

Introduction générale

En biologie moléculaire, il est un problème vieux de plus d'un siècle qui n'a toujours pas trouvé sa solution. Ce problème, le *docking* moléculaire, consiste à comprendre comment des molécules peuvent s'assembler afin d'en former une nouvelle. L'avènement de l'informatique a permis à de nombreux chercheurs de proposer des algorithmes toujours plus évolués les uns que les autres mais aucun ne permet d'être sûr d'obtenir une solution dans un temps raisonnable. Même l'augmentation exponentielle de la puissance de calcul des ordinateurs ne permet pas de s'approprier un tel problème.

Afin de donner un nouveau souffle à ce domaine de recherche, l'humain, et ses capacités de décision, ont été introduit dans le processus de recherche. Cependant, un biologiste seul peut difficilement appréhender un problème d'une telle complexité. C'est pourquoi, des systèmes collaboratifs permettant le partage de connaissances ont commencé à émerger.

Parallèlement à ces nouvelles approches, les biologistes souhaitent avoir la possibilité de manipuler les molécules. Les contraintes physiques et techniques d'une telle manipulation ont amenés certains d'entre eux à s'orienter vers une modélisation puis une numérisation du comportement des molécules. Des moteurs de simulation sont alors développés pour permettre d'explorer virtuellement les comportements de ces molécules.

Puis, afin de pouvoir interagir avec ces simulations, certains biologistes vont chercher des solutions dans le domaine de la réalité virtuelle, notamment avec les interfaces haptiques. Ces interfaces haptiques permettent de sentir et d'interagir avec les molécules.

C'est dans ce contexte que les travaux de cette thèse prennent place. Nous proposons aux biologistes d'interagir de manière collaborative et en temps-réel avec une simulation moléculaire à l'aide d'interfaces haptiques. Nous souhaitons identifier les contraintes liées à cette collaboration étroitement couplée (synchrone et colocalisée) puis nous proposerons d'utiliser la modalité haptique pour assister cette collaboration. Les travaux présentés ici

s'intéressent donc à vérifier l'utilité et la pertinence de la modalité haptique pour assister la collaboration entre utilisateurs.

Le mémoire qui va suivre s'organise de la manière suivante. Dans un premier temps, nous présenterons de manière précise dans le chapitre 1 page ci-contre, le contexte dans lequel s'inscrit notre travail. Nous commencerons par y présenter le *docking* moléculaire et la complexité que représente ce problème. Puis nous nous intéresserons à la psychologie sociale du travail collaboratif en soulignant les avantages et les limites d'une telle approche. Enfin, nous reviendrons sur les particularités de la collaboration en environnement virtuel.

Dans le chapitre 2 page 37, nous allons présenter la plateforme Shaddock qui a été déployée dans le cadre de cette thèse pour répondre aux problématiques de collaboration et de manipulation moléculaire en temps-réel. Nous justifierons les choix architecturaux et les modules utilisés. La dernière partie sera consacrée à la présentation des outils haptiques développés pour répondre aux différents contraintes de manipulation.

Sur la base de la plateforme Shaddock, nous présentons ensuite trois études de cas afin d'étudier la collaboration étroitement couplée. Le chapitre 3 page 53 s'intéresse aux processus d'exploration et de sélection collaborative. Puis, le chapitre 4 page 81 propose de comparer différentes répartitions des ressources sur une tâche de déformation. Ces deux études ne proposant des manipulations que de manière individuelle ou en couple, le chapitre 5 page 111 abordera les contraintes liées à la déformation de molécules avec des groupes de quatre individus.

Sur la base des résultats de ces trois études de cas, nous proposons, dans le chapitre 6 page 133, des outils haptiques permettant d'améliorer le processus de collaboration. Ces outils seront testés entre autre par des biologistes afin d'évaluer leur pertinence et leur utilité dans ce contexte de déformation moléculaire.

Pour finir, nous présenterons la synthèse des travaux effectués dans le cadre de cette thèse. Puis nous proposerons des perspectives à plus ou moins long terme concernant la poursuite de ce travail.