

# 分子反応予測のための可視化におけるインタラクションデザイン

中小路 久美代<sup>†</sup>, 佐藤 寛子<sup>‡</sup>, 山本 恭裕<sup>†</sup>, 青木 淳<sup>§</sup>, 浅岡 浩子<sup>§</sup>

**概要:** 本論は, 分子科学者が低分子の化学合成を設計し反応を予測するための, 分子モデルの表現系と操作系について, その役割と, 必要となるインタラクションデザインの要件について考察するものである. 化学反応を考えることは, 知識と経験, 直感と洞察力を駆使する, 化学者の知的創造作業とみなすことができる. 本稿では, まず化学反応について考察する際の化学者の思考プロセスについて説明し, 現状の分子モデル可視化システムについて論じる. 次に, 分子反応予測のためのインタラクションデザインについて, 可視化表現, 操作性, インタラクションフロー, および表現の忠実度という四つの側面から, 課題およびそれに処するための要件について述べる. そして, 現在我々が構築中の FRAU-VI システムについて簡単に説明をおこない, 最後に, 今後の進むべき方向について論じる.

## Interaction Design for Molecular Reaction Prediction

Kumiyo NAKAKOJI<sup>†</sup>, Hiroko SATOH<sup>‡</sup>, Yasuhiro YAMAMOTO<sup>†</sup>, Atsushi AOKI<sup>§</sup>, Hiroko ASAOKA<sup>§</sup>

**Abstract:** The goal of our research is to identify requirements for interaction design for visualization systems that support chemists in predicting reactions of small molecules. Synthetic design and molecular reaction prediction involve human knowledge, expertise and insights, and can be characterized as a creative knowledge task. This paper first explains a cognitive process of chemists in making molecular reaction prediction using external representations such as chemical reaction schemes and molecular models, and argues for the interaction design for visualization systems that support the process. Four aspects of such interaction design are then emphasized, including visualization, interactivity, interaction flows, and representational fidelity. We present the FRAU-VI (FRAU Visual Interface) system to illustrate our claim, and discuss future directions.

### 1 はじめに

分子科学の分野は, 古くからビジュアルな表現を重視し活用してきた学問領域である.

分子構造や化学反応は化学構造式や反応式などの形式でダイアグラミックに記述されてきた. 化学教育においても, また化学に携わる研究者や実務者にとっても, 分子モデルは分子構造を認識したり化学反応について考える際の便利なツールとして利用されてきている. DNA の二重螺旋モデルの意味が広く

一般の人にも理解された背景には, その可視化が与えた影響が大きい.

このような背景のもとで, 分子科学の分野で分子の可視化に計算機を利用するのは当然の流れであるといえる. しかし, 分子科学, 特に合成設計や分子反応予測といった化学反応について考察するための可視化技術の利用の現状をみると, その多くが事象のコミュニケーションや化学学習を目的としており, 化学者が研究活動において思考を行う際に有用に利用されているとは言い難い. 「化学合成経路を考えることは芸術を生み出すことに似ている」といわれる [2]. 目的の構造を有する化合物を得るための合成経路を設計し, また, 考えた化学反応が実際に起こりうるか, 目的の化合物が主要な反応生成物

<sup>†</sup> 東京大学先端科学技術研究センター  
Research Center for Advanced Science and Technology, University of Tokyo

<sup>‡</sup> 国立情報学研究所  
National Institute of Informatics

<sup>§</sup> 株式会社 SRA先端技術研究所  
SRA Key Technology Laboratory, Inc.

として得られるかを考えることは、化学者が高度に統合化された知識と経験を活用しながら、直感や洞察を働かせる知的創造活動として捉えることができる。そのような知的創造活動のためのシステムには、従来化学者が活用してきている化学構造式やプラスチックなどの素材からなる分子模型といった外在化表現の利点を鑑みつつ、より化学者の思考に沿った表現系と操作系とを提供するインタラクティブデザインが求められる [3, 14]。

本稿では、分子科学者が低分子の反応を予測するための、分子モデルの表現系と操作系について、その役割と、必要となるインタラクティブデザインの要件について考察するものである。以下に、まず、反応予測における化学者の思考プロセスについて説明し、現状の分子モデル可視化システムについて論じる。次に、分子反応予測のためのインタラクティブデザインについて、可視化表現、操作性、インタラクティブフロー、および表現の忠実度という四つの側面から、課題およびそれに対処するための要件について述べる。4章では現在我々が構築中の FRAU-VI システムについて簡単に説明をおこない、最後に、今後の進むべき方向について論じる。

## 2 化学反応について考察する化学者の思考プロセスと可視化表現

### 2.1 化学者の思考プロセス

従来から分子科学においては視覚的表現が活用されてきている。図的表現である化学構造式や、分子模型などである(図 1)。

化学者は、これらの外在化表現を介して現象の理解をおこないながら、合成経路を考え、その化学反応が実際に主反応として起こるかを予測し考察する。すなわち、化学構造式や分子模型を見たり、触ったり、操作したりしながら、分子構造の比較、考察、判断をおこなう。

一般に基本的に用いられるのは化学構造式である。化学構造式は分子科学者にとって必要不可欠な分子記述法である。分子について考察する際に重要となる多くの情報を、非常に適切な抽象度度で含む、洗練された表現方法である。一方、どの分子のどの部位が立体的に込み合っているか、どの原子同

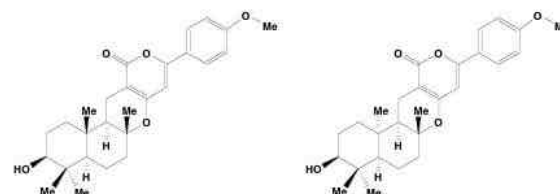
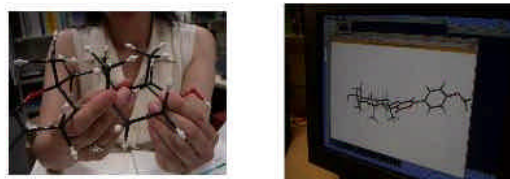


図 1: 分子科学における視覚的表現

士が実際に近い位置にあるか、といった三次元空間における分子の幾何構造を認識するためには、分子模型が用いられる。分子模型を手にとり操作しながら、原子間の位置関係などを様々な角度から眺める。

このように化学者は、必要となる抽象度を提供する適切な表現形態を利用しながら分子の様々な特徴を観察しつつ、化学反応の起こりやすさや選択性などについて知識と経験に基づいてメンタルシミュレーションをおこない、合成設計と反応予測の検討や考察を重ねる。

例えば、実際に化学者がどのように分子模型を利用して低分子の分子構造の立体化学的特徴を捉えたり、化学反応について考察したりするかを観察してみると、模型を組み立て、左手で模型をしっかりと保持し、右手で結合軸の関係を微妙に調整しながら、様々な方向から模型を眺めている(図 2)。その際、左手を操作の基点としてうまく利用しながら、模型を結合軸に沿って回転させたり、結合軸を含む平面の裏側を覗いたりしながら、右手で微妙な模型の調整をおこない、頭を動かしつつ、観たい側面からモデルを眺めている。回転軸の裏側の様子と比較する際には、模型を保持している左手で回転操作とそれを戻す操作とが非常に素早く繰り返しおこなわれ、模型を眺めながら、頭の中で立てた仮説に対してメンタルシミュレーションをおこなっている様子が観察される。

このプロセスには、建築設計者が、手描きのスケッチをおこないながら建物の構造を規定していくプロ

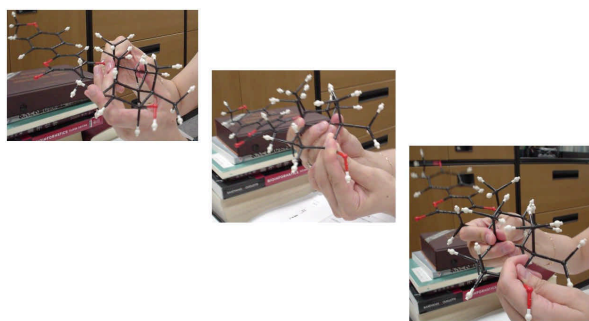


図2: 分子模型の利用

セスとの類似点を見出すことができる。建築設計者は、A3 サイズの紙とB2 の鉛筆といった道具を用いてスケッチをおこない、設計の初期段階である概念設計を進めていく [12]。曖昧さを含んで表出された図表現との対話を通して、幾度も what-if 状況をメンタルシミュレーションしながら、不確定な要因を漸次的に明確化していく [10, 18]。設計の仕様を正確に表現するCAD ツールはしばしば概念設計時の建築設計者の思考を阻害し、何通りにも解釈可能なスケッチという表現形態が建築設計者の創造的思考過程に効果的にはたらいっているとされている [4]。

両者のプロセスを比較すると、下記のような共通点を見ることができる。

- 複雑に絡み合った既知および未知の要因を考慮する
- メンタルシミュレーションを繰り返すおこなう

これをおこなうために、建築設計者も化学者も、曖昧性や多様な解釈を与え得るような low fidelity (低忠実度) な表現を直接的に操作していることができる。ここでいう low fidelity な表現とは、虚偽やいい加減な情報が混在しているという意味ではなく、適切な抽象化がおこなわれ、余分な詳細が削ぎ落とされているような表現を指す。Low fidelity な表現を利用することによって、その状況では不必要であったり無関係であったりする詳細に惑わされることなく、注目したい点に注目できるように操作することが可能となる [22]。

## 2.2 分子モデル可視化システムの現状

分子モデルを表示するためのソフトウェアは既に多く開発されてきている。例えば平面構造描画ソフト

ウェアとしては市販の ChemDraw (米国ケンブリッジソフト) が特に有機化学分野においてはスタンダードツールとして利用されている。また、Chem3D (米国ケンブリッジソフト) や CAChem (英国オックスフォードモレキュラー社) といったソフトウェアでは、三次元的に分子構造図を描画し、ユーザはそれを表示し操作することができる。

これらの表示・描画システムの利用の目的として三種類が考えられる。

第一に、デザインした合成経路や予測の内容、実験結果や考察から得られた結論を、他の化学者とコミュニケーションするという目的がある。一般に、上述の市販システムの多くはこれらの目的のために利用されている。また、RasMOL [16] や Chime [6] といったフリーウェアのタンパク質分子可視化環境も、対象とする分子を、目的に沿った表現で表現するためのツールである。化学者は、前節で説明したような思考プロセスを経て化学反応についての考察をおこなうが、その際に利用したメンタルシミュレーションに最も近い表現を選択し、論文発表やミーティング、講演で利用する。化学者間でのコミュニケーションの媒介を果たすメディアとしての目的を果たす。

第二に、教育および学習を目的とした利用である。化学者は、ある程度の熟練を積み、平面的に描かれた化学構造式を見ただけで三次元構造のイメージを頭の中に描き、回転させたりしながら個々の原子が三次元空間においてどのような位置関係にあるかを考えることもできるようになる。しかし、解析した経験のない分子や複雑な構造をもつ分子等についてそのような三次元構造のイメージを描くことは容易ではない。すなわち、これらの視覚化スキルは、模型や三次元モデルを実際に「見る」ことによって構築されていくものであると考えられる。前節で述べたような、low fidelity な表現を見ることで頭の中でメンタルシミュレーションをおこなえるようになるのは、このようなドメイン固有の視覚化スキルが出来上がるためだと考えられる。この学習過程は、建築設計者が、平面図を見ながら三次元構造を思い浮かべることができるようになるための学習過程に相当すると捉えることができる。

最後に、化学構造式や分子モデルに取って代わるような、化学者が仮説生成や検証といった思考をお

こゝ際実践的に利用する外在化表現としての目的がある。このような化学反応の考察のための可視化システムは、前節で説明した事柄をおこない易いような表現系と操作系とを提供する必要がある。しかし、既存の分子モデル可視化システムでは、このような化学者の思考に沿うようにインタラクションがデザインされているものはほとんど見られない。

次章では、これを目的とした分子モデルの可視化とそのインタラクションデザインについて考察する。

### 3 分子反応予測に向けたインタラクションデザイン

我々は、分子反応の考察をおこなう化学者のための分子モデルの可視化環境の構築を目的として研究をおこなっている。具体的には、数値化された分子の特性といった、広い意味でのシミュレーションによる数値結果を分子モデル上に可視化する。そして、low-fidelity な表現を直接的に操作できるという2.1節で述べた現状の表現形態の良さを失うことのないよう、化学者の思考プロセスに沿ったインタラクションデザインの実現を目指している。

並列計算、グリッドコンピューティング、専用メモリといった近年の計算機科学分野の技術進展にともない、大規模かつ複雑な対象系のシミュレーションをより高速に実行することが可能となってきている。以前はバッチ処理でおこなっていたシミュレーション計算を対話的におこない可視化することも可能となりつつある。分子反応解析のための可視化をおこなう際には、こういったシミュレーション計算結果を忠実に再現しそれに汎用的なインタフェースを付加するのみでは不十分な場合も多い。前章で述べたような化学者の思考に沿うようなインタラクションデザインをおこなう必要がある。

インタラクションデザインという言葉の定義自体には様々なものがあり、インタラクティブなシステムのデザイン全般を指すものもあれば [15]、振る舞い、機能、情報、そしてそれをユーザにどう見せるか、を選択していくこと [7]、と定義を絞っているものもある。我々の研究では、インタラクションデザインを、「ユーザがどのような思考過程を経験しながらシステムを利用するのか」という視点から、システムの表現系と操作系とを決めていくこと」を指すものとしている [3]。

分子反応予測のためのシステムにおける表現系は、分子の特性やシミュレーション結果を数値化したものの表示と、ユーザの操作対象、という二つの役割を担う必要がある。すなわち、操作系が表現系に制約を与え、表現系は操作系を規定することとなる。この両者を、化学者の思考のフローを阻害しないように決めていく必要がある。

本章では以下に、可視化表現、操作性、インタラクションフロー、および表現の忠実度という四つの側面から、インタラクションデザインにおける課題およびそれを処するための要件について述べる。

#### 3.1 可視化表現

数学的に同等であるとみなしうる情報であっても、人間の認知能力の特性や限界から、その表現形態に応じて人間の理解度に差異が生じる [21]。分子科学においては、シミュレーション結果の同一性や傾向を認識することは極めて重要である。しかし、たとえば、同一性を示すために同色を割り当てても、色の干渉による色彩の錯視により、画面上では人間には異なって見えてしまう [11]。

そこで、同一性を示すために、色彩の錯視の補正をおこなう必要がある。また、他の視覚的な識別情報の提示を利用する手法が必要となる。たとえば、点滅表示やアニメーションといった動きを利用した表示が考えられる [13]。また、力覚フィードバック装置などを利用して、分子表面をなぞった際のテキスチャの触覚を同一にするなどの触覚的な識別情報の提示も可能である。

#### 3.2 操作性

2.1 節で述べたように、化学者は分子模型を操作する際に、左手で模型を保持しながらそれを基点、すなわちホームポジションとして迅速に模型の回転操作をおこなう。回転の方向や量も、結合軸に沿った回転であったり、立体配座の反転であったりと、その時点で着目している分子の特性や、生成しつつある仮説に基づく操作である。

現在、通常三次元構造モデルのためのシステムのインタフェースとして用いられている VRML ビューアなど汎用的なインタフェースでは、視点操作や表示距離操作の自由度はあるものの、ホームポジシ

を指定した素早い回転比較や、軸に沿った回転、といったような制約でガイドされるような操作をおこなうことができない。また、可視化表現との対話手法をより直接的な操作として実現することによって、可視化された情報の要因間の関係を理解することが容易になることが示されている [19]。操作とその結果としての表現の変化との対応を維持しつつ、適切な制約を与えることにより、ユーザにかかる操作のための認知負荷を最低限にすることが必要である。

一方、分子の立体的構造や静電的構造といった分子構造に適合した可視化操作系を、力覚フィードバックデバイスを利用して実現するというアプローチも取られはじめている。例えば、IMD (Interactive Molecular Dynamics) [20] ではマウス入力を力覚に変換してインタラクティブシミュレーションをおこなえるインタフェースを提供している。また、CAVEStudy という、仮想現実空間を構築するツールキットを、分子表現のシミュレーションに応用しているアプローチなどもある [9]。ほかにも、仮想現実環境を利用して分子構造の操作や分子軌道に沿ったウォークスルーなどを目指したアプローチなどが多数ある。

こうした技術は、人の感覚に直接訴え理解を促すことができるという利点をもつ。しかしながら、それを利用する際には、実践的な研究に適った細かな特性や数値の相違を力学フィードバックデバイスや仮想現実感技術から人が認知しうるかどうか、といった人の認知の感度という本質的な問題について深く考慮する必要がある。また、上述の適切な制約をいかに与え「何でもできるが何にもできない」という操作環境とならないように考慮する必要がある。

### 3.3 インタラクションフロー

反応について考察する化学者は、化学構造式や分子模型といった外在化表現とインタラクションをおこないながら、仮説生成、比較検証、考察、といった内省行為を繰り返しておこなう。そのための可視化システムは、「見たいところが見たいように見える」ようになっていくことが望ましい。その際、必要な場合に適切な抽象化ができることも大事な要素である。情報可視化技術で重要とされる、「概観と詳細」「フォーカスプラスコンテキスト」といった閲覧の技法 [5] は、分子モデルを可視化する際にも重要な要件となる。

例えば化学者を観察していると、ある分子の静電的特性の可視化表現を見た後、特異な数値を有する一部分に着目し、その部分のみをより詳細な数値分布でみたい、その分布で他の部位と比較してみたい、といった要求が確認される。それら一連の思考のフローをできるだけ損なうことなく、化学者が見たいと要求する可視化を生成できるようなインタラクションデザインが必要となる。

### 3.4 表現の忠実度

最後に、そして最も問題となる課題として、シミュレーション結果はある仮定したモデルに基づく計算結果であり、必ずしも事象を正しく射影しているとは限らないという点がある。モデルは事実を抽象化した結果であり、抽象化した部分と捨象した部分とが、必要に応じて化学者に理解できるように表示される必要がある。

たとえば、以下は、タンパク質の結晶化モデルの可視化についての記述である。

“All crystallographic models are not equal. ... The brightly colored stereo views of a protein model, which are in fact more akin to cartoons than to molecules, endow the model with a concreteness that exceeds the intentions of the thoughtful crystallographer. It is impossible for the crystallographer, with vivid recall of the massive labor that produced the model, to forget its shortcomings. It is all too easy for users of the model to be unaware of them. It is also all too easy for the user to be unaware that, through temperature factors, occupancies, undetected parts of the protein, and unexplained density, crystallography reveals more than a single molecular model shows.” [Crystallography Made Crystal Clear, Rhodes, p.183]

美しく表現された結晶モデルを観てしまうことで、それが想定している条件要因などを忘れ、その可視化モデル自体が対象としているタンパク質そのものであると勘違いしてしまうことの危険性について触れている。

計算機上で事物を表現する上で、適切な曖昧さの表現というのは実は非常に難しいが、曖昧さのもつ効用も認められつつあり [8], 曖昧表現についても今後研究が進むと期待される。特に、ユーザーである化学者が曖昧に表現したい要求に忠実に応えて表現できる柔軟性が要求される。また、画面上やスクリーン上に投影された表現のうち、どの部分が意図して表現されていて、どの部分が便宜上表現されてしまっているのか、といったことを区別してユーザーに伝えることも、今後の可視化における大きな課題である。

## 4 FRAU-VI と今後の課題

### 4.1 FRAU-VI システム

FRAU-VI (Visual Interface) とは、化学反応特性を数量化する FRAU システムの可視化のために構築されたインタフェースである。FRAU (Field-characterization for Reaction Analysis and Understanding) システムは、仮想反応相手との相互作用に基づいて分子を取り囲む三次元的な立体的、電子的、空間的特徴を数値化した FRAU 特性値を計算するシステムである [2, 17]。FRAU は、分子を構成する原子ごとに FRAU 特性値を計算し、その方向のどの相互作用が反応に大きく寄与しているかを知るための有力な情報を与える。

FRAU-VI は、この FRAU 特性値の分布の様子の観察を可能とするために可視化をおこなう (図 3)。現状のインタフェース部分は、VisualWorks Smalltalk 上でオープンソース 3D マルチメディアライブラリ

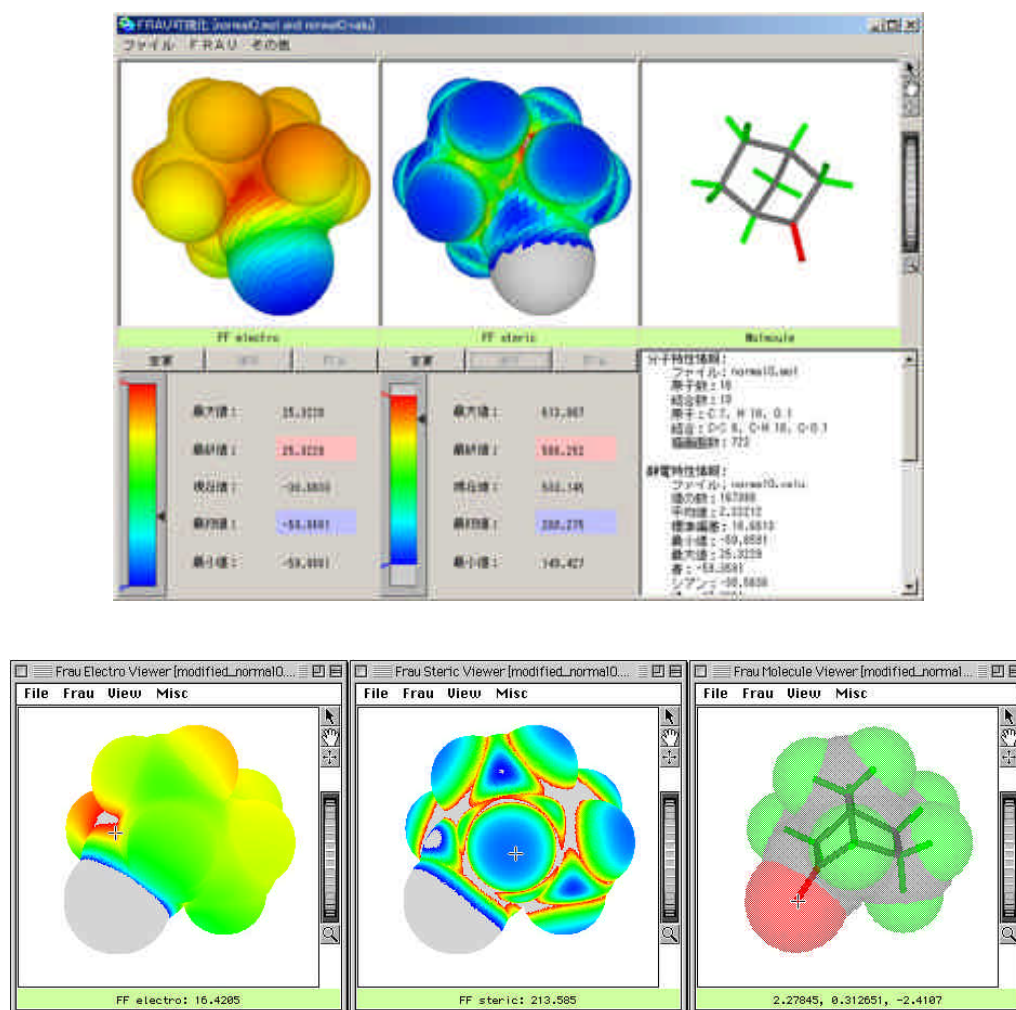


図 3: FRAU-VI システム

ゆん」(www.sra.co.jp/people/aoki/Jun/Main.htm) を用いて構築されている。あらかじめ計算された FRAU 特性値を読み込み、数値を色にマッピングして表示する。FRAU-VI は FRAU 特性値のうちの各指標を異なるビューで表示する。異なるビューに表示された分子モデルは連携して操作され、一つのビューでの操作が他のビューにも反映される。各ビューには、プロパティペインが付随しており、どの色がどの値にマッピングされているか、表示する値の最高値と最低値、などを表示している。また、ビューにおける可視化された分子の一点をクリックすると、その部分の点に対応する値がプロパティペインに表示される。

FRAU-VI では、3D 分子モデルの操作と可視化のカラーマッピング操作という二つの側面に関して、前章で述べた要件を考慮している。

3D 分子モデルの操作では、結合軸のみを表示するペインを設け、視点操作は結合軸ビューでおこなうとした(図 3)。また、可視化した結果をブックマーク化してとどめておけるように、画面をスポンする機能を設けた。これにより、ビュー間の比較がおこなえるようになってきている。現状では結合軸操作には制約は設けていないが、指定された軸に沿った回転や、対称表示など、ビューへの制約を加えていく予定である。また、SPIDAR という球状の三次元力覚デバイスをインタフェースとして利用する [1] ことで、画面上に見えているビューの操作がより直感的になるように開発をおこなっている。

可視化のカラーマッピングに関しては、カラー操作バーを各ビューのプロパティペインに提供し、そ

のビューで用いる色範囲を指定できる。現状では高い値を暖色、低い値を寒色にあてている。カラー操作バーでスライダーを利用して最大値最小値を指定することにより、そのビューでの色表示の値とのマッピングを変化させることができる。

## 4.2 研究の方向性

本稿では、分子反応について実践的な考察をおこなう化学者が、見る、操作する、比較/考察する、といったフローに沿って化学反応に関する仮説生成と検証がおこなえるような、可視化システムのためのインタラクションデザインについて考察をおこなった。上述の FRAU-VI は、今後、3 章で考察したような要件に沿って今後発展させていく予定である。将来的には、分子反応解析のための、可視化表現、操作環境とインタラクティブ性を考慮した図 4 に示すような統合環境を構築する予定である。

## 5 おわりに

化学研究における情報技術の開発と応用は、化学情報学(ChemInformatics)という分野で研究が進められてきている [2]。しかしながら、芸術的と呼ばれ、プロの化学者の知識と経験、直感と洞察力といった人的要因に深く関わる合成設計を支援するためのインタフェース研究は、まだ緒についたばかりである。我々のアプローチは、化学反応について考察する化学者の行為を知的創造作業とみなし、知的創造作業を支援するためのインタラクションデザインという視点でシステムの構築をおこなおうというものである。

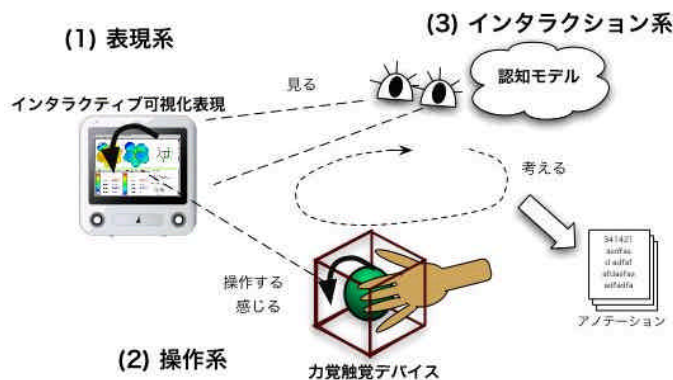


図 4: 統合的分子反応予測環境

仮想現実やハプティックデバイスを利用した分子科学のための可視化システムは増加しつつあるが、その多くが技術主導で進められているように見受けられる。情報技術者が、「こんなことができる」あんなこともできる」と化学者に提示しても、化学者自身がそれを自分の課題とどう結びつけることができるかを考え利用することは容易ではないし、また適切でもない。我々は、情報技術で可能となること、を模索しつつ、化学者にとって化学者の思考作業に有用となるように、情報技術を「デザイン」することが重要であると考えている。

### 参考文献

- [1] 金載然, 洪性寛, 佐藤誠, 小池康晴, SPIDARを用いたsize-weight illusionの検証, 日本バーチャルリアリティ学会論文誌, vol.7, no.3, pp.347-345, 2002.
- [2] 佐藤寛子, 化学情報学: 化学反応の系図と反応予測, 情報学シリーズ 7, 丸善株式会社, 2003.
- [3] 中小路久美代, 山本恭裕, 創造的情報創出のためのナレッジインタラクシヨndeザイン, 人工知能学会論文誌, March, 2004, (in print).
- [4] R. Arnheim, Visual Thinking. University of California Press, Berkeley, 1969.
- [5] S.K. Card, J.D. Mackinlay, B. Shneiderman, Readings in Information Visualization: Using Vision to Think, Morgan-Kaufmann Publishers, San Mateo, CA, 1999.
- [6] Chime, <http://www.umass.edu/microbio/chime/>
- [7] A. Cooper, The Inmates are Running the Asylum: Why High-Tech Products Drive Us Crazy and How to Restore the Sanity, SAMS Publishing, 1999.
- [8] B. Gaver, J. Beaver, S. Benford, Ambiguity as a Resource for Design, Proceedings of CHI2003, ACM Press, Ft. Lauderdale, FL., pp.233-240, 2003.
- [9] D. Germans, H.J.W. Spoelder, L. Renambot, H.E. Bal, VIRPI: A High-Level Toolkit for Interactive Scientific Visualization in Virtual Reality, Proceedings of Immersive Projection Technology/Eurographics Virtual Environments Workshop (IPT/EGVE), May 16-18, Stuttgart, Germany, 2001.
- [10] M.D. Gross, E.Y-L. Do, Ambiguous intentions: A paper-like interface for creative design, Proceedings of UIST'96, ACM, pp. 183-192, 1996.
- [11] S. Ishizaki, Color adaptive graphics: What you see in your color palette isn't what you get! ACM SIGCHI '95 Companion. May, 1995.
- [12] B. Lawson, Design in Mind, Architectural Press, MA, 1994.
- [13] K. Nakakoji, A. Takashima, Y. Yamamoto, Cognitive Effects of Animated Visualization in Exploratory Visual Data Analysis", Proceedings of Information Visualisation (IV01), IEEE Computer Society, pp.77-84, London, United Kingdom, 2001.
- [14] K. Nakakoji, Y. Yamamoto, Toward A Taxonomy of Interaction Design Techniques for Externalizing in Creative Work, Proceedings of HCII2003, Vol.2, Theory and Practice (Part II), C. Stephanidis, J. Jacko (Eds.), pp.1258-1262, Crete, Greece, June, 2003.
- [15] J. Preece, Y. Rogers, H. Sharp, Interaction Design: Beyond Human-Computer Interaction, John Wiley and Sons, 2002.
- [16] RasMOL, <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/>
- [17] H. Satoh, S. Itono, K. Funatsu, K. Takano, T. Nakata, A Novel Method for Characterization of Three-dimensional Reaction Fields Based on Electrostatic and Steric Interactions toward the Goal of Quantitative Analysis and Understanding of Organic Reactions, Journal of Chemical Information and Computer Sciences, Vol.39, 671-678, 1999.
- [18] D.A. Schoen, The Reflective Practitioner: How Professionals Think in Action, Basic Books, NY, 1983.
- [19] B. Shneiderman, P. Maes, Direct manipulation vs. interface agents, ACM Interactions, Vol.4, Issue 6, November, 1997.
- [20] J. E. Stone, J. Gullingsrud, K. Schulten, P. Grayson, A System for Interactive Molecular Dynamics Simulation, ACM Symposium on Interactive 3D Graphics, J. F. Hughes, C. H. Sequin (Eds.), ACM SIGGRAPH, pp.191-194, New York, 2001.
- [21] E.R. Tufte, Visual Explanations, Graphics Press. Cheshire, CT, 1997.
- [22] M. Walker, L. Takayama, J. Landay, High-Fidelity or Low-Fidelity, Paper or Computer? Choosing Attributes when Testing Web Prototypes, Proceedings of Human Factors and Ergonomic Society 46th Annual Meeting, 2002.