

LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN
Department "Institut für Informatik"
Lehr- und Forschungseinheit Medieninformatik
Prof. Dr. Andreas Butz

Bachelorarbeit

**Design und Entwicklung eines Web-Interfaces zur
chemischen Analyse von quantenmechanischen Daten**

Kurt Jacob Reinhard Groß
ja.gross@campus.lmu.de

Bearbeitungszeitraum: 02.11.2020 bis 22.03.2021
Betreuer: Linda Hirsch
Externe Betreuer: Prof. Dr. Hendrik Zipse, Dr. Harish Jangra, Dr. Thomas Engel
Verantw. Hochschullehrer: Prof. Dr. Andreas Butz

Zusammenfassung

Die Analyse von quantenmechanischen Daten in der Quantenchemie benötigt derzeit eine Kombination aus mehreren Programmen, was den Einstieg erschwert und die Effizienz Forschender einschränkt. In der Vergangenheit haben sich Online-Tools in der Chemie bewährt, weswegen es wünschenswert ist, weitere Prozesse für die digitale Nutzung aufzubereiten und anzubieten. Ein solcher Prozess ist die Analyse und Berechnung der Reaktionsenergie, welcher in dieser Arbeit durch ein Web-Interface visuell analysierbar gemacht werden soll. Insbesondere die gleichzeitige Kombination von Visualisierung und Datenberechnung stellt in dem Fachbereich einen einzigartigen, neuen Ansatz dar. Zur Umsetzung wurden die Prinzipien des User-Centered Design verwendet und User-Stories angefertigt, um das Minimum benötigter Features für die Analyse zu finden, mit dem Ziel, die Komplexität des User-Interfaces und einhergehende Frustration Nutzender gering zu halten, sowie Motivation der Nutzung durch höhere Nützlichkeit zu steigern. Zur Darstellung der Analyse wird die „Drag & Drop“-Mechanik verwendet, um Nutzenden eine spielerische und interaktive Erfahrung zu bieten. Im Rahmen der Entwicklung wurde ein Prototyp angefertigt, iterativ verbessert und anhand von Fragebögen ($N = 19$ Teilnehmer/-innen insgesamt), sowie einer Videostudie mit fünf Personen validiert. Die Ergebnisse der Nutzerstudien zeigen, dass eine positive Nutzererfahrung, gute Nutzerfreundlichkeit (System Usability Scale Score = 75,4) und niedrige Teilbelastung (Raw TLX arithmetisch gemittelt pro Person nach Nutzung des Historie-Features = 4,9) erreicht wurde. Die Tests zeigen außerdem Drag & Drop macht Nutzern Spaß und hilft zugleich Analyseergebnisse nachzuvollziehen und genauer zu untersuchen. Zudem gaben die Studienteilnehmer/-innen an, dass sie die Anwendung in ihrer tatsächlichen Forschung hilfreich finden und dementsprechend nutzen würden.

Abstract

The analysis of quantum mechanical data in chemistry currently requires a combination of several programs, which makes it difficult to get started and limits the efficiency of researchers. In the past, online tools have proven themselves in chemistry, which is why it is desirable to prepare and offer additional processes for digital use. One such process is the analysis and calculation of reaction energies, for which this work aims to create a web interface for visual analyzation. In particular, the simultaneous combination of visualization and data calculation represents a novel approach in the area. The approach follows the User-Centered Design: User Stories were created first to find the minimum required features, with the goal of reducing the complexity of the user interface and frustration of users, as well as to increase the motivation of use through high usefulness. The "Drag & Drop" mechanism is used to display the analysis and offers users a playful and interactive experience. Next, one prototype was developed, iteratively improved, and validated using questionnaires ($N = 19$ participants in total) and a video study with five people. The results of the user studies show a positive user experience, good usability (System Usability Scale Score = 75.4) and low specific task load (Raw TLX arithmetic mean = 4.9). Results show "Drag & Drop" is fun for users and at the same time helps to understand and examine analysis results in more detail. In addition, the study participants find the prototype helpful in their research and would use it.

Aufgabenstellung

Quantenmechanische (QM) Simulationsdaten und QM-Berechnungen in molekularen Systemen, die mit Softwarepaketen für die Quantenchemie generiert werden, spielen im Bereich der Chemieforschung eine sehr wichtige Rolle. Die Daten erfordern dabei eine umfangreiche Vorverarbeitung (häufig unter Verwendung proprietärer Software) für eine aussagekräftige Analyse und werden in der QM-Datenbank des Molecular Information Archive (MOLAR) gespeichert. Ziel dieser Arbeit ist es, eine benutzerfreundliche Plattform zu schaffen, auf der grundlegende chemische Analysen von QM-Daten durchgeführt werden können und die Plattform in MOLAR zu integrieren.

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, alle Zitate als solche kenntlich gemacht sowie alle benutzten Quellen und Hilfsmittel angegeben habe.

München, 21. März 2021

.....

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis	1
1 Einleitung	3
1.1 Umfeld	3
1.2 Motivation	3
1.3 Erwartung	4
1.4 Methodik	5
2 Literatur-Review	7
2.1 Usability	7
2.2 User Experience (UX)	8
2.3 E-Learning	8
2.4 Gamification und Drag & Drop (D&D)	9
2.5 Messung	10
2.6 Exkurs: Funktionsweise der chemischen Analyse	11
3 Planung	13
3.1 Nutzung vorhandener Ressourcen	13
3.2 Zielgruppen	13
3.3 Zielgeräte & Zielbrowser	14
3.4 Entwicklungsprozess	14
3.5 User-Stories	14
3.6 Entwurf der Benutzeroberfläche	15
4 Ergebnis & Diskussion	19
4.1 Prototyp 1	19
4.1.1 Validierung per Nutzerbefragung	25
4.1.2 Auswertung der Validierung	25
4.2 Prototyp 2	29
4.2.1 Verbesserungen gegenüber Prototyp 1	30
4.2.2 Validierung per Nutzerstudie	37
4.2.3 Auswertung der Nutzerstudie	38
4.3 Deployment & Integration in MOLAR	46
4.4 Soll-/Ist-Vergleich	48
5 Zusammenfassung & Ausblick	49
5.1 Lessons Learned	50
5.2 Ausblick	51
Abbildungsverzeichnis	55

Abkürzungsverzeichnis

AT	Analyse-Tool	7
CSS	Cascading Style Sheets	5
D&D	Drag & Drop	i
E-State	Energy State	37
HTML	Hypertext Markup Language	5
JSON	JavaScript Object Notation	33
LMU	Ludwig-Maximilians-Universität	3
LOT	Level of Theory	15
LRU	Least Recently Used	35
MOLAR	Molecular Information Archive Repository	3
OS	Operating System	14
QM	quantenmechanisch	3
RTLX	Raw (NASA) Task Load Index (TLX)	37
SemVer	Semantic Versioning	51
SQL	Structured Query Language	22
SUS	System Usability Scale	10
TLX	(NASA) Task Load Index	1
UCD	User-Centered Design	5
UI	User-Interface	4
URL	Uniform Resource Locator	22
UX	User Experience	i
XHR	XMLHttpRequest	33
XSS	Cross-Site-Scripting	22

1 Einleitung

Eine in 2020 angefertigte Studie des Departements für Chemie der Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) zeigt deutlich (bis zu 100%) verbessertes kognitives, affektives und psychomotorisches Lernen in einem Chemie Laborkurs durch Onlinemedien, in der Studie mithilfe einer Video-Bibliothek [1]. Pölloth, Schwarzer und Zipse beschreiben als Fazit, es erscheine wichtig, versatile und vielfältige Online-Lehr-Tools zu erstellen, damit sich die Chance erhöhe, den vielfältigen Ansprüchen und Präferenzen einer heterogenen Studierendengruppe zu genügen [1]. Ein weiteres Online-Lehr-Tool soll im Rahmen dieser Bachelorarbeit, angefertigt als Teil des Studienganges Medieninformatik mit dem Anwendungsfach Mensch-Maschine-Interaktion, genauer beschrieben werden. Der Schwerpunkt der Arbeit ist dabei die Umsetzbarkeit der chemischen Analyse von quantenmechanischen (QM) Daten in einem Web-Interface zu demonstrieren, wobei die konkrete Implementation einen Mehrwert für Nutzende zeigen soll, gemessen an subjektiven Indikatoren. Somit behandelt die Arbeit das Design und die Entwicklung dieses Web-Interfaces als Addition zu anderen existierenden Lehr- und Forschungs-Tools, welches an vorhandenen Abläufen anknüpft und Verbesserungen validiert.

1.1 Umfeld

Das Forschungsprojekt wird in Zusammenarbeit der Fakultät für Mathematik, Informatik und Statistik der LMU, sowie der Fakultät für Chemie und Pharmazie der LMU durchgeführt. Gleichzeitig entwickelt das Department für Chemie das so genannte Molecular Information Archive Repository (MOLAR), in der Ergebnisse von QM-Berechnungen gespeichert werden sollen, um diese in Forschungsarbeiten einfacher wiederverwendbar zu machen. Zudem soll MOLAR in Vorlesungen eingesetzt werden, um Studierende eine Visualisierungsmöglichkeit von Elementen (und Analysen) zu bieten. MOLAR setzt sich aus verschiedenen Modulen zusammen, unter anderem das Lesen und Interpretieren von verschiedenen quantenchemischen Paketen (gebündelte Ergebnisse von Berechnungen, beispielsweise durchgeführt mit ORCA¹) und die Entwicklung einer Anwendungsoberfläche zur Anzeige dieser Daten. Das Web-Interface zur chemischen Analyse von QM-Daten soll als eigenständiges Modul fungieren, mit Integration in die vorher genannte Oberfläche. Die Komplexität der Darstellung der chemischen Analyse und Interaktion mit diesen Daten stellt eine Herausforderung dar, wodurch die Kompetenz der Fakultät für Mathematik, Informatik und Statistik gefragt ist und gleichzeitig das in die Forschung mit einbezogene Spektrum an Erfahrung erweitert wird.

1.2 Motivation

Zum Zeitpunkt der Erstellung existieren für die chemische Analyse von QM-Daten nur offline Programme für nicht-mobile Betriebssysteme mit jeweils unterschiedlichen Features, so dass Forschende mehrere Programme kombinieren und sich jeweils in diese einarbeiten müssen. Zusätzlich existiert kein Standardvorgehen für die Analyse, jeder Forschende hat ein anderes Vorgehen wie zum Beispiel entweder das handschriftliche Sammeln von Daten und ausrechnen per Taschenrechner, oder die Erstellung von QM-Berechnungen, um diese per GaussView² zu betrachten und mit Microsoft Excel zu analysieren (Abbildung 1.1). Da Daten und Bilder in getrennten Programmen betrachtet werden, führt dies außerdem zu einem außerordentlich hohem Zeitaufwand sich nach Urlauben oder Feiertagen wieder einzuarbeiten, da so viele Daten vorhanden sind, dass diese nicht leicht mit Bildern verknüpft werden können und Bild-Betrachter keine Assoziation mit Daten unterstützen. Vereinfacht ausgedrückt, 3D-Ansichten³ von GaussView können nicht in Ex-

¹<https://orcaforum.kofo.mpg.de/app.php/portal>

²<https://gaussian.com/gaussview6/>

³Darstellung der räumlichen Umgebung und Struktur der Moleküle

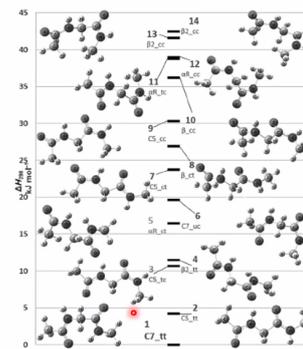
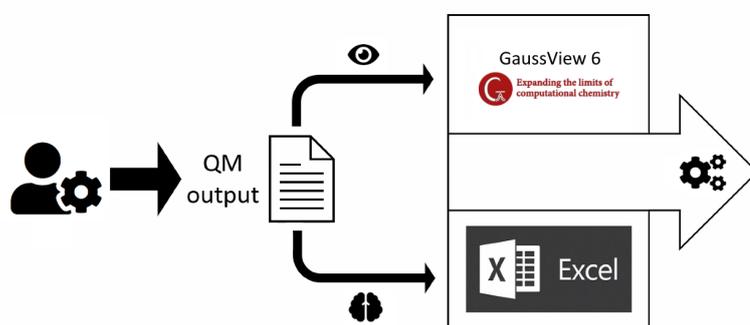


Figure 2. The structures of gas-phase minima obtained at B3LYP/6-31G(d) level and ΔH_{rel} calculated at G3(MP2)-RAD level.

Structure	Formula	Relative Energy (ΔH_{rel}) [kcal/mol]
1	C ₇ H ₁₄	0.0
2	C ₅ H ₁₀	1.2
3	C ₅ H ₁₀	2.5
4	C ₇ H ₁₄	3.8
5	C ₇ H ₁₄	5.1
6	C ₇ H ₁₄	6.4
7	C ₅ H ₁₀	7.7
8	C ₇ H ₁₄	9.0
9	C ₅ H ₁₀	10.3
10	C ₅ H ₁₀	11.6
11	C ₇ H ₁₄	12.9
12	C ₇ H ₁₄	14.2
13	C ₇ H ₁₄	15.5
14	C ₇ H ₁₄	16.8

Abbildung 1.1: Beispiel von bisherigem Analyse-Vorgehen vom Forschenden bis zur Forschungsarbeit (genaue Details der Tabelle nicht von Relevanz)

cel dargestellt werden und andersherum. Dies limitiert die Forschung und gleichzeitig die UX, da die Programme eine gewisse Komplexität aufweisen und somit eine längere Einführung in diese Programme notwendig ist. Zusätzlich muss jeder Forschende seine persönliche Herangehensweise erarbeiten, womit sich die Zeit erhöht, bis mit der eigentlichen Forschung begonnen werden kann. Die Komplexität kann außerdem zu Frustration führen und eine erhöhte Vermeidung von Entscheidungen auslösen [2], was schließlich dazu führen könnte, die Entscheidungen zu meiden - oder im Rahmen eines Programms ausgedrückt: das Schließen der Programme und pausieren der Forschung. Nach mehreren negativen Erfahrungen kann die Motivation das Programm wieder zu nutzen sinken, was im Sinne eines Lernprozesses ein zu vermeidender Zustand ist [3, 4]. Somit ist eine positive Nutzererfahrung im Rahmen eines Lehr-Werkzeugs unabdinglich. Weiterhin hat die Praxis gezeigt, dass das Ansetzen an vorherigen Ergebnissen erschwert ist, da die unterschiedlichen Vorgehensweisen und Rechenwege im Nachhinein nicht mehr durch andere Forschende nachvollziehbar sind. Dies ist besonders von Nachteil, wenn die Person die Forschungseinrichtung verlassen hat, mit der Folge, dass Ergebnisse erneut berechnet und validiert werden müssen und somit monatelange Arbeit zweifach durchgeführt wird.

1.3 Erwartung

Ziel dieser Forschungsarbeit ist es anhand der Entwicklung eines Prototypen herauszufinden, ob es möglich ist ein vereinfachtes User-Interface (UI) zu erstellen, welches Nutzenden auf einem kompatiblen Endgerät ermöglicht, eine chemische Analyse durchzuführen, das Ergebnis zu betrachten und zu verstehen. Außerdem wird der Fokus auf ein, im Vergleich zu den vorher genannten offline UIs, einfaches UI gelegt, das zudem eine hohe Nutzerfreundlichkeit (hohe Usability) und positive Nutzererfahrung (hohe UX) bietet, damit die tatsächliche Nutzung durch Zielgruppen nach Release möglichst hoch ist und bleibt. Die verschiedenen Versionen des Prototypen sollen durch Nutzerstudien in ihrer Usability validiert und iterativ verbessert werden, um sicherzustellen, dass alle Zielgruppen gleichermaßen zufrieden gestellt sind. Die erwartete hohe Nutzerfreundlichkeit soll durch eine einfache Navigation und niedrigere Einarbeitungszeit in das Interface ermöglicht werden. Um eine niedrige kognitive Belastung Nutzender zu erreichen und den „Paradox of Choi-

ce“ [2] zu vermeiden, wird die Analyse an sich (dementsprechend Features der offline Programme) in kleinere Schritte aufgeteilt, oder nicht bzw. vereinfacht implementiert, unter der Prämisse der Erhaltung von Hauptfunktionalitäten [5, Tesler’s Law]. Die Vereinfachung ermöglicht zudem passende Warnungen bei falscher Benutzung für Anfänger, beispielsweise falls die ausgewählte Analyse kein sinnvolles Ergebnis ermöglicht. Aufgrund der Internationalität der Forschungseinrichtung, wird erwartet, dass das UI in Englisch aufgebaut wird. Als Teil von MOLAR soll das Analyse-Modul als Open-Source-Software veröffentlicht werden und richtet sich im Sinne der Lizenz nach eingesetzten Bibliotheken und dem Rest von MOLAR.

1.4 Methodik

Bei der Entwicklung des Web-UI wird der Fokus entsprechend den Erwartungen gelegt, so sollen vorhandene Standards aus dem Gebiet der Nutzerfreundlichkeit nach DIN EN ISO 9241-110 [6] und Nutzererfahrung [7, 8] angewandt werden, um alle relevanten Zielgruppen anzusprechen und zum Benutzen zu motivieren [9]. Dabei soll der Ablauf der Auswahl der einzelnen Elemente und der Ablauf der Analyse intuitiv für neue als auch erfahrene Nutzer/-innen sein. Dadurch fällt die Wahl des Ansatzes auf User-Centered Design (UCD), das Nutzende in den Mittelpunkt stellt und durch eine iterative Weiterentwicklung und Validierung jeden Schrittes ein interaktives System gebrauchstauglich und zweckdienlich macht [10]. Um Nutzungsbedürfnisse zu erkennen, werden dabei zu Beginn Forschende direkt im chemischen Labor bei der Analyse offen beobachtet (passiv teilnehmend) und daraus notwendige Features in Form von User-Stories abgeleitet. Die Validierung erfolgt dabei mit Fragebögen zur Usability und Videostudien, wobei die Testpersonen Forschende aus den Zielgruppen sind. Die Ergebnisse dieser wiederum dienen als Ausgangspunkt für Verbesserungen der nächsten Iteration des Prototypen, somit bauen die Prototypen iterativ aufeinander auf. Für die Entwicklung an sich wird ein agiler Entwicklungsprozess nach dem „Agile Manifest“⁴ ähnlich zu „Extreme Programming“ gewählt [11], der dabei helfen soll, UCD bei der Entwicklung zu folgen, den Überblick über zu entwickelnde Features beizubehalten, Struktur in den Prozess zu bringen und die Entwicklung zu beschleunigen [12, 13].

Da die anderen Module von MOLAR in PHP⁵ 7.4 geschrieben sind, wird auch dieses Modul in PHP 7.4 umgesetzt. Für das Frontend wird Bootstrap⁶ v5.0⁷ zusammen mit jQuery⁸ v3.5 benutzt. Beide Bibliotheken werden ebenfalls von den anderen Modulen genutzt, was Konflikte zwischen unterschiedlichen Bibliotheken oder Versionen vermeidet. Sie sind außerdem ausgiebig getestet und in der Industrie weit verbreitet, dadurch ist keine Notwendigkeit gegeben von dieser Auswahl abzuweichen. Weitere Bibliotheken können im Laufe der Arbeit nach Bedarf hinzugefügt und an den entsprechenden Stellen erläutert werden.

Zur Qualitätssicherung des JavaScript, Cascading Style Sheets (CSS) und Hypertext Markup Language (HTML) Codes werden folgende Programme zur statischen Analyse genutzt: ESLint⁹, stylelint¹⁰ und htmlhint¹¹. Stylelint und ESLint besitzen jeweils die Plugins stylelint-no-unsupported-browser-features¹² und eslint-plugin-compat¹³, die anhand einer „Browserlist“¹⁴ prüfen, ob die verwendete Syntax in definierten Zielgeräten/-browsern (3.3) unterstützt wird. Dokumentation erfolgt in dem Code mit Kommentaren und „DocBlocks“,

⁴<http://agilemanifesto.org/>

⁵<https://php.net/>

⁶<https://getbootstrap.com/> - v5.0 hat die MIT Lizenz

⁷Stand Januar 2021 noch in „Beta“, Stable Release in naher Zukunft erwartet

⁸<https://jquery.com/> - v3.5 hat die MIT Lizenz

⁹<https://eslint.org/>

¹⁰<https://stylelint.io/>

¹¹<https://github.com/htmlhint/HTMLHint>

¹²<https://github.com/ismay/stylelint-no-unsupported-browser-features>

¹³<https://www.npmjs.com/package/eslint-plugin-compat>

¹⁴<https://github.com/browserslist/browserslist>

insbesondere JSDoc¹⁵. Die CSS Namensgebung orientiert sich dabei an BEMIT¹⁶ und atomaren Utility-Klassen wie von Bootstrap benutzt. Im Sinne von „Separation of Concerns“ wird in dem HTML-Code zwischen CSS Klassen stylistischer Art und Klassen, die als Selektor für JavaScript Code dienen per `js-` Präfix unterschieden. PHP 7.4 ist Plattform-unabhängig und kann auf gängigen Servern jeglicher Betriebssysteme ausgeführt werden, was das Deployment vereinfacht. Zur Speicherung von Nutzeraktionen wird das native Session-System von PHP genutzt. Als Datenbanksystem wird von MOLAR PostgreSQL¹⁷ 12 eingesetzt, wobei das Analyse-Modul nur liest und nicht schreibt. Zur Validierung der Funktionalität, subjektiver Benutzerfreundlichkeit und Nutzererfahrung der entstandenen Prototypen werden Nutzerstudien/-befragungen eingesetzt [14]. Als Versionierungssystem benutzt MOLAR Git, wobei Module in jeweils separaten Branches entwickelt werden¹⁸.

¹⁵<https://jsdoc.app/>

¹⁶<https://csswizardry.com/2015/08/bem-it-taking-the-bem-naming-convention-a-step-further/>

¹⁷<https://www.postgresql.org/>

¹⁸Veröffentlichung ausstehend unter <https://github.com/AKZipse/>

2 Literatur-Review

Während für MOLAR ähnliche wissenschaftliche Arbeiten existieren, beispielsweise „Mayr’s Database Of Reactivity Parameters“¹⁹, gibt es für das Analyse-Tool (AT) nach bestem Kenntnisstand des Verfassers keine weiteren verwandten Arbeiten oder Projekte. Die Entwicklung und die kombinierten Funktionalitäten stellen somit ein Novum dar und füllen eine wissenschaftliche Lücke in der Medien- und Chemieinformatik in dem Bereich der Reaktionsenergie-Analyse von QM-Daten von molekularen Systemen. Für die Umsetzung werden als erstes die grundlegenden Konzepte des Interaction Designs der Medieninformatik vorgestellt, die für das Design, die Entwicklung und Zielerreichung der Prototypen ausschlaggebend sind. Im Anschluss wird das AT im Bereich des Distanz-Lernen eingeordnet und notwendige Merkmale für erfolgreiches Lernen und Motivation Nutzender besprochen. Zum Schluss folgen Messmethoden der genannten Bereiche zur Validierung des Projektes, sowie ein Exkurs, der die für diese Arbeit relevanten Formeln zur Analyse QM-Daten beinhaltet.

2.1 Usability

Usability misst die Gebrauchstauglichkeit, spezifischer „das Ausmaß, in dem ein Produkt durch bestimmte Benutzer in einem bestimmten Nutzungskontext genutzt werden kann, um bestimmte Ziele effektiv, effizient und zufriedenstellend zu erreichen“ [9]. Die Effektivität meint dabei wie genau und vollständig Nutzende ihre Ziele erreichen, Effizienz das Verhältnis zwischen eingesetztem Aufwand und Ergebnis, und Zufriedenstellung das subjektive Nutzungserlebnis [9]. Abseits des ISO-Standards, gibt es weitere Definitionen von Usability, insbesondere die von Nielsen [15]:

- Erlernbarkeit: Aufgaben sollten von Erstnutzenden einfach umzusetzen sein.
- Effizienz: Nach Erlernen des Systems, sollte die Produktivität hoch sein.
- Einprägsamkeit: Nach Pausen der Nutzung sollten Nutzende einfach am vorherigen Leistungsniveau ansetzen können.
- Fehler: Die Fehlerrate sollte gering sein, insbesondere katastrophale sollten vermieden werden, im Fehlerzustand sollte es einfach sein zu einem fehlerfreien Zustand zurückzukehren.
- Zufriedenheit: Nutzende sollten das System subjektiv ansprechend empfinden.

Zusätzlich liefert er die Definition von Nützlichkeit (Usefulness), welche beschreibt ob Nutzende benötigte Features vorfinden (Utility) und ob diese angenehm einfach zu nutzen sind (Usability) [15]. Die genannten Komponenten von Nielsen überschneiden sich auch teilweise mit DIN EN ISO 9241-110 [6] Standard, worin sieben Kriterien für die Dialoggestaltung von gebrauchstauglichen Systemen definiert sind:

- Aufgabenangemessenheit: Design und Funktionalität folgt der Aufgabenstellung.
- Selbstbeschreibungsfähigkeit: Nutzenden sollte jederzeit der aktuelle Zustand und weitere ausführbare Handlungen bekannt sein.
- Erwartungskonformität: System folgt bekannten Konventionen und Erwartungen.
- Lernförderlichkeit: Wie Nielsen.
- Steuerbarkeit: Nutzer können Handlungen in ihrem Tempo und ihren Abläufen beeinflussen.
- Fehlertoleranz: Wie Nielsen.
- Individualisierbarkeit: Anpassung des Systems an eigene Fähigkeiten und Bedürfnisse.

¹⁹<https://www.cup.lmu.de/oc/mayr/reaktionsdatenbank2/>

2.2 UX

Als Erweiterung der Usability umfasst die UX zusätzlich das ganzheitliche Erlebnis vor, bei und nach Interaktion mit einem Produkt und bezieht somit die „Emotionen, Vorstellungen, Vorlieben, Wahrnehmungen, physiologischen und psychologischen Reaktionen, Verhaltensweisen und Leistungen“ [10] Nutzender mit ein [16]. Nach DIN EN ISO 9241-210 wird UX als „Wahrnehmungen und Reaktionen einer Person, die aus tatsächlichen und/oder der erwarteten Benutzung eines Produkts, eines Systems oder einer Dienstleistung resultieren“ definiert [10]. UX umfasst also im hohen Maße subjektive Nutzerwahrnehmungen, die im Gegensatz zur Usability nicht nur während der Nutzung von Bedeutung sind. Es ist also im Sinne hoher UX dienlich, Nutzende von Beginn an der Entwicklung einzubeziehen. Dies geschieht bei dem so genannten UCD, einem Ansatz zur Entwicklung interaktiver, gebrauchstauglicher und zweckdienlicher Systeme [10]. Dabei ist vier iterativen Schritten zu folgen [10]:

- Analyse: Nutzungskontext und Bedürfnisse verstehen und beschreiben
- Konzeption: Nutzungsanforderungen vergegenwärtigen und definieren
- Design: Entwerfen der Oberfläche
- Evaluation: Prüfen der Oberfläche mit realen Nutzer/-innen

Für die erste Phase ist es wichtig, im gegebenen Nutzungskontext Probleme oder User-Needs Nutzender zu erkennen und Chancen zu ergreifen oder explizit Funktionalitäten auszulassen [16], somit hat der Schritt insgesamt das Potential über den Erfolg des Ergebnisses zu entscheiden [16]. Im nächsten Schritt ist es wichtig, erhobene Daten zu konsolidieren und ein Plan diese zu adressieren zu entwerfen [16]. Danach folgt der Entwurf von einem Prototypen und eine Evaluation [16]. Durch den iterativen Charakter ist es möglich gezielt Schritte mehrfach auszuführen und zu vorherigen zurückzukehren. Insbesondere merken Butz und Krüger an, dass jeder Schritt in einer kurzen Diskussion oder Prüfung enden soll, um „die Plausibilität des Schrittes zu überprüfen“ [16].

2.3 E-Learning

E-Learning ist ein umfassender Begriff als Unterkategorie von Distanzlernen, der das Lernen über Informations- und Kommunikations-Technologien gestützte Systeme meint, also ein dementsprechendes Multimedia-Gerät und gegebenenfalls Internet voraussetzt [17]. Weiterhin liefert die, in der Einleitung, angesprochene Studie von Pölloth, Schwarzer und Zipse die wichtige Erkenntnis, dass durch gesonderte multimediale Angebote Studierende vermehrt dazu motiviert werden, sich mit dem Thema des Kurses auseinander zu setzen [1]. Insbesondere weibliche Testpersonen würdigen moderne Medien signifikant mehr als männliche. Pölloth, Schwarzer und Zipse geben an, die Mechanismen hinter dieser Tatsache konnten aufgrund des Studienaufbaus nicht herausgearbeitet werden [1]. Unterschiede zwischen Geschlechtern in multimedialen Lernumgebungen wurde auch von einer weiteren Studie in 2019 gefunden, wobei weibliche Testpersonen ein höheres aufrechterhaltenes situatives Interesse angaben, wenn Animation, Erzählung und Text effektiv miteinander kombiniert wurden [18]. Kigundu führt weiter an, dass E-Learning Umgebungen zum Lernen beitragen und liefert Erkenntnisse um die Effektivität des Lernens zu erhöhen. Das Engagement von Nutzenden in E-Learning Tools kann durch kognitive Faktoren erhöht werden, wie beispielsweise angemessen herausfordernde Inhalte und das Ermöglichen von kritischem Denken beim Anwenden von Gelerntem, aber auch durch diverse weitere Möglichkeiten [19]:

- Präsentation: Nutzer/-innen können Inhalte erstellen, für erhöhtes inhaltliches Engagement.
- Zusammenarbeit: Ermöglichen von Kooperation zwischen Nutzenden, für erhöhtes kritisches Auseinandersetzen.

- Bewertung: Bei selbst-reguliertem Lernen ermöglichen Verantwortung zu übernehmen.
- Anpassung: Unterschiedliche Typen von Tools für verschiedenartige Bedürfnisse und eine Möglichkeit bereits erlerntes zu überspringen.
- Zugang: Einfacher Zugang zu Informationen über Hyperlinks, was sammeln und planen ermöglicht, für erhöhtes Aufgaben Engagement.

Das AT könnte dementsprechend teilweise unter E-Learning fallen, da es Eigenschaften besitzen soll, die Studierenden ermöglichen, eigenständig begangene Fehler bei der Analyse zu erkennen und zu korrigieren [17]. Kriterien von E-Learning sollen aber nicht explizit geprüft werden, wie in der Einleitung vermerkt. Angeführte Studien und Fakten können aber dazu verwendet werden, das Engagement und Interesse am AT zu erhöhen.

2.4 Gamification und D&D

Ein weiterer großer Faktor um die Motivation zur Nutzung einer E-Learning Anwendung zu erhöhen, sind positive Emotionen, wie beispielsweise Spaß [20]. Umgekehrt zeigen negative Emotionen einen nachteiligen Effekt auf den Lernerfolg [3]. Somit ist es notwendig Lernende möglichst positiv zu stimmen, was unter anderem durch Gamification möglich ist [20, 21, 22]. Als Gamification wird der Prozess beschrieben, aus einer Sache ein Spiel anhand von Spielmechaniken zu machen und erfreut sich seit der Einführung in 2003 immer größerer Beliebtheit, insbesondere auch in der Industrie [23]. Während das AT nun kein direktes E-Learning Tool darstellen soll, und auch nicht erwartet wird beispielsweise verschiedene Level und Schwierigkeitsgrade vorzufinden, können bestimmte Konzepte wiederum benutzt werden, um die Motivation zur Nutzung hoch zu halten. Eine gewissermaßen relevante Studie, die zwar statt auf dem Gebiet der Chemie, auf dem Gebiet der Nuklearmedizin angefertigt wurde, beschäftigt sich mit der Gamification eines Nuklear-medizinischen Prozesses („Enzyme-linked Immunosorbent Assay“) und kann somit bedingt relevante Erkenntnisse liefern, da das AT auch einen Prozess nachstellen soll [24]. Als Hauptmechanismus zur Nachbildung von Reaktionen dient dort D&D in Form von bestimmten Elementen, die in ein Reagenzglas gezogen werden können. Insgesamt wurde der dortige Prototyp an sieben Personen getestet in Bezug auf Effizienz, Richtigkeit, Einprägsamkeit und Reaktionen und deckt somit zumindest teilweise Kriterien der Usability ab. Als Ergebnis der Effizienz wird lediglich angegeben, wie viele Schritte nötig waren bis zur Vervollständigung und hat somit keine Relevanz für die Entwicklung des AT, wichtiger sind allerdings die Erkenntnisse im Bezug auf die Fehlerrate, da nur drei Fehler begangen wurden bei der Kombination von Elementen und nach mehreren Abläufen keine mehr. Zudem geben die Autoren an, dass Nutzer/-innen den Prototyp einfach zu nutzen fanden, die Elemente und Funktionalität verstanden und in Erinnerung behalten haben. Insgesamt gaben Nutzende an, dass sie die Anwendung mochten und es eine angenehme Erfahrung war. Weiterhin gibt die Studie an, dass Nutzer/-innen unsicher waren wie das Problem zu lösen ist, aber haben schließlich eine Lösung gefunden. Auch ein weiteres Forschungsprojekt von 2008 nutzt D&D zur Nachstellung von Prozessabläufen und hat auf eine höhere Motivation zur Nutzung gezeigt, ohne die Mechanismen von D&D explizit zu betrachten [25]. Somit sollten bei Verwendung von D&D folgende Fragen genauer betrachtet werden:

- Wie effizient ist D&D?
- Hilft D&D beim Verständnis und Lösen des Problems?
- Führt D&D zu der angenehmen Erfahrung durch Auslösen positiver Emotionen?
- Verstehen Nutzer/-innen den Umgang mit D&D?

Eine weitere Studie liefert ein paar weitere Erkenntnisse durch den Vergleich einer Kontrollgruppe und einer D&D Gruppe. Als Aufgabe sollten Schüler/-innen der vierten ($N = 84$), sechsten ($N = 90$) und achten ($N = 86$) Klasse in drei Experimenten bestimmte Sachen zu Zahlen/Ursachen zuordnen, wobei die Kontrollgruppe diese Zuordnung über Textboxen und die D&D-Gruppe per D&D erledigt hat. Einordnung in Kontrollgruppe oder D&D-Gruppe erfolgte zufällig, Ergebnisse wurden auf Unterschiede der Noten geprüft und fanden keinerlei negativen Unterschiede zwischen schlechter und besser abscheidenden Testpersonen [26]. Das Gegenteil scheint der Fall, so schlussfolgern Ponce, Mayer und Loyola: „Overall, these results provide preliminary evidence that drag & drop testing formats allow lower-achieving students to demonstrate their knowledge better, presumably because they are freed from the cognitive demands of a conventional interface“ [26, Seite 22], wobei mehr erfolgreiche Schüler/-innen kaum bis nicht beeinflusst sind [26]. Daher sind folgende Ergebnisse von besonderer Relevanz: Bezüglich der Effizienz schnitt D&D statistisch signifikant besser ab durch schnellere Reaktionszeiten ($d = 0,62; p < .001$), niedrigere Anzahlen von Mausklicks ($d = 1,13; p < .001$) und sei vergleichbar mit Ersparnissen von 8,6 bis 10,5 min in einer 60 min Klausur [26], trotz gleichbleibender Korrektheit der Antworten im Vergleich zur Kontrollgruppe [26]. Somit scheint D&D ein geeigneter Kandidat, Prozesse effizienter für Nutzende heterogener Studierendengruppen unterschiedlicher akademischen Grade zu gestalten.

2.5 Messung

Um potentielle Usability-Probleme frühzeitig zu erkennen und die subjektive Nutzererfahrung zu erfassen, ist es sinnvoll häufig zu testen [27]. Dabei gibt es qualitative, aber auch quantitative Messmethoden, die zum Einsatz kommen können. Zu den qualitativen zählt die heuristische Evaluation [28], welche allerdings mehr als einen Evaluator mit Fachkenntnissen bei der Durchführung voraussetzt und im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich ist [28]. Somit liegt der Fokus auf Nutzertests, um qualitative Daten zu erhalten. Videostudien mit dem „Think-Aloud“ Ansatz in Kombination mit Aufgabenstellungen und zusätzlicher Beobachtung durch Studienleitende haben sich hierbei als wirksam herausgestellt [29]. Dabei werden Nutzende angewiesen, Gedanken bei Umsetzung von Aufgaben laut auszusprechen, um 85% der potentiellen Probleme schon bei einer niedrigen Probanden Anzahl von fünf Personen zu beobachten und herauszuarbeiten [30]. Zusätzlich geben Fragebögen mit Aufgabenstellungen Auskunft über problematische Teile eines Systems, auch im Bereich von E-Learning [31, 32].

Für die quantitative Datenerhebung eignen sich Fragestellungen nach Abarbeitung aller Aufgabenstellungen [32]. Häufig dafür verwendet wird der von Brooke 1986 definierte und validierte System Usability Scale (SUS) [14, 33, 34, 35]. Dabei geben Nutzende am Ende des Fragebogens eine subjektive Einschätzung auf bestimmte Aussagen mittels einer Likert-Skala von eins bis fünf („Strongly Disagree“ - „Strongly Agree“) ab. Da niedrige Teilnehmerzahlen oft keine statistisch signifikanten Aussagen zulassen [32], ist es umso wichtiger für diese Arbeit, dass der SUS bereits bei wenig Testpersonen eine hohe Aussagekraft erreicht [34]. Zur Beurteilung der Belastung Nutzender nach einzelnen Aufgaben, hat sich der NASA-TLX etabliert [32, 36]. Dieser lässt Aussagen zur kognitiver und physischer Belastung, zeitlicher Beanspruchung, Frustration, benötigter Anstrengung, und Erfolg der Ausführung zu. Dies ist insbesondere bei komplexen Abläufen wichtig und somit ein guter Kandidat für diese Arbeit zur Überprüfung, ob bestimmte Abläufe im AT angemessen belastend für Nutzende sind [32]. Der Nachteil quantitativer Daten, die per Selbstausskunft gesammelt werden, ist die Unzuverlässigkeit durch Subjektivität und sonstige kognitive Einflüsse (beispielsweise Erwartungshaltungen, Peer-Pressure, Fehlervermeidung, und Unterschiede in der Perzeption von Skalen) [32, 37]. Nielsen beschreibt, dass Nutzende nicht wissen was sie wollen [37], somit ist zusätzlich zu quantitativen Daten das qualitative Messen unabdingbar, auch zutreffend in E-Learning Umgebungen [38].

2.6 Exkurs: Funktionsweise der chemischen Analyse

In dieser Sektion wird kurz erläutert, wie die QM-Datenanalyse im Rahmen dieser Bachelorarbeit abläuft. Der Hauptfokus liegt auf dem Protonentransfer zwischen zwei Molekülen [39], wofür Forscher zwei oder mehr Reaktanten (Edukte) und zwei oder mehr Produkte festlegen müssen. Der Transfer zwischen den Reaktanten und Produkten kann nun betrachtet und die Energie, die für die Reaktion notwendig ist, berechnet werden [40]. Die Energetik von Protonen-Transfer-Reaktionen spielt in den molekularen Wissenschaften eine vielfältige Rolle, und ist von großer Bedeutung in Projekten die so divers sein können wie das Auftreten von Gen-Mutationen [41] oder die Deaktivierung von COVID-2019 (SARS-CoV-2) [42, 43]. Dabei berechnet werden ΔE (Änderung der Totalenergie), ΔH (Änderung der Reaktionsenthalpie) und ΔG (Änderung der freien Enthalpie). Die Variablen, Funktionen und Formeln lauten wie folgt:

$rLen$ = Anzahl der Reaktanten

$pLen$ = Anzahl der Produkte

$etotal(i)$ = elektrochemisches Potential des Moleküls

$h_{corr}(i)$ = Abweichung der Reaktionsenthalpie relativ zu $etotal(i)$

$g_{corr}(i)$ = Abweichung der freien Enthalpie relativ zu $etotal(i)$

$$productsE = \sum_{n=1}^{pLen} etotal(n)$$

$$reactantsE = \sum_{n=1}^{rLen} etotal(n)$$

$$productsH = \sum_{n=1}^{pLen} etotal(n) + h_{corr}(n)$$

$$productsG = \sum_{n=1}^{pLen} etotal(n) + g_{corr}(n)$$

$$reactantsH = \sum_{n=1}^{rLen} etotal(n) + h_{corr}(n)$$

$$reactantsG = \sum_{n=1}^{rLen} etotal(n) + g_{corr}(n)$$

$$\Delta E = productsE - reactantsE$$

$$\Delta H = productsH - reactantsH$$

$$\Delta G = productsG - reactantsG$$

Die Ergebnisse sind in der Einheit Hartree angegeben (was 2625.5 kJ/mol entspricht²⁰), und somit erfolgt die Umrechnung per Multiplikation. Die Molekül-Typen die als Reaktant oder Produkt fungieren, sind Konformere und Einzelpunkte (Singlepoints), die jeweils ein bestimmtes Energieniveau (Energy State, E-State) besitzen.

²⁰<https://www.cup.lmu.de/oc/zipse/teaching/organische-chemie-5/molekuelorbitale-ausgewaehlter-systeme/technische-anmerkungen/>

3 Planung

Auf den vorher beschriebenen Methodiken von UCD aufbauend werden im Folgenden notwendige Definitionen und Voraussetzungen festgelegt und der Entwicklungsprozess genauer erläutert. Zum Schluss folgt ein erster Entwurf der Benutzeroberfläche anhand der herausgearbeiteten Nutzungsbedürfnisse in Form von User-Stories.

3.1 Nutzung vorhandener Ressourcen

Als Teil von MOLAR greift das AT auf die gleichen Dateien- und Datenbanksysteme zu. Wie Anfangs erwähnt, liest AT dabei ausschließlich. Um einen Überblick über die Struktur zu erhalten, zeigt Abbildung 3.1 das Schema der PostgreSQL Relationen als E/R-Diagramm. Die Tabellen wurden Anfangs mit ausgewählten echten Daten befüllt, um aussagekräftige Testabläufe zu garantieren. Außerdem wird das AT im Netzwerk des Departments für Chemie gehostet und für Testpersonen und Interessierte zugänglich gemacht.

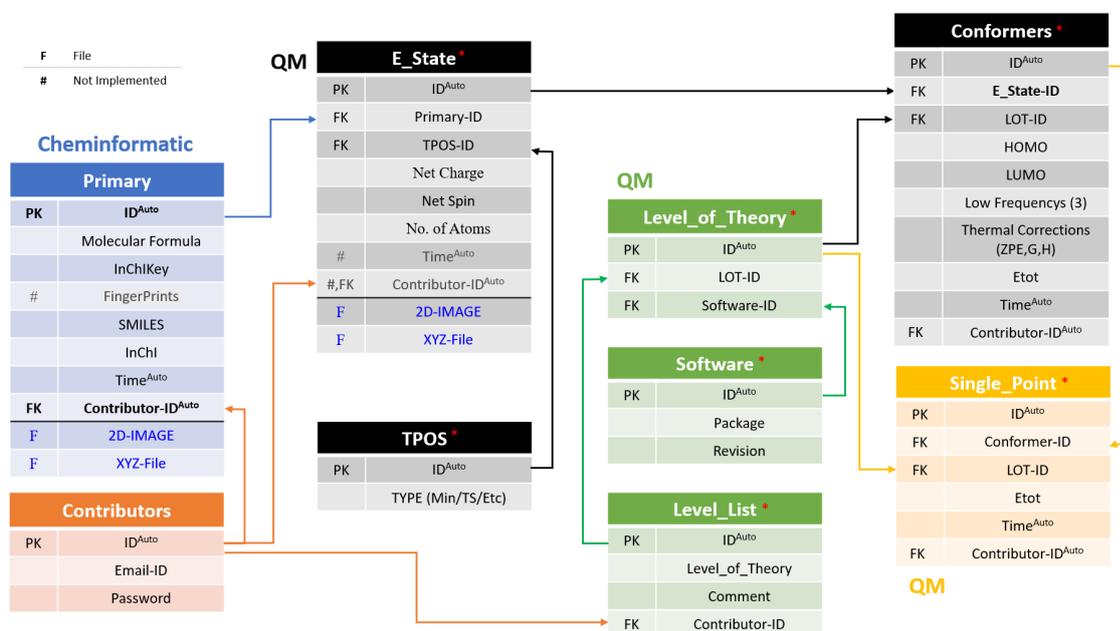


Abbildung 3.1: Entity-Relationship-Modell mit Zusatzinformationen, wobei rote Sternchen die für das AT relevante Relationen markieren

3.2 Zielgruppen

Die Zielgruppen wurden gemeinsam mit den Betreuern aus dem Fachbereich für Chemie dieser Arbeit festgelegt. Als Zielgruppe (primäre Stakeholder im UCD [16]) werden alle Bachelor und Master Studenten des Departments für Chemie, sowie alle Mitarbeiter der Fakultät des Departments für Chemie festgelegt. Alle Zielnutzer/-innen haben ein erweitertes chemisches Wissen in experimenteller- und Computerchemie und beherrschen den Umgang mit chemischen Datenbanken, oder im Falle eines Bachelor Studenten, sind dabei diese zu erlernen. Die entsprechenden Fachkenntnisse werden also bei der Entwicklung als Voraussetzung betrachtet. Als Testgruppen fungieren permanente Mitglieder und Gäste der Zipse Forschungsgruppe²¹, sowie andere Personen von ausgewählten Gruppen des Departments für Chemie der LMU.

²¹<https://www.cup.uni-muenchen.de/oc/zipse/members/>

3.3 Zielgeräte & Zielbrowser

Es wird erwartet, dass die genannten Zielnutzende das AT während der Forschung im Rahmen der Forschung oder des Lernens nutzen, das heißt auf den Labor-Rechnern in der Universität, aber auch Zuhause. Da die Zielgruppen den Umgang mit PCs beherrschen, wird angenommen die Geräte Zuhause sind mindestens auf dem gleichen Stand wie die Labor-Rechner, somit stellen Ubuntu 19.04 (und vergleichbare Linux Distributionen), Windows 8 und macOS 10.14-11 die Mindestanforderungen dar. Die genannten Operating System (OS) sind die letzten oder ersten Versionen des jeweiligen OS, welche die Mindestanforderungen an folgende als zu unterstützend definierte Browserversionen erfüllen: Chrome/Chromium ≥ 76 , Opera ≥ 64 , Edge ≥ 79 , Firefox ≥ 72 und Safari ≥ 12 . Die Versionen ergeben sich aus der Bedingung, dass alle Browser unterstützt werden sollen, die maximal ein Jahr alt sind (ausgehend von November 2020), damit die unterschiedlichen Nutzer/-innen / Labore einen Puffer haben, die Versionen zu aktualisieren. Zudem wird angenommen, dass die Zielnutzenden Forschung sowohl mit größeren Endgeräten (Laptop oder PC), als auch mit Tablets arbeiten können. Die Nutzung durch Smartphones wird als unwahrscheinlich betrachtet und sollte somit kein Fokus bei der Entwicklung darstellen. Die Nutzung von Geräten für Barrierefreiheit wird als ebenso unwahrscheinlich betrachtet und soll zumindest für die Entwicklung der Prototypen nicht betrachtet werden, sondern nur die im Rahmen der durch die Frameworks zur Verfügung gestellten Mittel genutzt werden (Bootstrap bietet eine gewisse Kompatibilität mit zum Beispiel Screenreadern, durch entsprechende HTML `aria-*` Attribute).

3.4 Entwicklungsprozess

Der generelle Entwicklungsprozess folgt den vorgestellten Schritten des UCD. Dementsprechend wird der Autor zuerst in entsprechende chemische Fachbegriffe und Bereiche eingewiesen, darauf folgt eine einhergehende Analyse der Zielgruppe durch Interaktion und Befragung in den entsprechenden Laboren. Zusammen mit den Betreuern werden danach die Erkenntnisse besprochen und zu einem Gesamtbild verknüpft um User-Stories zu bilden. Die Ideen-Generierung, Entwicklung des Prototypen und Testen dessen ist die Aufgabe des Autors. Zur Anwendung der agilen Entwicklung wird die Projektmanagement-Software Trello²² genutzt. Zusammen mit den Betreuern, die als Stakeholder fungieren, wird ein Backlog mit User-Stories gefüllt und anhand dessen ein Sprint Backlog durch entsprechende Priorisierung für einen vier-wöchentlichen Sprint realisiert. Nach Abschluss der Sprints wird ein Product Increment geliefert und mit den Betreuern geprüft. Jeder entstandene Prototyp soll getestet und Verbesserungen für den nächsten Prototyp herausgearbeitet werden.

3.5 User-Stories

Die Anforderungen für die Funktionen der Prototypen wurden durch Befragung, Beobachtung und Interaktion im praktischen Labor der Zielgruppe abgeleitet und mit weiteren Anforderungen von Betreuern der Zielgruppe ergänzt. Die User-Stories die sich dadurch ergeben haben, werden im folgenden aufgelistet:

Als Nutzer/-in möchte ich...

Protonentransfer im Browser ansehen und die Reaktionsenergie berechnen können, um schnell Ergebnisse zu erhalten.

E-States aus einer Liste auswählen können.

Konformer/Einzelpunkte aus einer Liste auswählen können.

²²<https://trello.com/>

sehen mit welchem Level of Theory (LOT) ich rechne, um falsche Reaktionen zu vermeiden.

in der Analyse Reaktanten und Produkte festlegen können.

Ergebnisse ohne lange Wartezeit sehen können.

wissen mit welchem Faktor Ergebnisse multipliziert werden.

die Einheit des Ergebnisses sehen.

ausgewählte Elemente wieder deselektieren können.

präzise Details zu Elementen sehen, damit ich für mich relevante Reaktionen analysieren kann.

ΔE , ΔH um ΔG als Ergebnis haben.

Bilder der ausgewählten Elemente sehen, damit ich auch visuell sehen kann, was als Edukt oder Produkt funktioniert.

das Ergebnis möglichst einfach kopieren können um es für weitere Forschungszwecke zu nutzen.

Spaß bei der Analyse haben, da ich es dann häufiger nutze.

verschiedene Kombinationen in der Analyse ausprobieren können, selbst wenn diese nicht 100% sinnvoll sind, damit ich beim Selbststudium experimentieren kann.

3.6 Entwurf der Benutzeroberfläche

Basierend auf den User-Stories und Methoden aus dem Kapitel Literatur-Review, wurde ein erster Entwurf der Benutzeroberfläche in Form von Wireframes erstellt mit Beschränkung auf die Hauptfunktionalitäten wie in 1.3 Erwartung beschrieben, mit dem Ziel, eine höhere Usability zu bieten [44]. Später soll die Selektion der Elemente in MOLAR erfolgen, so dass nur eine Funktionalität zum Auswählen erarbeitet werden muss und im Sinne eines Prototyps Beispieldaten für E-States angezeigt werden sollen. Abbildung 3.2 zeigt den Index, wobei durch die Checkboxen einzelne E-States un/-selektiert werden und zur visuellen Betrachtung ein 2D-Bild des Moleküls angezeigt wird. Die Entscheidung auf eine 2D-Darstellung zurückzugreifen, statt einer äquivalenten 3D-Darstellung zu GaussView, wurde im Zuge der Vereinfachung des Ablaufes gefällt, da die 3D-Ansicht den Nachteil hat, dass diese es wesentlich schwerer macht Moleküle schnell zu erkennen, da selbst sehr erfahrene Nutzende eine wesentlich höhere benötigte Zeit bei der Beobachtung im Labor gezeigt haben. So dauert insbesondere der visuelle Vergleich von zwei oder mehr Molekülen länger, da Unterschiede gegebenenfalls erst durch Rotation oder Inspektion visuell gefunden, erkannt und kognitiv verarbeitet werden müssen. Weiterhin tragen die zusätzlichen Informationen, die eine 3D-Ansicht liefert, nicht wesentlich zur Analyse der Reaktionsenergie bei und somit kann die Interaktion und genaue Inspektion der Struktur außer Acht gelassen werden, was auch durch die Betreuer bestätigt wurde. Der Nachteil der 2D-Ansicht ist, dass exakte (chemische) Details zu geformten Verbindungen nicht akkurat angezeigt werden, wobei diese für die pure Unterscheidung und Zuordnung von Reaktanten und Produkten nicht von größerer Bedeutung sind, weswegen die Entscheidung zugunsten von niedrigerem visuellen und kognitivem Aufwand gefällt wurde. Weitere Details für jedes Molekül werden nach einem Klick auf das entsprechende Bild in einem Modal angezeigt (Abbildung 3.3), was später durch entsprechende Seiten von MOLAR ersetzt wird. Als Hauptkonzept für die Analyse fungiert D&D, welches den spielerischen Umgang mit den ausgewählten Elementen ermöglicht durch das hin-und-her Ziehen nach Belieben. Nutzende

können dabei Elemente beliebig aus der Selektion zu dem Reaktanten- oder Produkte-Bereich ziehen und vice-versa (Abbildung 3.2). Die visuelle Trennung der drei Bereiche hilft dem Nutzer zu verstehen, dass eine Reaktion nachempfunden wird (Edukte werden zu Produkten), wobei Arslan u. a. [45] festhalten, dass die Reihenfolge (Ziele als erstes oder Quelle als erstes) bei D&D keine Auswirkung im Bezug auf die Performance hat und lediglich darauf geachtet werden muss, die Distanz zwischen den Bereichen gering zu halten um scrollen zu vermeiden. Sobald eine Reaktion möglich ist, soll das Ergebnis über dem Pfeil prominent angezeigt oder aktualisiert werden. Insbesondere soll durch D&D die Anfangs beschriebene trockene und zahlenintensive Analyse der QM-Eigenschaften ein positiveres Erlebnis bieten, durch eine einfache und verständliche Bedienung, welche Freude bei der Benutzung bereitet. Dies ermöglicht Nutzenden auch weniger sinnvolle Reaktionen zu erstellen, um aus Fehlern lernen zu können, aber gleichzeitig Experten/-innen die Möglichkeit geben soll, Ergebnisse für Forschungsaufgaben schneller zu berechnen. Nach dem Schließen des Modals wird der D&D-Status erhalten, so dass Nutzende weitere Elemente auswählen und bei der vorherigen Reaktion anknüpfen können.

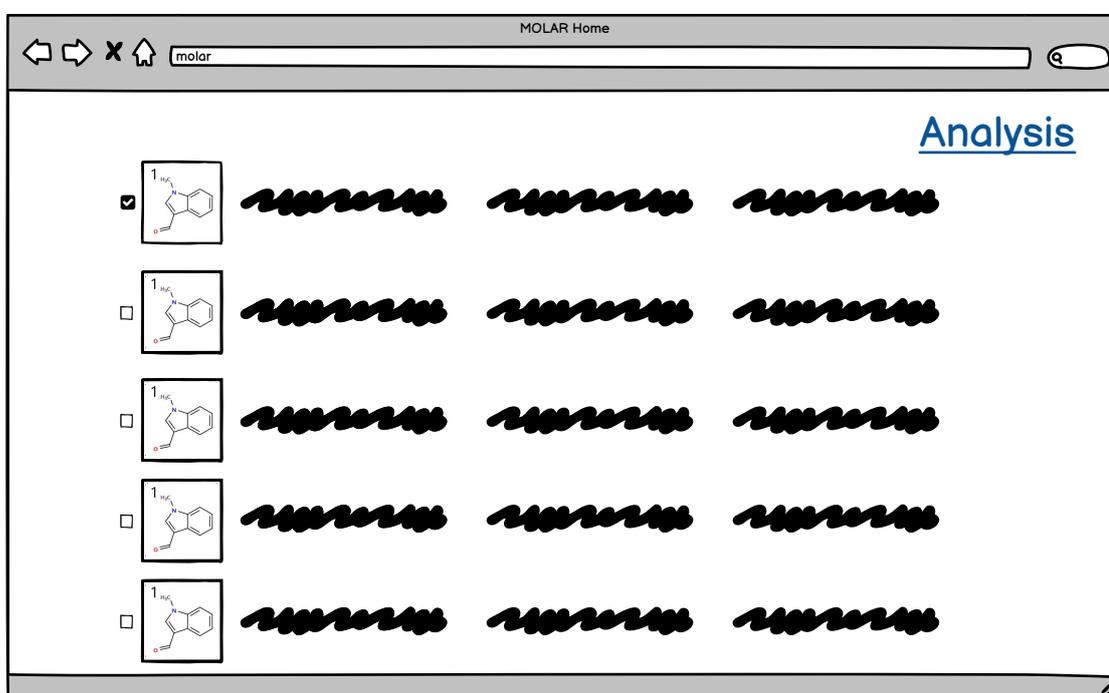


Abbildung 3.2: Wireframe: Ansicht für die Auswahl der Elemente

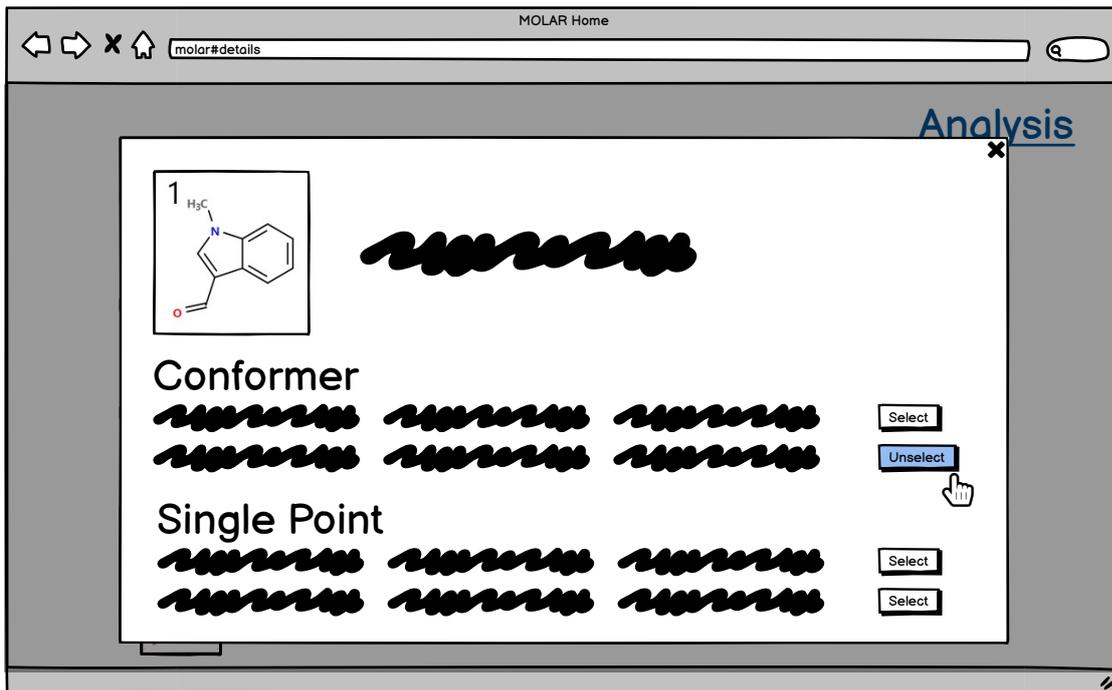


Abbildung 3.3: Wireframe: Details für E-States als Modal

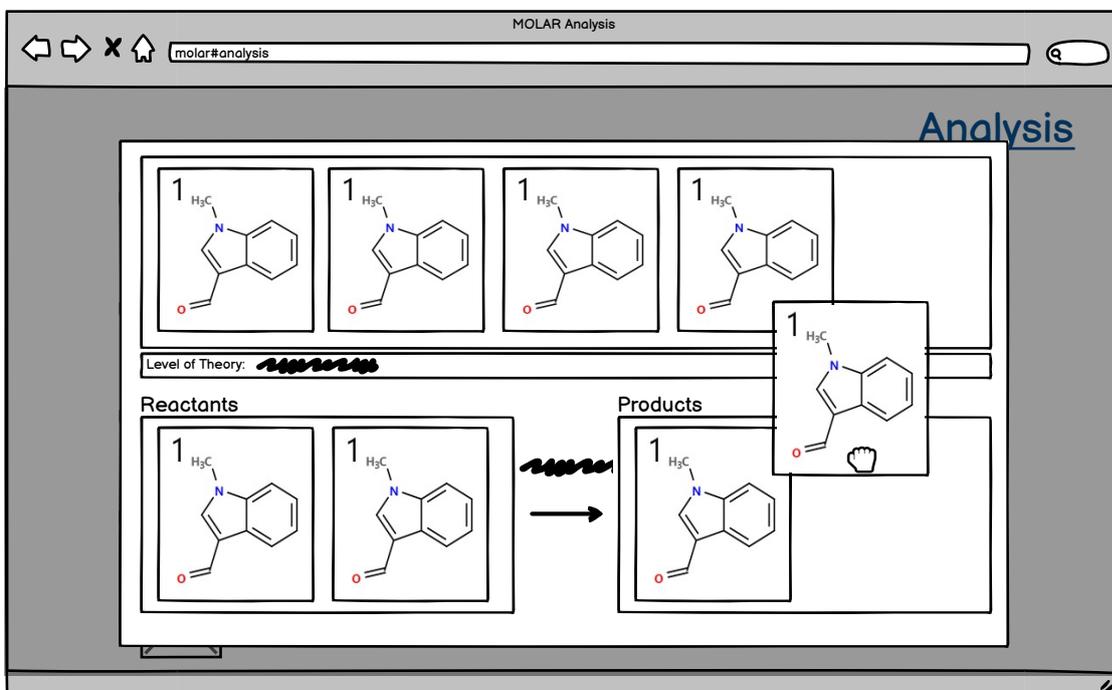


Abbildung 3.4: Wireframe: Analyse-UI mit D&D als Modal

4 Ergebnis & Diskussion

Nach der in der Planung skizzierten Benutzeroberfläche, folgt nun die Implementation und der iterative Kreislauf zur Verbesserung. Zum Schluss wird die Integration des AT in MOLAR beschrieben und sowohl der Ausgangszustand mit dem Endzustand verglichen als auch diskutiert.

4.1 Prototyp 1

Basierend auf dem Entwurf der Benutzeroberfläche, wurde ein Prototyp angefertigt, der abseits von MOLAR eigenständig funktioniert und mit Beispieldaten arbeitet. Abbildung 4.1 zeigt dabei die Umsetzung von Abbildung 3.2, wobei die E-States ihrer Nummer in der Datenbank nach aufsteigend sortiert werden. Um die Analyse Funktion gut sichtbar zu machen, wurde ein farbiges Mikroskop-Objekt-Emoji (🔬) hinter den Analyse-Link gesetzt.

All e states [Analysis](#) 🔬

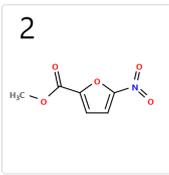
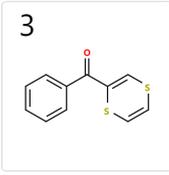
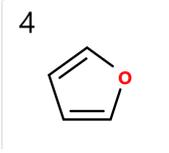
#	e_state	net_charge	spin_state	type	Download
1	<input type="checkbox"/> 	0	1	Minimum	1.xyz
2	<input type="checkbox"/> 	0	1	Minimum	2.xyz
3	<input type="checkbox"/> 	0	1	Minimum	3.xyz
4	<input type="checkbox"/> 	0	1	Minimum	4.xyz

Abbildung 4.1: Index: E-States Übersicht

Die Tabellen-Spalten `net_charge`, `spin_state` und `type` stellen chemische Attribute dar, die aus der Datenbank geladen werden und den Nutzenden mit Fachkenntnissen hilft, E-States auszuwählen, die ein sinnvolles Ergebnis²³ erreichen. Im Folgenden wird nun mit Hilfe von Screenshots die Funktionalität des Prototypen vorgestellt, die auch später validiert werden soll, um zu überprüfen ob diese sowohl logisch als auch inhaltlich von den Nutzern verstanden wird und um den in 1.3 definierten Erwartungen zu entsprechen. Nach einem Klick auf ein E-State auf dem Index, öffnet sich wie konzipiert in Abbildung 3.3 ein Modal, in Abbildung 4.5 gezeigt. In diesem können Nutzende Konformer oder einzelne Punkte für die spätere Analyse auswählen, per Klick auf den Button in der jeweiligen Zeile. Die Tabelle enthält erneut chemische Attribute aus der Datenbank. Fett markiert sind die Spalten `h_corr`, `g_corr` und `etotal` der Zeile mit den niedrigsten

²³Im Sinne von einer funktionierenden chemischen Reaktion

Zahlen, was Nutzenden die Entscheidung der Auswahl erleichtert²⁴. Nach Hick's Law steigt mit der Anzahl der Auswahlmöglichkeiten die Reaktionszeit und kognitive Belastung, somit erhöht die Hervorhebung einer Zeile die UX, da dies Nutzenden eine schnellere Entscheidung ermöglicht [46]. Um ein Konformer/Einzelpunkt für die Analyse auszuwählen, klickt der Nutzende auf „Select“ und vice-versa per „Unselect“ (Abbildung 4.6). Das Reagenzglas-Emoji (🧪) ist als Metapher für die „chemische Analyse“ angedacht und soll Nutzenden den Zusammenhang, wofür die Selektion ist, implizit aufzeigen und fungiert somit als mentales Modell. Um die kognitive Belastung durch die vielen Details und nur minimal unterschiedlichen Zahlen zu reduzieren, werden nach Selektion einer Zeile alle Zeilen ausgegraut, die ein anderes LOT haben, damit Nutzende weitere Entscheidungen treffen können ohne ungewünschte Elemente zu wählen (Abbildung 4.7). In seltenen Fällen ist es interessant, Elemente von unterschiedlichen LOT zu analysieren, um Unterschiede in der Berechnung der QM-Daten festzustellen. Somit bleibt Experten/-innen die Möglichkeit erhalten dies zu tun, da die Zeilen nicht komplett ausgeblendet werden.

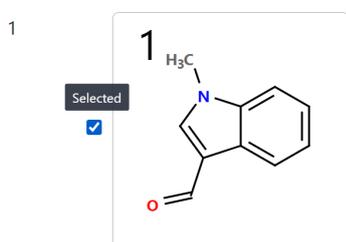


Abbildung 4.2: Index: Checkbox und Tooltip (selektiert)

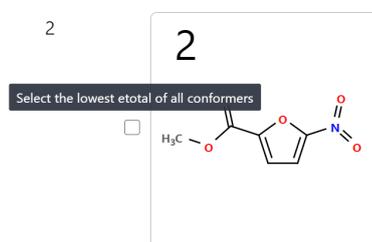


Abbildung 4.3: Index: Checkbox und Tooltip (unselektiert)

Um die kognitive Belastung weiter zu reduzieren, findet sich auf der Startseite eine Checkbox (Abbildung 4.3), die ein „Shortcut“ für die Selektion der hervorgehobenen Zeile des Modals darstellt. Ebenso ist die Checkbox im Status „checked“ sobald ein Konformer/Einzelpunkt im Modal ausgewählt wurde, um eine schnelle Deselektion zu ermöglichen. Durch die Nähe zum Bild des E-States, ist Nutzenden mit einem Blick klar, dass die Checkbox mit dem E-State zusammenhängt [47, Law of Proximity, Law of Common Region].

Das AT erreichen Nutzende per Klick auf „Analysis 🧪“ oben rechts auf dem Bildschirm in einer prominenten Schriftgröße durch den <h1>-Tag (Abbildung 4.1). Das Mikroskop-Emoji (🔬) soll wieder als Metapher dienen, im Sinne von „detaillierter Betrachtung“, hier die Analyse der ausgewählten Elemente und fungiert somit als mentales Modell für den Nutzer. Das Bootstrap Modal-Element wird als Container für die UI des AT (Abbildung 4.4) verwendet zur Umsetzung des Wireframes (Abbildung 3.4). Dort werden alle ausgewählten Elemente gelistet und können nun wie geplant per D&D verschoben werden. Zudem wird das momentan ausgewählte LOT angezeigt. Während dem D&D, wird Nutzenden visuell gezeigt, in welche Felder er die Elemente verschieben kann (Abbildung 4.8). Nachdem der Nutzende mindestens ein Element zu dem Feld der Reaktanten (links) oder Produkte (rechts) geschoben hat, wird das Ergebnis mittig angezeigt (Abbildung 4.9). Der Pfeil in der Mitte stellt den Nutzenden auf das mentale Modell ein, wie die Reaktion in der Praxis ablaufen würde: die Reaktanten „reagieren“ und formen bestimmte Produkte. Um Elemente zu entfernen oder Details zu betrachten, kann der Nutzende mit der Maus über dem Element „hovern“ um ein Popover zu öffnen (Abbildung 4.10). Das Popover wird mit einer Verzögerung von 300 ms mit 200 ms „Fade-In“ Dauer, sofern sich das Element nicht bereits im „Drag“-Status befindet, angezeigt, um die D&D Bewegung nicht zu stören. Durch die insgesamt 500 ms Verzögerung, bis das Popover sich öffnet, soll die Häufigkeit der störenden Anzeige des

²⁴Im generellen Konsens der Chemiker wird ein Konformer/Einzelpunkt mit dem niedrigsten etotal als „gut genug“ angesehen um eine schnelle Auswahl zu treffen. Dies kann und muss aber nicht immer die beste Entscheidung darstellen.

Popovers reduziert werden ohne Nutzenden das Gefühl einer unperformanten UI zu geben, die verzögert auf Mausbewegungen reagiert [48, 49]. Die „Fade-In“ Animation wird mit der ease-out Kurve versehen, was die Animation natürlicher erscheinen lässt [49].

Da es sich um einen ersten Prototypen handelt und Nutzende bei eventuellen Fehlern nicht vom weiteren Testen gehindert werden sollen, werden Aktionen (Zustände) nur im aktuellen JavaScript-Heap der Seite gespeichert:

```
const storage = {
  selection: {
    level: '',
    estates: new Set(),
    conformers: new Set(),
    singlepoints: new Set(),
  },
  products: {},
  reactants: {}
}
```

Wobei die Klasse Set Teil von ECMAScript 2015 (ES6)²⁵ ist und von allen Zielbrowseren (3.3) unterstützt wird²⁶. Es wird genutzt um zu garantieren, dass ausgewählte Elemente nur einmal im Heap gespeichert werden. Die Übertragung der Nutzerauswahl erfolgt per GET Parameter an das Backend und wird durch folgende Funktion, die die native toString Methode des Objekts überschreibt, anhand der derzeitigen Inhalte in storage gebildet:

```
/**
 * Outputs the storage key-value pairs as string
 * that can be used as GET parameters in URLs.
 *
 * @return {string}
 */
function toString() {
  let text = '&'
  for (let key in storage.selection) {
    const element = storage.selection[key]
    if (typeof element === 'string') text += key + '=' +
      ↪ encodeURIComponent(element) + '&'
    else if (element instanceof Set) text += key + '=' +
      ↪ [...element].join('+') + '&'
  }
  return text
}
```

und wird durch folgenden PHP-Code gelesen:

```
<?php
$conformers = !empty($_GET['conformers']) ? array_map('intval', explode('
↪ ', $_GET['conformers'])) : [];
$singlepoints = !empty($_GET['singlepoints']) ? array_map('intval',
↪ explode(' ', $_GET['singlepoints'])) : [];
$estates = !empty($_GET['estates']) ? array_map('intval', explode(' ',
↪ $_GET['estates'])) : [];
```

²⁵<https://262.ecma-international.org/6.0/#sec-set-objects>

²⁶https://developer.mozilla.org/de/docs/Web/JavaScript/Reference/Global_Objects/Set

Durch die Konvertierung der Array-Inhalte per `array_map('intval', ...)` zu Zahlen, wird sichergestellt keine Structured Query Language (SQL)-Injektion und Cross-Site-Scripting (XSS) Lücke entstehen zu lassen, da beispielsweise `<` und `'` nicht als Zahl (Integer) darstellbar sind. Das AT an sich wird mit der jQuery-Funktion `load` aktuell gehalten und das benötigte HTML wird folgendermaßen vom Backend geladen: `$(...).load('?result' + storage.selection.toString())`, wobei der GET-Parameter `result` dem Backend zeigt, dass nun das AT ausgegeben werden soll. Durch die Datenübergabe per Uniform Resource Locator (URL) speichert das Backend keine Daten und somit wird die Wahrscheinlichkeit reduziert, dass Tester in Studien an einem Punkt ankommen, an dem sie nicht mehr weiter testen können, da ein Neuladen der Seite alle Daten zurücksetzt und somit der Fehlertoleranz von DIN EN ISO 9241-110 [6] gerecht wird. Im Backend wird das HTML, welches im folgenden Schritt benötigt wird, generiert und die Daten per SQL-Query abgefragt. Die Wahl des „besten“ Konformer²⁷ erfolgt dabei anhand der Datenbank-Einträge:

```
SELECT e.id as pr_id, l.id as lot_id, ..., 'estates' as selection_type FROM
  ↪ public.e_states e
JOIN public.tpos t ON e.tpos_id = t.id
JOIN public.conformers c ON e.id = c.estate_id
JOIN public.levels_of_theory l ON c.lot_id = l.id
WHERE c.etotal = (SELECT MIN(c2.etotal) FROM PUBLIC.conformers c2 WHERE
  ↪ c2.estate_id = e.id)
AND e.id IN (*)
```

wobei der Platzhalter bei `IN (*)` durch das Ergebnis von der PHP-Funktion `implode(',', $estates)` ersetzt wird.

Für die D&D Funktionalität wird `Interact.js`²⁸ v1.10 verwendet, wobei die Konfiguration analog zum Tutorial der Bibliothek folgt. D&D hat verschiedene Schritte, die selbsterklärende Events auslösen, diese lauten bei Drop-Zonen: `ondropactivate`, `ondragenter`, `ondragleave`, `ondrop`, `ondropdeactivate`. Bei Drag-Elementen: `start`, `move`, `end`. Bei allen Events werden per JavaScript CSS Klassennamen hinzugefügt oder entfernt, beispielsweise `dropzoneElement.classList.add('drop-target')`, `draggableElement.classList.add('can-drop')`, um Nutzenden den aktuellen Zustand von D&D visuell zu vermitteln um die Benutzung zu vereinfachen [50]. Wird ein Drag-Element „gedroppt“, wird es in dem `ondrop` Event-Handler in das `storage`-Objekt eingefügt und das Analyseergebnis aktualisiert. Die Berechnungsfunktion dafür wurde basierend auf 2.6 Exkurs: Funktionsweise der chemischen Analyse implementiert und von Dr. Harish bezüglich ihrer Korrektheit verifiziert.

²⁷Siehe Fußnote 24

²⁸<https://github.com/taye/interact.js-v1.10> hat die MIT Lizenz

All e states

#	e_state	net_charge	spin_state	type	Download
1	1 H ₃ C	0	1	Minimum	1.xyz

Drag & Drop the boxes to calculate

Level: Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/int=ultrafine

Reactants

Products

ΔE
ΔH
ΔG
kJ/mol

4

Abbildung 4.4: Modal: Analyse-UI

All e states

#	e_state	net_charge	spin_state	type	Download
1	1 H ₃ C	0	1	Minimum	1.xyz

Conformers

#	homo	lumo	If_1	If_2	If_3	zpe	h_corr	g_corr	etotal	level_package	Download	Action
1	-0.22516	-0.05114	-5.7702	-0.001	0.0002	0.166942	0.177767	0.131559	-516.5205135	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/int=ultrafine	4.xyz	Select
2	-0.22456	-0.05553	-0.0008	-0.0005	0.0005	0.166878	0.177782	0.13131	-516.5184094	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/int=ultrafine	3.xyz	Select

Single Points

#	Conformer Nr.	homo	lumo	If_1	If_2	If_3	zpe	h_corr	g_corr	etotal	level_package	Action
1	1	-0.22456	-0.05553	-0.0008	-0.0005	0.0005	0.166878	0.177782	0.13131	-516.6438839	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-311++G(3df,2pd)/empiricaldispersion=gd3	Select
2	2	-0.22516	-0.05114	-5.7702	-0.001	0.0002	0.166942	0.177767	0.131559	-516.6460225	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-311++G(3df,2pd)/empiricaldispersion=gd3	Select
3	1	-0.22456	-0.05553	-0.0008	-0.0005	0.0005	0.166878	0.177782	0.13131	-516.5304586	Gaussian 09, Revision E.01: CPCM(DMSO)/B3LYP/6-31++G(d,p)/empiricaldispersion=gd3	Select
4	2	-0.22516	-0.05114	-5.7702	-0.001	0.0002	0.166942	0.177767	0.131559	-516.5332077	Gaussian 09, Revision E.01: CPCM(DMSO)/B3LYP/6-31++G(d,p)/empiricaldispersion=gd3	Select

Abbildung 4.5: Modal: E-State Details

#	homo	lumo	If_1	If_2	If_3	zpe	h_corr	g_corr	etotal	level_package	Download	Action
1	-0.22516	-0.05114	-5.7702	-0.001	0.0002	0.166942	0.177767	0.131559	-516.5205135	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/int=ultrafine	4.xyz	Unselect
2	-0.22456	-0.05553	-0.0008	-0.0005	0.0005	0.166878	0.177782	0.13131	-516.5184094	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/int=ultrafine	3.xyz	Select

Abbildung 4.6: Modal: UI nach Selektion

Single Points

#	Conformer Nr.	homo	lumo	If_1	If_2	If_3	zpe	h_corr	g_corr	etotal	level_package	Action
1	1	-0.21174	-0.08485	-1.5075	-0.0024	-0.0019	0.157998	0.171112	0.117995	-1295.7925823	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-311++G(3df,2pd)/empiricaldispersion=gd3	Select
2	2	-0.21387	-0.08271	-0.8242	-0.0029	-0.0023	0.157865	0.171023	0.117598	-1295.7915188	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-311++G(3df,2pd)/empiricaldispersion=gd3	Select

Abbildung 4.7: Modal: Ausgrauung von unterschiedlichen Level of Theories

Abbildung 4.8: Modal: Ansicht während „Drag“ Status

Abbildung 4.9: Modal: Ansicht nach „Drop“ und Analyseergebnis

net_charge	spin_state	type	homo	lumo	If_1	If_2	If_3	zpe	h_corr	g_corr	etotal	level_package	selection_type
0	1	Minimum	-0.22516	-0.05114	-5.7702	-0.001	0.0002	0.166942	0.177767	0.131559	-516.5205135	Gaussian 09, Revision E.01: B3LYP/6-31++G(2d,p)/empiricaldispersion=gd3/mt=ultrafine	estates

Unselect

Abbildung 4.10: Modal: Popover bei „Hover“ über einem Element zeigt Details des Elements

4.1.1 Validierung per Nutzerbefragung

Ziel der Nutzerbefragung ist es den Prototyp 1 auf folgendes zu überprüfen:

1. ob die Features, die implementiert wurden, verstanden werden,
2. wie einfach sie zu verstehen sind,
3. wie schnell sie zu benutzen sind und
4. welche Features fehlen bzw. zusätzliche User-Needs zu finden.

Da es sich um einen ersten Prototyp handelt, ist es auch wünschenswert Vergleichswerte für eine spätere erneute Evaluation zu sammeln. Somit wird ein Fragebogen erstellt, der für Punkte eins bis drei eine Likert-Skala, sowie eine offene Fragestellung mit optionaler Antwort für Punkt vier verwendet. Um das Verständnis zu prüfen, werden zusätzlich zur verwendeten Likert-Skala definierte Aufgaben und Ergebnisse abgefragt, wodurch sich feststellen lässt, ob das gefundene Ergebnis auch das gewünschte Ergebnis ist. Daraus lassen sich gegebenenfalls weiterführende Maßnahmen ableiten. Durch die vorher bekannte niedrige Testpersonen Anzahl $N = 7$ bietet sich ein Kommentarfeld nach der Likert-Skala an, um eventuelle Schwierigkeiten oder Wünsche bei einzelnen Aufgaben zu erfassen. Der Ablauf des Tests und das Design der Fragen folgt den Richtlinien eines Standardwerks zu Interaction Design [51]. Somit ist eine Vorstellung der Studie der erste Schritt, sowie die Zusicherung der anonymen Auswertung. Da die Funktionalität des Prototyps für die Testpersonen unbekannt ist, wird der Testgruppe eine Einführung in den Prototyp gegeben und der Umgang mit der chemischen Analyse vorgeführt. Das Tutorial wurde den Teilnehmern ebenfalls schriftlich und ohne zeitliche Begrenzung zur Verfügung gestellt. Den Teilnehmern stand vor dem Absenden des Fragebogens frei, sich solange mit der UI zu beschäftigen wie benötigt. Der gesamte Fragenkatalog ist im Anhang zu finden.

4.1.2 Auswertung der Validierung

Die Demografie war mit fünf männlichen (71%) und zwei weiblichen (29%) Testpersonen in Hinblick auf das Geschlecht nicht ausgeglichen, wodurch es bei der subjektiven Nutzerfreundlichkeit zu einem minder verzerrtem Ergebnis kommen könnte, da Geschlechter teilweise unterschiedliche Präferenzen in Web-UIs haben [52], was allerdings bei der geringen Anzahl nicht mit signifikantem Ergebnis genauer zu bestimmen ist. Die Altersgruppen beliefen sich auf 43% (3) über 30-Jährige und 43% (3) 20- bis 30-Jährige (sowie 14% (1) ohne Angabe). Außerdem waren jeweils ein/e Bachelor Student/-in, ein/e Postdoktorant/-in, ein/e Professor/-in, und drei PhD Anwärtler/-innen (43%), sowie eine Person ohne Angabe zu finden. Somit sind in der Studie Anfänger bis Experte vertreten, was ausreicht zur Bewertung der vorher definierten Punkte.

Fünf (71%) der Teilnehmer/-innen haben das richtige Ergebnis für ΔE auf Basis der Aufgabenstellung gefunden, für ΔH und ΔG allerdings nur vier (57%), wobei 100% der Teilnehmer/-innen das richtige LOT angegeben haben. Nur eine Person hat angegeben, Probleme dabei zu haben die Lösung zu finden (Abbildung 4.11), somit lässt sich ein Nutzungsfehler bei der Analyse vermuten, wie zum Beispiel das Verdrehen der Elemente im Sinne von richtige Elemente gewählt, aber Reaktanten als Produkte und vice-versa angegeben, oder alternativ Missverständnisse bei der Aufgabe (falsche Elemente gewählt, zufällig richtige LOT). Weiterhin wird die These gestützt durch die Auswertung der Nützlichkeit des Tutorials, da 100% der Studienteilnehmer/-innen diese als nützlich empfanden und somit den Ablauf der Analyse verstanden haben sollten. Potentiell wird die Fehlerrate reduziert, indem die Hinweise aus dem Tutorial auch in die Anwendung eingebaut werden, was 71% als sinnvoll erachten, und könnte weiterhin auch dazu beitragen, dass das Tutorial nicht öfters angeschaut werden muss. Die Mehrheit (min. 71%), also der gleiche Anteil, der zumindest ΔE korrekt angegeben hat, war zufrieden mit der benötigten Zeit und Anstrengung bis

zum Erreichen des Ergebnisses (Abbildung 4.12). Abbildung 4.13 zeigt die Bewertung der Webanwendung in Bezug auf generelle Aspekte, die mehrheitlich positiv ausgefallen sind. Insbesondere ist das Ziel erfüllt worden Analyseergebnisse schneller zu liefern als offline Programme, da 100% der Nutzendenangaben, schneller zu Ergebnissen zu kommen. Im nächsten Schritt sollte D&D bewertet werden, zu sehen in Abbildung 4.14.

Die Mehrheit (57%) findet D&D nicht innovativ und 85% hätten D&D auch ohne Erklärung verstanden. Ebenso finden 71% die D&D Funktionalität besser als traditionellere Varianten wie zum Beispiel die Auswahl per Button. Da D&D der Hauptmechanismus für die Analyse ist und 71% zugestimmt, sowie 29% etwas zugestimmt haben, dass die Anwendung Spaß gemacht hat, lautet eine These als Erklärung für den Spaß, dass D&D Spaß macht. Dies ist in der nächsten Studie zu testen. Weiterhin war es für die Weiterentwicklung von dem Prototypen auch wichtig einzelne Funktionalitäten zu bewerten, um herauszuarbeiten, wo am meisten Nachbesserungsbedarf ist und ob eingebaute Erleichterungen Nutzenden helfen könnten (Abbildung 4.15, Abbildung 4.16). Insbesondere folgende Statements haben eine Zustimmung von 85% bei der Testgruppe: das Ausgrauen von weniger relevanten Daten hilft dem Nutzer, die genauen Details zu Konformere/Einzelpunkten werden als nützlich angesehen, und es wird verstanden wie die Details einsehbar sind. Hervorhebenswert ist noch, dass 57% unentschlossen auf das Statement, ob die Details den Nutzenden überwältigen (vergleiche Abbildung 4.10), geantwortet haben. Dies lässt darauf schließen, dass unterschiedliche Details für unterschiedliche Personengruppen wichtig sind und somit keine pauschal weniger prominent dargestellt oder weggelassen werden können, da die Antworten sonst eindeutiger in eine Richtung ausgefallen wären. Eine weitere These war, dass zwei Dezimalstellen ausreichend für weitere Forschungstätigkeiten sind, dies wurde von 43% bestätigt, aber von 57% teilweise bestätigt oder nicht bestätigt (unentschlossen), somit sollte erneut geprüft werden, ob Nutzende die Möglichkeit haben sollten Dezimalstellen erweitern zu können im Sinne der Individualisierbarkeit nach DIN EN ISO 9241-110 [6].

Zuletzt, vier (57%) der Teilnehmer haben das Freitext-Feld genutzt um Wünsche oder Vorschläge abzugeben. Ein Teil des Feedbacks handelt von vorhandenen Fehlern in Prototyp 1: Overflow der Popover aus dem Bildschirmrand (Abbildung 4.10), Overflow der ausgewählten Elemente (wenn mehr als 10 ausgewählt bzw. abhängig von Bildschirmauflösung) in Abbildung 4.4, ein visueller Reflow nach Klick des „Select“ Buttons durch unterschiedliche Textlänge (Abbildung 4.6), und nicht-entfernbar Elemente im Reaktanten/Produkte Feld (Abbildung 4.9). Vorschläge zu Features waren wie folgt: ein „alles abwählen“ Button (50% von den Nutzern, die das Feld ausgefüllt haben), Auswahl der LOT direkt im AT (25%), visuelle Differenzierung von Konformere gleicher E-States (25%) und umändern der Download-Option (Abbildung 4.6), da nicht die ganze Datei benötigt wird, sondern häufig nur einzelne Koordinaten (25%). Somit wäre eine Inline-Anzeige des Dateiinhalts der QM-Pakete (.xyz Datei) bzw. der Koordinaten sinnvoller als die Abfolge Download -> öffnen auf OS -> kopieren. Eine Testperson hat direkt die Popover angesprochen (Abbildung 4.10), die in Prototyp 1 durch ein „hover“ getriggert werden, somit werden die Details jedes mal angezeigt, wenn man den D&D Mechanismus benutzt und hat vorgeschlagen andere Trigger-Mechanismen, beispielsweise Details nach einem Klick anzeigen, zu benutzen. Alle Probanden gaben an, dass sie mindestens etwas Spaß hatten an dem Fragebogen (29% haben zugestimmt, 71% etwas zugestimmt), somit scheint die Fragebogen Länge annehmbar gewesen zu sein.

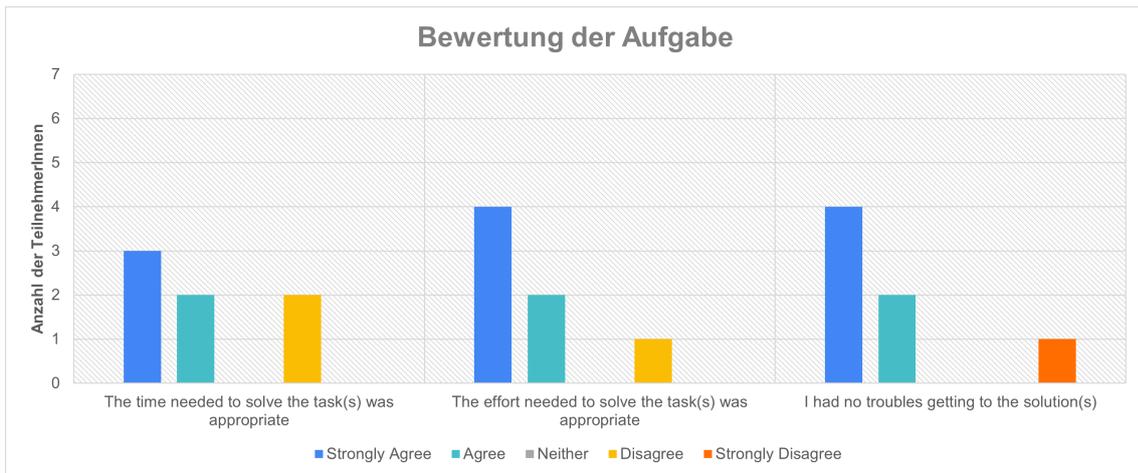


Abbildung 4.11: Bewertung der gestellten Aufgabe im Fragebogen

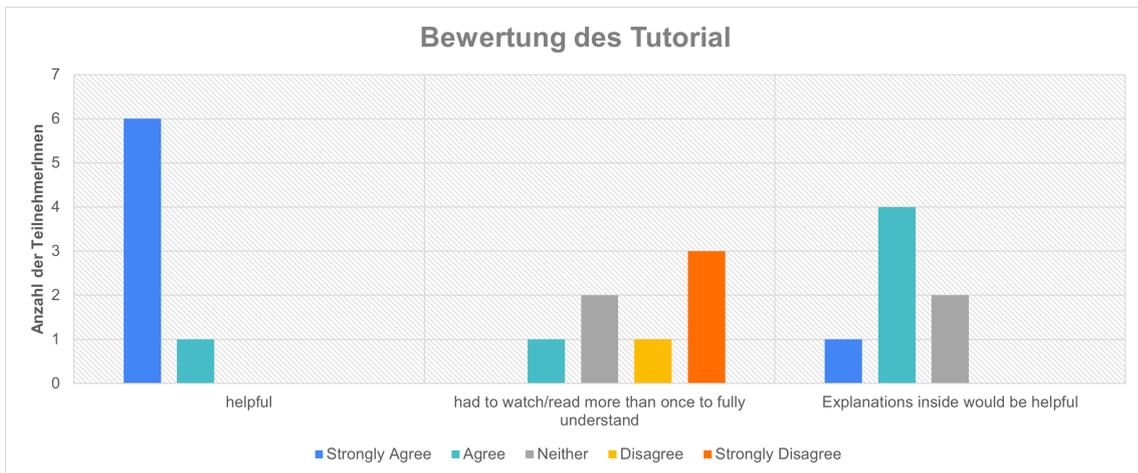


Abbildung 4.12: Bewertung des Tutorials vor dem Fragebogen

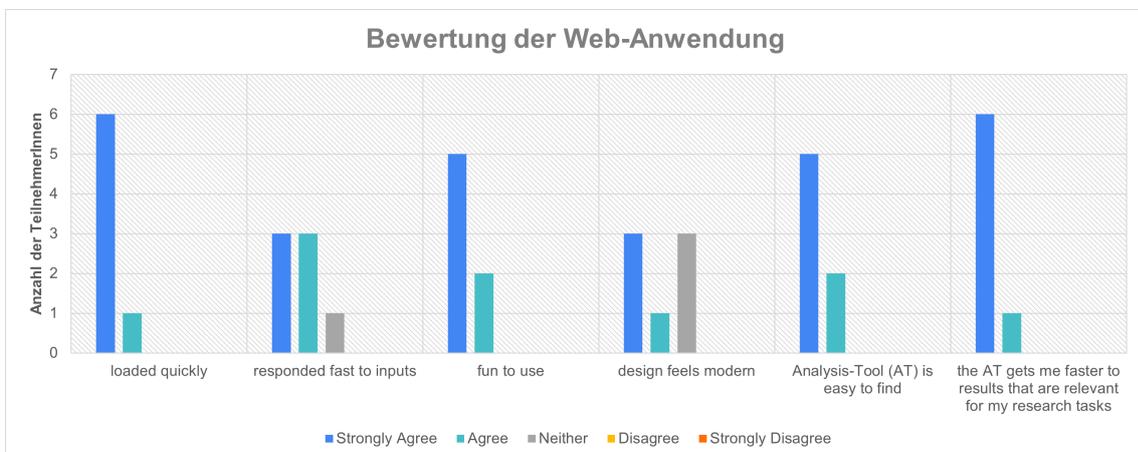


Abbildung 4.13: Bewertung von generellen Eigenschaften der Webanwendung

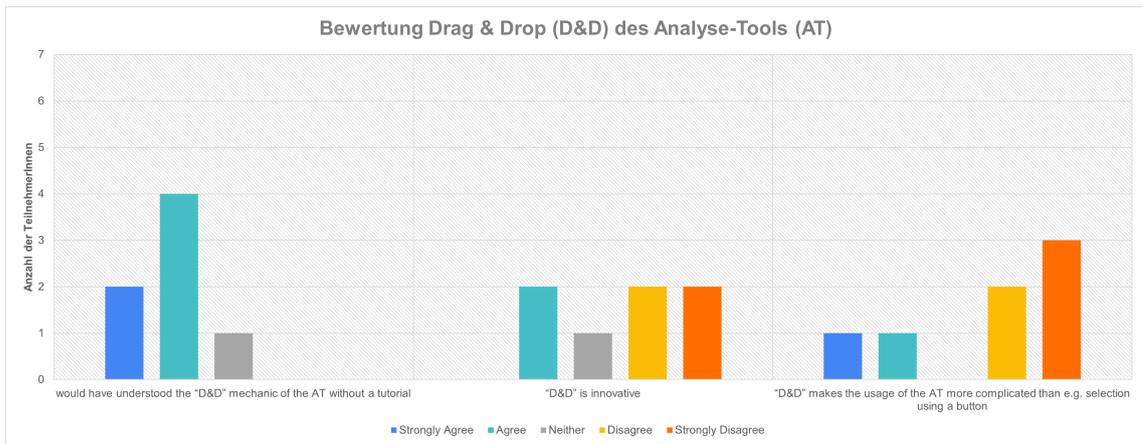


Abbildung 4.14: Bewertung D&D des AT

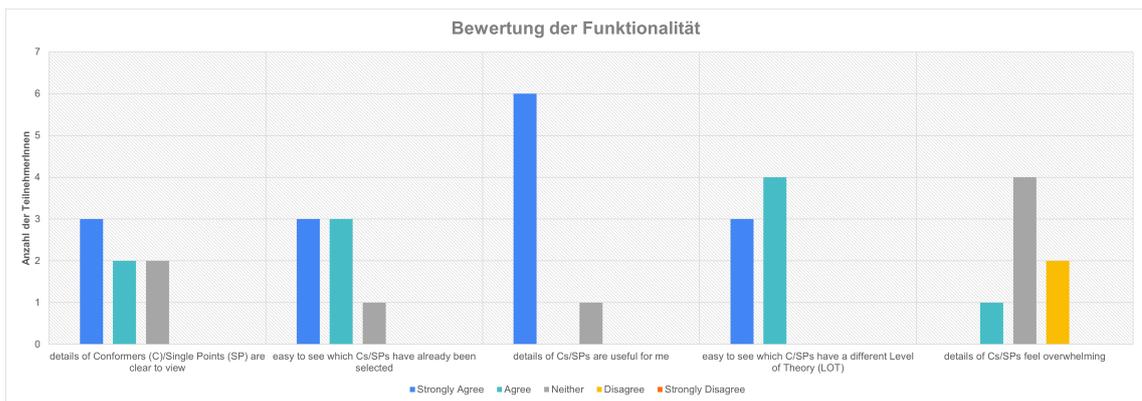


Abbildung 4.15: Bewertung der Funktionalität der Webanwendung (1/2)

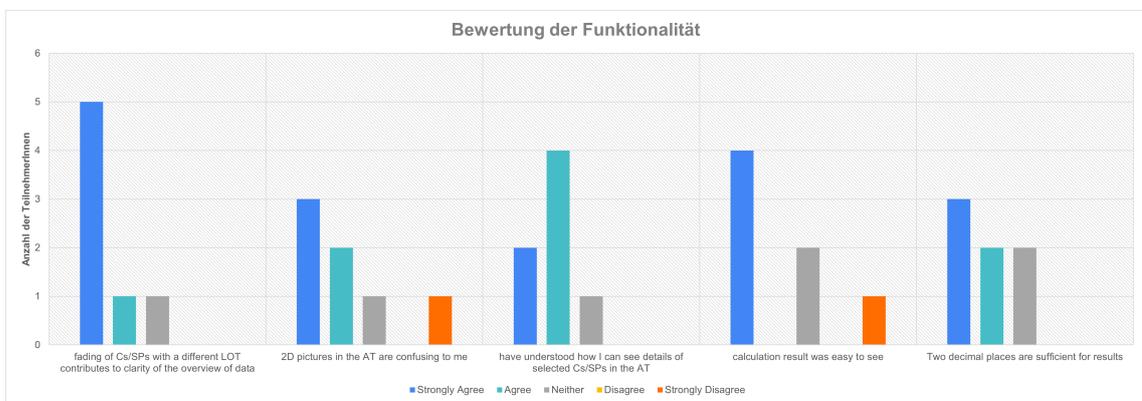


Abbildung 4.16: Bewertung der Funktionalität der Webanwendung (2/2)

4.2 Prototyp 2

Basierend auf Prototyp 1 und dessen Validierung, wurden einige Punkte zur Verbesserung herausgearbeitet und unter anderem sind durch fortlaufende Analysen und Beobachtungen als Teil von UCD neue User-Stories entstanden. Ein großer, bis jetzt nicht beachteter Teil fällt auf das Teilen von Ergebnissen in Teams als Maßnahme zur drastischen Verbesserung der Nützlichkeit beim Forschen (und Lernen) bei Teamarbeit. Dieser Punkt ist indirekt bei der Studie aufgefallen, da Teilnehmer nach der Studie an sich weiterhin Zugriff auf den Prototypen hatten und Ergebnisse teilen wollten. In Prototyp 1 war dieser Use-Case nicht möglich, da die Auswahl der E-States und die Analyseergebnisse nur mündlich weiter zureichen waren. Aus diesem Use-Case ist ein weiterer entstanden, da Nutzende auch die Ergebnisse eigener abgeschlossener Forschung speichern und später wieder einsehen wollen. Somit gibt es zwei neue User-Stories:

- Als Nutzer/-in möchte ich Ergebnisse mit anderen Personen teilen können, damit diese basierend auf meinen weitere Analysen anfertigen können.
- Als Nutzer/-in möchte ich meine Ergebnisse speichern, um diese in Zukunft wieder abrufen zu können.

Beide haben zudem das Potential von großer Bedeutsamkeit zu sein, da dies ermöglichen würde Analysen, die sonst nur per Tabellen in wissenschaftlichen Arbeiten dargestellt sind, auf langfristig zugänglich und nachvollziehbar zu machen und somit das Aufbauen auf vorherigen Analysen zu vereinfachen, selbst wenn der/die Autor/-in der Forschungsarbeit nicht mehr an der Forschung beteiligt ist. Letzteres ist nicht nur ein theoretisches Szenario, sondern hat das Department für Chemie bereits in der Vergangenheit vor Herausforderungen gestellt.

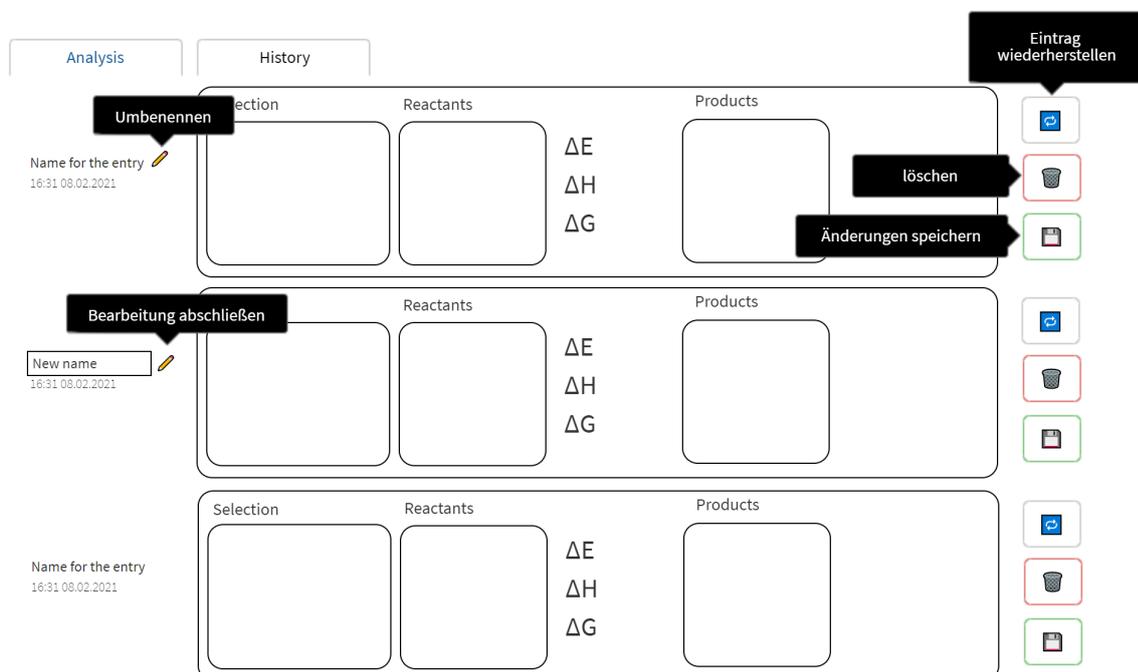


Abbildung 4.17: Sketch des History-Tabs

4.2.1 Verbesserungen gegenüber Prototyp 1

In führenden Apps und Webseiten im Internet, hat es sich als Standard etabliert Inhalte per URL-Parameter zu teilen, so enthält beispielsweise ein YouTube-Video die ID als Query-Parameter: <https://www.youtube.com/watch?v=y6120QOlsfU>. Dieser Mechanismus soll auch im AT benutzt werden. Es ist unbekannt, wie viel Nutzende ohne IT-Kenntnisse wissen, dass man häufig die URL, die der Browser in der Adressleiste anzeigt, teilen kann und somit setzen auch sämtliche Social-Media-Webseiten auf einen „Share“-Button, der oft nichts anderes macht, als die URL in die Zwischenablage zu kopieren.



Abbildung 4.18: Ansicht der URL-Teilen Funktionalität

Nutzer/-innen wird die URL zum kopieren in einer readonly Textbox angezeigt, die die Browser Adressleiste eins-zu-eins reflektiert, wobei der „Copy“-Button als „Share“-Button fungiert und bei Klick die URL in die Zwischenablage kopiert, damit auch Nutzende ohne Kenntnisse über Strg+C bzw. „Rechtsklick -> Kopieren“ den Link teilen können. Der Text des Buttons ändert sich auf „copied“ nach Betätigung und nach einer Änderung in der URL wieder zurück auf „copy“. Als kleine Verbesserung der UX wird der gesamte Text markiert, sobald die Textbox fokussiert wird, damit der Nutzende nicht erst manuell den gesamten Text markieren muss. Über native Browser Funktionen kann der Nutzende zudem nun die URL favorisieren, um jederzeit einen beliebigen Zustand herzustellen. Um diese Funktionalitäten zu ermöglichen, muss die URL nach jeder Aktion aktualisiert werden. Damit der Nutzende nicht durch einen Browser-Refresh des Tabs unterbrochen wird, wird das Aktualisieren per JavaScript durchgeführt:

```
/**
 * @param {{ [x: string]: any; }} obj
 * @param {boolean} replace
 */
function updateURLByObj(obj, replace) {
  const searchParams = new URLSearchParams(location.search)
  for (const i in obj) setSearchParams(searchParams, i, obj[i])

  const urlStr = location.pathname + '?' + searchParams.toString()
  if (replace) history.replaceState(null, 'Calculate Reaction Energy -
  ↪ MOLAR', urlStr)
  else history.pushState(null, 'Calculate Reaction Energy - MOLAR', urlStr)

  $('#currentURL').val(location.href) // update share box
}
```

wobei je nach Parameter, die momentane URL überschrieben wird per `history.replaceState` (daher: der Nutzende kann die Browser-Zurück-Taste nicht verwenden) oder per `history.pushState` aktualisiert (ermöglicht Vor/Zurück). Um die URL zu modifizieren, wird der gesamte GET-Parameter-String genommen und angepasst, somit werden nur relevante GET-Parameter modifiziert und zukünftige additional GET-Parameter von beispielsweise anderen MOLAR Modulen unberührt gelassen. Als Gegenstück zum schreiben der URL, wird von der URL gelesen mit folgender JavaScript Funktion:

```

/**
 * @param {string} key
 * @param {URLSearchParams} searchParams
 */
function assignFromSearchParam(key, searchParams) {
  const items = searchParams.get(key)
  if (items) {
    const arr = items.split(' ')
    assignFrom(arr, key)
  }
}

function initFromSearchParams() {
  const searchParams = new URL(document.location).searchParams
  assignFromSearchParam('products', searchParams)
  assignFromSearchParam('reactants', searchParams)
}

```

Damit nun Nutzende nicht das Browser-Favoriten System benutzen müssen um ihre Einträge zu speichern, und vor allem um vorherige Ergebnisse weiterhin gut sichtbar im AT zu haben, wird für die zweite neue User-Story (4.2) das Tab-System von Bootstrap genutzt, um einen „History“ Tab hinzuzufügen. Somit kann der Nutzende nun zwischen Haupt-UI und „History“ wechseln. Eine Skizze des History-Tabs ist in Abbildung 4.17 zu sehen, die Umsetzung in Abbildung 4.29 (ohne Sichtbarkeit der Tooltips), wobei die Drag-Elemente genau 50% kleiner sind um einen sichtbaren Unterschied zwischen Analyse-Tab und History-Tab zu ermöglichen und mehr auf dem Bildschirm (horizontal in einer Zeile) darstellen zu können. Erneut werden die 2D-Ansichten genutzt, um einen schnellen Überblick über vergangene Analysen zu ermöglichen. Um den Nutzenden nicht mit Icons zu überladen, wird das Stift-Objekt-Emoji (🖋) zum Umbenennen des Eintrages nur bei „hover“ über den Bereich des Namens angezeigt. Das Umbenennen kann mit der Enter Taste, einem erneuten Klick auf das Icon, oder durch Heraus-Klicken (löst „blur“-Event aus) bestätigt werden. Um die Nützlichkeit des History-Tabs zu erhöhen, wird der Bereich der Reaktanten und Produkte immer angezeigt, Nutzenden wird also ermöglicht Elemente aus den Einträgen der History per D&D zu verschieben (Abbildung 4.30), und das Ergebnis der Reaktion ist auch stets sichtbar und interaktiv. Weiterhin wird Nutzenden mit einem Button ermöglicht, den momentanen Zustand des Analyse-Tabs zur Historie zu speichern. Gleichzeitig wird nun auch ein weiterer Button eingefügt für den Reset der aktuellen Selektion, und somit dem häufigsten (50%) Wunsch der Nutzenden aus der Studie zum ersten Prototypen nachkommt (Abbildung 4.19). Um einen unerwünschten Reset zu vermeiden, wird nach Button Betätigung ein Bootstrap Modal geöffnet, in dem der Nutzende erneut bestätigen muss die Aktion wirklich durchzuführen, wobei der „Clear“ Button eine rote Farbe trägt um Nutzenden einen visuellen Hinweis zu geben, welcher der Button die Reset-Aktion auslöst (Abbildung 4.20). Über den Erfolg oder Misserfolg der Aktion wird ein Nutzender am oberen rechten Bildschirmrand (ohne Überlagerung des Navigation-Menüs) mit so genannten „Toasts“ der Bibliothek Toastr²⁹ benachrichtigt (Abbildung 4.21).

²⁹<https://github.com/CodeSeven/toastr> - v2.1.4 hat die MIT Lizenz



Abbildung 4.19: Speichern- und „alles entfernen“-Buttons

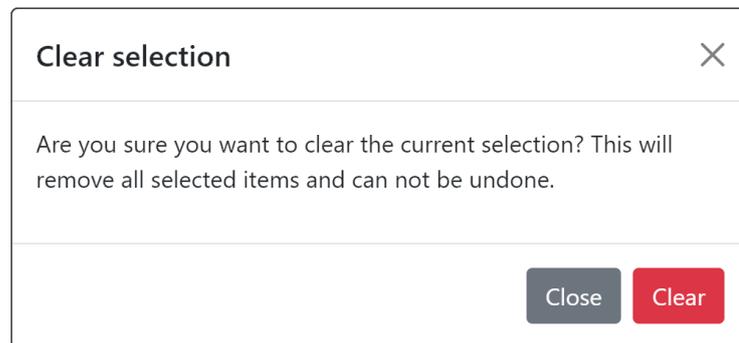


Abbildung 4.20: Modal: Bestätigung für Reset



Abbildung 4.21: Toast: Erfolg von Aktion „Save selection“

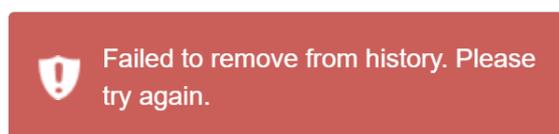


Abbildung 4.22: Toast: Misserfolg von Aktion „Delete entry“

Um die Interaktivität des History-Tabs zu gewährleisten, wird das Datenspeichermodell `storage` verändert und nutzt nun das State-Entwurfsmuster anstatt der direkten Speicherung des LOT, damit die gespeicherten Daten in Zukunft beliebig erweitert werden können:

```
const storage = {
  /** @type {StorageValue} */
  current: {
    /** @type {Set<number>} */
    reactants: new Set(),
    /** @type {Set<number>} */
    products: new Set(),
    /** @type {{ [type_id: string]: {[level: int]} }} */
    states: null, // type_id => state object
    /** @type {{ [type: string]: number[] }} */
    _types: null // contains possible types of reactants/products e.g.
    ↳ estates, conformers, singlepoints & their IDs
  }
}
```

Zudem wurde `selection` zu dem passenderen `_types` umbenannt und wird nun auch dynamisch vom Server befüllt, falls in Zukunft weitere Analyse-Typen abseits von E-States, Konformere und Einzelpunkten benötigt werden. Die `type_id` setzt sich aus einem `type` von `_types` und der ID aus `reactants/products/_types[i]` zusammen. Da der Heap nur begrenzt Daten aufnehmen kann und durch den Hauptspeicher des PC limitiert ist, ist zumindest von einem technischen Standpunkt aus ein Limit der Historie angebracht, die genaue Zahl ist per Studie zu determinieren. Falls Zielgruppen unlimitierte Einträge wünschen, ist es die Aufgabe der Navigation dafür zu sorgen, nur die relevanten Daten, die gerade angezeigt werden, im Speicher zu halten und den Rest für den Garbage Collector freizugeben. Damit die Historie nicht nur im Browser gespeichert wird, sondern auch auf Session-Ebene auf dem Server, wird die Storage per XMLHttpRequest (XHR) an den Server gesendet, der diese dann gemeinsam mit der Zeit in einem assoziativen Array speichert (wobei `$data->value` das jeweilige Storage Objekt als JavaScript Object Notation (JSON) String enthält):

```
<?php
try {
  session_start();
  $data = json_decode($_POST['data']);
  $storage = json_decode($_SESSION['history'] ?? '[]', true);

  ... assertions to validate data ...

  $lastId = array_key_last($storage);
  $id = ((int) $lastId) + 1;
  $storage[$id] = ['name' => null, 'time' => time(), 'storage' =>
  ↳ $data->value];
  $_SESSION['history'] = json_encode($storage);
  echo '{"ok":true,"id":"' . $id . '"}';
} catch (Exception e) { ... }
```

Analog zu dem Code zum Lesen der gewählten E-States aus den GET-Parametern, wird nun auch aus der Session-Variable gelesen und die beiden Selektionen verschmolzen, damit keine Nutzereingabe verloren geht. Für alle gewählten Elemente, also inklusive denen in der Historie, werden alle LOT geladen und per Skript-Tag an den Client übergeben:

Ergebnisse, durch höchste Präzision (typischerweise sind QM-Daten aus der Datenbank mit 14 Nachkommastellen angegeben; decimal.js unterstützt dies). Der Nachteil bei der Verwendung der Bibliothek für Berechnungen sind langsamere Berechnungen³², die sich allerdings auf $\leq 1-2$ ms belaufen und in dieser UI bei 60 Bildern pro Sekunde (ca. 16,67 ms Frame-Dauer) nicht visuell wahrnehmbar sind, ausgelöst durch dazukommende Objekt-Allocations der JavaScript-Engine (durch `new Decimal(...)`) und komplexere mathematische Abläufe statt der Verwendung nativer Zahlen. Falls in Zukunft komplexere oder mehr Abläufe von Nöten sind, kann dieser Nachteil aber teilweise aufgefangen werden durch einen Least Recently Used (LRU)-Cache, der Berechnungen speichern und ohne erneuten Aufwand wiedergeben kann, also Geschwindigkeit mit leicht höherer Speichernutzung kompensiert.

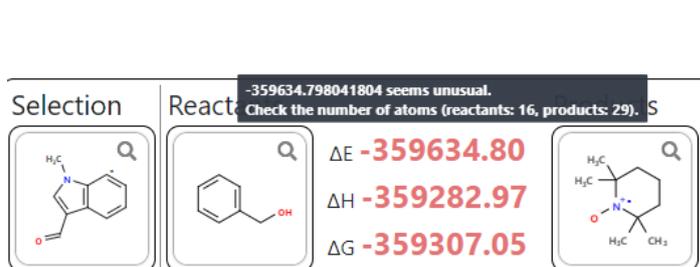


Abbildung 4.25: Hinweis zur ungleicher Anzahl der Atomen

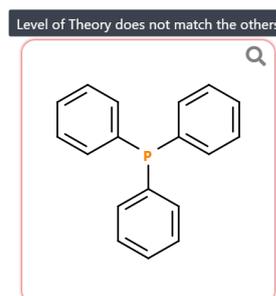


Abbildung 4.26: Hinweis zu unterschiedliche LOTs

Als Reaktion auf das User-Feedback bezüglich des Trigger-Mechanismus für die Details der Elemente, wird in Prototyp 2 nun getestet die Details per Rechtsklick anzeigen zu lassen, was allerdings verhindert, dass Nutzende per nativer Browser Funktion das Bild des Elements kopieren können und somit gegebenenfalls die UX mindert. Als Alternative zum Rechtsklick-Trigger, wurde ein visuelles Element samt Tooltip auf dem Drag-Element eingefügt, zu sehen in Abbildung 4.27. Diese Änderung führt auch dazu, dass das unerwünschte Triggern des Popovers bei langsamer D&D Bewegung (durch Element „hover“ länger als 500 ms), vermieden wird. In dem Details-Popover wurde die Tabelle visuell minimal verbessert, durch das Ersetzen von `_` durch den entsprechenden Index (Tiefsatz) und Anpassung der Button-Farbe zum Entfernen. Neu ist zudem, dass direkt im Details-Popover das LOT angepasst werden kann, wie von Nutzern gewünscht. Um Vergleiche zwei verschiedener LOT des gleichen Elements zu ermöglichen, wurde außerdem das Plus hinzugefügt, welches das Element dupliziert (Abbildung 4.28). Technisch gesehen war das Duplizieren von Elementen einfach umzusetzen, da schon für die Interaktion mit dem History-Tab eine Lösung für Konflikte durch gleiche Primär-IDs entwickelt wurde:

```
/**
 * @param {storage.states} states
 * @param {string} type_id
 * @return string
 */
function getNextCloneId(states, type_id, count = 0) {
  const nextId = type_id.split('.')[0] + '.' + count
  if (states[nextId] === undefined) return nextId.split('.')[1]
  return getNextCloneId(states, type_id, count + 1) // tail recursion
}
```

Die Endrekursive Funktion gibt für die `type_id = estates_15` zum Beispiel bei zwei vorhandenen Konflikten (string) `15.2` zurück. Der Hintergrund für die Wahl dieses Schemas beläuft sich

³²<https://www.measurethat.net/Benchmarks/Show/8101/0/decimaljs-vs-fractionjs>

auf die Funktionsweise der Konvertierung von Floats zu Integern: die Nachkommastellen werden ohne Rundung entfernt. Somit kann zwischen Duplikaten unterschieden werden und gleichzeitig ohne zusätzliche Attribute das Original wieder gefunden werden ((int) 15.2 = 15).

Zuletzt wurden Overflows der Popover und Drag-Elemente, sowie ein manchmal auftretendes Problem von unabwählbaren Elementen behoben.

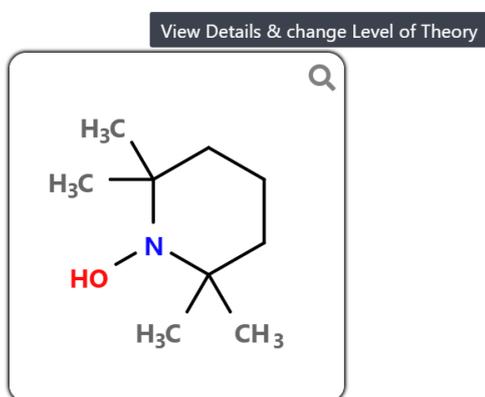


Abbildung 4.27: Drag-Element Design in Prototyp 2

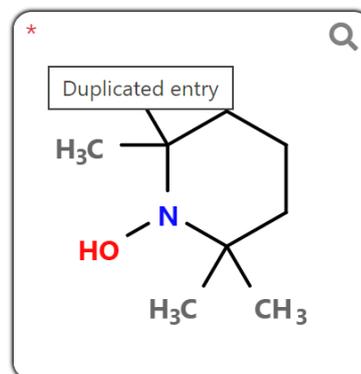


Abbildung 4.28: „Dupliziertes“ Element in Prototyp 2

Analysis History

for my BA thesis ... 16:31 08.02.21	<p>Selection</p>	<p>Reactants</p> <p>ΔE -359634.80 ΔH -359282.97 ΔG -359307.05</p>	<p>Products</p>	
for my MA thesis ... 17:10 08.02.21	<p>Selection</p>	<p>Reactants</p> <p>ΔE -1573.23 ΔH -1534.70 ΔG -1534.18</p>	<p>Products</p>	
for my PhD thesis ... 16:13 12.02.21	<p>Selection</p>	<p>Reactants</p> <p>ΔE -3334264.50 ΔH -3333799.89 ΔG -3334031.93</p>	<p>Products</p>	
Deadline: yesterday 19:18 13.02.21	<p>Selection</p>	<p>Reactants</p> <p>ΔE 0.00 ΔH 0.00 ΔG 0.00</p>	<p>Products</p>	

Abbildung 4.29: Ansicht des History-Tabs

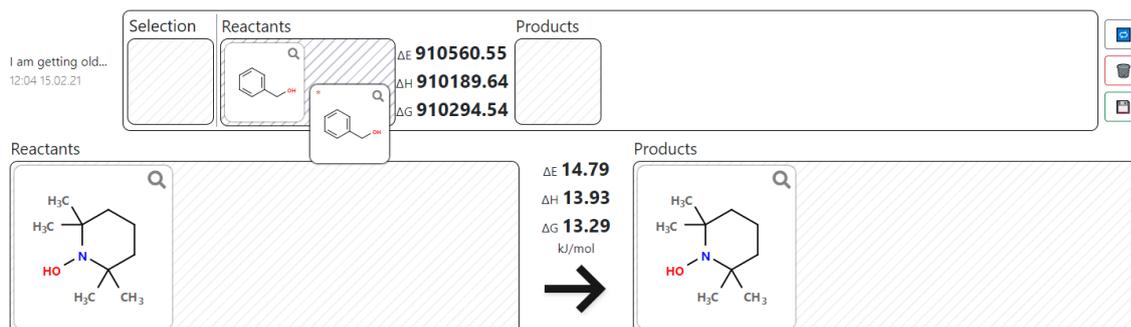


Abbildung 4.30: Ansicht während „Drop“ aus der Historie

4.2.2 Validierung per Nutzerstudie

Um die neuen Features und Verbesserungen zu testen, sowie um genauere Aussagen zu UX treffen zu können, wird in der zweiten Studie der SUS-Fragebogen zur Bewertung des ATs verwendet, sowie der Raw TLX (RTLX) zur Bewertung des History-Tabs. Außerdem werden Teilnehmer gebeten einer Videoaufnahme zuzustimmen, in der sie die Aufgaben erhalten und durchführen („moderated“), ihre Gedanken laut aussprechen („Think-Aloud“-Technik) und den Anfang und das Ende explizit markieren sollen [30]. Um besser zu testen wie Erstnutzende in dem Tool navigieren, erfolgt keine Einführung in die UI vor der Studie. Ziel ist herauszufinden, welche Funktionen Erklärungen benötigen oder zu komplex sind. Insgesamt sollen somit quantitative und qualitative Messwerte eingefangen werden. Neben den wiederkehrenden demografischen Fragen aus der Validierung von Prototyp 1 wird außerdem gefragt, ob die Person schon Prototyp 1 benutzt hat um Erstnutzende Erfahrungen filtern zu können. Der Ablauf der Studie erfolgt erneut nach vorhandenen Standards [51]. Als Warm-Up werden Testpersonen gebeten sich mit dem UI vertraut zu machen, das AT aufzurufen und nach freier Wahl angebotene Funktionen zu testen. Danach folgen fünf Aufgaben:

1. Drei E-States zum AT hinzufügen, davon zwei bestimmte als Reaktanten und eins als Produkt wählen. Zweck: Prüfen ob Selektion mit D&D verstanden wird.
2. Von zwei bestimmten E-States das E_{total} finden. Zweck: Prüfen ob das Lupe-Icon als Hinweis für „Details“ erkannt wird.
3. Von einem bestimmten Energy State (E-State) das LOT ändern. Zweck: Prüfen ob das LOT-Dropdown schon in der vorherigen Aufgabe wahrgenommen wurde.
4. Die Selektion in der Historie speichern und dem Eintrag einen Namen geben. Zweck: Prüfen, ob das Speichern und die Umbenennen-Funktion erkannt wird (nur per Video).
5. Die ganze Selektion löschen und danach mithilfe der Historie wiederherstellen. Zweck: Betrachten des Vorgehens des Nutzers (nur per Video).

Zur Überprüfung ob die gewünschten Aktionen richtig ausgeführt wurden, sollen Nutzende für Aufgabe eins das Ergebnis von ΔE , ΔG und ΔH angeben, für die zweite die jeweiligen E_{total} der E-States und für drittens das aktualisierte Ergebnis von ΔE . Für die letzten beiden Aufgaben folgt außerdem der erwähnte RTLX ohne weitere Modifikation, zur Bestimmung der subjektiven Beanspruchung des Umganges mit dem History-Tab. Der danach folgende Teil besteht aus spezifischen Fragen zu neuen Features, insbesondere zu: Navigation in der Historie bei vielen Einträgen oder Limitierung der Einträge, zur Funktionalität der Browser vor-/zurück-Taste und dem Teilen der

Selektion per URL. Um offene Fragen bezüglich D&D zu klären wird spezifisch gefragt ob die D&D-Mechanik Nutzer/-innen Zusammenhänge und Änderungen des Ergebnisses der Analyse besser nachvollziehen lässt und ob D&D Spaß macht. Außerdem wird zum Validieren der Änderung des Mechanismus um Details von Elementen einzusehen mit Hilfe einer Likert-Skala abgefragt, wie einfach es zu verstehen ist diese zu finden. Zuletzt folgt der SUS-Fragebogen zur qualitativen Bewertung des AT in einer modifizierten, aber wissenschaftlich validierten, ausschließlich positiven Variante [55, 56]. Der Rest der Fragen ist ebenfalls ausschließlich positiv formuliert, um unabsichtliche falsche Antworten Befragter zu reduzieren [55]. Der gesamte Fragenkatalog ist im Anhang zu finden und wurde an freiwillige Teilnehmer unterschiedlicher Forschungsgruppen (siehe 3.2 Zielgruppen) geschickt.

4.2.3 Auswertung der Nutzerstudie

Die Teilnehmerzahl hat sich im Vergleich zur ersten Studie auf $N = 12$ leicht erhöht. Erneut lässt sich eine unausgeglichene Verteilung der Geschlechter mit vier (33%) weiblichen und doppelt so vielen (acht, 67%) männlichen Teilnehmern feststellen. Das Alter ist mit sieben (70%) 20-30 jährigen und drei (30%) über-dreißig-jährigen nicht mehr balanciert, was einen Einfluss auf das Ergebnis und Präferenzen haben könnte [57]. Durch die Videoaufzeichnungen lassen sich die beiden Verzerrungen, falls vorhanden, herausarbeiten. Diesmal waren sieben (59%) der Teilnehmer PhD Kandidaten/-innen, zwei (17%) Postdoktoranten/-innen und jeweils ein/e (8%) Master-/Bachelor-Student/-in und ein/e (8%) Professor/-in. Für die Videostudie haben sechs der zwölf Teilnehmer eingewilligt, aufgrund von technischen Problemen ist eine Testperson allerdings ausgefallen, somit sind $N = 5$ Videoteilnehmer/-innen übrig geblieben. Ergebnisse der Videostudie belaufen sich auf Beobachtungen des Testleiters, Aussagen der Testpersonen, sowie der gemessenen Zeit (in Sekunden) von durch Teilnehmer/-innen markiertem Start bis Ende der Aufgabe (Aufgaben-Abschlusszeit, Abbildung 4.33). Im Durchschnitt finden fünf Testpersonen 84,4% und zwölf Testpersonen 98,8% der Usability-Probleme pro Studie, gemeinsam mit den $N = 7$ Testpersonen aus der ersten Studie und den sich überlappenden Features, ist somit eine gute Abdeckung gewährleistet [27]. Weiterhin sind zwölf Personen für den SUS-Score ausreichend um ein 100% verlässliches Ergebnis zu erhalten, unabhängig vom Geschlecht der Teilnehmer, allerdings mit leicht sinkendem Score in Korrelation mit steigendem Alter [58, 59]. Für die Auswertung des SUS, wurde die Likert-Skala von „Strongly disagree“ bis „Strongly agree“ in respektive 0 bis 4 kodiert, die Ergebnisse pro Person sind in Abbildung 4.32 zu sehen. Insgesamt beläuft sich der per arithmetischem Mittel berechnete SUS-Score auf 75,4, welcher Anhand der Auswertungsskala (Abbildung 4.31) in der akzeptablen Spanne liegt und einem Ergebnis von „gut“ (Note „C“-„B“ [59, 60]) entspricht, somit befindet sich das Ergebnis im Vergleich im dritten Quartil [59].

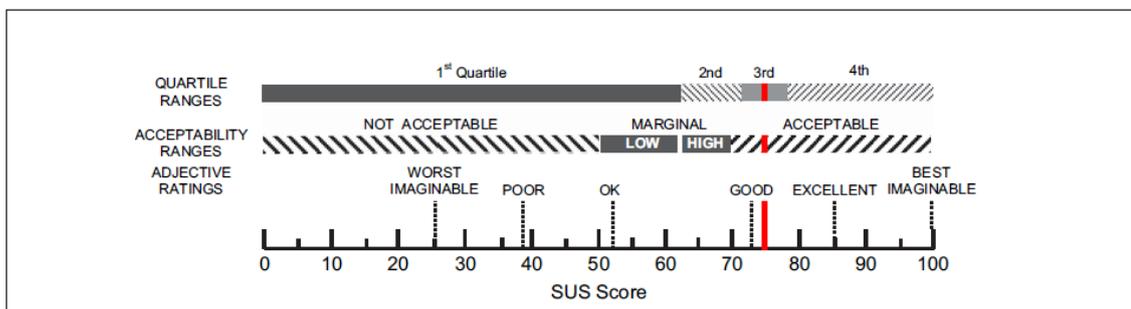


Abbildung 4.31: SUS Auswertungsskala von Bangor, Kortum und Miller ([34]) (AT Ergebnis rot markiert)

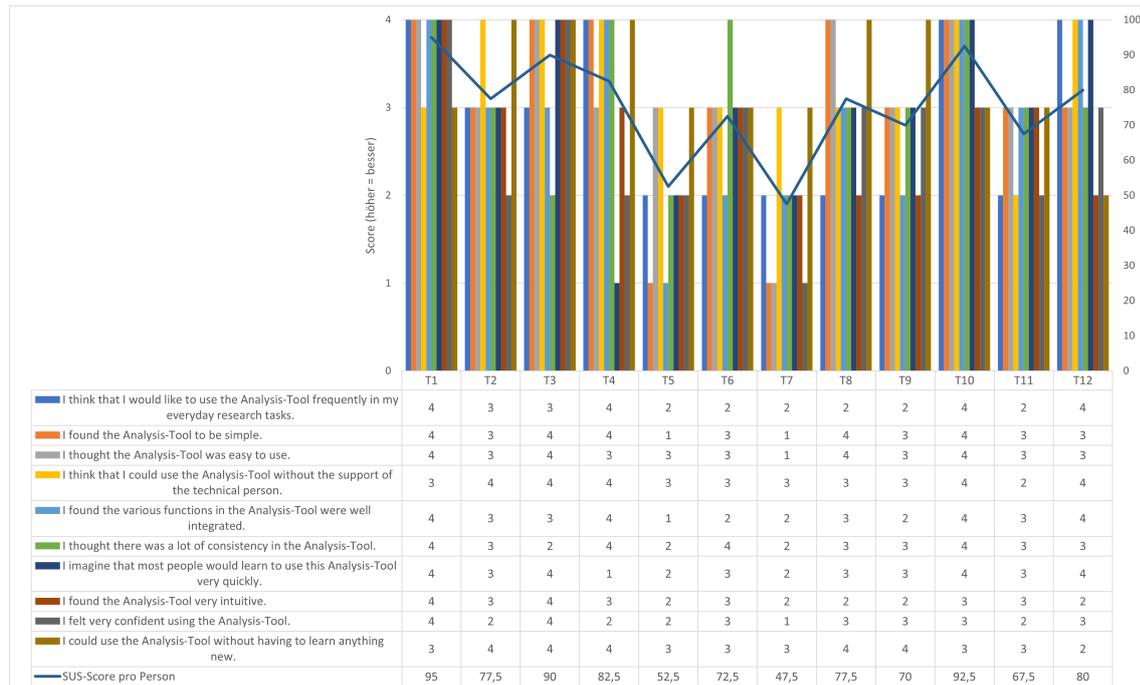


Abbildung 4.32: Auswertung SUS pro Person

Das gute Ergebnis spiegelt die Meinung der Mehrheit im Bezug auf einzelne Funktionen wider, so haben von vier der zwölf Personen (33%), die das Wünsche-Freitext-Feld genutzt haben, drei (75%) betont, dass das AT im Vergleich zu anderen Tools „ein großer Schritt nach vorne ist“ (Teilnehmer) und „gut und vielversprechend“ (Teilnehmer) sei. Das AT hilft den Nutzern außerdem dabei schneller an für sie relevante Ergebnisse zu kommen im Vergleich zu den in der Einleitung beschriebenen traditionellen Methoden, durch Zustimmung der Mehrheit (acht von zwölf, 67% absolut), davon 63% (fünf von acht, 41% absolut) sehr (Abbildung 4.41).

Einen großen Teil für die subjektive Nutzererfahrung trägt D&D bei, wie in der Auswertung zur Studie 1 angenommen, da zehn (83%) Teilnehmer mindestens zustimmen (davon 70% relativ / 58% absolut / sieben der zehn sehr), dass D&D Spaß macht. Im Vergleich (Abbildung 4.39) ist zu sehen, dass D&D tendenziell mehr Leuten Spaß bereitet, aber auch acht von zwölf Personen mindestens zustimmen (davon 50% relativ / 33% absolut / vier der acht sehr), dass die Mechanik dabei hilft die Zusammenhänge/Beziehungen und Änderungen des Ergebnisses in der Analyse besser zu verstehen. Somit ist D&D nicht nur für die UX von Bedeutung, sondern bietet Nutzenden auch einen Mehrwert bei der Analyse an sich.

Bei den Aufgaben haben alle bis auf eine Person (92%) das richtige Analyseergebnis gefunden, wobei die gefundenen Werte der einen Person so hoch sind, dass entweder von einem technischen Fehler ausgegangen werden kann, oder die falschen E-States genutzt wurden. In der Videostudie haben alle Nutzer/-innen die Selektion der E-States in MOLAR durch Klick auf das  -Icon, sowie den Umgang mit D&D verstanden, mit einer durchschnittlichen D&D-Zeit, bis alle gewünschten E-States an ihrer Position sind, von 6,8 s ($\sigma = 3,97$ s). Dies zeigt, dass die Unterscheidung der drei einzelnen E-States durch die 2D-Ansicht schnell durchzuführen ist. Auch hat keine der Testpersonen Schwierigkeiten bei der Auswahl und Einordnung gezeigt. In der nächsten Aufgabe, haben alle Befragten einen Wert für das E_{total} angegeben, wobei acht von zwölf (67%) den erwarteten Wert gefunden haben. Alle vier falschen Ergebnisse konnten reproduziert werden und entsprechen einem Nutzerfehler (zwei haben das E_{total} eines anderen der ausgewählten E-State angegeben, aber das zweite abgefragte E_{total} richtig; die anderen zwei haben das LOT geändert für jeweils beide Angaben). Somit ist davon auszugehen, dass 100% der Nutzenden den

neuen Details-Trigger-Mechanismus verstanden haben. In den Videoaufzeichnungen haben drei von fünf Personen (60%) dies ebenfalls erkannt (nach dem expliziten Hinweis „Suchen Sie im AT nach den Details“ 100%). Insgesamt hat nur eine Person den Rechtsklick-Trigger erkannt und sich positiv darüber geäußert. Die durchschnittliche Aufgaben-Abschluss-Zeit betrug für diese Aufgabe 9,20 s ($\sigma = 4,53$ s). Auch bei der Angabe des geänderten Analyseergebnis durch Anpassung eines LOT, haben 100% der Teilnehmer ein Ergebnis angegeben, wobei drei (25%) ein falsches Ergebnis angaben und eine Person davon vorher schon einen Fehler begangen hat. Die zwei weiteren Ergebnisse konnten nicht reproduziert werden und haben zuvor keine Fehler gemacht, somit könnten diese Reporting-Fehler gewesen sein durch das Abtippen von falschen Zahlen oder Ähnlichem. Die durchschnittliche Aufgaben-Abschluss-Zeit in der Videostudie betrug dort, verglichen mit der ersten Aufgabe, welche auch genau drei Klicks benötigt hat, hohe 17,75 s ($\sigma = 5,67$ s). Zwei (40%) Personen haben dabei erneut einen Hinweis gebraucht, aber nur eine davon hat dann die Mechanik erkannt. Eine Person hat außerdem bei der Angabe des aktualisierten Ergebnis einen begangenen Fehler bei der Angabe des E_{total} korrigiert, ohne diese Angabe im Fragebogen zu korrigieren. Somit ist anzunehmen, dass größtenteils verstanden wurde, wie das LOT im Details-Popup zu ändern ist, aber das Dropdown und das LOT an sich hervorgehoben werden muss, sowie die Darstellung des aktuellen LOT pro Element um die benötigte Zeit potentiell zu reduzieren. Die beiden Thesen werden durch die der Auswertung der Likert-Skalen bestätigt (Abbildung 4.40), so haben neun von zwölf (75%) mindestens zugestimmt (67% relativ / 50% absolut / sechs der neun sehr), dass sie verstanden haben wie der Details-Trigger funktioniert und bezüglich des LOT stimmte nur die Minderheit (42% / fünf von zwölf) zu, dass das LOT einfach zu sehen und zu unterscheiden ist. In dem Wünsche-Freitext-Feld gab außerdem eine Teilnehmer/innen an, dass die Warnung bezüglich unterschiedlicher LOT (Abbildung 4.26) zu subtil sei und eine weitere Person wünscht sich Verbesserungen bei der Anzeige des LOT, was die genannten Punkte noch einmal bekräftigt.

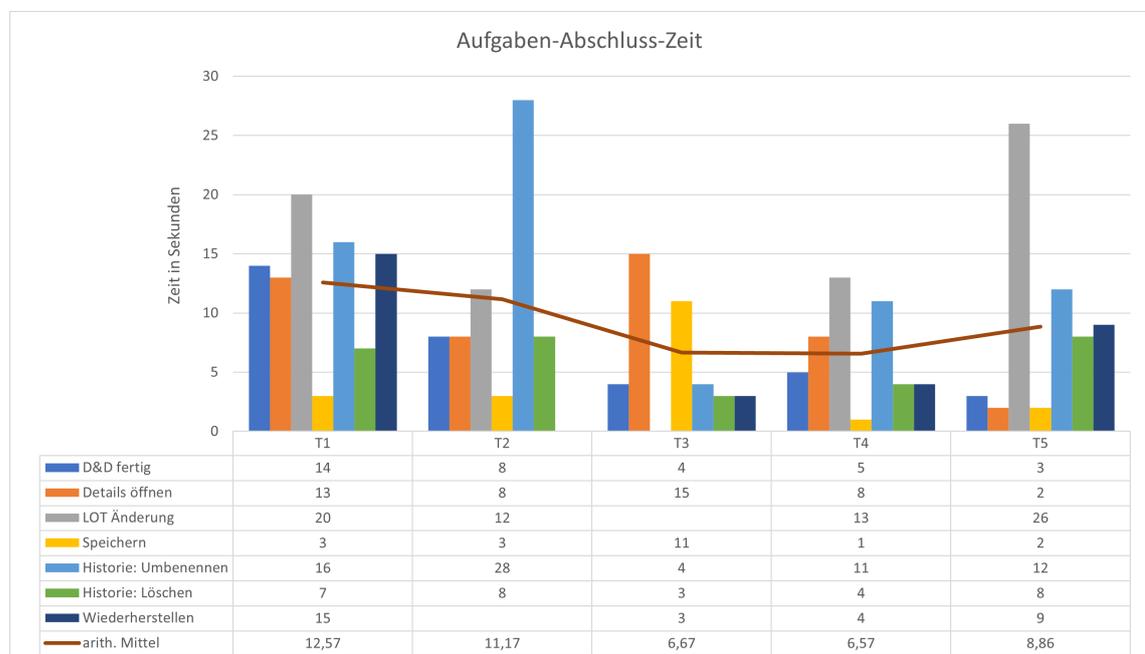


Abbildung 4.33: Aufgaben-Abschluss-Zeiten der Videostudie (zwei fehlende Zeiten durch Nicht-Bearbeitung der entsprechenden Aufgabe)

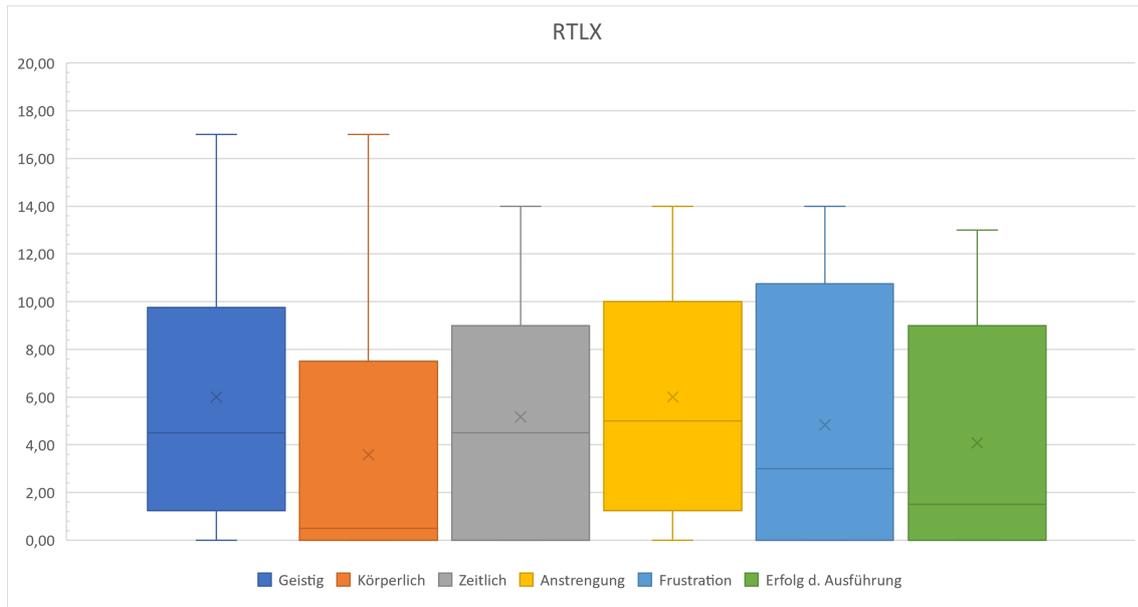


Abbildung 4.34: RTLX Ergebnisse per Kategorie

Als nächstes folgt die Auswertung des RTLX über den Umgang mit der Historie als Boxplot in Abbildung 4.34, wobei das Maximum jeweils 20 („Very high“/„Failure“) und das Minimum 0 („Very low“/„Perfect“) ist. Die Antworten der Teilnehmer pro Frage wurden jeweils summiert und das arithmetische Mittel berechnet (sowie Median eingezeichnet). Dabei ist zu erkennen, dass die physische Beanspruchung sehr gering ist mit $\mu = 3,58$ ($\sigma = 5,28$) und die geistige Beanspruchung sowie die notwendige Anstrengung ähnlich sind mit respektive $\mu = 6$ ($\sigma = 5,31$) und $\mu = 6$ ($\sigma = 4,65$). Nutzende scheinen durchschnittlich weder großartig frustriert bei der Nutzung ($\mu = 4,83$ ($\sigma = 5,19$)), noch überfordert zu sein ($\mu = 4,08$ ($\sigma = 4,63$)), und auch der Zeitaufwand ist gering mit $\mu = 5,17$ ($\sigma = 5,13$). Insgesamt sind alle Kategorien vergleichbar weit vom Mittelwert verstreut durch die ähnlich hohen Standardabweichungen. Pro Person beläuft sich das arithmetische Mittel auf $4,94 \pm 3,95$, somit hat das Historie-Feature bereits einen guten Wert erreicht und zeugt von geringer Belastung der Nutzenden. Der Umgang mit dem History-Tab wurde per Videoaufzeichnung genauer beachtet, die folgenden Daten stammen aus diesen: Den Umgang damit haben 100% der Nutzenden erkannt, mit $\mu = 4,00$ s ($\sigma = 3,58$ s) bis zur Erkennung und Betätigung des Speichern-Buttons (Abbildung 4.19) und weiteren $\mu = 14,20$ s ($\sigma = 7,90$ s; exkl. Eingabe-Zeit) benötigt zum Wechseln des Tabs plus Identifizierung des „Umbenennen“-Mechanismus (Abbildung 4.17). Der vergleichsweise hohe Wert ist potentiell durch die neue Situation entstanden, mit der Nutzende konfrontiert sind, da die Testpersonen die Historie-Eintragsansicht zum ersten mal in dieser Aufgabe zu sehen bekamen und sich erst zurechtfinden mussten. Hierbei erwähnenswert ist, dass eine (20%) Person probiert hat den Namen doppelt zu klicken zum Umbenennen, anstatt das Stift-Objekt-Emoji (🖋) zu klicken, drei von fünf (60%) „Enter“ zur Bestätigung der Umbenennung benutzt haben und jeweils eine Person das Stift-Objekt-Emoji (🖋) beziehungsweise das „Blur“-Event. Alle Personen haben kein Zeichen der Irritation gezeigt nach Abschluss der Umbenennung, somit sollten die verschiedenen Methoden beibehalten werden, damit alle unterschiedlichen bereits bekannten/erlernten Nutzungsgewohnheiten zum Erfolg führen im Sinne der Aufgabenangemessenheit nach DIN EN ISO 9241-110 [6] und Jakob's Law [61]. Weiterhin schien eine Person anzunehmen, dass zuerst der History-Tab aktiv sein muss, bevor der Speichern-Button genutzt werden kann. Für die nächste Aufgabe wurde zum Entfernen aller ausgewählten Elemente der „Clear selection“-Button (Abbildung 4.19) von vier Personen (80%) genutzt und eine hat alle Elemente nacheinander mit dem „Remove“-Button im jeweili-

gen Popover entfernt, aber angemerkt ein „Clear selection“-Button wäre einfacher. Nach einem Hinweis, dass dieser womöglich vorhanden sei, gab die Person an, diese Methode zu bevorzugen. Die durchschnittliche Dauer nach Aufgaben-Beginn bis „Button geklickt und Modal bestätigt“ als Ende, beträgt $\mu = 6,00$ s ($\sigma = 2,10$ s), somit haben Nutzende entweder beim Betätigen des „Speichern“-Buttons sich die Position des „Clear selection“-Buttons gemerkt und mussten diesen nun nicht mehr suchen, oder haben das Modal nur zwei Sekunden betrachtet (da $4,00$ s $\pm 3,58$ s versus $6,00$ s $\pm 2,10$ s). Dies wird auch durch das Beobachten der Teilnehmer/-innen bestätigt, denn es schien allen klar zu sein, dass das Modal zur Bestätigung der Aktion dient und dem genauen Text wurde nicht weiter Beachtung geschenkt. Die Positionen der Buttons im Modal an sich scheinen auch klar, da keiner der Videoteilnehmer/-innen eine ungewollte Aktion (zum Beispiel Abbruch) ausgeführt hat. Für die Wiederherstellung der gespeicherten Selektion, beläuft sich das arithmetische Mittel auf $\mu = 7,75$ s ($\sigma = 4,76$ s), wobei eine Person statt dem „Wiederherstellen“-Button die einzelnen Elemente per D&D zurück in das Reaktanten/Produkte Feld gezogen hat. Nach einem Hinweis auf die vorhandene Funktionalität, hat auch diese Person den Button gesucht und genutzt, gab allerdings an, D&D zu bevorzugen (für den Mittelwert wurde die nach dem Hinweis benötigte Zeit der Person hergenommen, da es bei dem D&D zu einem Fehler kam). Eine weitere Person konnte den Eintrag nicht wiederherstellen, da der entsprechende Historie-Eintrag trotz Hinweises gelöscht wurde.

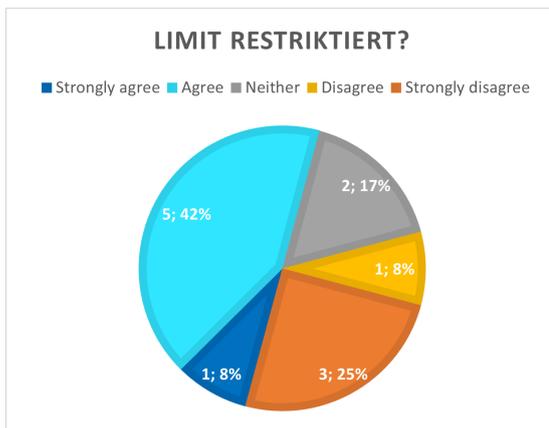


Abbildung 4.35: Bewertung eines hypothetischen Historie-Eintrag-Limits

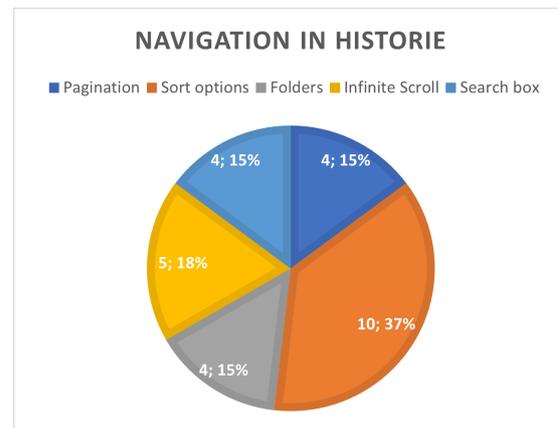


Abbildung 4.36: Gewünschte Navigations-Möglichkeiten in der Historie

Nach Benutzung des History-Tabs, wurde im Fragebogen ein hypothetisches Limit von 20 bezüglich der Historie-Einträge angesprochen, Abbildung 4.35 zeigt wie viele Nutzende sich dadurch restriktiert fühlen würden. 50% stimmen mindestens zu (8% / eine Person sehr) und 17% sind unentschlossen, somit ist ein Bedarf von einer gewissen Anzahl von Einträgen gegeben. Teilnehmer/-innen sollten danach einen Wert angeben, der für sie ausreichend wäre (inkl. unendlich durch Angabe von null). Das Histogramm in Abbildung 4.37 (null wurde grafisch als > 1000 modelliert) zeigt, dass die Mehrheit mit einem Limit von ≤ 100 zurecht käme (zwei Antworten waren ohne Angabe), aber eine Minderheit trotzdem ein hohes Limit benötigt (1000: einmal / 10% relativ / 8% absolut, unendlich: zweimal / 20% relativ / 17% absolut). Abbildung 4.36 zeigt die gewünschten Navigations-Möglichkeiten in der Historie, wobei die deutliche Mehrheit (83% absolut / zehn von zwölf) eine Sortierfunktion wünscht, welche auch bei einem unendlichen Limit möglich wäre, aber nur in Zusammenarbeit mit einer Methode zur Limitierung angezeigter Daten, wie etwa die am zweit-häufigsten gewählte Option „Infinite Scroll“ (42% absolut), vorstellbar wäre zuerst die Sortierung anzugeben (beispielsweise nach Datum) und dann nach Bedarf durch scrollen mehr Einträge nachzuladen.

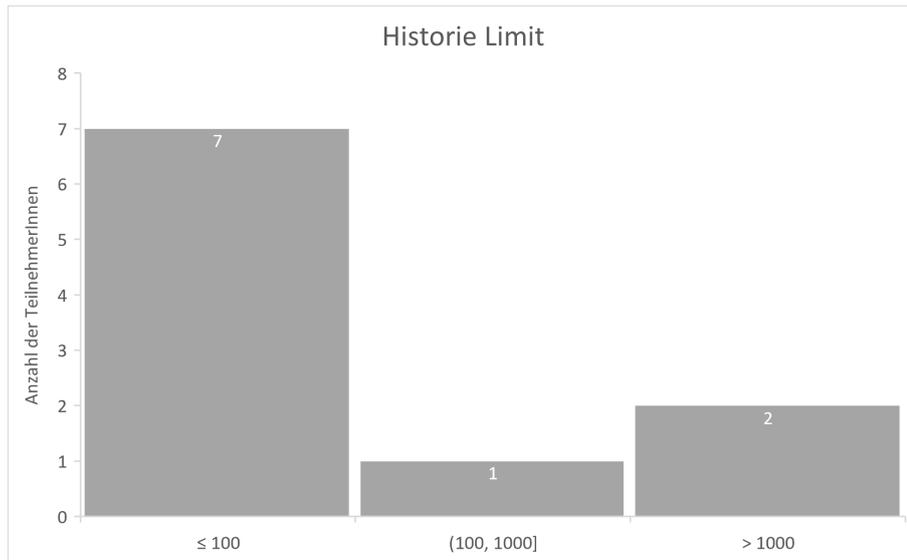


Abbildung 4.37: Auswertung der angegebenen Limits als Histogramm (unendlich wurde als „> 1000“ modelliert)

Das andere neue Feature, die Selektion per URL zu teilen, wurde von den Nutzenden sehr gut aufgenommen wie in Abbildung 4.38 zu erkennen, da die Mehrheit (58% absolut) diese hilfreich empfindet (33% absolut / vier von zwölf sehr). In der derzeitigen Implementation wird die URL per pushState aktualisiert zur Anpassung der Share-URL, was wie erwähnt die Vor-/Zurück-Funktion des Browsers beeinflusst und diese sollte nicht entgegen den Erwartungen funktionieren. Per Befragung gibt es keine Indikation für negative Einflüsse auf die Funktionalität, da sechs von zwölf (50%) die Zurück-Taste genutzt haben und 100% davon angaben, dass diese einwandfrei funktionierte. Dies trifft ebenso auf alle Teilnehmer/-innen in der Videostudie zu.

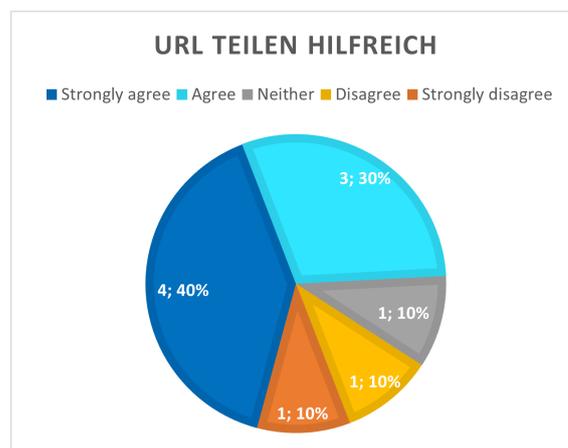


Abbildung 4.38: Bewertung der URL-Teilen-Funktion (exkl. zwei Enthaltungen)

Weitere Beobachtungen in der Videostudie: Eine Person (20%) hat alle Toasts weggeklickt, bevor weitere Aktionen durchgeführt wurden; Eine Person (20%) dachte der Analyse-Tab muss aktiv sein vor der Betätigung des „Clear selection“-Buttons, da dieser sonst vermeintlich die Historie leert; Eine Person (20%) hat nach D&D-Ende einen „Speichern“-Button gesucht, was eine Gewohnheit aus anderen Anwendungen sein könnte; Eine Person (20%) fand es irritierend, dass das momentan ausgewählte LOT nicht an erster Stelle im Dropdown steht (sondern sortiert

nach ID in der Datenbank). Zwei Personen (40%) schienen das E_{total} im Details-Popover (Abbildung 4.10) erst spät zu bemerken durch die Vielzahl von Daten und fett markierten Texten; Zwei Personen (40%) nahmen an, dass sich Änderungen in Historie-Einträgen automatisch speichern; Zwei Personen (40%) hätten erwartet, alle LOT-Details gleichzeitig im Popover sehen zu können (praktisch gesehen, alle Konformere gleichzeitig sehen). Weiterhin waren drei Personen (60%) unsicher, ob die Änderung des LOT automatisch das Ergebnis aktualisiert, somit scheint die Notwendigkeit gegeben die Aktualisierung des Ergebnis visuell zu markieren durch eine kurze Highlight-Animation, oder Alternativ erst nach Bestätigung der Änderung des LOT. Zuletzt, alle Nutzer/-innen schienen unsicher, ob das Analyseergebnis wie gewohnt per Markierung und „Strg+C“/Rechtsklick kopiert werden kann. Ein Teilnehmer des Fragebogens und ein Teilnehmer der Videostudie hätte gerne das Ergebnis in höherer Präzision kopiert. Dies wäre zu lösen durch Hinzufügen eines „Kopieren“-Button unter dem Ergebnis, oder schon bei Linksklick auf die Zahl (Intention zum „markieren“) das jeweilige Ergebnis zu kopieren, darüber zu informieren, und bei Rechtsklick dann das präzise Ergebnis. Alternativ könnte eine Einstellung eingebaut werden, die festlegt wie präzise das Ergebnis angezeigt wird, oder das Kopieren des präzisen Ergebnisses nach einem Klick auf das Tooltip.

Abseits der Beobachtungen und dem lauten Aussprechen der Gedanken während der Bearbeitung der Aufgaben, wurde von allen Teilnehmer/-innen das Potential des AT als hoch eingeschätzt. Trotz den oben beschriebenen Verbesserungspunkten, wurde der Umgang, die gemachte Erfahrung und das Erlebnis insgesamt von allen als äußerst positiv beschrieben und gaben weiterhin an, das AT unbedingt wieder/weiter nutzen zu wollen.

Gefundene, reproduzierbare und zeitnah behobene Fehler waren Probleme mit D&D in Safari und ein JavaScript-Error bei der Ausführung einer „Drop“-Aktion aus einem Historie-Eintrag zu einem Reaktanten-Feld nach Betätigung des „Clear selection“-Buttons. Eine Person gab als zusätzliches Feedback an, dass ein kurzes Tutorial oder ein Link zur Dokumentation hilfreich für die Benutzung des AT wäre, um über alle Features in Kenntnis zu sein. Ein Tutorial ist bereits vorhanden, nur wurde dieses explizit nicht erwähnt um eine aussagekräftige Studie zu gewährleisten, somit ist dieser Punkt für den späteren Release bereits berücksichtigt.

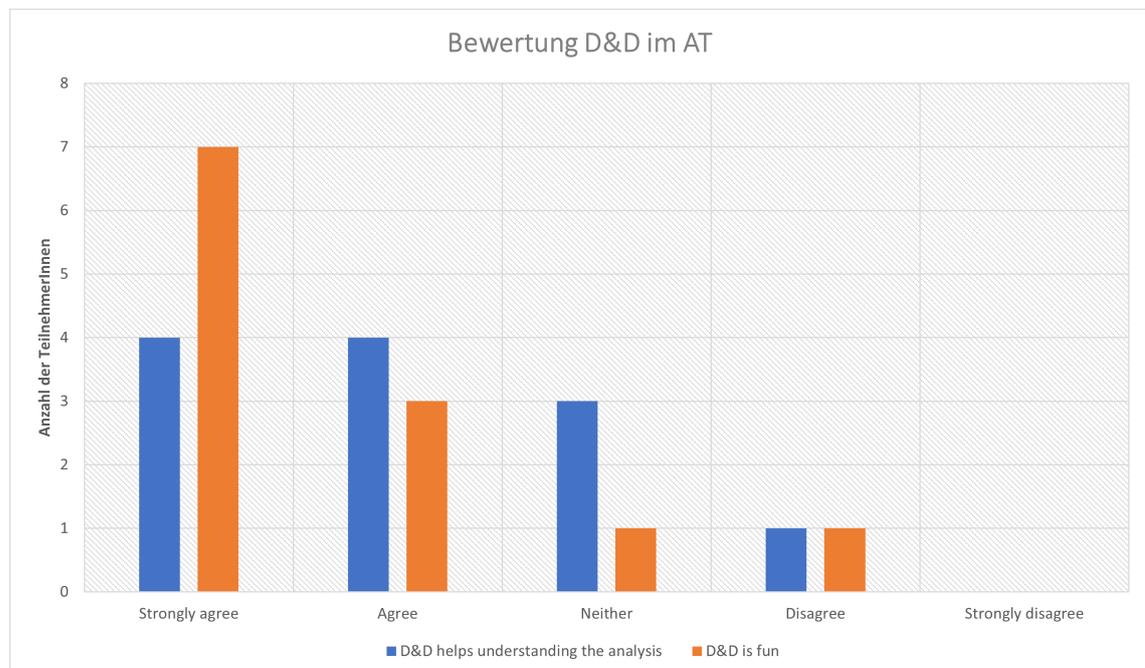


Abbildung 4.39: Verständnis der Analyse durch D&D und Spaß von D&D

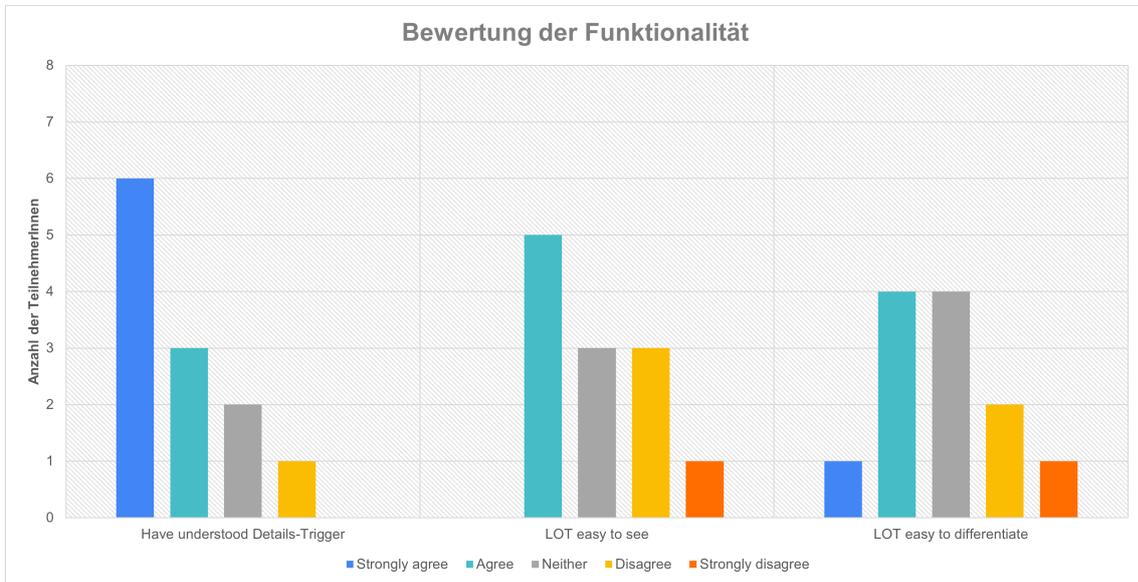


Abbildung 4.40: Bewertung bekannter Funktionalität aus Prototyp 1

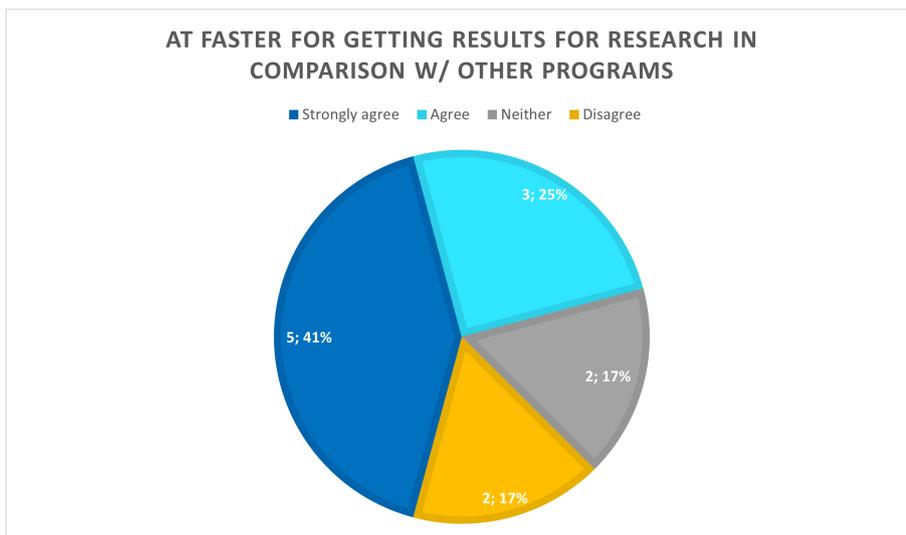


Abbildung 4.41: Bewertung der Aussage „AT führt schneller zu für meine Forschung relevanten Ergebnissen als trad. Programme“

Limitierungen: Nur eine einzige Person in der Videostudie hat Prototyp 1 nicht genutzt (im Vergleich, 50% der Teilnehmer im Fragebogen waren neue Nutzende), dennoch war das Ergebnis das schnellste mit einem arithmetischen Mittel von 6,57 s bei sieben Aufgaben, was ein Hinweis sein könnte, dass Nutzende, die den Umgang mit dem AT schon beherrschen, nachdenken, welches der Features/Methoden sie zur Umsetzung der Aufgabe verwenden wollen oder was von ihnen erwartet wird (im Sinne der Fehlervermeidung). Bezüglich der Unterschiede bei Geschlechtern: Die einzig weibliche Teilnehmerin bei der Videoaufnahme hat keinerlei Unterschied zu männlichen Testpersonen in gleicher Altersgruppe in Bezug auf Design-Präferenzen, Klickverhalten, Navigation in der UI, oder durchschnittliche Aufgaben-Abschluss-Dauer ($\bar{x}_f = 11,17$ s ($MD = 5,89$ s), $\bar{x}_m = 8,86$ s ($MD = 5,19$ s)) gezeigt. Die gleiche Beobachtung ist bei zwei über-dreißig-jährigen Testpersonen festgestellt worden (durchschnittliche Aufgaben-Abschluss-Dauer $\bar{x}_{>30} = 9,77$ s ($\pm 1,63$ s; $n = 2$), $\bar{x}_{\leq 30} = 8,79$ s ($\pm 3,44$ s; $n = 3$)), und auch der akademische Grad scheint keinen Einfluss auf das Ergebnis gehabt zu haben (durchschnittliche Aufgaben-Abschluss-Dauer bei PhD Kandidaten/-innen $\bar{x} = 8,79$ s ($\pm 3,44$ s; $n = 3$) versus höherer akademischem Grad $\bar{x} = 9,77$ s ($\pm 1,63$ s; $n = 2$)). Die Unterschiede von jeweils ein bis zwei Sekunden sind im Rahmen der Messfehler in der Zeitabnahme erklärbar. Aufgrund der kleinen Anzahl an Testpersonen können diese Beobachten allerdings nicht mit statistisch signifikanten Aussagen belegt werden, somit ist bezüglich Verzerrungen durch Geschlechter-/Altersunterschiede oder akademische Grade keine weitere Aussage möglich und dient nur als Hinweis ohne weitere Einschätzung der Bedeutsamkeit.

4.3 Deployment & Integration in MOLAR

MOLAR QM DATABASE

Home About Us Service Contact Us Analysis Signup Login

Drag & Drop the elements to calculate

Analysis History

Reactants

Products

ΔE 14.79
 ΔH 13.93
 ΔG 13.29
 kJ/mol

Share the current selection: <http://localhost/molar/analysis/reacti> copy

Save selection Clear selection

Abbildung 4.42: Integration in MOLAR

Die Integration in die anderen Module von MOLAR hat sich unproblematisch gestaltet durch die vorher besprochene Aufspaltung in die einzelnen Bestandteile als möglichst eigenständige Module (1.1 Umfeld). Wie in Prototyp 1 entworfen, wird die Selektion von E-States per Checkbox ermöglicht und auch das Tooltip (Abbildung 4.2) wurde übernommen. Nach Absprache mit anderen Modul-Besitzern, wurde die Checkbox an einen geeigneten Platz eingefügt und ist zu sehen in Abbildung 4.44, wobei die Nähe zum Bild immer noch gegeben ist, aber durch das Tabellen-Layout visuell getrennt erscheint. Ebenso soll das AT vorerst auf einer separaten Seite zu finden sein als

Eintrag in der Navigationsleiste, statt als Modal (Abbildung 4.42). Nach Selektion der Checkbox erscheint ein „Toast“, durch welches Nutzende informiert werden, was die Funktionalität der Checkbox ist und welche Aktion gerade ausgeführt wurde. Zusätzlich wurde ein Mikroskop-Icon eingefügt, damit Nutzende ohne Vorkenntnisse eine Assoziation zwischen Icon und AT herstellen können.

Da der Rest von MOLAR in PHP geschrieben wurde, ist der Integrations-Code ebenfalls in PHP und lautet wie folgt:

```
<span class='tooltip-sp'
  data-tooltip='Select the lowest etotal of all conformers'>
  <input type='checkbox' class='js-estateSelect' name='estate[]'
    value='<?= $ID ?>' <?= in_array($ID, $estates) ? 'checked' : '' ?>>
</span>
```

wobei \$ID der Datenbank Primary-Key des E-States ist und \$estates ein einfaches Array mit bisher selektierten IDs darstellt. Weiterhin ist es notwendig ausgewählte E-States per XHR zu übertragen, da Nutzende möglicherweise mehrere E-States pro Seite auswählen wollen. Der entsprechende JavaScript Code nutzt toastr und das XHR-Modul von jQuery:

```
function estateSelectErrorHandler(checkbox) {
  toastr.error('Failed to ' + (checkbox.checked ? '<b>add</b> to' :
    ↳ '<b>remove</b> from') + ' the analysis tab. Please try again.')
  checkbox.checked = false
}

$('.js-estateSelect').change(function() {
  const add = this.checked
  $.post('e_state/addtostorage.php',
  { data: JSON.stringify({
    checked: add, type: 'estates', value: this.value
  })})
  .done(data => {
    if (data.ok)
      toastr.info('Successfully ' + (add ? '<b>added</b> to' : '<b>removed</b>
        ↳ from') + ' the analysis tab.')
    else estateSelectErrorHandler(this)
  })
  .fail(() => estateSelectErrorHandler(this))
})
```

Nutzende werden bei Erfolg und Misserfolg per „Toast“ informiert und im Falle eines Fehlers wird die Checkbox unselektiert. Durch die Arrow-Funktionen wird `this` gebunden und kann somit auch in den Promise-Callbacks von `$.post` benutzt werden. Prototyp 2 wurde vollständig als Bestandteil von MOLAR getestet und validiert (Abbildung 4.42). Zuletzt wurde außerdem eine für Nutzende im Footer sichtbare Version integriert, damit bei Fehlern oder ähnlichem angegeben werden kann, welche Version es betrifft (Abbildung 4.43).

MOLAR_{QM} DATABASE - Analysis v1.0

Abbildung 4.43: Versionsbezeichnung im Footer

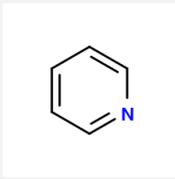
ESID ^a	Image	TPOS ^b	Charge	Multiplility	Number of Atoms	Conformers
8 <input type="checkbox"/>		Minimum	0	1	11	 

Abbildung 4.44: Checkbox und Icon in MOLAR

4.4 Soll-/Ist-Vergleich

Im Folgenden wird beschrieben, wie sich Erwartung, der Entwurf der Benutzeroberfläche und der integrierte Prototyp 2 und dessen Auswertung unterscheiden. Alle User-Stories wurden umgesetzt und getestet, inklusive den zwei neuen von Prototyp 2 und Wünschen aus dem Fragebogen zu Prototyp 1. Ebenso führt das reduzierte Feature-Set wie geplant schneller zu relevanten Ergebnissen (Abbildung 4.41). Da aber nicht 100% zugestimmt haben, sollte zukünftig erforscht werden, welche Features diese Quote erhöht (beispielsweise durch Einführen eines Expertenmodus). Insgesamt wurde nur ein Wunsch nicht umgesetzt: die Inline-Anzeige des .xyz-Dateien Inhalt, da dies eine vorherige Extraktion der Koordinaten voraussetzt und dies Aufgabe anderer Module des MOLAR sein wird. Ein weiterer Punkt ist die festgelegte Anzahl an Dezimalstellen, die in der ersten Studie ein unschlüssiges Ergebnis gebracht haben, aber in der zweiten explizit von einer Testperson angesprochen wurden, somit ist nach DIN EN ISO 9241-110 die Individualisierbarkeit in diesem Bezug nicht gegeben und sollte nachgebessert werden [6].

Die D&D-Mechanik hat sehr gute Werte für Spaß geliefert und hilft Nutzenden auch bei dem Experimentieren mit Ergebnissen (Abbildung 4.39). Auch hat D&D keine Verständnisprobleme ausgelöst und scheint Nutzenden bereits bekannt durch andere Anwendungen. Abseits der Studien wurde mündlich insbesondere bestätigt, dass das „hin-und-her verschieben der Moleküle“ im Zuge der Analyse „angenehm erfrischend“ sei im Vergleich zum bloßen Analysieren von Zahlen. Besonders hervorhebenswert ist dabei, dass auch sehr erfahrene Nutzende mit hohen akademischen Graden angemerkt haben, mehr Spaß an der Analyse zu haben als bei traditionellen Vorgehensweisen.

Weggefallen hingegen sind die Modal-Fenster, da die Anzeige der Details von E-States (Abbildung 4.5) von MOLAR umgesetzt ist. Ebenso ist das AT an sich nun eine eigenständige Seite und wird nicht im Modal geöffnet, da MOLAR dies so vorschreibt. Dies hat den Vorteil, dass Nutzer zum Beispiel die Analyse auf den zweiten Monitor ziehen können und auf dem ersten weitere Moleküle auswählen können. Allerdings wurde von mehreren befragten Nutzer/-innen ausschließlich mündlich angesprochen, dass die Auswahl von E-States direkt im AT vom Vorteil wäre, was wiederum per Modal umgesetzt werden könnte (beispielsweise AT lädt Index im Modal zur Selektion).

Weiterhin ist der in Prototyp 2 dazugekommene History-Tab auf äußerst positive mündliche Resonanz gestoßen und hat mit dem RTLX eine gute niedrige durchschnittliche Beanspruchung Nutzender gezeigt. Testnutzende haben abseits der Studien angegeben, dass der History-Tab das Potential habe zu einem Projektmanagement-Tool für Analysen zu werden. Ebenfalls ist das URL-Teilen Feature im Sinne von E-Learning ein Fortschritt, da somit eine kollaborative Zusammenarbeit an Projekten ermöglicht und somit das Engagement erhöht wird [19].

5 Zusammenfassung & Ausblick

Zur Analyse von QM-Daten existiert bisher kein einheitlicher Ansatz, so dass alle Forschenden unterschiedliche Methoden verwenden, wie zum Beispiel Taschenrechner oder Excel. Diese wiederum bieten keine Möglichkeit zur visuellen Betrachtung der zu analysierenden Moleküle / E-States, da dafür weitere Tools notwendig sind, die ihrerseits keine Verknüpfung mit Daten ermöglichen. Dadurch ist es, unabhängig von der Erfahrung oder akademischen Graden Studierender, schwierig in das Gebiet einzusteigen und führt zu höherer Frustration, sowie niedrigerer Motivation zum Durchführen (oder Erlernen) dieser Analysen. Um dieses Problem zu lösen, ist es sinnvoll ein interaktives System anzubieten, welches mit hoher Usability und UX bei der Durchführung punktet. Des Weiteren haben sich in der Vergangenheit Onlinemedien zur Veranschaulichung von Lehr-/Lernmaterial in der Chemie bewährt und führen unter anderem zu wesentlich verbessertem Lernen.

Um angebotene Lehr- und Forschungs-Tools zu erweitern, auf vorhandenen Methoden aufzubauen und diese zu verbessern, wurde die Web-UI mit dem UCD Ansatz der Medieninformatik erstellt, welcher durch Einbezug Nutzender in jedem Schritt ein gebrauchstauglicheres Endprodukt zur Folge haben soll. Dabei wurden Nutzungsbedürfnisse der Zielgruppen über einen Zeitraum per offener On-Site Beobachtung und Befragung im Labor erfasst, mit Betreuern dieser Arbeit dank hoher Expertise im QM-Bereich diskutiert und definiert, und diese schließlich in User-Stories, als Teil einer agilen Entwicklung, umgewandelt. Insbesondere ist die Wahl dabei auf D&D als Hauptmechanik zur spielerischen Umsetzung des Analyse-Prozesses gefallen. Dabei entstandene Prototypen wurden durch Fragebögen und Nutzerstudien validiert und wiederum iterativ verbessert.

Der Analyse-Prozess besteht dabei aus zwei Schritten: Zuerst wählen Nutzende für die Analyse relevante E-States / Konformere / Einzelpunkte aus, diese werden dann per D&D entweder als Reaktant (Edukt) oder Produkt eingeordnet und können beliebig vertauscht oder durch andere Elemente ausgetauscht werden. Die Berechnung der Ergebnisse erfolgt dabei in Echtzeit und stellt die Grundlage für nachfolgende Forschungstätigkeiten dar. Das Novum hierbei ist, dass die Daten der einzelner Elemente direkt aus dem AT sichtbar sind und Nutzenden somit die Verbindung zwischen Daten und Bild stets klar ist. Weiterhin spielt das LOT eine wichtige Rolle bei der Analyse, so dass auch dies eine prominente Rolle im AT hat. Auch hier findet sich im Vergleich ein drastischer Vorteil für das AT, da n LOT multipliziert mit m Daten gleicher E-States zu einer unübersichtlich großen Menge von Daten führt, die nur durch angeeignete individuelle Methoden des jeweiligen Forschenden zu unterscheiden waren und somit nachfolgende wissenschaftliche Tätigkeiten erschwert haben.

Während der Arbeit an Prototyp 2 wurden die Historie-Verwaltung und das URL-Teilen als zwei neue Anwendungsgebiete entdeckt, welche das Potential haben vorhandene Arbeitsweisen bei der Analyse von QM-Daten positiv zu ändern. Somit wird nun nicht nur die Kombination von mehreren Programmen (siehe 1.2) hinfällig, sondern auch beispielsweise das Kopieren von Dateien vorheriger Analysen zum Anknüpfen an dortige Ergebnisse. Teams können nun einfach URLs im Browser favorisieren und mit Kollegen teilen, und sollte sich eine Analyse ändern, muss nicht mehr der gesamte Datensatz erneut kopiert und zusammengeführt werden, sondern lediglich die aktualisierte URL erneut geteilt werden. Dies wirkt sich direkt auf die Zusammenarbeit im Bereich von E-Learning aus und ermöglicht einfacheres kollaboratives Arbeiten Nutzender. Der History-Tab ermöglicht Nutzenden einen visuellen Überblick über vergangene Analysen beizubehalten und schnell an diesen anzuknüpfen. Der per RTLX ermittelte arithmetische Mittelwert von 4,94 zeugt auf eine niedrige Beanspruchung Nutzender bei Benutzung. Für eine potentielle Weiterentwicklung des Tabs, wurden auch Ergebnisse zu Eintrag-Limitierungen und gewünschter Navigationsmethoden gesammelt (4.2.3 Auswertung der Nutzerstudie). Insgesamt hat der Prototyp bei zwölf Nutzern einen SUS Score von 75,4 erzielt, was einer guten Usability entspricht. Als Teil von MOLAR, wurde der zweite Prototyp bereits vollständig integriert und getestet, somit sind

die Aussagen nicht nur in Isolation gültig, wie in Prototyp 1. Abseits der quantitativen Daten, haben alle fünf Testpersonen der Videostudie die Mehrheit der Aufgaben verstanden, den Mehrwert an Effizienz erkannt und den Analyse-Vorgang im AT als äußerst positives Erlebnis empfunden.

Weiterhin hat sich D&D in den Studien als geeigneter Kandidat für die Umsetzung des Prozesses bewährt, denn die Mehrheit der Testpersonen gab an, die Mechanik von D&D ohne zusätzliche Erklärung zu verstehen (86% bei $N = 7$). Des Weiteren hat die absolute Mehrheit von 83% (bei $N = 12$) angegeben, dass der Umgang damit Spaß (Freude) bereitet und gleichzeitig waren 67% der Testpersonen der Meinung, dass D&D dabei hilft Beziehungen/Verbindungen und daraus resultierende Änderungen des Analyseergebnis besser zu verstehen.

Zusammenfassend kann also die Frage zu Beginn, ob das Design und die Entwicklung eines Web-UI zur Analyse QM-Daten, welches mit hoher Usability und UX punktet und trotzdem verschiedenen akademischen Graden langfristig einen Mehrwert bietet, möglich ist, positiv beantwortet werden durch gute quantitative und qualitative Messwerte. Obwohl der Prototyp in verschiedenen Bereichen verbessert oder erweitert werden kann, ist es der Arbeit insgesamt gelungen, die mindestens notwendigen Features zur Reduktion der Komplexität einzufangen und unter Berücksichtigung von Konzepten aus dem Interaction Design und E-Learning Bereich, vorhandene Prozesse spielerisch zugänglich zu machen. Dabei wurden sogar traditionelle Abläufe, durch den neuartigen Ansatz QM-Daten mit visuellen Elementen zu verbinden, überboten, bieten ein positiveres Erlebnis und haben somit das Potential einen neuen de-facto Standard auf dem Gebiet zu etablieren.

5.1 Lessons Learned

Insbesondere während der Ausführung der Studien, sind einige Punkte aufgefallen, die es wert sind angesprochen zu werden. Dazu gehört die ungleiche Anzahl von Testpersonen im Bezug auf Altersgruppen und Geschlechter, was sich vor allem bei der Videostudie gezeigt hat, da nur eine weibliche Meinung vertreten war. Die angesprochene unterschiedliche Perzeption von Design der Geschlechter und Altersgruppen [52, 57], sowie das unterschiedliche Lernverhalten der Geschlechter wurde durch die ungleiche Anzahl der Personen nicht komplett eingefangen und sollte somit zukünftig detaillierter betrachtet werden [1]. Das Gleiche lässt sich in Bezug auf akademische Grade sagen, da bei allen die selben Grundkenntnisse vorausgesetzt sind (siehe 3.2 Zielgruppen), aber potentiell unterschiedliche Erwartungen in Bezug auf Funktionalitäten stellen könnten. Somit ist nicht auszuschließen, dass beispielsweise Professoren und Professorinnen einen Expertenmodus willkommen heißen würden. Bezüglich der Usability wurden insgesamt 19 Personen per Fragebogen befragt, inklusive der fünf Personen bei der Videostudie. Diese fünf finden zwar 85% der Usability-Probleme, aber um eine volle Abdeckung zu gewährleisten sind mindestens zwei weitere aufeinanderfolgende Tests (mit fünf Personen) notwendig [27], somit sollten weitere Tests durchgeführt werden.

Abseits dieser Punkte, gibt es aber auch Positives zu berichten. Durch die interdisziplinäre Zusammenarbeit und durch Einfluss verschiedener Kompetenzen der zwei Fachbereiche, konnte trotz unterschiedlicher Methodiken oder Vorgehensweisen ein überaus positiver beidseitiger Einfluss auf die jeweilige Entwicklung von AT aber auch des MOLAR vernommen werden. Die Einführung in fachfremde Bereiche war im Sinne des Perspektivenwechsels auch hilfreich bei der Ideen- und User-Stories-Findung.

Als letztes ist eine Pointe erwähnenswert, da während der Entwicklung vereinzelt Fehler aufgetreten sind: Der Vergleich von verschiedenen LOT eines gleichen Element, war so nicht geplant und hätte als Fehler angesehen werden können, da die Rechnung mit unterschiedlichen LOT häufig weniger sinnvoll ist. Dieser „Fehler“ wurde aber als Feature erkannt, da jener Vergleich mit dem AT wesentlich einfacher als mit anderen Methoden durchzuführen ist. Dieser Fall scheint gar nicht unüblich in der Softwareentwicklung, so schreibt der auf Twitter bekannte³³ Softwareent-

³³circa 30 000 Follower auf Twitter @DavidKPiano

wickler David Khourshid von Microsoft über eine sich wiederholende Schleife vom schreiben des Codes und dem Ausliefern, bis zum Refactoren für neue Features und daraus resultierende Fehler beheben, nur um schließlich Fehler wiederherzustellen, da Nutzer dachten diese seien Features³⁴.

5.2 Ausblick

Da die Berechnung von Reaktionsenergien (und hier besonders die von Protonentransfer-Prozessen) nicht die einzigen kalkulierbaren Analysen sind, ist es zukünftig möglich weitere Varianten des AT anzufertigen, mit verschiedenen anderen Ergebnissen. Die Architektur der Daten wurde darauf ausgelegt und dies im Hinterkopf bei der Entwicklung berücksichtigt (vergleiche 4.2.1 Verbesserungen gegenüber Prototyp 1 storage). Somit müssen Nutzende nicht die für sie relevanten Daten aus einer großen Menge herauspicken, sondern können direkt das für sie relevante Tool mit einer übersichtlichen Anzahl an Ergebnissen nutzen. Zugleich wird somit das Prinzip von „Separation of Concerns“ sowohl Informatik- als auch Chemie-technisch (durch Vermeidung der Kombination von unterschiedlichen Analysen in einem Tool) gefolgt. Sofern sinnvoll, könnten diese Analysen außerdem auf eine 3D-Darstellung, statt der 2D-Darstellung der Moleküle setzen. Um eine möglichst hohe Ähnlichkeit der Tools beizubehalten, wäre es dann möglich, die 3D-Ansicht durch einen „Expertenmodus“ bei der Analyse zur Verfügung zu stellen. Weiterhin ist die Umsetzung der genannten Wünsche aus den Studien geplant: einerseits die Anzeige der relevanten Koordinaten aus den .xyz-Dateien direkt im Browser, sowie die Möglichkeit E-States im AT auszuwählen. Alternativ zum letzteren wäre eine Art „Warenkorb“, welcher ähnlich wie bei großen eCommerce-Seiten per „Hover“ anzeigt, welche Elemente ausgewählt wurden. Dies wäre insbesondere hilfreich bei Projekten, die eine größere Menge von Elementen betrachten, da Nutzer nur 7 ± 2 Chunks im Kurzzeitgedächtnis behalten ([62, Miller's Law]) und somit während der Auswahl bereits vergessene Elemente erneut betrachten könnten ohne die Anzahl von Klicks/Navigtionen zu erhöhen. Bezüglich observierter Verhalten der Videostudie: Als Alternative zum Bestätigungs-Modal um ungewolltes Löschen zu reduzieren, könnte eine Button dienen, der in einem bestimmten Zeit Intervall zwei mal hintereinander geklickt werden muss, als eindeutige Bestätigung der Intention. Die Motivation zum Testen einer Alternative ist gegeben durch die sehr geringe Betrachtungszeit des Modals und dessen Textinhalt von circa 2 s (siehe 4.2.3 Auswertung der Nutzerstudie).

Kein explizit genannter Wunsch Nutzender, aber heutzutage immer häufiger anzutreffendes Feature, ist ein „Night Mode“, der bei dem sehr weiß-lastigen Design des AT und MOLAR sinnvoll wäre, da Studierende nicht nur tagsüber forschen. Browser und OS bieten zur Erkennung der Systemeinstellung (ob OS-weit ein dunkles Design aktiviert ist) bereits entsprechende Funktionen³⁵ und wäre im Sinne der Personalisierung ein Fortschritt. Weiterhin wäre es denkbar, eine gesamte Historie von Analysen zur Verfügung zu stellen, ähnlich dem Prinzip von einem Newsfeed (statt News, Analysen), somit würden die Konsumenten des AT gleichzeitig Prosumenten werden und die Interaktion zwischen Nutzenden, aber möglicherweise auch die Produktivität (durch finden von vorherigen relevanten Analysen und dortigem Anknüpfen). Ob es sinnvoll ist, das AT zu einer „Web 2.0“ Anwendung zu transformieren sollte zuvor aber getestet werden. Zeitgleich würde das außerdem im Sinne von E-Learning eine Möglichkeit schaffen Inhalte zu erstellen und damit das Engagement zu erhöhen [19, Präsentation].

Für die Weiterentwicklung von Relevanz wäre die Einführung von Semantic Versioning (SemVer)³⁶ um die Version im Footer sinnvoll aktuell zu halten (Abbildung 4.43). Passend dazu könnten die so genannten „Conventional Commits“³⁷ verwendet werden um neue Features, Fixes und „Breaking Changes“ zu trennen. Ein weiterer letzter großer Punkt für zukünftige Entwicklung

³⁴Original auf Twitter.com abgerufen am 03.03.2021

³⁵<https://caniuse.com/prefers-color-scheme>

³⁶<https://semver.org/lang/de/>

³⁷<https://www.conventionalcommits.org/en/v1.0.0/>

sind UI Tests des AT, die aufgrund limitierter Zeit während der fortlaufenden Entwicklung zu zeitaufwendig gewesen wären. Mögliche Testverfahren sind UI/visuelle Regressionstests³⁸ oder End-to-end Tests, sowie Unit-Tests zur Prüfung der JavaScript/PHP-Berechnungen.

³⁸<https://github.com/mojoaxel/awesome-regression-testing> / <https://github.com/NoriSte/ui-testing-best-practices>

Inhalt der Abgabe

- Fragebogen & Rohdaten (Ergebnisse) der Studie zu Prototyp 1
- Fragebogen & Rohdaten (Ergebnisse) der Studie zu Prototyp 2
- PHP (demo.php), JavaScript (demo.js) und CSS (demo.css) Code (plus stylelint, eslint, htmlhint und browserlist config) von Prototyp 1 inkl. externer SQL Struktur mit Demo Daten und generierten 2D-Bildern
- PHP (addtostorage.php, history.php, reactionenergy.php), JavaScript (main.js, reactionenergy.js) und CSS (demo.css) Code (plus stylelint, eslint, htmlhint und browserlist config) von Prototyp 2 exkl. Code von MOLAR

Abbildungsverzeichnis

1.1	Beispiel von bisherigem Analyse-Vorgehen vom Forschenden bis zur Forschungsarbeit (genaue Details der Tabelle nicht von Relevanz)	4
3.1	Entity-Relationship-Modell mit Zusatzinformationen, wobei rote Sternchen die für das AT relevante Relationen markieren	13
3.2	Wireframe: Ansicht für die Auswahl der Elemente	16
3.3	Wireframe: Details für E-States als Modal	17
3.4	Wireframe: Analyse-UI mit D&D als Modal	17
4.1	Index: E-States Übersicht	19
4.2	Index: Checkbox und Tooltip (selektiert)	20
4.3	Index: Checkbox und Tooltip (unselektiert)	20
4.4	Modal: Analyse-UI	23
4.5	Modal: E-State Details	23
4.6	Modal: UI nach Selektion	23
4.7	Modal: Ausgrauung von unterschiedlichen Level of Theories	24
4.8	Modal: Ansicht während „Drag“ Status	24
4.9	Modal: Ansicht nach „Drop“ und Analyseergebnis	24
4.10	Modal: Popover bei „Hover“ über einem Element zeigt Details des Elements	24
4.11	Bewertung der gestellten Aufgabe im Fragebogen	27
4.12	Bewertung des Tutorials vor dem Fragebogen	27
4.13	Bewertung von generellen Eigenschaften der Webanwendung	27
4.14	Bewertung D&D des AT	28
4.15	Bewertung der Funktionalität der Webanwendung (1/2)	28
4.16	Bewertung der Funktionalität der Webanwendung (2/2)	28
4.17	Sketch des History-Tabs	29
4.18	Ansicht der URL-Teilen Funktionalität	30
4.19	Speichern- und „alles entfernen“-Buttons	32
4.20	Modal: Bestätigung für Reset	32
4.21	Toast: Erfolg von Aktion „Save selection“	32
4.22	Toast: Misserfolg von Aktion „Delete entry“	32
4.23	Ablaufdiagramm D&D Prototyp 1	34
4.24	Ablaufdiagramm D&D Prototyp 2	34
4.25	Hinweis zur ungleicher Anzahl der Atomen	35
4.26	Hinweis zu unterschiedliche LOTs	35
4.27	Drag-Element Design in Prototyp 2	36
4.28	„Dupliziertes“ Element in Prototyp 2	36
4.29	Ansicht des History-Tabs	36
4.30	Ansicht während „Drop“ aus der Historie	37
4.31	SUS Auswertungsskala von Bangor, Kortum und Miller ([34]) (AT Ergebnis rot markiert)	38
4.32	Auswertung SUS pro Person	39
4.33	Aufgaben-Abschluss-Zeiten der Videostudie (zwei fehlende Zeiten durch Nicht-Bearbeitung der entsprechenden Aufgabe)	40
4.34	RTLX Ergebnisse per Kategorie	41
4.35	Bewertung eines hypothetischen Historie-Eintrag-Limits	42
4.36	Gewünschte Navigations-Möglichkeiten in der Historie	42
4.37	Auswertung der angegebenen Limits als Histogramm (unendlich wurde als „> 1000“ modelliert)	43
4.38	Bewertung der URL-Teilen-Funktion (exkl. zwei Enthaltungen)	43
4.39	Verständnis der Analyse durch D&D und Spaß von D&D	44

4.40	Bewertung bekannter Funktionalität aus Prototyp 1	45
4.41	Bewertung der Aussage „AT führt schneller zu für meine Forschung relevanten Ergebnissen als trad. Programme“	45
4.42	Integration in MOLAR	46
4.43	Versionsbezeichnung im Footer	47
4.44	Checkbox und Icon in MOLAR	48

Literatur

- [1] Benjamin Pölloth, Stefan Schwarzer und Hendrik Zipse. “Student Individuality Impacts Use and Benefits of an Online Video Library for the Organic Chemistry Laboratory”. In: *J. Chem. Educ.* 97.2 (2020), S. 328–337. ISSN: 19381328. DOI: 10.1021/acs.jchemed.9b00647.
- [2] Barry Schwartz. *The paradox of choice*. 2005. URL: https://www.ted.com/talks/barry%7B%5C_%7Dschwartz%7B%5C_%7Dthe%7B%5C_%7Dparadox%7B%5C_%7Dof%7B%5C_%7Dchoice.
- [3] Franz Wortha u. a. “Multiple Negative Emotions During Learning With Digital Learning Environments – Evidence on Their Detrimental Effect on Learning From Two Methodological Approaches”. In: *Front. Psychol.* 10 (2019). ISSN: 16641078. DOI: 10.3389/fpsyg.2019.02678.
- [4] Petra Engelmann und Maria Bannert. “Fostering students’ emotion regulation during learning: Design and effects of a computer-based video training”. In: *Int. J. Emot. Educ.* 11.2 (2019), S. 3–16. ISSN: 2073-7629. URL: <http://oaji.net/articles/2019/4987-1575375186.pdf>.
- [5] Dan Saffer. *Designing for Interaction: Creating Innovative Applications and Devices*. 2. Aufl. New Riders, 2009. ISBN: 978-0321643391.
- [6] DIN Deutsches Institut für Normung e.V. “ISO 9241-110 Ergonomie der Mensch-System-Interaktion - Teil 110: Grundsätze der Dialoggestaltung (ISO 9241-110:2006); Deutsche Fassung EN ISO 9241-110:2006”. In: *Ergonomics* September (2008), S. 34.
- [7] Arno Hitzges. “Usability als wesentlicher Erfolgsfaktor für Unternehmenssoftware”. In: *Wirtschaftsinformatik Manag.* 8.3 (2016), S. 100–108. ISSN: 1867-5905. DOI: 10.1007/s35764-016-0044-4.
- [8] M. Burmester, Marc Hassenzahl und F. Koller. “Usability ist nicht alles Wege zu attraktiven Produkten (Beyond Usability Appeal of interactive Products)”. In: *i-com* 1.1/2002 (2006). ISSN: 1618-162X. DOI: 10.1524/icom.2002.1.1.032.
- [9] DIN - Deutsches Institut für Normung. “Ergonomie der Mensch-System-Interaktion - Teil 11: Gebrauchstauglichkeit: Begriffe und Konzepte (ISO/DIS 9241-11.2:2018)”. In: *Dtsch. Norm* (2018).
- [10] DIN-Normenausschuss Ergonomie (NAErg) und Ergonomics Standards Committee. *DIN EN ISO 9241-210*. Bd. 47. 2020.
- [11] Zahid Hussain u. a. “Integrating Extreme Programming and User-Centered Design”. In: *May* (2008), S. 313–330.
- [12] Pedro Serrador und Jeffrey K. Pinto. “Does Agile work? - A quantitative analysis of agile project success”. In: *Int. J. Proj. Manag.* 33.5 (2015), S. 1040–1051. ISSN: 02637863. DOI: 10.1016/j.ijproman.2015.01.006.
- [13] Samar Al-Saqqa, Samer Sawalha und Hiba Abdelnabi. “Agile software development: Methodologies and trends”. In: *Int. J. Interact. Mob. Technol.* 14.11 (2020), S. 246–270. ISSN: 18657923. DOI: 10.3991/ijim.v14i11.13269.
- [14] Stefanie Schmidt, Annemarie Minow und Irina Böckelmann. “Use and significance of established quantitative usability questionnaires in a user test”. In: *Zentralblatt für Arbeitsmedizin, Arbeitsschutz und Ergon.* 70.6 (2020), S. 256–263. ISSN: 21980713. DOI: 10.1007/s40664-020-00399-2.

- [15] Jakob Nielsen. *Usability 101: Introduction to Usability*. 2012. URL: <https://www.nngroup.com/articles/usability-101-introduction-to-usability/> (besucht am 10.02.2021).
- [16] Andreas Butz und Antonio Krüger. *Mensch-Maschine-Interaktion*. De Gruyter Oldenbourg, 2017. DOI: 10.1515/9783110476378-002.
- [17] Joi L. Moore, Camille Dickson-Deane und Krista Galyen. “E-Learning, online learning, and distance learning environments: Are they the same?” In: *Internet High. Educ.* 14.2 (2011), S. 129–135. ISSN: 10967516. DOI: 10.1016/j.iheduc.2010.10.001.
- [18] Tonia A. Dousay und Natasha P. Trujillo. “An examination of gender and situational interest in multimedia learning environments”. In: *Br. J. Educ. Technol.* 50.2 (2019), S. 876–887. ISSN: 14678535. DOI: 10.1111/bjet.12610.
- [19] S. Kigundu. “Engaging e-Learning in Higher Education: Issues and Challenges”. In: *Int. J. Educ. Sci.* 6.1 (2014), S. 125–132. ISSN: 0975-1122. DOI: 10.1080/09751122.2014.11890125.
- [20] W. M. Amir Fazamin W. Hamzah u. a. “Influence of gamification on students’ motivation in using E-learning applications based on the motivational design model”. In: *Int. J. Emerg. Technol. Learn.* 10.2 (2015), S. 30–34. ISSN: 18630383. DOI: 10.3991/ijet.v10i1.4355.
- [21] Faraon Llorens-Largo u. a. “Gamification of the Learning Process: Lessons Learned”. In: *Rev. Iberoam. Tecnol. del Aprendiziz.* 11.4 (2016), S. 227–234. ISSN: 19328540. DOI: 10.1109/RITA.2016.2619138.
- [22] Raed S. Alsawaier. *The effect of gamification on motivation and engagement*. 2018. DOI: 10.1108/IJILT-02-2017-0009.
- [23] Steve Dale. “Gamification: Making work fun, or making fun of work?” In: *Bus. Inf. Rev.* 31.2 (2014), S. 82–90. ISSN: 17416450. DOI: 10.1177/0266382114538350.
- [24] Ariana Yunita, Andrew Moore und Julian Andres Galindo Losada. “Gamification for learning science: ELISA (Enzyme linked immuno sorbent assay) game study case”. In: *Proc. 11th Int. Conf. Inf. Commun. Technol. Syst. ICTS 2017*. Bd. 2018-Janua. Institute of Electrical und Electronics Engineers Inc., 2018, S. 297–301. ISBN: 9781538628256. DOI: 10.1109/ICTS.2017.8265687.
- [25] Ruben Morales-Menendez u. a. “Drag-and-drop graphical user interface for process control education”. In: *ASEE Annu. Conf. Expo. Conf. Proc.* American Society for Engineering Education, 2008. DOI: 10.18260/1-2--4370.
- [26] Héctor R. Ponce, Richard E. Mayer und María Soledad Loyola. “Effects on Test Performance and Efficiency of Technology-Enhanced Items: An Analysis of Drag-and-Drop Response Interactions”. In: *J. Educ. Comput. Res.* (2020). ISSN: 15414140. DOI: 10.1177/0735633120969666.
- [27] Jakob Nielsen. *Why You Only Need to Test with 5 Users*. 2000. URL: <http://www.useit.com/alertbox/20000319.html> (besucht am 10.02.2021).
- [28] Jakob Nielsen. *Heuristic Evaluation: How-To: Article by Jakob Nielsen*. 1995. URL: <https://www.nngroup.com/articles/how-to-conduct-a-heuristic-evaluation/> (besucht am 10.02.2021).
- [29] Roobaea AlRoobaea, Ali Al-Badi und Pam Mayhew. “The Impact of the Combination between Task Designs and Think-Aloud Approaches on Website Evaluation”. In: *J. Softw. Syst. Dev.* (2013), S. 1–18. DOI: 10.5171/2013.172572.

- [30] Jakob Nielsen. *Thinking Aloud: The #1 Usability Tool*. 2012. URL: <https://www.nngroup.com/articles/thinking-aloud-the-1-usability-tool/> (besucht am 10.02.2021).
- [31] Khaled Abuhlfaia und Ed De Quincey. “The usability of E-learning platforms in higher education: A systematic mapping study”. In: *Proc. 32nd Int. BCS Hum. Comput. Interact. Conf. HCI 2018*. 2018. DOI: 10.14236/ewic/HCI2018.7.
- [32] Page Laubheimer. *Beyond the NPS: Measuring Perceived Usability with the SUS, NASA-TLX, and the Single Ease Question After Tasks and Usability Tests*. 2018. URL: <https://www.nngroup.com/articles/measuring-perceived-usability/> (besucht am 10.02.2021).
- [33] John Brooke. “System usability scale (SUS): a quick-and-dirty method of system evaluation user information”. In: *Reading, UK Digit. Equip. co ltd* 42 (1986), S. 1–7. ISSN: 07618425.
- [34] Aaron Bangor, Philip T. Kortum und James T. Miller. “An empirical evaluation of the system usability scale”. In: *Int. J. Hum. Comput. Interact.* 24.6 (2008), S. 574–594. ISSN: 10447318. DOI: 10.1080/10447310802205776.
- [35] James R. Lewis. “The System Usability Scale: Past, Present, and Future”. In: *Int. J. Hum. Comput. Interact.* 34.7 (2018), S. 577–590. ISSN: 15327590. DOI: 10.1080/10447318.2018.1455307.
- [36] Sandra G. Hart. “NASA-task load index (NASA-TLX); 20 years later”. In: *Proc. Hum. Factors Ergon. Soc.* 2006, S. 904–908. ISBN: 9780945289296. DOI: 10.1177/154193120605000909.
- [37] Jakob Nielsen. *First Rule Of Usability? Don't Listen To Users*. 2001. URL: <https://www.nngroup.com/articles/first-rule-of-usability-dont-listen-to-users/> (besucht am 10.02.2021).
- [38] Nouzha Harrati u. a. “Exploring user satisfaction for e-learning systems via usage-based metrics and system usability scale analysis”. In: *Comput. Human Behav.* 61 (2016), S. 463–471. ISSN: 07475632. DOI: 10.1016/j.chb.2016.03.051.
- [39] Lev I. Krishtalik. *The mechanism of the proton transfer: An outline*. 2000. DOI: 10.1016/S0005-2728(00)00057-8.
- [40] P Atkins und J De Paula. *Atkins' Physical chemistry 8th edition*. 8. Aufl. Oxford University Press, 2009. ISBN: 978-0716787594.
- [41] Ruby Srivastava. *The Role of Proton Transfer on Mutations*. 2019. DOI: 10.3389/fchem.2019.00536.
- [42] Letícia Cristina Assis u. a. *Theoretical insights into the effect of halogenated substituent on the electronic structure and spectroscopic properties of the favipiravir tautomeric forms and its implications on the treatment of COVID-19*. 2020. DOI: 10.26434/chemrxiv.12977597.v1.
- [43] Snehasis Banerjee. “An insight into the interaction between α -ketoamide- based inhibitor and coronavirus main protease: A detailed in silico study”. In: *Biophys. Chem.* 269 (2021). ISSN: 18734200. DOI: 10.1016/j.bpc.2020.106510.
- [44] Jakob Nielsen. *Designing Web Usability: The Practice of Simplicity*. 1. Aufl. New Riders, 1998. ISBN: 978-1562058104.
- [45] Burcu Arslan u. a. “The Effect of Drag-and-Drop Item Features on Test-Taker Performance and Response Strategies”. In: *Educ. Meas. Issues Pract.* 39.2 (2020), S. 96–106. ISSN: 17453992. DOI: 10.1111/emip.12326.

- [46] W. E. Hick. "On the Rate of Gain of Information". In: *Q. J. Exp. Psychol.* 4.1 (1952), S. 11–26. ISSN: 0033-555X. DOI: 10.1080/17470215208416600.
- [47] D Todorovic. "Gestalt principles". In: *Scholarpedia* 3.12 (2008), S. 5345. DOI: 10.4249/scholarpedia.5345.
- [48] Jakob Nielsen. *The 3 Important Limits*. 1993. URL: <https://www.nngroup.com/articles/response-times-3-important-limits/> (besucht am 10.02.2021).
- [49] Page Laubheimer. *Executing UX Animations: Duration and Motion Characteristics*. URL: <https://www.nngroup.com/articles/animation-duration/> (besucht am 02.10.2021).
- [50] Page Laubheimer. *Drag-and-Drop: How to Design for Ease of Use*. 2020. URL: <https://www.nngroup.com/articles/drag-drop/> (besucht am 10.02.2021).
- [51] Austin Henderson. "Interaction design". In: *Ubiquity* 2002.March (2002), S. 2. ISSN: 1530-2180. DOI: 10.1145/512526.512528.
- [52] Soussan Djamasbi u. a. "Gender preferences in web design: Usability testing through eye tracking". In: *Assoc. Inf. Syst. - 13th Am. Conf. Inf. Syst. AMCIS 2007 Reach. New Height*. Bd. 7. 2007, S. 4620–4627. ISBN: 9781604233810.
- [53] Mathias Bynens. *The cost of JavaScript in 2019*. 2019. URL: <https://v8.dev/blog/cost-of-javascript-2019%7B%5C%7Djson> (besucht am 01.01.2021).
- [54] *IEEE Standard for Floating Point Arithmetic*. 1985. URL: <https://irem.univ-reunion.fr/IMG/pdf/ieee-754-2008.pdf>.
- [55] Jeff Sauro und James R. Lewis. "When designing usability questionnaires, does it hurt to be positive?" In: *Conf. Hum. Factors Comput. Syst. - Proc.* 2011, S. 2215–2223. ISBN: 9781450302289. DOI: 10.1145/1978942.1979266.
- [56] Philip Kortum, Claudia Ziegler Acemyan und Frederick L. Oswald. "Is It Time to Go Positive? Assessing the Positively Worded System Usability Scale (SUS)". In: *Hum. Factors* (2019). ISSN: 15478181. DOI: 10.1177/0018720819881556.
- [57] Chihhsiang Ko und Yuchun Liu. "Old and Young Users' White Space Preferences for Online News Web Pages". In: *IEEE Access* 7 (2019), S. 57284–57297. ISSN: 21693536. DOI: 10.1109/ACCESS.2019.2913407.
- [58] Thomas S Tullis und Jacqueline N Stetson. "A Comparison of Questionnaires for Assessing Website Usability". In: *Usability Prof. Assoc. Conf.* (2004), S. 1–12. URL: <http://home.comcast.net/%7B%7Dtomtullis/publications/UPA2004TullisStetson.pdf>.
- [59] Aaron Bangor, Philip Kortum und James Miller. "Determining what individual SUS scores mean: adding an adjective rating scale". In: *J. usability Stud.* 4.3 (2009), S. 114–123. ISSN: 1931-3357.
- [60] Jeff Sauro und James R. Lewis. *Quantifying the User Experience*. Elsevier Inc., 2012. ISBN: 9780123849687. DOI: 10.1016/C2010-0-65192-3.
- [61] NNgroup. *Jakob's Law of Internet User Experience*. 2017. URL: <https://www.nngroup.com/videos/jakobs-law-internet-ux>.
- [62] G Miller. "The Magical Number Seven, Plus or Minus Two". In: *Essent. Sources Sci. Study Conscious.* Bd. 63. 2019. DOI: 10.7551/mitpress/2834.003.0029.