search, PLATO Search, Search All, and Other Types of Research. A search input field contains the placeholder text "Insert compound name". A red error message box below the field says "Preencha este campo." (Fill this field). The footer includes logos for CNPq, Chemaxon, FreeWeb, ChemDoodle, PASS, PLATO, MolPredict, and the text "Laboratory of Cheminformatics - Universidade Federal da Paraíba".

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

não se aplica às pesquisas por classe e por LogP. No que diz respeito à pesquisa por classe, conforme ilustrado na Figura 17, o usuário pode prosseguir a pesquisa sem digitar nada. Nesse caso, se o usuário não digitar o nome da classe no campo de pesquisa, nenhum composto será retornado na página de resultados. O mesmo não ocorre no caso da pesquisa por LogP.

Figura 17: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por Classe

The screenshot shows the same top navigation bar as Figure 16. The search menu now has "Class Search" selected. The search input field contains the placeholder text "Enter the class name". Below the field is a green button with a magnifying glass icon and the text "Loading...". The footer is identical to Figure 16, showing logos and the text "Laboratory of Cheminformatics - Universidade Federal da Paraíba".

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

No que diz respeito à pesquisa por LogP, conforme ilustrado na Figura 18, o usuário também pode prosseguir a pesquisa sem digitar nada no campo correspondente, nesse caso, o valor mínimo e máximo do LogP. Se isso acontecer, todos os compostos cadastrados no sistema serão retornados.

Como é possível observar na Figura 19, foram retornadas 8818 compostos do sistema, isso corresponde a todos os composto cadastrados no Sistemax. Dessa forma, essas duas pesquisas não seguem o padrão de pesquisa estabelecido anteriormente, e isso pode

Figura 18: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por LogP



Laboratory of Cheminformatics - Universidade Federal da Paraíba

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

gerar algumas consequências conforme é possível verificar no caso da pesquisa por LogP que retorna todos os resultados (igual ao que a pesquisa Search All se propõe a fazer), e assim, produz resultados que divergem do que foi originalmente proposto para a pesquisa associada. Para identificar mais detalhes, veja a AH do Quadro 6.

Figura 19: Captura de tela da página de resultados obtidos a partir de uma pesquisa por LogP

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

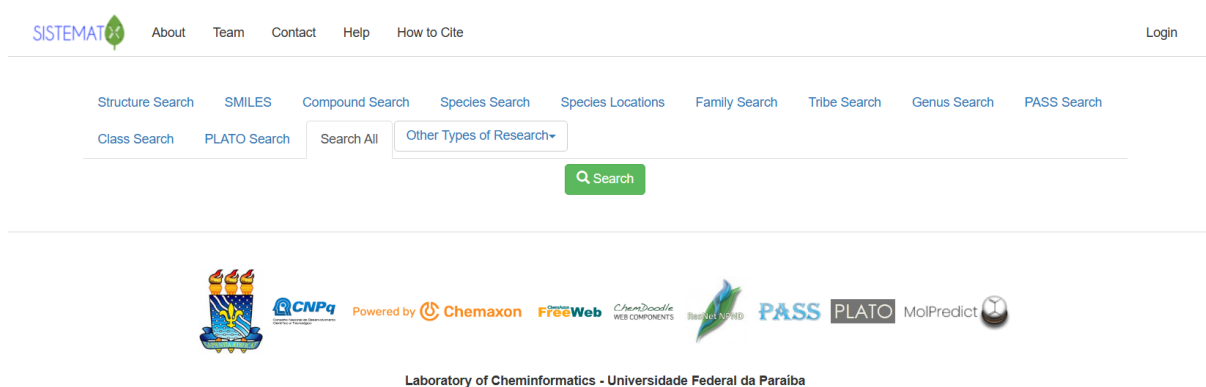
Quadro 6: AH referente a Figura 17 e a Figura 18

Heurística Violada	– 4 ^a Heurística: Consistência e padronização
Local	Na aba de pesquisa por Classe e por LogP na página inicial
Gravidade	1 (problema cosmético)
Recomendação de solução	Inserir um alerta para preenchimento do campo pelo usuário, conforme acontece nas outras pesquisas semelhantes do sistema.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.2.1.3 Pesquisa Search All

O objetivo principal da pesquisa “Search All” é proporcionar aos usuários o acesso a uma lista completa de todos os 8818 compostos, que foram catalogados e incorporados na plataforma web Sistemax. Essa funcionalidade visa oferecer uma visão abrangente e detalhada de todo o conjunto de compostos disponíveis na plataforma, permitindo aos usuários explorar e acessarem as informações sobre cada um deles, conforme necessário.

Figura 20: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa Search All



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Em todas as pesquisas da plataforma, o usuário inicialmente seleciona a categoria de pesquisa na qual pretende conduzir a busca. Em seguida, ele modifica o valor do campo de entrada da pesquisa e, por último, clica no botão “Search” para realizar a pesquisa. Esse padrão é seguido em todas as pesquisas disponíveis. Considerando isso, como é possível observar na Figura 20, na pesquisa “Search All”, o usuário ao realizar a pesquisa precisa executar mais etapas do que é necessário, ou seja, o usuário ao selecionar

“Search All” no menu de pesquisas disponíveis, precisa clicar novamente no botão “search” realizando assim 2 cliques para obter o resultado esperado. Essa violação heurística gera uma carga cognitiva pequena, porém desnecessária, logo, com o intuito de minimizar a sobrecarga de etapas, e seguindo o princípio de design para reduzir a carga cognitiva do usuário, eliminando tarefas desnecessárias, a AH do Quadro 7, foi proposta.

Quadro 7: AH referente a Figura 20

Heurística Violada	– 4^a Heurística: Consistência e padronização – 6^a Heurística: Flexibilidade e eficiência de uso
Local	Na aba de pesquisa “Search All” da página inicial
Gravidade	1 (problema cosmético)
Recomendação de solução	Ao selecionar “Search All”, a pesquisa deve ser realizada imediatamente. Poderia ser considerado também, colocar o botão “Search All” em outra localidade para que o padrão das outras pesquisas não seja quebrado. (OBS.: o padrão, se refere ao passo a passo seguido em todas as outras pesquisas de: clique - input - search)
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.1.4 Pesquisa por Filtros

Como é possível observar na Figura 12, através do botão “Other Types of Research” (o último elemento do menu de navegação por abas nas pesquisas disponíveis no sistema), é possível selecionar uma série de pesquisas, denominadas, “Filters Search”. Dentre as pesquisas disponíveis nessa categoria, temos, a de massa exata, massa relativa, solubilidade pelo PH 7.4, área de superfície polar topológica e Log P.

A pesquisa por “Nox” se refere a um valor numérico que pode ser negativo ou positivo. O mesmo ocorre com a pesquisa por “Solubility at pH 7.4” que é determinada pela relação entre a solubilidade e o pH do composto, e com a pesquisa por “Log P” (logaritmo do coeficiente de partição) que é utilizado na química medicinal e na pesquisa farmacêutica para quantificar a lipofilicidade de compostos bioativos. Por outro lado, a pesquisa por “Topological Polar Surface Area” se refere a um valor numérico positivo, assim como a massa relativa.

4.2.1.4.1 Por Massa Relativa e TPSA

Conforme descrito pelo sistema, a massa exata utiliza a massa do isótopo mais abundante de cada átomo do composto, e a massa relativa utiliza a massa atômica média de cada átomo do composto. Considerando isso, e dado que, a pesquisa por massa exata permite que o usuário insira somente valores positivos, maiores ou iguais a zero, temos que, como é possível observar na Figura 21, não deveria ser permitido ao usuário inserir caracteres alfabéticos.

Figura 21: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por massa relativa

The screenshot shows the top navigation bar of the SISTEMATX website with links for About, Team, Contact, Help, and How to Cite. Below this is a horizontal menu with various search options: Structure Search, SMILES, Compound Search, Species Search, Species Locations, Family Search, Tribe Search, Genus Search, PASS Search, Class Search, PLATO Search, Search All, and Other Types of Research. The 'Other Types of Research' dropdown is open, showing a search form titled 'Insert compound relative mass'. The form has a text input field containing 'permite string' and a feedback message below it stating 'input deveria ser numerico'. A green 'Search' button is located at the bottom of the form.

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Dado que, nesse caso, o usuário pode inserir valores alfanuméricos, temos que, um erro é gerado quando o usuário tenta realizar uma pesquisa. Como pode ser visualizado na Figura 22, o backend do sistema não consegue lidar com a requisição por não se tratar de valores numéricos. Dessa forma, o frontend também não exibe uma descrição apropriada, devido ao erro na especificação do sistema.

Figura 22: Captura de tela do erro na pesquisa por massa relativa

The screenshot displays an 'HTTP Status 500 – Internal Server Error' message. Below the title bar, there is a 'Type' field with the value 'Status Report', a 'Message' field with the value 'For input string: "permite string"', and a 'Description' field with the text 'The server encountered an unexpected condition that prevented it from fulfilling the request.' At the bottom, the server information 'Apache Tomcat/8.5.75' is shown.

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Além disso, o usuário também consegue inserir valores negativos para a pesquisa da massa relativa de um composto. O mesmo ocorre para a pesquisa por TPSA.

Figura 23: Captura de tela da pesquisa por massa relativa com campos negativos

The screenshot shows the top navigation bar of the SISTEMATX website with links: About, Team, Contact, Help, How to Cite, and Login. Below this is a horizontal menu with search options: Structure Search, SMILES, Compound Search, Species Search, Species Locations, Family Search, Tribe Search, Genus Search, PASS Search, Class Search, PLATO Search, Search All, and Other Types of Research (with a dropdown arrow). The main search area is titled 'Insert compound relative mass' and contains two input fields: the first has the value '0' and the second has '-100'. A green 'Search' button with a magnifying glass icon is positioned below the input fields.

Fonte: <https://sistematrix.ufpb.br>

4.2.1.4.2 Por Nox, PH e LogP

Como é possível observar na Figura 24, o mesmo acontece para a pesquisa por Nox. O usuário consegue inserir caracteres alfabéticos, e por consequência, obtém um erro que o sistema não trata. Além da pesquisa por Nox, o mesmo erro ocorre nas pesquisas por PH e LogP.

Figura 24: Captura de tela da página inicial, na guia de pesquisa por nox

The screenshot shows the same top navigation bar as Figure 23. The search menu is identical. The main search area is titled 'Insert compound nox' and contains two input fields: the first has the value 'Nox' and the second has 'String'. A green 'Search' button with a magnifying glass icon is positioned below the input fields.

Fonte: <https://sistematrix.ufpb.br>

Dessa forma, dada as diversas pesquisas da categoria de Filtros, e dado que cada uma possui suas especificidades, o contexto deve ser analisado para que o usuário não consiga inserir dados errôneos ao realizar suas pesquisas, diminuindo assim, possíveis erros e problemas relacionados.

Assim, a AH do Quadro 8 foi criada, considerando a interface das Figura 21, 23 e 24, temos que a heurística 8 foi quebrada, já que ela não previne o usuário de cometer o erro mencionado acima, gerado pela falha na validação de entrada. Além dela, temos que a heurística 9, também não foi cumprida adequadamente, já que a mensagem de erro gerada para o usuário (na Figura 22) não é clara e nem informa ao usuário o motivo do erro.

Quadro 8: AH referente a Figura 21, 22, 23 e 24

Heurística Violada	– 8ª Heurística: Prevenção de erros – 9ª Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperarem de erros
Local	Nas pesquisas por filtros da página inicial
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Limitar a inserção de dados pelo usuário dependendo da pesquisa em questão, dadas as particularidades de cada uma delas.
Análise de Viabilidade	Viável

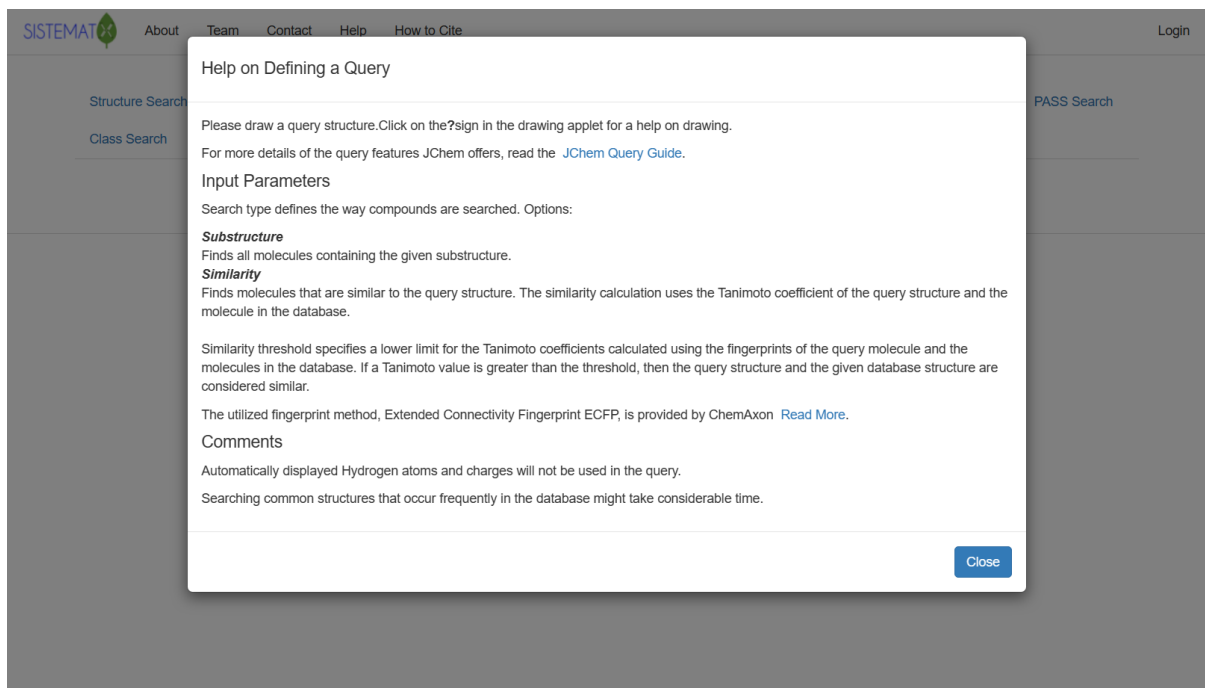
4.2.2 Modal de Ajuda

Considerando que o SistematiX é uma ferramenta especializada e específica para um nicho muito particular, e percebendo que seu público-alvo inclui usuários com um certo conhecimento na área de produtos naturais e quimiointormática, seria de grande utilidade disponibilizar uma forma para esses usuários esclarecerem suas dúvidas em relação a todos os tipos de pesquisa oferecidos na plataforma.

Assim, com base na heurística 10 de Jakob Nielsen que enfatiza a importância da assistência e documentação para o usuário, seria apropriado desenvolver uma seção de ajuda mais detalhada do que a já existente, observada na Figura 25, que atualmente só explica detalhes da pesquisa por Estrutura. Essa seção poderia explicar resumidamente o que cada pesquisa se propõe a fazer, como fazer tais pesquisas e quais resultados elas geram.

É importante ressaltar que essa seção de ajuda mais abrangente seria uma valiosa adição à plataforma, já que iria ajudar os usuários a explorarem e aproveitarem ao máximo as capacidades do sistema, ao mesmo tempo em que reduziria potenciais barreiras para os usuários menos experientes ou iniciantes. Além disso, uma documentação mais específica, também contribuiria para uma experiência geral mais positiva e satisfatória para os usuários. Verifique a AH descrita no Quadro 9.

Figura 25: Captura de tela do modal de ajuda (Help) da página inicial



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

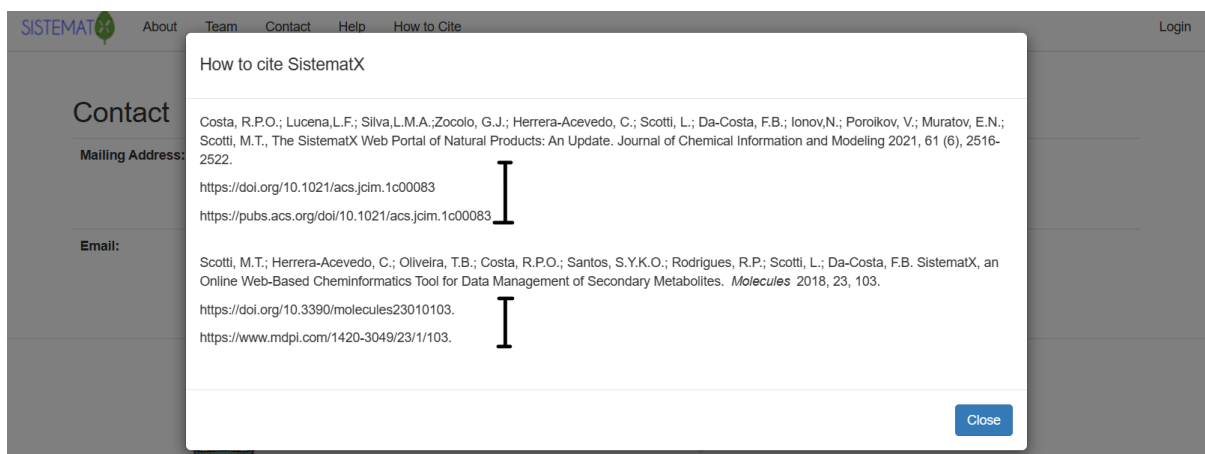
Quadro 9: AH referente a Figura 25

Heurística Violada	– 10 ^a Heurística: Ajuda e documentação
Local	No modal de ajuda (Help) da página inicial
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Complementar a seção de ajuda do modal da página inicial com informações específicas para cada pesquisa disponível na plataforma. Considere também, criar uma seção para detalhar os termos utilizados na plataforma, para os usuários poderem recorrer em casos de dúvidas.
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.3 Modal “How to Cite”

Como é possível observar na Figura 26, temos links definidos no modal que não são clicáveis. O links em questão se referem aos artigos produzidos sobre o sistema que podem ser utilizados em pesquisas para citar a ferramenta web.

Figura 26: Captura de tela do modal “How to cite”



Fonte: <https://sistematox.ufpb.br>

Seria benéfico para os usuários definir os links como clicáveis para que possam ser abertos em uma nova aba do navegador. Considerando o fato de que esses links não necessariamente precisam ser referenciados diretamente no texto de uma citação de artigo, mas serão utilizados pelos usuários apenas para os mesmos conseguirem verificar os artigos mencionados pelas referências.

Considerando que, os links não são clicáveis, o usuário terá que copiar o mesmo manualmente e abri-lo em uma nova aba do navegador. Isso não apenas torna a tarefa mais demorada, mas também aumenta a carga cognitiva, o que pode afetar negativamente a experiência do usuário. Dessa forma, dada a falha de flexibilidade e eficiência de uso a AH do Quadro 10 foi definida.

Quadro 10: AH referente a Figura 26

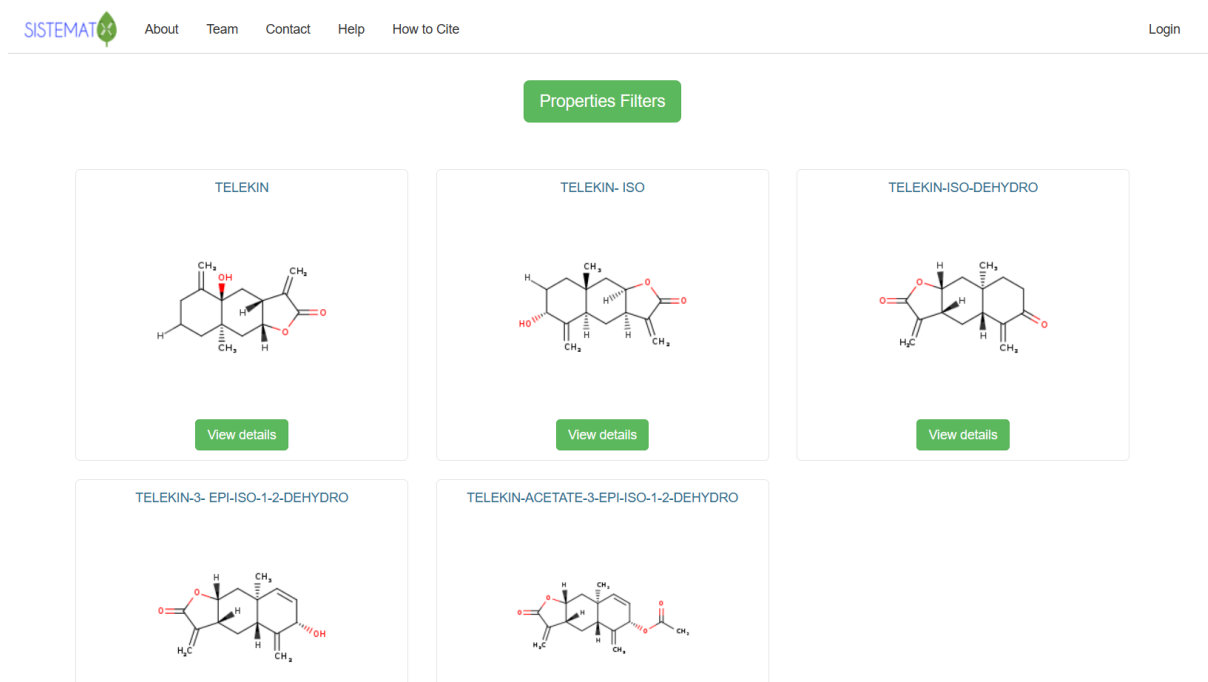
Heurística Violada	– 6 ^a Heurística: Flexibilidade e eficiência de uso
Local	No modal de como citar o SistematoX
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Adicionar os links como elementos clicáveis redirecionando os usuários para os artigos em questão.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.2.4 Página de Resultados

Para a maioria das pesquisas disponíveis na plataforma web SistematoX, os resultados são apresentados em uma página com paginação para todos os composto resultantes

da pesquisa. Nela é possível visualizar o nome do composto, sua representação em 2D e um botão para acessar informações detalhadas do composto. Além disso, nessa página, os usuários também podem realizar alterações nos filtros, através do botão “Properties Filters”, para obter resultados mais personalizados. Observe a Figura 27.

Figura 27: Captura de tela da página de resultados



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Não existe uma forma, através da interface do sistema, para retroceder a página anterior (de pesquisa). A única alternativa disponível para realizar tal ação consiste em utilizar a funcionalidade padrão do navegador web. Dessa forma, a AH do Quadro 11 foi definida, considerando simplificar a navegação, para torna-lá mais intuitiva.

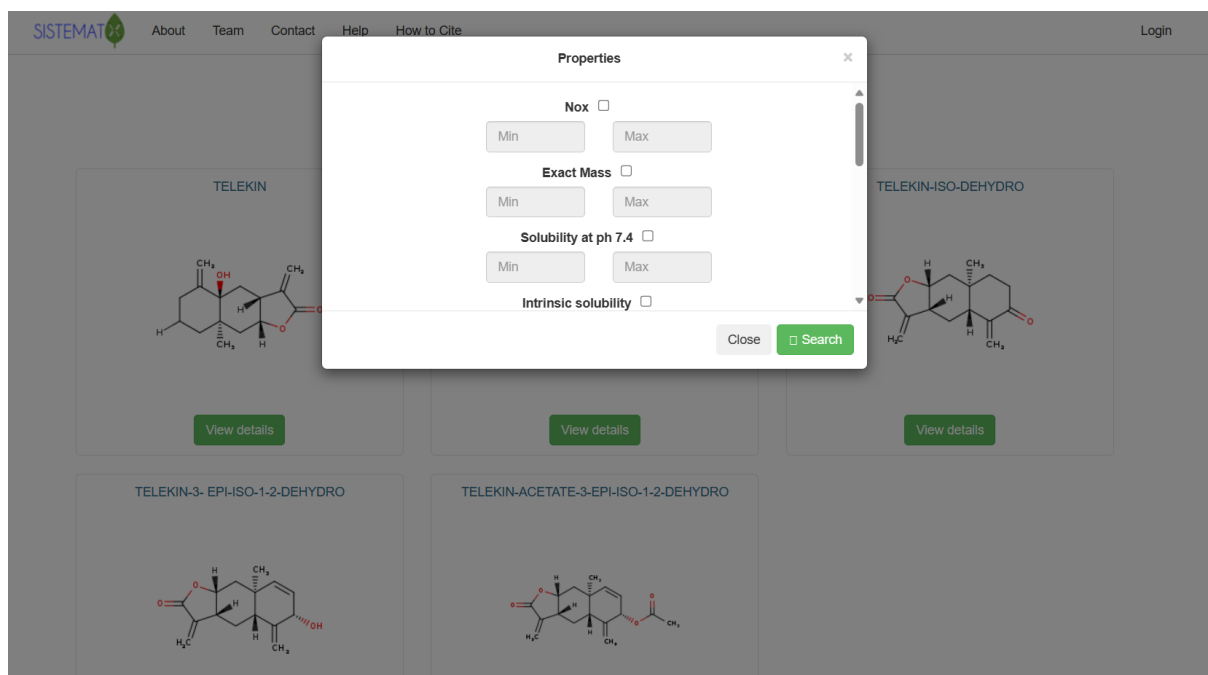
Quadro 11: AH referente a Figura 27

Heurística Violada	– 6 ^a Heurística: Flexibilidade e eficiência de uso
Local	Na página de resultados
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Adicionar botão para retornar à página anterior do sistema.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.2.4.1 Filtros

Na opção de Filtros, conforme ilustrado no modal da Figura 28, existem uma gama de opções na qual o usuário pode selecionar uma propriedade e definir um valor mínimo e máximo para ela. Observe que, o ícone referente ao botão de pesquisa (a lupa) não se encontra adequadamente definido, ou, não foi carregado adequadamente.

Figura 28: Captura de tela do modal com filtros da página de resultados



Fonte: <https://sistematx.ufpb.br>

O botão de “Search” deveria ter um ícone, já que, isso ocorre em outras partes do sistema, como o ícone do botão de pesquisa se encontra definido em outras páginas, mas não nessa, devemos considerar a falta de consistência nos padrões e a falta de compatibilidade entre o sistema e o mundo real. Dessa forma, a AH do Quadro 12 foi definida.

Quadro 12: AH referente a Figura 28

Heurística Violada	– 2^a Heurística: Correspondência entre o sistema e o mundo real – 4^a Heurística: Consistência e padronização
Local	No modal de filtros da página de resultados
Gravidade	1 (problema cosmético)
Recomendação de solução	Carregar o ícone de Search corretamente.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.2.5 Página de Detalhes do Composto

Ao acessar a página de detalhes de um composto, através do botão “View details”, obtemos uma série de informações sobre o mesmo, como é possível observar na Figura 29. Quando o usuário rola um pouco mais a página, nos deparamos com a seção “Botanical Data” que exibe diversas informações sobre os dados botânicos existentes e catalogados para aquele composto específico.

Figura 29: Captura de tela da página de detalhes de um composto

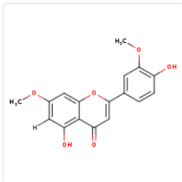
SISTEMATX

AboutTeamContactHelpHow to Cite

Login

velutin

BackAmplify



NMR 1H Data

NMR 1H by SPINUS WEB

NMR 13C Data

PASS Data

PLATO Data

PubChem Reference

ChEMBL Reference

ChemSpider Reference

MolpredictX Reference

Compound Identification

Common Name	velutin
SMILES	[H]C1=C(OC)C=C2OC(=CC(=O)C2=C1O)C1=CC(OC)=C(O)C=C1
IUPAC	5-hydroxy-2-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-7-methoxy-4H-chromen-4-one
InChI	1S/C17H14O6/c1-21-10-6-12(19)17-13(20)8-14(23-16(17)7-10)9-3-4-11(18)15(5-9)22-2/h3-8,18-19H,1-2H3
InChIKey	ROCUOVBWAWAQFD-UHFFFAOYNA-N
CAS	25739-41-7

Compound Data

Class	Skeleton	NOX	Exact Mass
Flavonoid	Flavona	-2	314.079038171
Solubility at pH 7.4	Intrinsic Solubility	Acid pKa	Basic pKa
-3.39	-3.72	7.36	-4.51
Relative Mass	LogP	Hydrophilic-lipophilic Balance	Topological Polar Surface Area (Å²)

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

É importante notar, como podemos observar na Figura 30, que a tabela que exibe os dados botânicos se encontra truncada, isto é, uma parte dela foi cortada devido a problemas de ajustes na interface, isso faz com que uma parte dos dados não esteja visível completamente para os usuários.

Figura 30: Captura de tela da página de detalhes de um composto com destaque para visualização da tabela de dados botânicos

SISTEMATX About Team Contact Help How to Cite Login

NMR 1H Data
NMR 1H by SPINUS WEB
NMR 13C Data
PASS Data
PLATO Data
PubChem Reference
ChEMBL Reference
ChemSpider Reference
MolpredictX Reference

InChIKey ROCUOVBWAWAQFD-UHFFFAOYNA-N
CAS 25739-41-7

Compound Data

Class	Skeleton	NOX	Exact Mass
Flavonoid	Flavona	-2	314.079038171
Solubility at pH 7.4	Intrinsic Solubility	Acid pKa	Basic pKa
-3.39	-3.72	7.36	-4.51
Relative Mass	LogP	Hydrophilic-lipophilic Balance	Topological Polar Surface Area(Å²)
314.293	2.69	9.05	85.22

Botanical Data

Family	Subfamily	Tribe	Subtribe	Genus	Species	Reference
Asteraceae	Unknown	Eupatorieae	Fleischmanninae	Chromolaena	hirsuta	Phytotherapy research, v. 18, p. 250. 2004
Asteraceae	Unknown	Anthemideae	Artemisiinae	Artemisia	gmelinii	Flavonoids of the Sunflower

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

Se o usuário rolar a página até o final, ele conseguirá visualizar um scroll horizontal, no qual será possível utilizá-lo para ver o resto da tabela “Botanical Data”. No entanto, considerando que a seção “Botanical Data” pode ser muito grande, isso frustraria o usuário.

Figura 31: Captura de tela da página de detalhes de um composto no final da página

SISTEMATX

About

Team

Contact

Help

How to Cite

Login

							1995	
Asteraceae	Unknown	Astereae	Baccharidinaea	Parastrephia	lucida		Boletín de la Sociedad Chilena de Química, v. 40, p. 293. 1995	
Asteraceae	Unknown	Astereae	Baccharidinaea	Baccharis	calliprinos		Acta Farmaceutica Bonaerense, v. 18, p. 99. 1999	
Asteraceae	Unknown	Astereae	Baccharidinaea	Baccharis	rhetinodes		Acta Farmaceutica Bonaerense, v. 18, p. 99. 1999	

Biological Activity

Empty biological activity data.

Geographic Data

Empty geographic data.

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

Dada a necessidade de rolagem excessiva para visualizar o conteúdo completo da tabela “Botanical Data”, e a má adequação de visualização apesar do espaço disponível na página, devemos considerar que o usuário é afetado quando tenta acessar as informações do dados de “Plant Part” da tabela.

Quadro 13: AH referente a Figura 30

Heurística Violada	– 7 ^a Heurística: Projeto estético e minimalista
Local	Página de detalhes do composto na seção “Botanical Data”
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Ajustar o overflow para exibir toda a tabela ‘Botanical Data’ sem cortar erroneamene os dados da mesma.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

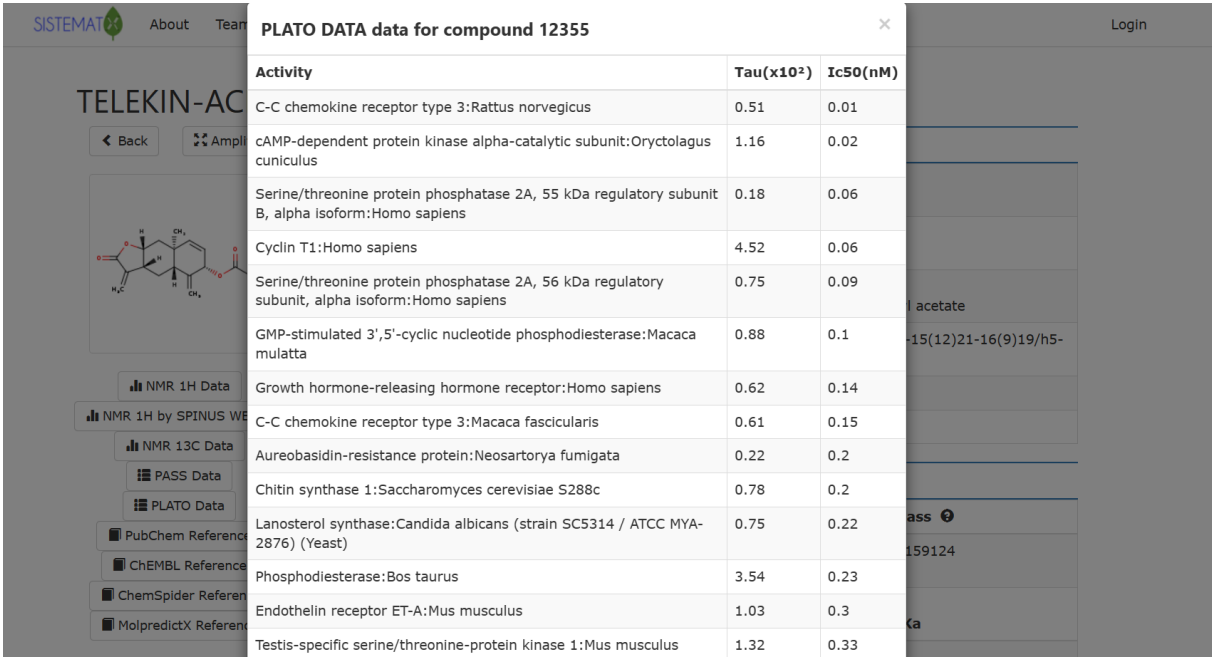
Portanto, é possível visualizar as informações com um certo esforço do usuário, mas se o usuário não rolar a página até o final para verificar o scroll existente (Figura 31), ele pode achar que as informações não estão acessíveis para visualização através

da tabela. Isso pode prejudicar a experiência do usuário e impedi-lo de completar seu objetivo. Verifique a AH do Quadro 13, para entender detalhes sobre a solução.

4.2.5.1 PLATO Data

O modal da Figura 32 exibe uma série de atividades que possuem bioatividade com o composto selecionado, neste caso o “TELEKIN-ACETATE-3-EPI-ISO-1-2-DEHYDRO”. Essa lista de atividades pode ser muito extensa, e considerando isso, pode ser ineficiente para o usuário encontrar a atividade que deseja analisar.

Figura 32: Captura de tela do modal de dados referentes ao PLATO



Activity	Tau(x10 ²)	IC50(nM)
C-C chemokine receptor type 3:Rattus norvegicus	0.51	0.01
cAMP-dependent protein kinase alpha-catalytic subunit:Oryctolagus cuniculus	1.16	0.02
Serine/threonine protein phosphatase 2A, 55 kDa regulatory subunit B, alpha isoform:Homo sapiens	0.18	0.06
Cyclin T1:Homo sapiens	4.52	0.06
Serine/threonine protein phosphatase 2A, 56 kDa regulatory subunit, alpha isoform:Homo sapiens	0.75	0.09
GMP-stimulated 3',5'-cyclic nucleotide phosphodiesterase:Macaca mulatta	0.88	0.1
Growth hormone-releasing hormone receptor:Homo sapiens	0.62	0.14
C-C chemokine receptor type 3:Macaca fascicularis	0.61	0.15
Aureobasidin-resistance protein:Neosartorya fumigata	0.22	0.2
Chitin synthase 1:Saccharomyces cerevisiae S288c	0.78	0.2
Lanosterol synthase:Candida albicans (strain SC5314 / ATCC MYA-2876) (Yeast)	0.75	0.22
Phosphodiesterase:Bos taurus	3.54	0.23
Endothelin receptor ET-A:Mus musculus	1.03	0.3
Testis-specific serine/threonine-protein kinase 1:Mus musculus	1.32	0.33

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

A falta de uma opção de filtragem de dados em uma lista grande afeta a flexibilidade e eficiência de uso do sistema, já que, não existe uma forma de os usuários encontrarem as informações que desejam de forma mais rápida e eficaz.

Considerando a extensa listagem dos itens no modal em questão, seria uma consideração viável implementar uma funcionalidade de paginação para os dados de atividade. Isso se deve ao fato de que a atual lista de itens pode ocultar a visibilidade do botão de fechamento do modal para o usuário. Além disso, a disposição de todos os itens da lista de atividades PLATO contradiz os princípios de design estético e minimalista, violando, assim, as heurísticas de usabilidade em relação à apresentação visual e organização de informações. Dessa forma, a AH do Quadro 14 foi criada.

Quadro 14: AH referente a Figura 32

Heurística Violada	– 6^a Heurística: Flexibilidade e eficiência de uso – 7^a Heurística: Projeto estético e minimalista
Local	No modal de PLATO Data
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Adicionar um filtro por nome da atividade (para atender a 6 ^a Heurística), e adicionar uma paginação (para atender a 7 ^a Heurística).
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.6 Página de Login

Na página de login do Sistemax, quando o usuário insere incorretamente seu nome de usuário (“username”) e/ou senha (“password”), o sistema não identifica ou exibe nenhum erro específico, ele apenas recarrega a página. Esse recarregamento ocorre sem fornecer informações sobre os erros cometidos, e, conseqüentemente, se um usuário esquecer sua senha ou cometer um erro de digitação, ele não terá conhecimento do motivo pelo qual não conseguiu realizar o login. Como resultado, devido à falta de feedback sobre o erro, o usuário não irá poder identificar a causa e, portanto, ficará impossibilitado de seguir adiante em direção ao seu objetivo.

Seguindo os padrões de usabilidade, sabemos que é muito importante fornecer aos usuários feedbacks claros e informativos, detalhando os motivos dos erros, para que os mesmos consigam diagnosticar e se recuperar das falhas. Quando o usuário enfrenta problemas no login, o sistema retorna um feedback insuficiente, dessa forma, considerando essa violação, a AH realizada, foi definida no Quadro 15.

Figura 33: Captura de tela da página de Login

Fonte: <https://sistematx.ufpb.br>

Quadro 15: AH referente a Figura 33

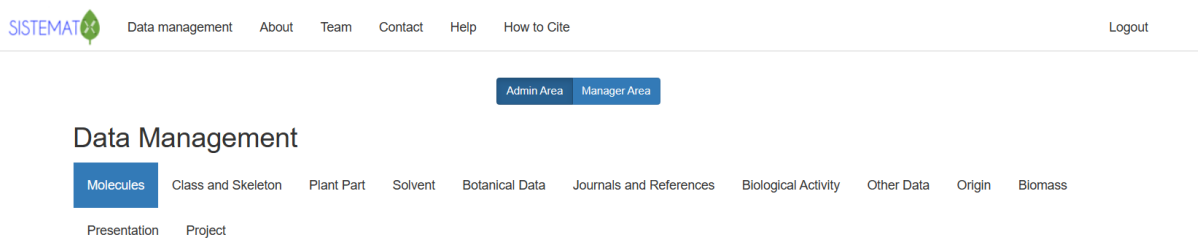
Heurística Violada	– 1ª Heurística: Visibilidade de estado do sistema – 9ª Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperarem de erros
Local	Na página de login
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Adicionar uma mensagem de erro quando o usuário inserir o username ou a senha errados, identificando qual dos dois foram inseridos de maneira errônea.
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.7 Página de Gerenciamento dos Dados

Conforme mencionado anteriormente, o usuário administrador pode gerenciar todas as informações disponibilizadas na plataforma, ele pode realizar essa ação por meio do menu ilustrado na Figura 34.

Após efetuar o login, o usuário administrador do sistema terá acesso às telas de cadastro de novas informações na plataforma. Dentre todas as informações gerenciáveis

Figura 34: Captura de tela das guias do menu da página de gerenciamento de dados



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

incluem-se as categorias: *Molecules*, *Class and Skeleton*, *Plant Part*, *Solvent*, *Botanical Data*, *Journals and References*, *Biological Activity*, *Other Data*, *Origin*, *Biomass*, *Presentation* e *Project*.

4.2.7.1 Cadastro de Molécula

Como é possível observar na Figura 35, na página de cadastro de uma nova molécula, o botão de salvar está posicionado no topo da página, o que implica que após o usuário concluir o preenchimento de todos os campos, ele precisa rolar ou navegar de volta até o início da página para executar a ação de salvar as informações de uma molécula.

Figura 35: Captura de tela da página de cadastro de Moléculas

The screenshot displays the 'Data Management' page with the 'Molecules' tab selected. Below the navigation tabs, there is a toolbar with icons for adding (+), editing (pencil), deleting (trash), and a red button. The main form is titled 'Basic Data' and is divided into two columns. The left column, labeled 'Molecule', contains a large empty box for a chemical structure. The right column contains several input fields: 'Name' (with a sub-label 'Common Name'), 'SMILES', 'IUPAC Name', 'InChI', 'InChIKey', and 'CAS'. At the bottom of the form, there are three more fields: 'NOX', 'Exact Mass' (with a question mark icon), and 'Relative Mass' (with a question mark icon).

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Essa localização pode resultar em um fluxo de trabalho menos eficiente, exigindo esforço adicional por parte dos usuários administradores e possivelmente causando uma experiência menos intuitiva. Dessa forma, a AH do Quadro 16 foi criada.

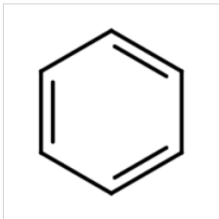
Quadro 16: AH referente a Figura 35

Heurística Violada	– 6 ^a Heurística: Flexibilidade e eficiência de uso
Local	Na página de gerenciamento de Moléculas
Gravidade	2 (problema pequeno)
Recomendação de solução	Adicionar o botão de salvar as informações de uma molécula no final da página.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

Ainda na tela de cadastro de moléculas, quando um usuário cria uma molécula, uma série de dados são carregados automaticamente para a mesma. Entre eles temos, os *SMILES*, o nome *IUPAC*, o *InChi*, e a *InChikey*, o *CAS*, o NOX, a massa exata e relativa, o Log P, dados sobre a solubilidade, entre outros.

Como é possível observar na Figura 36, os dados de “Acid pKa” e “Basic pKa”, não são carregados corretamente e aparece no input o termo “NaN”, ou seja, devido a algum erro interno, esses dados não são carregados e exibidos de forma adequada.

Figura 36: Captura de tela da página de cadastro de Moléculas, ao carregar dados automáticos

Molecule


Name

Common Name

SMILES

C1=CC=CC=C1

IUPAC Name

benzene

InChi

1S/C6H6/c1-2-4-6-5-3-1/h1-6H

InChiKey

UHOVQNZJYSORNB-UHFFFAOYSA-N

CAS

27271-55-2

NOX

-6

Exact Mass

78,0469501932

Relative Mass

78,114

LogP

1.9953288015

Solubility at pH 7.4

-1.3223876619385602

Intrinsic Solubility

-1.3223876619385602

Acid pKa

NaN

Basic pKa

NaN

Hydrophilic-lipophilic Balance

2.49

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Considerando isso, é importante adotar uma abordagem mais clara, para o usuário, com o intuito de evitar problemas na criação de novas moléculas, e inserção de dados errôneos, a AH do Quadro 17 foi criada.

Quadro 17: AH referente a Figura 36

Heurística Violada	– 9 ^a Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperaram de erros.
Local	Na página de criação de uma molécula
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Deixar o campo vazio, caso o dado não possa ser carregado adequadamente.
Análise de Viabilidade	Viável

Também é possível salvar moléculas com os campos preenchidos de maneira errônea. Como é possível observar na Figura 37, o usuário consegue inserir textos nos inputs CAS, Log P, Solubilidade, PKa, TPSA, entre outros, esses campos deveriam ser campos exclusivamente numéricos.

Figura 37: Captura de tela do cadastro de dados de uma Molécula

Fonte: <https://sistemtx.ufpb.br>

O mesmo ocorre na Figura 38, onde dados extras da molécula são inseridos. No caso analisado na figura, temos que na seção de NMR 1H é permitido ao usuário inserir no H (números de hidrogênios), um valor de texto, o que não deveria ser permitido.

Figura 38: Captura de tela do cadastro de dados de uma Molécula

Fonte: <https://sistematx.ufpb.br>

Considerando que nenhum alerta é gerado ao salvar esses dados, temos que o sistema não oferece mecanismos para evitar possíveis erros de entrada de dados pelos usuários, como não existem validações, a integridade dos dados pode ser corrompida, gerando erros que poderiam ser evitados.

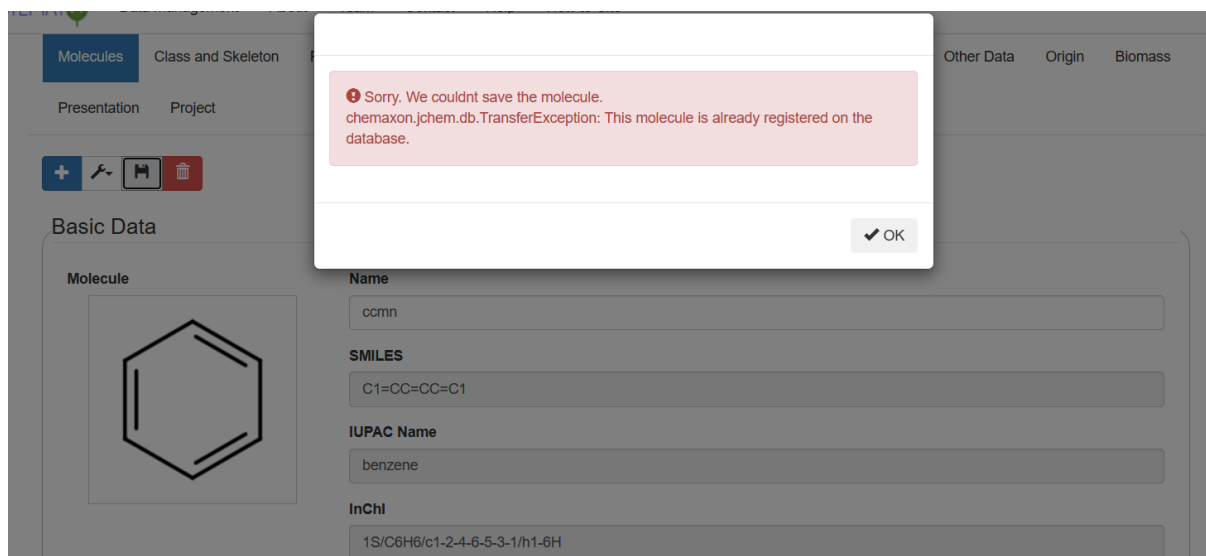
Quadro 18: AH referente a Figura 37

Heurística Violada	– 8^a Heurística: Prevenção de erros – 9^a Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperaram de erros.
Local	Na página de criação de uma molécula
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Não permitir inserção de caracteres alfabéticos em campos que deveriam ser numéricos e alertar ao usuário, caso o preenchimento dos tipos de dados estejam incorretos.
Análise de Viabilidade	Viável

Isso fere a 8^a heurística, de Prevenção de Erros, e a 9^a, já que não trata nem alerta o usuário sobre o possível erro. Dessa forma, a AH do Quadro 18 foi definida.

Por fim, como é possível observar na Figura 39, ao tentar salvar um molécula, de mesma estrutura molecular com outro nome, o sistema alerta que a molécula já está cadastrada no banco de dados.

Figura 39: Captura de tela do modal de erro ao salvar Molécula



Fonte: <https://sistematx.ufpb.br>

Seria interessante para o usuário se uma mensagem de erro mais clara e informativa fosse apresentada. Com base no presente erro, um modal é exibido explicando a ocorrência de uma exceção no banco de dados. Seria vantajoso alertar ao usuário que o sistema permite apenas a definição de uma estrutura molecular, assim, só é possível alterar os dados da molécula já existente, não é possível criar um nova molécula com outro nome para a mesma estrutura molecular. Observe o Quadro 19 da AH referente.

Quadro 19: AH referente a Figura 39

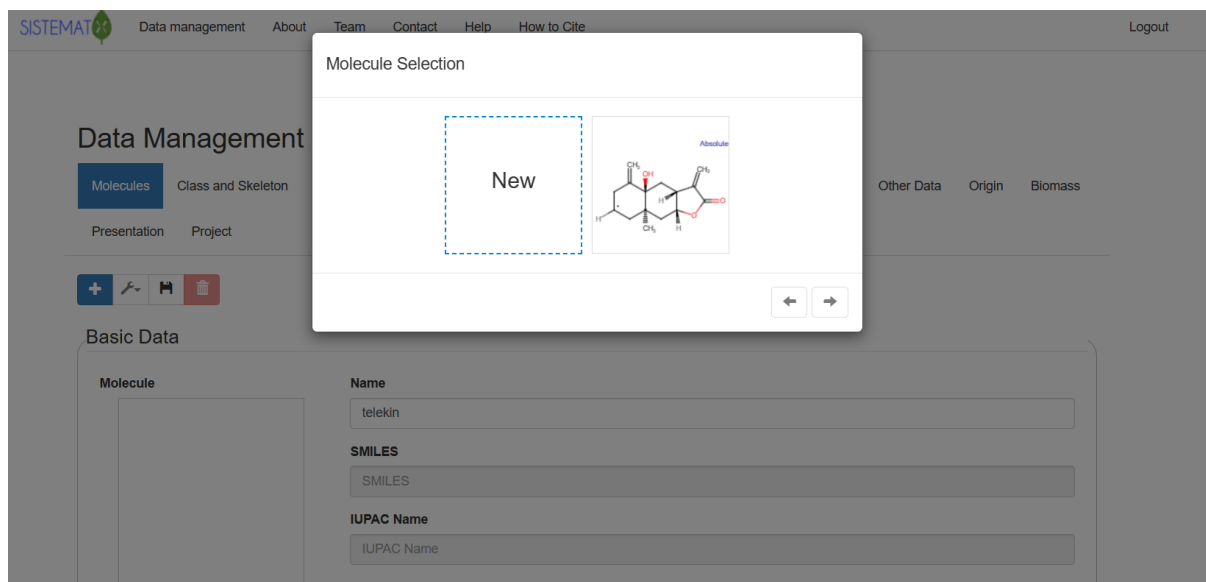
Heurística Violada	– 9 ^a Heurística: Ajude os usuários a reconhecerem, diagnosticarem e se recuperaram de erros.
Local	Na página de criação de uma molécula
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Remover detalhes transcritos de erro no banco de dados e alterar a mensagem de erro deixando-a mais clara para os usuários.
Análise de Viabilidade	Viável

4.2.7.2 Edição de Molécula

Quando um usuário pretende editar uma molécula, ele pode inserir o nome da mesma no campo “Name”, ou desenhar a estrutura dela através da ferramenta da Che-

maxon. Ao realizar a AH, o usuário avaliador selecionou uma molécula existente, para criar outra baseada nela, como é possível observar na Figura 40, porém, ao clicar na opção “New” do modal de seleção de moléculas, foi obtida a tela exibida na Figura 41.

Figura 40: Captura de tela do modal de seleção da página de gerenciamento de Moléculas



Fonte: <https://sistematx.ufpb.br>

Como é possível observar na Figura 41, o sistema tenta carregar os dados, porém os dados não são retornados, e isso, acaba gerando um erro que exibe na tela o texto “loading” nos inputs de texto, que nunca desaparecem.

Figura 41: Captura de tela da página de gerenciamento de Moléculas

Basic Data

Molecule

Name

Common Name

SMILES

SMILES

IUPAC Name

Loading...

InChI

Loading...

InChIKey

Loading...

CAS

Loading...

NOX

Loading...

Exact Mass

Loading...

Relative Mass

Loading...

LogP

Loading...

Solubility at pH 7.4

Loading...

Intrinsic Solubility

Loading...

Acid pKa

...

Basic pKa

...

Hydrophilic-lipophilic Balance

...

Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

O usuário, por sua vez, nunca é avisado sobre a possível falha no carregamento e fica esperando o sistema carregar as informações indefinidamente. É importante notar que, se o usuário realizar a operação de desenhar a estrutura “Telekin” dada nos exemplos acima, é possível utilizar o botão “New” para criar outra molécula.

Quadro 20: AH referente a Figura 41

Heurística Violada	– 1ª Heurística: Visibilidade de estado do sistema
Local	Na página de edição de uma molécula
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Retornar ao usuário uma mensagem clara do status de carregamento das informações da molécula, alertando-o caso haja falha na obtenção dos dados.
Análise de Viabilidade	Viável

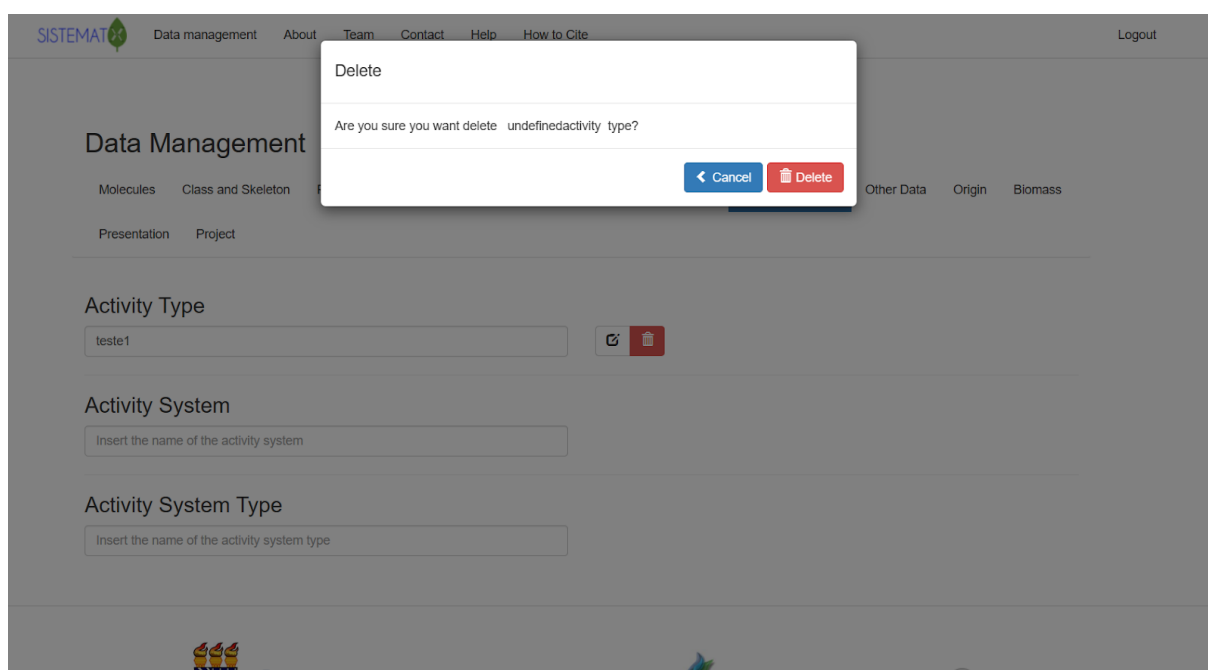
Dessa forma, considerando como é primordial para a usabilidade do sistema ter transparência nas indicações de estado do mesmo, a AH do Quadro 20 foi criada. Considere também, que uma alternativa para contornar esse problema seria, remover o botão “New” quando o usuário tentasse realizar a edição de uma molécula, criando uma molécula

baseada na existente. Isso vai depender do contexto do sistema, e se no mesmo será permitido ou não criar as mesmas moléculas apenas com nomes diferentes.

4.2.7.3 Exclusão de Atividade Biológica

Na interface do sistema, onde é realizado o Cadastro dos dados de Atividade Biológica, temos três tipos de dados que o usuário administrador pode alterar, sendo eles, o “Activity Type”, “Activity System” e o “Activity System Type”.

Figura 42: Captura de tela do modal de exclusão um tipo de atividade da página de Atividade Biológica



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Como é possível perceber na Figura 42, ocorre uma imprecisão na apresentação do título do tipo de atividade a ser excluída, pois exibe a palavra “undefined”, em vez de “teste1” que é o nome do tipo de atividade que deveria estar sendo deletada. Essa descrição inadequada do título pode causar confusão para o usuário, uma vez que não fornece informações claras e significativas sobre a atividade em questão, prejudicando assim, a experiência do usuário ao interagir com o sistema. Portanto, é importante corrigir essa imprecisão na interface para garantir que os usuários recebam informações precisas e entendíveis, dessa forma, a AH do Quadro 21 foi definida.

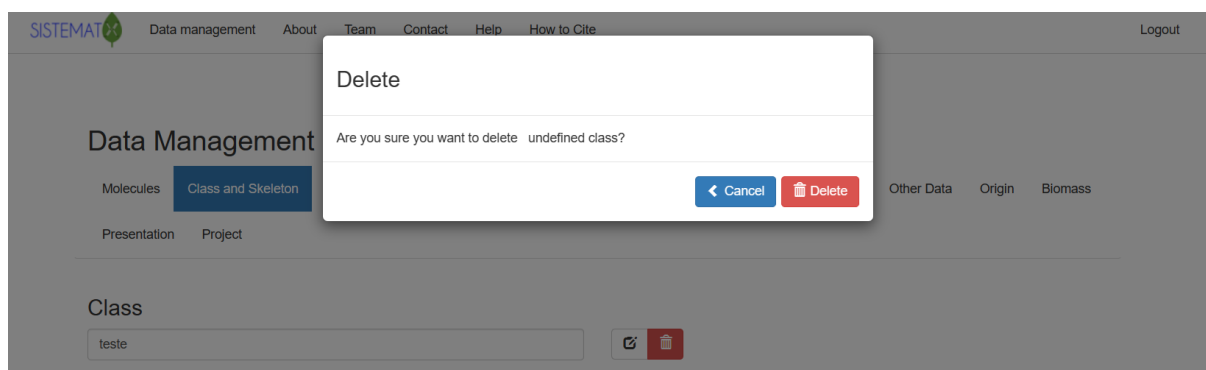
Quadro 21: AH referente a Figura 42

Heurística Violada	– 8ª Heurística: Prevenção de erros
Local	Nos modais de exclusão dos dados de atividade biológica
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Alterar o valor retornado no modal para o nome específico do tipo atividade. (Observação: esse erro ocorre nos três tipos de dados na página de atividade biológica, sendo eles, o ‘Activity Type’, o “Activity System” e o “Activity System Type”.)
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.2.7.4 Exclusão de uma Classe, do Skeleton, entre outros

O mesmo ocorre quando o usuário tenta deletar uma classe. Como é possível observar na Figura 43, o modal não exibe o nome da classe que está sendo excluída, e ao invés disso, exibe a palavra “undefined” devido a algum erro gerado durante a exibição do modal.

Figura 43: Captura de tela do modal de exclusão de uma classe



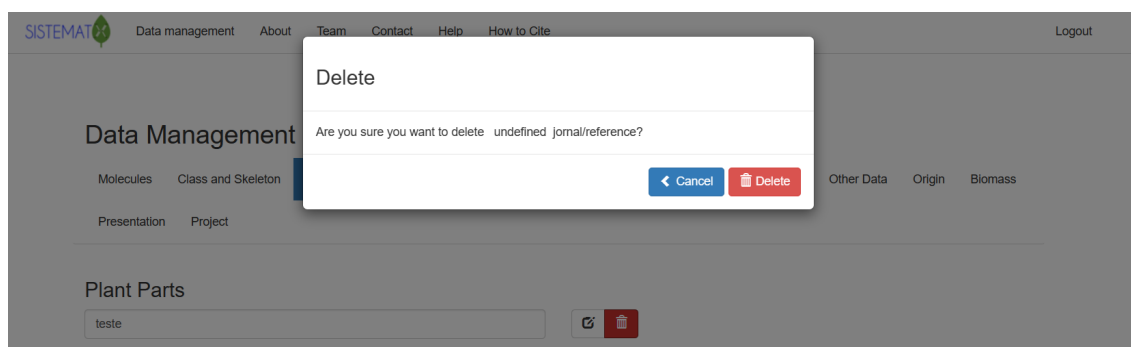
Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Ao tentar realizar a exclusão de alguns outros dados, como os dados de Solventes, de Origem, de Biomassa, de Apresentação, de Projeto, de Skeleton (Esqueleto), de parte de planta, dos jornais e referências e “Other Data”, os mesmos resultados foram obtidos.

Conforme claramente ilustrado na Figura 44, é observado que o modal de exclusão associado aos dados da parte da planta não possui uma referência apropriada na tela. Isso se torna aparente devido ao fato de que o modal de exclusão exibe uma pergunta

relacionada à exclusão de um “jornal/reference”. No entanto, essa mensagem não está diretamente relacionada ao contexto ou à entidade da parte da planta, o que pode causar confusão ou falta de clareza para os usuários que interagem com a interface.

Figura 44: Captura de tela do modal de exclusão de uma parte de planta



Fonte: <https://sistemax.ufpb.br>

Portanto, é importante revisar e ajustar os modais de exclusão para garantir uma correspondência adequada com os elementos e dados específicos da parte da planta e as outras seções relacionadas, a fim de proporcionar uma melhor experiência e reduzir possíveis confusões. Assim, uma AH parecida com a do Quadro 21 foi definida para o problema descrito nas Figuras 43 e 44. Verifique o Quadro 22 para mais detalhes.

Quadro 22: AH referente a Figura 43, 44 e outros

Heurística Violada	– 8ª Heurística: Prevenção de erros
Local 1	Na página de gerenciamento de solventes (“Solvent”), no modal de confirmação de exclusão
Local 2	Na página de gerenciamento de origens (“Origin”), no modal de confirmação de exclusão
Local 3	Na página de gerenciamento de biomassa (“Biomass”), no modal de confirmação de exclusão
Local 4	Na página de gerenciamento de apresentação (“Presentation”), no modal de confirmação de exclusão
Local 5	Na página de gerenciamento de projeto (“Project”), no modal de confirmação de exclusão
Local 6	Na página de gerenciamento de esqueleto (“Skeleton”), no modal de confirmação de exclusão
Local 7	Na página de gerenciamento da parte da planta (“Plant Part”), no modal de confirmação de exclusão
Local 8	Na página de gerenciamento de jornais e referências (“Journals and References”), no modal de confirmação de exclusão
Local 9	Na página de gerenciamento de outros dados (“Other Data”), no modal de confirmação de exclusão
Gravidade	3 (problema grande)
Recomendação de solução	Alterar o valor retornado no modal para o nome específico do que está sendo excluído.
Análise de Viabilidade	Totalmente viável

4.3 Visão Geral do Teste de Usabilidade

Inicialmente, como etapa preliminar à participação dos usuários no experimento de uso do software, eles foram solicitados a preencher um questionário de pré-teste. Depois foram orientados a seguir um fluxo de execução de tarefas definido para pesquisadores ou para gerenciadores do sistema. Esse fluxo representa o experimento de uso do software. Após realizarem as tarefas propostas, eles puderam avaliar através do questionário

pós-teste, sua experiência de uso. As questões referentes aos questionários serão melhor explicadas e detalhadas nas seções que se seguem abaixo.

4.3.1 Pré-Teste

No processo de teste foram definidos os papéis dos tipos de usuários. Para realizar a avaliação das diferentes funções no sistema, um usuário pode ser pesquisador ou gerenciador. Dessa forma, o usuário que participar do teste de usabilidade pode escolher entre realizar o fluxo de tarefas para um usuário pesquisador ou gerenciador, ou realizar ambas as tarefas definidas. Veja o Quadro 23.

Quadro 23: Definição dos papéis e tarefas

Pesquisador	Gerenciador
Realiza as diversas pesquisas disponíveis no sistema, por estrutura, <i>SMILES</i> , composto, espécie, localização, família, tribo, gênero, classe, entre outras. Alterando os filtros disponíveis.	Gerencia os dados do sistema adicionando, removendo e editando as informações sobre os compostos/moléculas, dados botânicos, dados de revista, atividade biológica, entre outros.

4.3.1.1 TCLE

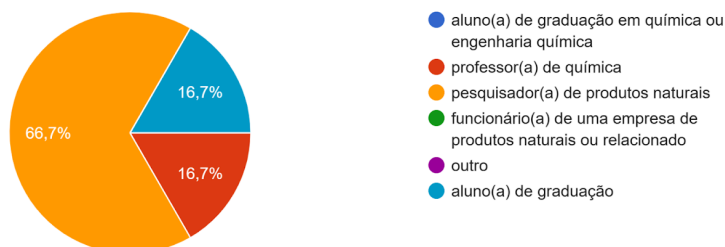
Antes de responderem o questionário pré-teste, os usuários que participaram do teste de usabilidade precisaram ler o Termo de Consentimento Livre e Esclarecido (TCLE), definido no Apêndice 1 na página 101, expressando seu consentimento em participar do experimento e na coleta dos dados relacionados. Depois, eles responderam o questionário pré-teste definido no Apêndice 2, na página 102.

4.3.1.2 Resultados

Os participantes da pesquisa incluem alunos de graduação em química ou engenharia química, pesquisadores de produtos naturais e professores de química.

Figura 45: Resultados da 1ª questão do Questionário Pré-Teste

1. Qual dos perfis abaixo melhor te representa?
6 respostas

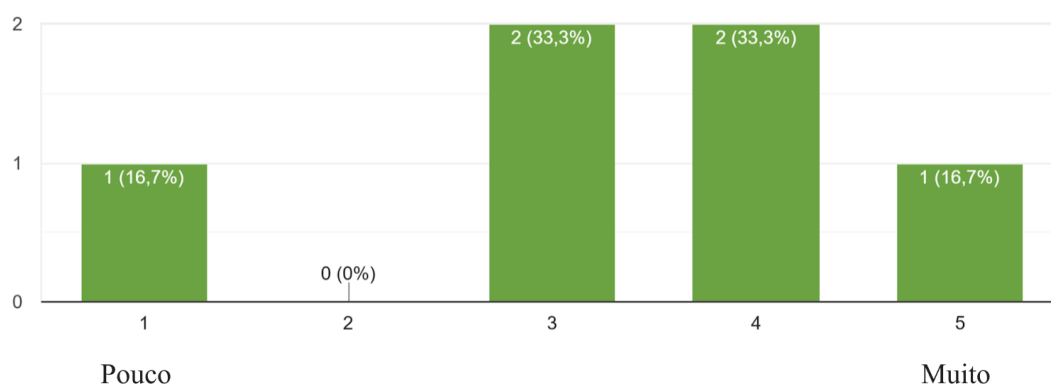


Fonte: Google Forms do questionário

Sendo sua maioria pesquisadores de produtos naturais, assim, usuários que já possuem certa experiência com área. Observe a Figura 45. Cada participante respondeu a uma série de perguntas que abordavam suas condições físicas e emocionais no momento da pesquisa, bem como sua experiência anterior com o Sistemax ou ferramentas relacionadas de quimiointormática.

Figura 46: Resultados da 2ª questão do Questionário Pré-Teste

2. Em uma escala de 1 a 5, o quanto você está fisicamente exausto no momento?
6 respostas



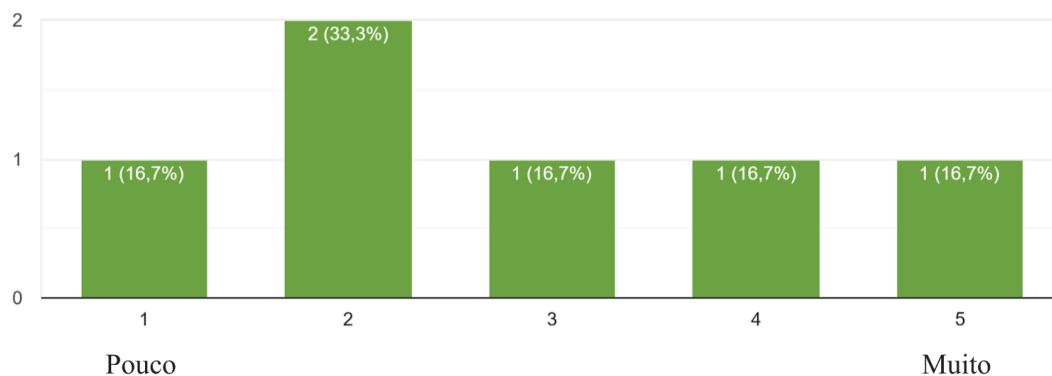
Fonte: Google Forms do questionário

Tenha em mente que os usuários que selecionaram o valor 3 como entrada em suas respostas, têm suas respostas consideradas como neutras na prática. Em relação a estar fisicamente exausto, como é possível observar na Figura 46, os usuários estão relatando algum nível de exaustão física no momento.

Figura 47: Resultados da 3ª questão do Questionário Pré-Teste

3. Em uma escala de 1 a 5, o quanto você está nervoso(a) ou preocupado(a) com outros assuntos não relacionados a esta pesquisa?

6 respostas



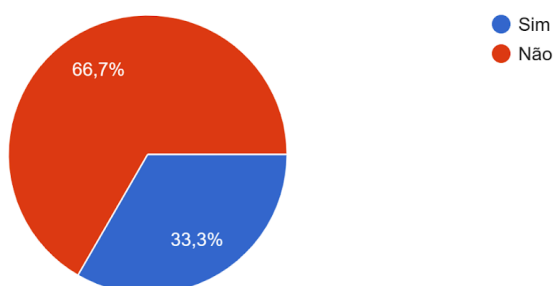
Fonte: Google Forms do questionário

Já em relação a estar nervoso ou preocupado, com base na Figura 47, é possível inferir que os usuários estão relatando um nível baixo de preocupação ou nervosismo com outros assuntos não relacionados à pesquisa.

Figura 48: Resultados da 4ª questão do Questionário Pré-Teste

4. Existe algum fator externo lhe atrapalhando?

6 respostas

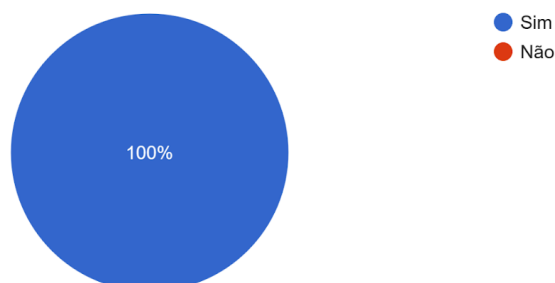


Fonte: Google Forms do questionário

Além disso, a maioria dos participantes não enfrentou dificuldades externas durante a pesquisa (Figura 48) e todos os participantes já utilizaram o Sistemax ou ferramentas relacionadas de quimioinformática (Figura 49).

Figura 49: Resultados da 5ª questão do Questionário Pré-Teste

5. Você já utilizou o SistematX, ou alguma ferramenta relacionada de quimioinformática?
6 respostas

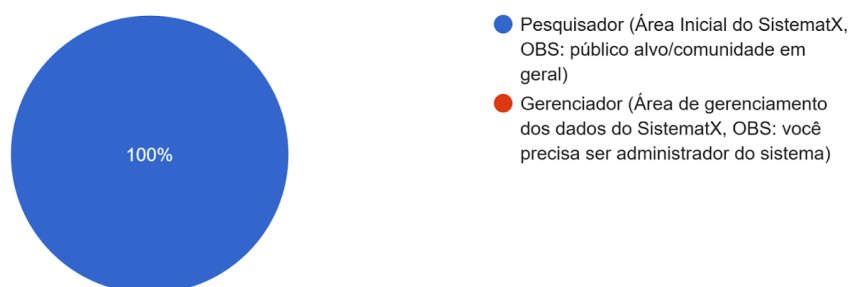


Fonte: Google Forms do questionário

Em relação ao teste de usabilidade, todos os participantes optaram por executá-lo como “Pesquisador” (Figura 50), realizando o fluxo de tarefas da página inicial do SistematX que foi especificamente designado para o público-alvo ou a comunidade em geral.

Figura 50: Resultados da 6ª questão do Questionário Pré-Teste

6. Você prefere executar o teste de usabilidade como Pesquisador ou Gerenciador?
6 respostas



Fonte: Google Forms do questionário

4.3.2 Experimento de Uso

Para o teste de usabilidade foi estabelecido um fluxo de execução de tarefas para os usuários executarem na sequência lógica pré-determinada. A descrição detalhada dessas tarefas e do referido fluxo será apresentada de forma mais minuciosa abaixo.

4.3.2.1 Fluxo (Pesquisador)

1. Entre no site do SistematiX: <https://sistematiX.ufpb.br>
2. Realize uma pesquisa por estrutura (Structure Search)
3. Altere alguns dos filtros (Properties Filters)
4. Clique para ver detalhes da molécula (View details)
5. Visualize as informações sobre a mesma

Teste as seguintes funções:

- Amplify (2D, 3D)
 - NMR 1H by SPINUS WEB
 - PASS Data
 - PLATO Data
 - Verifique os dados do composto (Compound Identification, Compound Data, Botanical Data, Biological Activity, Geographic Data)
6. Verifique se os filtros estão corretos ou se você encontrou algum problema.
 7. Se possível repita os mesmos passos só que agora para outras pesquisas por exemplo: Composto (Compound Search)

4.3.2.2 Fluxo (Gerenciador)

1. Entre no site do SistematiX: <https://sistematiX.ufpb.br>
2. Realize login com usuário e senha do administrador
3. Na aba de gerenciamento de dados (Data Management) na seção de Molécula (Molecules) preencha os dados da molécula, e realize as seguintes operações:
 - Salve a molécula
 - Edite a molécula
 - Delete a molécula

A condução do experimento ocorreu de maneira completamente online [23], utilizando a plataforma Google Forms como a ferramenta de coleta de dados. Isso permitiu que os participantes respondessem às questões e fornecessem suas percepções de maneira remota e autônoma. Assim, foi possível obter informações acerca da experiência dos participantes, seus feedbacks em relação à usabilidade e suas opiniões sobre o SistematiX.

4.3.3 Pós-Teste

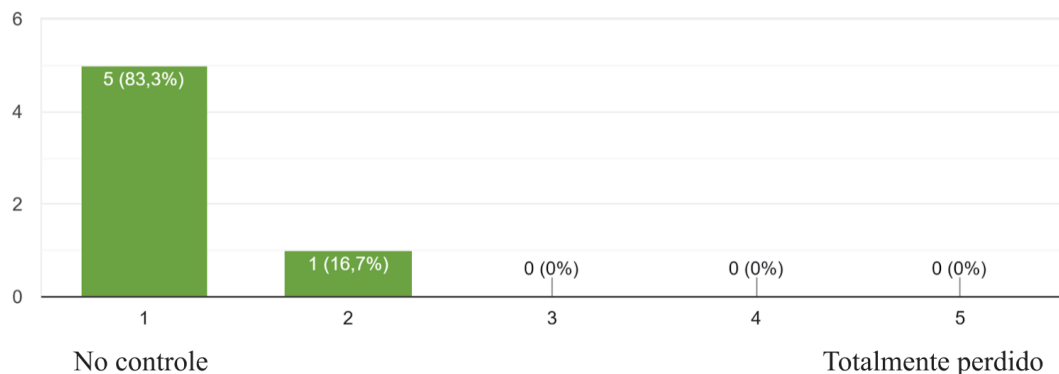
Após realizarem o experimento de uso, os usuários responderam o questionário pós-teste. Foram definidos dois tipos de questionários pós-teste, um para o fluxo de tarefas do pesquisador e outro para o fluxo de tarefas do gerenciador. Ambos, foram definidos no Apêndice 3 e 4, respectivamente, nas páginas 103 e 105.

4.3.3.1 Resultados

As respostas às perguntas de usabilidade indicam que, em geral, os participantes se sentiram à vontade usando o site e consideraram a facilidade de uso satisfatória, como é possível observar na Figura 51, 54 e 56.

Figura 51: Resultados da 1ª questão do Questionário Pós-Teste

1. Em uma escala de 1 a 5, você se sentiu perdido ao tentar realizar alguma operação no sistema?
6 respostas



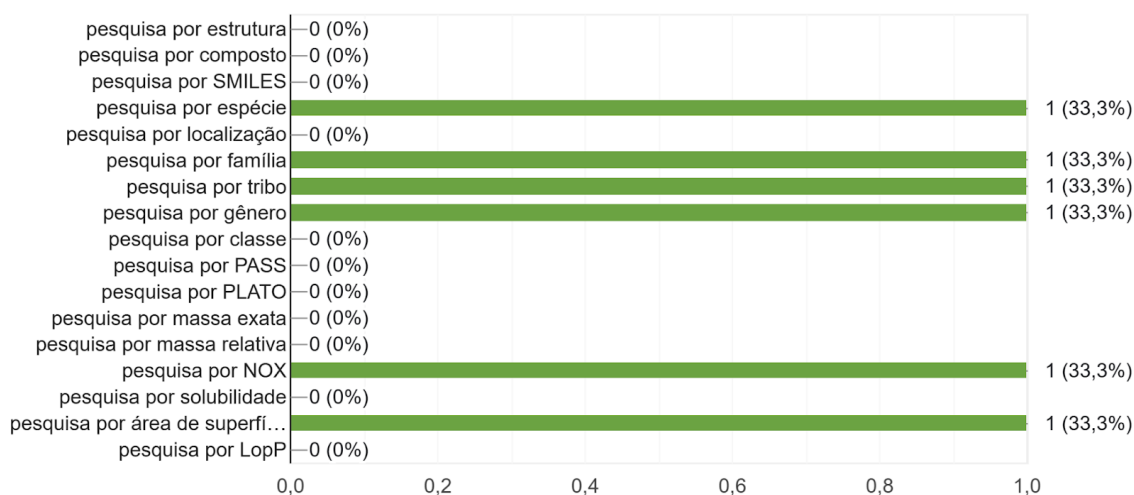
Fonte: Google Forms do questionário

No entanto, houve algumas variações nas respostas, com alguns participantes relatando dificuldades específicas na pesquisa, como pesquisa por NOX ou área de superfície polar topológica. Como é possível observar na Figura 52.

Figura 52: Resultados da 2ª questão do Questionário Pós-Teste

2. Você teve alguma dificuldade para realizar alguma pesquisa específica? (obs: deixe vazio se não teve)

3 respostas



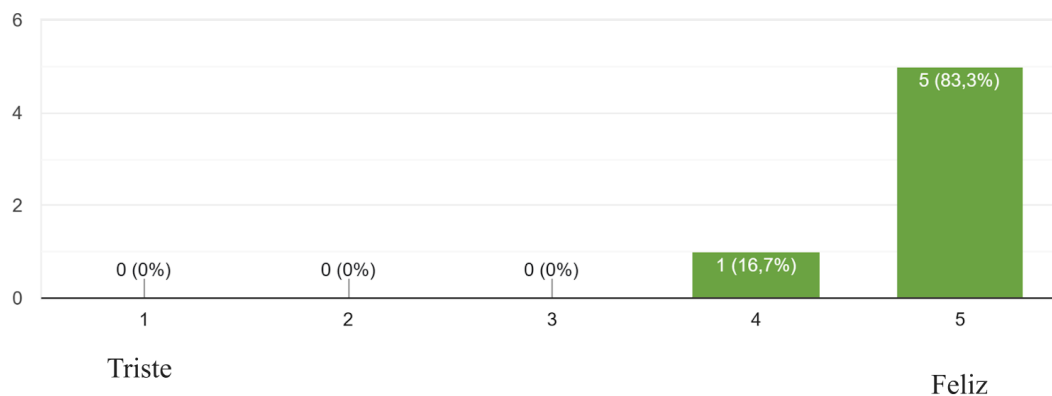
Fonte: Google Forms do questionário

Em relação a pontuação sobre assertividade, os usuários se sentiram confiantes na precisão das operações de pesquisa, como é possível observar na Figura 53, porém, podem ter encontrado desafios na usabilidade, observe a Figura 54.

Figura 53: Resultados da 3ª questão do Questionário Pós-Teste

3. Em uma escala de 1 a 5, como você está se sentindo em relação a assertividade da operação de pesquisa?

6 respostas

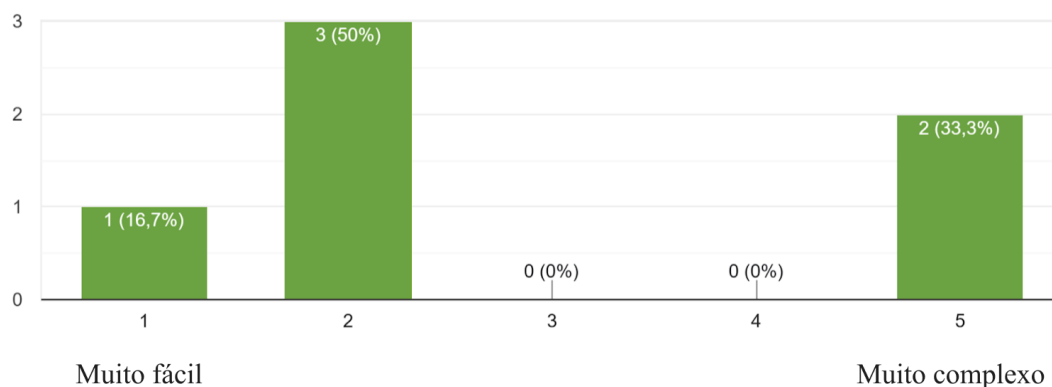


Fonte: Google Forms do questionário

Figura 54: Resultados da 4ª questão do Questionário Pós-Teste

4. Em uma escala de 1 a 5, como você classificaria a facilidade de uso do site?

6 respostas



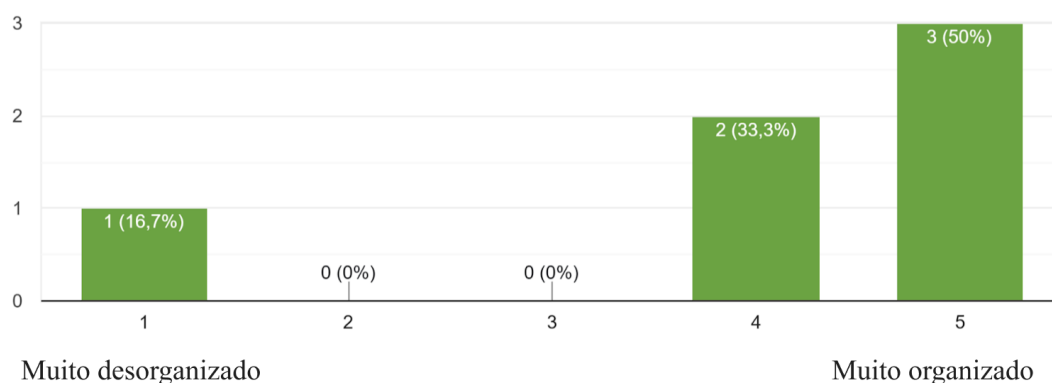
Fonte: Google Forms do questionário

Já em relação à disposição das informações sobre as moléculas (Figura 55), a maioria dos usuários pontuou bem (entre 4 ou 5), sugerindo que as informações estavam bem organizadas e acessíveis, o que é positivo para a usabilidade do sistema.

Figura 55: Resultados da 5ª questão do Questionário Pós-Teste

5. Em uma escala de 1 a 5, como você se sentiu em relação a disposição das informações sobre as moléculas?

6 respostas



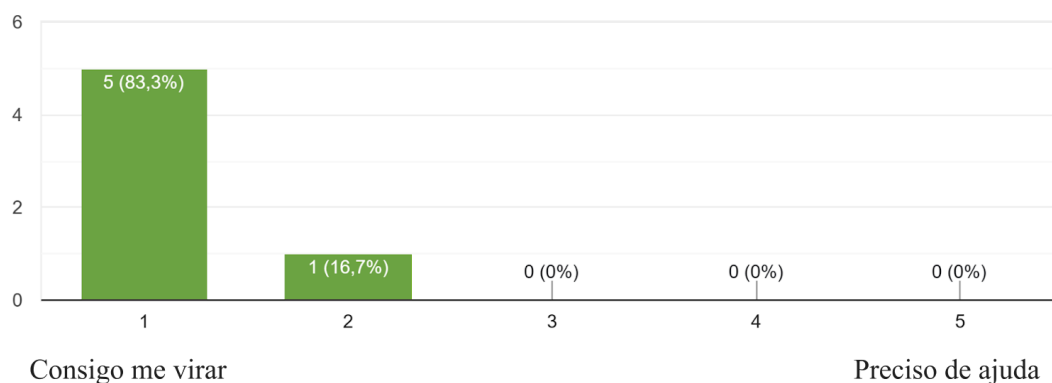
Fonte: Google Forms do questionário

A maioria dos usuários atribuiu pontuações mínimas (entre 1 ou 2) a questão 6ª (Figura 56), indicando que eles não sentiram a necessidade de assistência técnica.

Figura 56: Resultados da 6ª questão do Questionário Pós-Teste

6. Em uma escala de 1 a 5, você acha que precisaria de ajuda de uma pessoa com conhecimentos técnicos para usar o site?

6 respostas



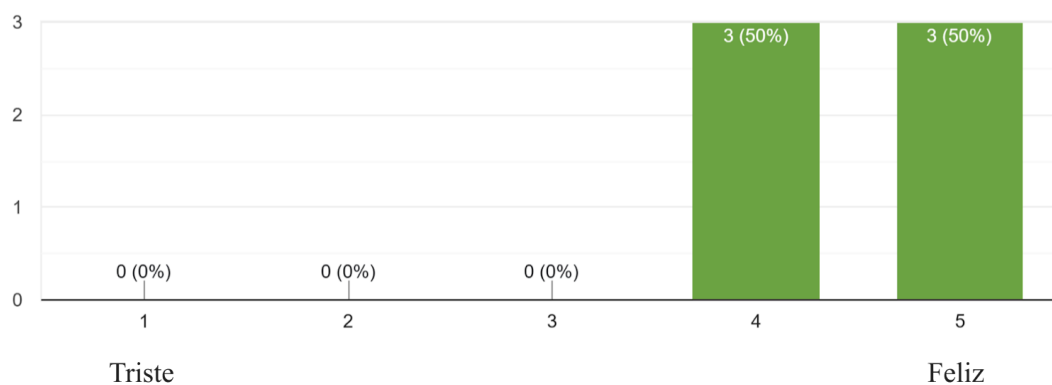
Fonte: Google Forms do questionário

Os usuários atribuíram pontuações altas (entre 4 e 5) na questão 7 (Figura 57), indicando uma boa percepção em relação ao tempo de resposta do sistema.

Figura 57: Resultados da 7ª questão do Questionário Pós-Teste

7. Em uma escala de 1 a 5, como você se sente em relação ao tempo de resposta das operações realizadas no site?

6 respostas



Fonte: Google Forms do questionário

Além disso, alguns participantes sugeriram a inclusão de informações explicativas sobre os filtros disponíveis. Observe a Figura 58.

Figura 58: Resultados da 8ª questão do Questionário Pós-Teste

8. Deseja incluir algum comentário adicional? (Opcional)

3 respostas

Até o momento só utilizei a plataforma para pesquisa mesmo. Caso esteja necessitando de ajuda para inclusão de novos dados ou qualquer outra atividade que seja possível participar. Pode falar, posso me disponibilizar.

Acho que poderia ter uma opção ao lado de cada filtro com informações do que é aquele filtro. É normal a gente pressupor que quem for querer colocar um filtro, entenda o que é aquele filtro. Mas a partir do momento que possui a informação do que é aquele filtro, vai ser inclusivo principalmente para os alunos.

Têm alguns resultados em português e outros em inglês

Fonte: Google Forms do questionário

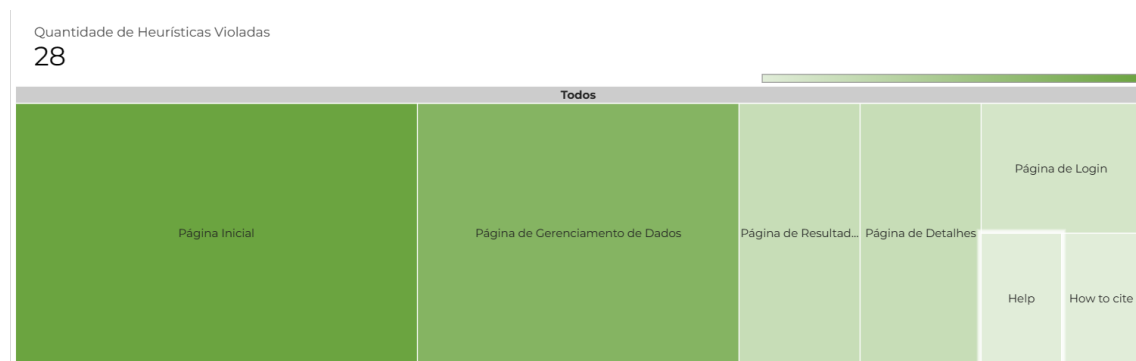
5 ANÁLISE E DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Neste capítulo, iremos analisar o resultado da avaliação heurística realizada e do teste de usabilidade, assim como, discutir as possíveis medidas de melhoria de usabilidade na interface do software em questão, o SistematX.

5.1 Análise das Violações Heurísticas

Foram encontradas um total de 28 heurísticas violadas durante a análise do sistema. Para representa-las melhor e permitir uma rápida visualização de quais telas têm mais ou menos violações de heurística, o gráfico da Figura 59 foi elaborado. Através dele, é possível perceber que a maior quantidade de violações se encontra na página inicial do sistema, seguida pela página de gerenciamento de dados.

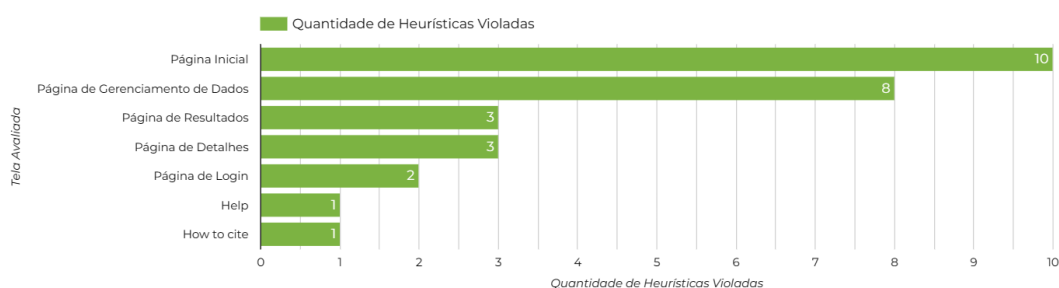
Figura 59: Captura de tela do modal de exclusão de uma parte de planta



Fonte: Elaborado pela Autora

Com base no gráfico de barras, melhor detalhado na Figura 60, podemos perceber que é possível obter alguns insights sobre as orientações no direcionamento da equipe de desenvolvimento para gerar melhoria no design de interface e melhorar a usabilidade.

Figura 60: Gráfico de barras: Tela Avaliada X Quantidade de Heurística Violações



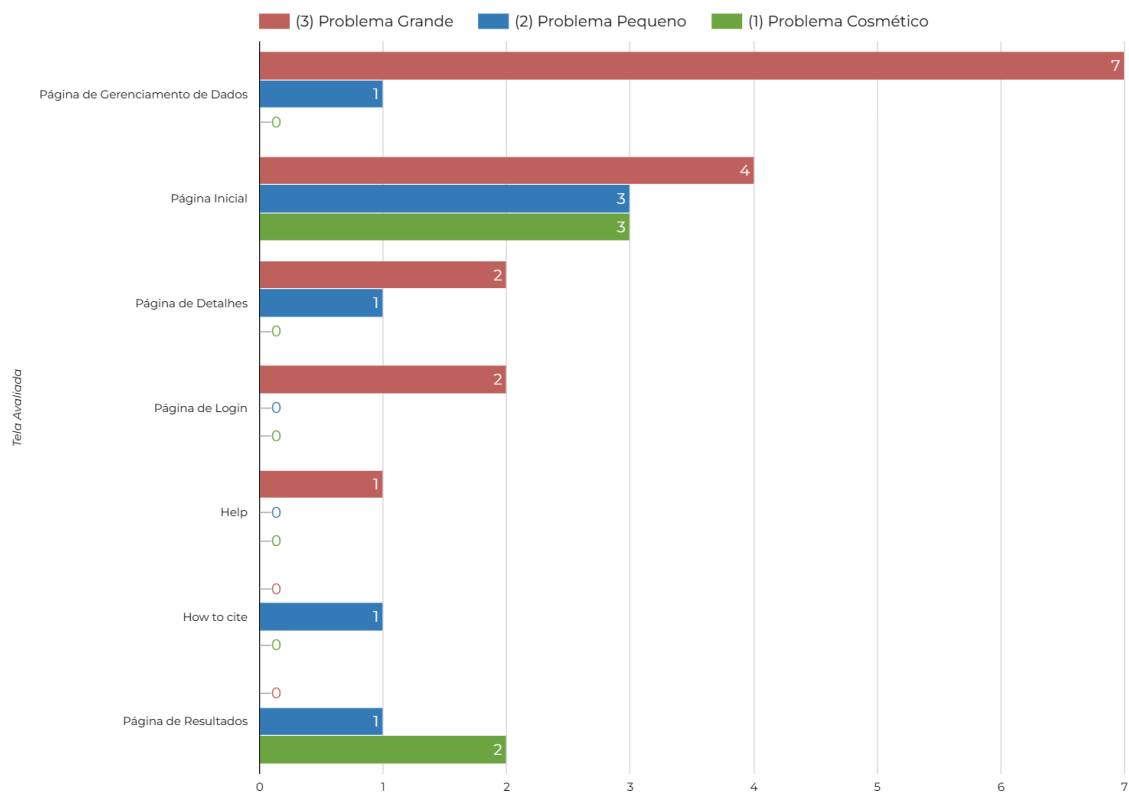
Fonte: Elaborado pela Autora

Dada a identificação das telas críticas, temos que, deve-se priorizar algumas áreas específicas para definir o plano de adequação do sistema e possível redesign. As melhorias devem ser priorizadas com base na gravidade e impacto percebido na experiência do usuário. Dessa forma, a Figura 61, foi elaborada para detalhar a gravidade da heurística violada por tela.

Contudo, deve-se considerar também as páginas que mais são utilizadas de fato pelo usuário, e como é possível observar na Figura 10, o foco do sistema é exatamente disponibilizar as pesquisas para toda a comunidade científica, logo, a página inicial, onde estão as pesquisas, são de fato onde o foco de melhoria deverá se manter primeiramente.

A “Página Inicial” se destaca como uma das telas mais problemáticas, com um equilíbrio de problemas de diferentes gravidades, como é possível observar na Figura 61. Para priorizar as correções é sugerido tratar primeiro os problemas grandes, seguidos pelos pequenos e, por fim, os cosméticos. Considere que os problemas grandes indicam problemas substanciais de usabilidade nestas telas, enquanto os cosméticos e pequenos sugerem que a tela pode precisar de melhorias, principalmente em aspectos visuais e de usabilidade menores.

Figura 61: Gráfico de barras: Tela Avaliada X Gravidade da Violação Heurística

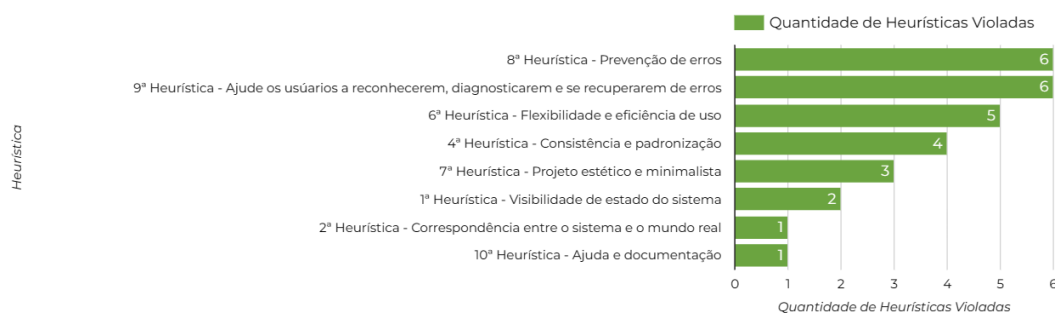


Fonte: Elaborado pela Autora

Sobre as áreas do design de interface que precisam de mais atenção em relação as

melhorias do sistema, são as das heurísticas 8^a e 9^a, como é possível observar na Figura 62. Nela podemos observar que as violações relacionadas a prevenção, reconhecimento, diagnóstico e recuperação de erros, são as áreas mais afetadas durante a análise de avaliação heurística. Isso indica uma necessidade crítica de aprimoramentos em termos de design para evitar erros e facilitar a recuperação em situações de falha.

Figura 62: Gráfico de barras: Heurística X Quantidade de Violações



Fonte: Elaborado pela Autora

5.2 Análise do Teste de Usabilidade

A realização do teste de usabilidade proporcionou uma compreensão da experiência do usuário no site. Por meio dela foi possível identificar a percepção geral dos participantes. Os participantes se sentiram à vontade utilizando o site e consideraram a facilidade de uso satisfatória, eles também se sentiram confiantes na precisão das operações de pesquisa e no tempo de resposta do sistema. A maioria dos participantes não sentiu a necessidade de assistência técnica. No entanto, alguns participantes relataram dificuldades específicas, como na pesquisa por NOX e área de superfície polar topológica. Essas pesquisas podem não estar claras ou intuitivas para os usuários e podem exigir mais informações explicativas ou exemplos na documentação. Sobre a organização das informações, a maioria dos participantes considerou os detalhes sobre as moléculas bem organizadas e acessíveis, eles conseguiram visualizar os dados relevantes e comparar as propriedades das moléculas.

5.3 Discussão dos Resultados

Os resultados da avaliação heurística identificaram várias violações de usabilidade em diferentes telas do sistema com problemas variando de cosméticos a grandes. Foram encontrados um total de 28 violações de usabilidade em 7 telas avaliadas, sendo elas, a Página Inicial, a Página de Gerenciamento de dados, a Página de Resultados, a Página de Detalhes do Composto, a Página de Login, o Modal do Help e o Modal do How to Cite. Dessa forma, obtivemos uma média de 4 violações por tela. Considerando essa média e o fato de termos 16 violações classificadas como problemas grandes, 7 como problemas

pequenos e 5 como problemas cosméticos, podemos inferir que existem várias questões significativas de usabilidade que precisam ser resolvidas no sistema. Isso é particularmente preocupante devido à quantidade de violações críticas que tem um impacto significativo e afetam negativamente a experiência do usuário e a eficácia do sistema.

Já os resultados do teste de usabilidade, indicam uma percepção geral positiva da usabilidade do sistema, mas também revelam áreas que podem ser aprimoradas, como a facilidade e entendimento na realização das pesquisas, considerando a disponibilidade de informações detalhadas para os usuários. Note que é importante levar em consideração o feedback dos usuários para implementar as melhorias e garantir uma experiência mais satisfatória e eficaz.

Essas descobertas fornecem orientações valiosas para a equipe de design e desenvolvimento, permitindo a melhoria da experiência do usuário e a correção dos problemas de usabilidade em todo o sistema.

5.4 Notas para o Redesign do Sistema

Considerando todas as recomendações de solução dos problemas de usabilidade detalhados durante a realização da avaliação heurística e dos resultados obtidos durante o teste de usabilidade, devem ser considerados alguns aspectos para realizar o redesign da ferramenta web SistematiX. Em primeiro lugar, é essencial analisar todas as sugestões de solução e implementá-las conforme necessário após discussão com a equipe. É particularmente relevante dar ênfase às heurísticas relacionadas à prevenção, reconhecimento, diagnóstico e correção de erros, bem como à flexibilidade, eficiência de uso, consistência e padronização.

Além disso, foi possível observar, que a maior dificuldade dos usuários é em relação as pesquisas disponíveis na plataforma. Dessa forma, é importante considerar o ajuste da interface. Para isso, a criação de um agrupamento lógico para as pesquisas deve ser analisada com o intuito de manter um design mais minimalista, tornando o processo de utilização do software mais eficiente para os usuários. Um exemplo disso, seria a separação das pesquisas por Estrutura Química (Structure Search e SMILES), Taxonomia (Family Search, Tribe Search, Genus Search, Species Search, Species Locations e Class Search), Propriedades Químicas (Filters Search) e Previsão de Bioatividade (PASS Search e PLATO Search).

Seria útil também fornecer informações detalhadas sobre os filtros, sobre as opções de pesquisa disponíveis no sistema e sobre os termos utilizados na página de detalhes de um composto, para atender às necessidades tanto de usuários mais experientes quanto de usuários menos experientes. Para fazer isso será necessário identificar todos os filtros, termos e pesquisas existentes, e descrevê-los de forma clara e concisa. Uma alternativa

seria a criação de Tooltips para guiar os usuários (por exemplo, Acid pKa: Mede a acidez de um ácido em solução. Quanto menor, mais forte), e a criação de uma página de documentação explicando como aplicar cada filtro e como realizar cada pesquisa, fornecendo uma descrição, e exemplos de uso. Ademais, semelhante ao agrupamento da página de pesquisa, os filtros também podem ser separados em propriedades.

Para realizar essa separação, os atuais filtros existentes poderiam ser agrupados de acordo com propriedades relacionadas, tornando assim, o sistema mais fácil para os usuários encontrarem os filtros desejados com base em sua finalidade. Por exemplo, poderiam ser separados em propriedades de solubilidade (Solubility at pH 7.4 e Intrinsic Solubility), propriedades de massa (Exact Mass e Relative Mass), e propriedades químicas (Acid pKa, Basic pKa, Log P, Nox, Topological Polar Surface Area e Hydrophilic-Lipophilic Balance).

Por fim, para assegurar uma maior consistência na maneira como o sistema lida com erros, seria viável reprojeter a abordagem de tratamento de erros estabelecendo códigos de erros específicos para diferentes tipos de ocorrências e implementando um mecanismo de tratamento de exceções. Esse mecanismo deve fornecer mensagens de erro informativas, por exemplo, para a exclusão de dados deve incluir o nome do elemento a ser excluído, o código de erro e uma descrição clara do problema. Seria útil também, documentar os códigos de erro e as mensagens de erro para que os usuários e desenvolvedores possam entendê-los melhor. Para auxiliar no direcionamento da resolução dos problemas, foi criada uma Lista de *Issues*, conforme detalhado no Apêndice 5 da página 107, sintetizando os problemas analisados em ordem de prioridade para resolução.

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Nesta monografia, exploramos a significativa importância do gerenciamento da qualidade de uso um software, que transcende as preocupações dos usuários, alcançando toda a empresa ou equipe encarregada de sua criação e manutenção. Destacamos que a usabilidade desempenha um papel fundamental nesse contexto, pois ela possibilita a identificação de áreas que requerem aprimoramento no sistema, isso, por sua vez, resulta em interações mais eficientes e satisfatórias para os usuários, contribuindo para que eles atinjam seus objetivos de maneira mais eficaz e satisfatória. Portanto, a avaliação qualidade de uso do software SistematoX é essencial para o sucesso do sistema e a satisfação dos usuários e das partes envolvidas.

Além disso, vimos como a área da quimioinformática pode contribuir para o desenvolvimento da química, em especial a química de produtos naturais, dado o desenvolvimento de ferramentas que auxiliam no gerenciamento e pesquisa de metabólitos secundários, e como, a ferramenta web SistematoX, tem um papel importante para a área farmacológica, atuando no aprimoramento dos estudos e descobertas de fármacos.

Conforme evidenciado durante a análise da avaliação heurística, o sistema em questão apresenta diversas violações heurísticas que exigem atenção e tratamento para aprimorar sua qualidade de uso. Embora a maioria dos resultados provenientes do teste de usabilidade sugira uma experiência de uso positiva, é crucial considerar as limitações inerentes ao grupo de usuários que participou da pesquisa. Dado que, o sistema atende a um nicho específico, a seleção de avaliadores que não possuíam um conhecimento prévio satisfatório da ferramenta, ou de soluções similares, mas que possuíam da área da química de produtos naturais, revelou-se desafiadora para a obtenção dos resultados. O SistematoX demonstra ser um sistema de fácil acesso e utilização para alunos de pós-graduação e pesquisadores, no entanto, necessita de aprimoramentos para alunos de graduação. Dessa forma, os estudos das áreas do sistema que precisam de melhorias para os usuários menos familiarizados com o domínio, podem se fazer necessários.

6.1 Trabalhos Futuros

Em relação a trabalhos futuros, o próximo passo envolveria a realização de um teste de usabilidade mais abrangente, considerando uma ampla gama de perfis de usuários, inclusive aqueles que nunca tiveram contato com plataformas de quimioinformática semelhantes. Uma vez que se trata de um sistema direcionado a um nicho específico, é necessário que o usuário possua um certo nível básico de conhecimento na área de química de produtos naturais, isso é necessário tanto para compreender os resultados de suas pesquisas quanto para contribuir com o gerenciamento e a criação de novos compostos.

Além disso, outra etapa crucial no avanço deste trabalho seria a validação das avaliações por meio da participação de um número maior de avaliadores de usabilidade. Isso proporcionaria um relatório de violações heurísticas mais abrangente e confiável, ao permitir comparações com outras avaliações. Essa abordagem visa aprimorar a precisão das descobertas e direcionar as melhorias necessárias no sistema, contribuindo para a contínua otimização da usabilidade e da eficiência do software.

REFERÊNCIAS

- [1] BROWN, Frank K. **Chemoinformatics: What is it and How does it Impact Drug Discovery**. In: Annual Reports in Medicinal Chemistry. Academic Press: James A. Bristol, 1998, vol. 33, pp. 375-384
- [2] AGRAFIOTIS, D.K., HOLLOWAY, M.K., JOHNSON, S.A. Química, informação e Frank: uma homenagem a Frank Brown. **Journal of Computer-Aided Molecular Design**, vol. 32, pp. 723-729, 07, 2018.
- [3] MESIA-VELA, Sonia. Drug Discovery and Therapeutic Medicine. **Phytomedicine: International Journal of Phytotherapy & Phytopharmacology**, vol. 13, no. 9-10, pp. 747, 11, 2006.
- [4] MOUHSEN, Lahlou. The Success of Natural Products in Drug Discovery. **Pharmacology & Pharmacy**, vol. 4, no. 3a, pp. 17-31, 06, 2013.
- [5] CHEN, Ya, KIRCHMAIR, Johannes. Cheminformatics in Natural Product-based Drug Discovery. **Molecular informatics**, vol. 39, pp. e2000171, 12, 2020.
- [6] FUMAGALI, E., GONÇALVES, R. A. C., MACHADO, M. DE F. P. S., VIDOTI, G. J., OLIVEIRA, A. J. B. de. Produção de metabólitos secundários em cultura de células e tecidos de plantas: o exemplo dos gêneros *Tabernaemontana* e *Aspidosperma*. **Revista Brasileira De Farmacognosia**, vol. 18, 2008. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0102-695X2008000400022>>.
- [7] TRO, Nivaldo J. Tradução: Oswaldo Esteves Barcia, Edilson Clemente da Silva **Química - uma abordagem molecular - volume 1**. Rio de Janeiro: LTC, 2017.
- [8] Bicudo, Carlos E. de M.. Taxonomia. **Biota Neotropica [online]**. 2004, v. 4, n. 1 [Acessado em: 1 Agosto 2023], pp. I-II. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S1676-06032004000100001>>.
- [9] Barbosa, S. D. J.; Silva, B. S. da; Silveira, M. S.; Gasparini, I.; Darin, T.; Barbosa, G. D. J. **Conceitos básicos**. Interação Humano-Computador e Experiência do usuário. Autopublicação, 2021.
- [10] Barbosa, S. D. J.; Silva, B. S. da; Silveira, M. S.; Gasparini, I.; Darin, T.; Barbosa, G. D. J. **Planejamento da Avaliação de IHC**. Interação Humano-Computador e Experiência do usuário. Autopublicação, 2021.
- [11] Barbosa, S. D. J.; Silva, B. S. da; Silveira, M. S.; Gasparini, I.; Darin, T.; Barbosa, G. D. J. **Métodos de Avaliação de IHC**. Interação Humano-Computador e Experiência do usuário. Autopublicação, 2021.

- [12] Requisitos Ergonômicos para Trabalho de Escritórios com Computadores: Parte 11 – Orientações sobre Usabilidade. Rio de Janeiro: ABNT, 2002. Disponível em: <https://www.inf.ufsc.br/~edla.amos/ine5624/_Walter/Normas/Parte%2011/iso9241-11F2.pdf>. Acesso em: 9 ago 2023.
- [13] Engenharia de software - Qualidade de produto: Parte 1: Modelo de qualidade. Rio de Janeiro: ABNT, 2003. Disponível em: <https://jkolb.com.br/wp-content/uploads/2014/02/NBR-ISO_IEC-9126-1.pdf>. Acesso em: 16 ago 2023.
- [14] Souza, M. K., Jacob, C. E., Gama-Rodrigues, J., Zilberstein, B., Cecconello, I., Habr-Gama, A. Termo de consentimento livre e esclarecido (TCLE): fatores que interferem na adesão. **ABCD. Arquivos Brasileiros De Cirurgia Digestiva**. (São Paulo), 26(3), 200–205 [Acessado em: 30 Agosto 2023] Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/S0102-67202013000300009>>.
- [15] Bradley, M., Lang, P. Measuring emotion: The self-assessment manikin and the semantic differential. **Journal of Behavior Therapy and Experimental Psychiatry**, 25(1), 49-59, 1994.
- [16] Mehrabian, A., Russell, J. A. . **An approach to environmental psychology**. The MIT Press, 1974.
- [17] Likert, R. A technique for the measurement of attitudes. **Archives of Psychology**, 22, 140, 55, 1932.
- [18] OLIVEIRA, Aline. O que é escala Likert e como aplicá-la na pesquisa? Disponível em: <<https://mindminers.com/blog/entenda-o-que-e-escala-likert/>>. Acesso em: 6 set 2023.
- [19] Brooke, John. SUS – A Quick and Dirty Usability Scale. **Usability Evaluation in Industry**, 189-194, 1986.
- [20] Brooke, John. SUS: a retrospective. **Journal of Usability Studies**, 29-40, 2013.
- [21] Costa, R.P.O.; Lucena, L.F.; Silva, L.M.A.; Zocolo, G.J.; Herrera-Acevedo, C.; Scotti, L.; Da-Costa, F.B.; Ionov, N.; Poroikov, V.; Muratov, E.N.; Scotti, M.T., The SistemX Web Portal of Natural Products: An Update. **Journal of Chemical Information and Modeling** 2021, 61 (6), 2516-2522.
- [22] Scotti, M.T.; Herrera-Acevedo, C.; Oliveira, T.B.; Costa, R.P.O.; Santos, S.Y.K.O.; Rodrigues, R.P.; Scotti, L.; Da-Costa, F.B. SistemX, an Online Web-Based Cheminformatics Tool for Data Management of Secondary Metabolites. **Molecules** 2018, 23, 103.

- [23] ALBUQUERQUE, E. F. Sistemax Usability Questionnaire. Disponível em: <https://forms.gle/Zska4ggYiz52cWaL7>. Acesso em: 12 outubro 2023.

APÊNDICE 1 - TCLE: Termo de Consentimento Livre e Esclarecido

Você está sendo convidado(a) a participar de um teste de usabilidade do Sistemax, uma ferramenta web que busca auxiliar a comunidade científica de pesquisadores de produtos naturais, realizando o gerenciamento de um banco de dados de metabólitos secundários. O objetivo do teste é analisar as respostas, avaliando a facilidade de uso e eficácia do site com o intuito de melhorar o software.

Note que você não precisará fornecer nenhum outro dado pessoal e nenhuma outra informação sobre você será registrada ao longo do teste. Ao preencher o questionário, você expressa seu consentimento em participar do experimento.

Obrigado(a)! Sistemax Team.

APÊNDICE 2 - Questionário Pré-Teste

1. Qual dos perfis abaixo melhor te representa?

- ☐ aluno(a) de graduação em química ou engenharia química
- ☐ professor(a) de química
- ☐ pesquisador(a) de produtos naturais
- ☐ funcionário(a) de uma empresa de produtos naturais ou relacionado
- ☐ outro

2. Em uma escala de 1 a 5, o quanto você está fisicamente exausto no momento?

Pouco ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Muito

3. Em uma escala de 1 a 5, o quanto você está nervoso(a) ou preocupado(a) com outros assuntos não relacionados a esta pesquisa?

Pouco ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Muito

4. Existe algum fator externo lhe atrapalhando?

- ☐ Sim
- ☐ Não

5. Você já utilizou o SistematiX, ou alguma ferramenta relacionada de quimiointormática?

- ☐ Sim
- ☐ Não

6. Você prefere executar o teste de usabilidade como Pesquisador ou Gerenciador?

- ☐ Pesquisador (Área Inicial do SistematiX, OBS: público alvo/comunidade em geral)
- ☐ Gerenciador (Área de gerenciamento dos dados do SistematiX, OBS: você precisa ser administrador do sistema)

APÊNDICE 3 - Questionário Pós-Teste (Pesquisador)

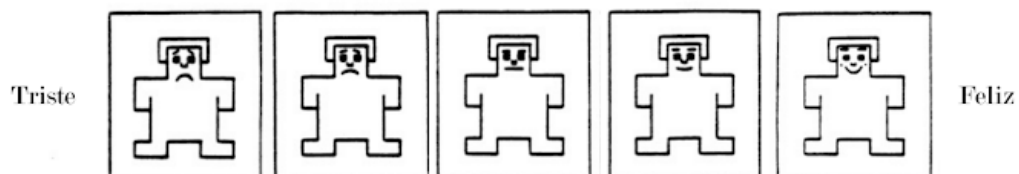
1. Em uma escala de 1 a 5, você se sentiu perdido ao tentar realizar alguma operação no sistema?

No controle ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Totalmente perdido

2. Você teve alguma dificuldade para realizar alguma pesquisa específica? (obs: deixe vazio se não teve)

- ☐ pesquisa por estrutura
- ☐ pesquisa por composto
- ☐ pesquisa por SMILES
- ☐ pesquisa por espécie
- ☐ pesquisa por localização
- ☐ pesquisa por família
- ☐ pesquisa por tribo
- ☐ pesquisa por gênero
- ☐ pesquisa por classe
- ☐ pesquisa por PASS
- ☐ pesquisa por PLATO
- ☐ pesquisa por massa exata
- ☐ pesquisa por massa relativa
- ☐ pesquisa por NOX
- ☐ pesquisa por solubilidade
- ☐ pesquisa por área de superfície polar topológica
- ☐ pesquisa por Lop P

3. Em uma escala de 1 a 5, como você está se sentindo em relação a assertividade da operação de pesquisa?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5

4. Em uma escala de 1 a 5, como você classificaria a facilidade de uso do site?

Muito fácil ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Muito Complexo

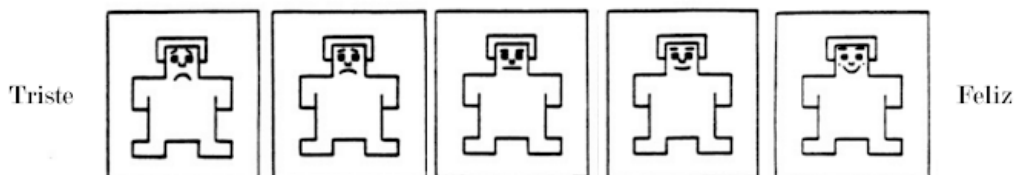
5. Em uma escala de 1 a 5, como você se sentiu em relação a disposição das informações sobre as moléculas?

Muito Desorganizado ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Muito Organizado

6. Em uma escala de 1 a 5, você acha que precisaria de ajuda de uma pessoa com conhecimentos técnicos para usar o site?

Consigo me virar ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Preciso de ajuda

7. Em uma escala de 1 a 5, como você se sente em relação ao tempo de resposta das operações realizadas no site?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5

8. Deseja incluir algum comentário adicional? (Opcional)

APÊNDICE 4 - Questionário Pós-Teste (Gerenciador)

1. Você teve alguma dificuldade relacionada às seguintes operações? (obs: deixe vazio se não teve)

- ☐ salvar os dados da molécula
☐ editar os dados da molécula
☐ deletar os dados da molécula

2. Em uma escala de 1 a 5, você se sentiu perdido ao tentar realizar alguma operação no sistema?

No Controle ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Totalmente Perdido

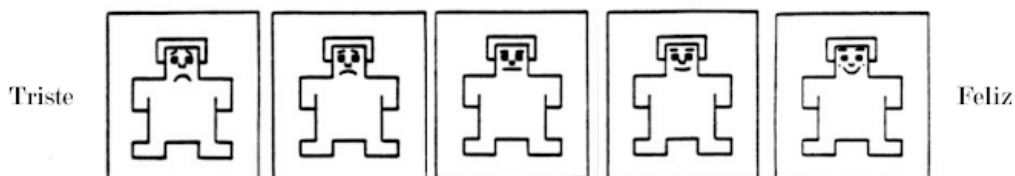
3. Em uma escala de 1 a 5, como você classificaria a facilidade de uso do site?

Muito Fácil ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Muito Complexo

4. Em uma escala de 1 a 5, você acha que precisaria de ajuda de uma pessoa com conhecimentos técnicos para usar o site?

Consigo me virar ☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5 Preciso de ajuda

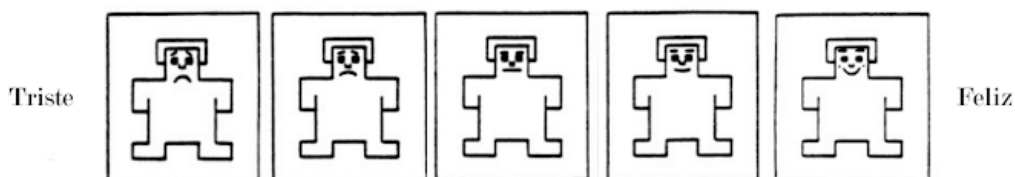
5. Em uma escala de 1 a 5, como você está se sentindo em relação a assertividade da operação de adição das informações de uma molécula?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5

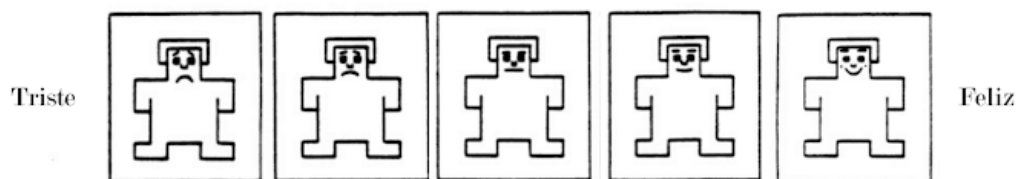
6. Em uma escala de 1 a 5, como você está se sentindo em relação a assertividade da operação de edição das informações de uma molécula?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

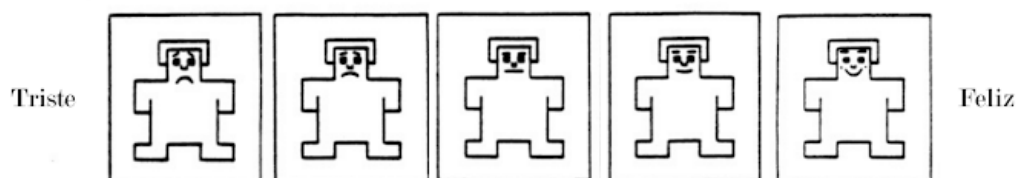
☐ 1 ☐ 2 ☐ 3 ☐ 4 ☐ 5

7. Em uma escala de 1 a 5, como você está se sentindo em relação a assertividade da operação de remoção das informações de uma molécula?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

8. Em uma escala de 1 a 5, como você se sente em relação ao tempo de resposta das operações realizadas no site?



Fonte: BRADLEY; LANG, 1994, p. 51 - Adaptado pela Autora

9. Deseja incluir algum comentário adicional? (Opcional)

APÊNDICE 5 - Lista de *Issues*

ID	Issue	Severidade	Melhoria
1	Ferramenta externa indisponível	3	Adequação do modal de alerta (para maiores detalhes verifique o Quadro 4)
2	Bug de especificação de entrada da Massa Relativa	3	Limitar inserção de dados pelo usuário (para maiores detalhes verifique o Quadro 8)
3	Bug de especificação de entrada do TPSA	3	Limitar inserção de dados pelo usuário (para maiores detalhes verifique o Quadro 8)
4	Bug de Especificação de entrada do NOX	3	Limitar inserção de dados pelo usuário (para maiores detalhes verifique o Quadro 8)
5	Bug de Especificação de entrada do PH	3	Limitar inserção de dados pelo usuário (para maiores detalhes verifique o Quadro 8)
6	Bug de Especificação de entrada do LogP	3	Limitar inserção de dados pelo usuário (para maiores detalhes verifique o Quadro 8)
7	Documentação incompleta	3	Expansão e aprimoramento da documentação (para maiores detalhes verifique o Quadro 9)
8	Geração de dados inválidos	3	Alterar geração de autocomplete para dados inválidos (para maiores detalhes verifique o Quadro 17)

ID	Issue	Severidade	Melhoria
9	Bug de inserção de dados inválidos para a criação de uma molécula	3	Limitar o input para valores numéricos (para maiores detalhes verifique o Quadro 18)
10	Não é possível criar uma molécula que já existe	3	Adequação do modal de alerta (para maiores detalhes verifique o Quadro 19)
11	Carregamento infinito de uma molécula	3	Exibir mensagem de erro ao carregar os dados (para maiores detalhes verifique o Quadro 20)
12	Bug modal de exclusão de um ‘Activity Type’	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 21)
13	Bug modal de exclusão de um “Activity System”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 21)
14	Bug modal de exclusão de um “Activity System Type”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 21)

ID	Issue	Severidade	Melhoria
15	Bug modal de exclusão de um “Solvent”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
16	Bug modal de exclusão de uma “Origin”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
17	Bug modal de exclusão de uma “Biomass”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
18	Bug modal de exclusão de uma “Presentation”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
19	Bug modal de exclusão de um “Project”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)

ID	Issue	Severidade	Melhoria
20	Bug modal de exclusão de um “Skeleton”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
21	Bug modal de exclusão de uma “Plant Part”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
22	Bug modal de exclusão de um “Journals and References”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
23	Bug modal de exclusão de “other Data”	3	Alterar mensagem de erro do modal para o nome do elemento a ser excluído (para maiores detalhes verifique o Quadro 22)
24	Disposição dos dados do PLATO	3	Filtro de pesquisa por nome de atividade (para maiores detalhes verifique o Quadro 14)
25	Feedback do Login	3	Adicionar alertas de erro (para maiores detalhes verifique o Quadro 15)

ID	Issue	Severidade	Melhoria
26	Sobrecarga visual das pesquisas existentes	2	Agrupamento lógico das pesquisas (para maiores detalhes verifique o Quadro 3)
27	Links não clicáveis	2	Ajustar redirecionamento para uma nova guia (para maiores detalhes verifique o Quadro 10)
28	Bug de inserção manual do valor da similaridade	2	Limitar o input para valores numéricos (para maiores detalhes verifique o Quadro 5)
29	Não é possível retornar para a pesquisa realizada	2	Adicionar botão de retorno (para maiores detalhes verifique o Quadro 11)
30	Ícone indefinido	2	Carregar o ícone de Search corretamente (para maiores detalhes verifique o Quadro 12)
31	Retorno ao topo da página para salvar dado de molécula	2	Alterar localização do botão de salvar (para maiores detalhes verifique o Quadro 16)
32	Pesquisa por Classe sem entrada do usuário	1	Alerta de preenchimento do input (para maiores detalhes verifique o Quadro 6)
33	Pesquisa por LogP sem entrada do usuário	1	Alerta de preenchimento do input (para maiores detalhes verifique o Quadro 6)

ID	Issue	Severidade	Melhoria
34	Repetição da operação na pesquisa Search All	1	Alteração da localidade de obteção de todos os dados do sistema (para maiores detalhes verifique o Quadro 7)