

Thèse en Informatique

Jean SIMARD

Interactions haptiques collaboratives pour la manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

Thèse soutenue le 1^{er} décembre 2011 en présence de

Martin DUPONT (rapporteur) Directeur de recherche au LIMSI
Martin DUPOND (examineur) Directeur de recherche au LIMSI

Table des matières

Table des matières	iii
Table des figures	v
Liste des tableaux	vii
I Le sujet	1
1 Introduction	3
II Étude du travail collaboratif	5
2 La recherche collaborative	7
2.1 Présentation	7
2.1.1 Objectifs	7
2.1.2 Hypothèses	7
2.2 Dispositif expérimental	7
2.3 Méthode	7
2.3.1 Sujets	7
2.3.2 Variables	8
2.3.3 Tâche	11
2.3.4 Procédure	11
2.4 Résultats	11
3 La manipulation collaborative	13

Table des matières

4	Les dynamiques de groupe	15
III	Propositions pour le travail collaboratif	17
5	Travail collaboratif assisté par haptique	19
IV	Synthèse	21
6	Conclusion et perspectives	23
	Glossary	25
	Acronyms	27
A	Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design	29

Table des figures

2.1 Répartition des résidus sur les molécules	10
---	----

Table des figures

Liste des tableaux

2.1	Liste des résidus recherchés	9
2.2	Paramètres de complexité des résidus	9

Liste des tableaux

Liste des *À faire*

Liste des À faire

Première partie

Le sujet

Chapitre 1

Introduction

Deuxième partie

Étude du travail collaboratif

Chapitre 2

La recherche collaborative

2.1 Présentation

2.1.1 Objectifs

2.1.2 Hypothèses

2.2 Dispositif expérimental

2.3 Méthode

2.3.1 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 27.8$ ($\sigma = 7.19$) ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

- linguistique et traitement automatique de la parole ;
- réalité virtuelle et système immersifs ;
- audio-acoustique.

Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni déficience audio.

Chaque participants est complètement naïf concernant les détails de l'expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation mais en omettant l'objectif de l'étude.

2.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-population, c'est-à-dire que tous les sujets seront expérimentés dans toutes les conditions de cette variable. (\mathcal{V}_{i1}) possède 2 valeurs possibles : « 1 sujet (*c.f. monôme*) » ou « 2 sujets (*c.f. binôme*) ». Les sujets seuls et les sujets en couples ont à leur disposition 2 interfaces haptiques et une souris 3D (SpaceNavigator®). Pour les binômes, seulement un des deux sujets est désigné pour l'utilisation exclusive de la souris 3D. 24 monômes et 12 binômes ont été testés ce qui fait deux fois plus de monômes que de binômes.

(\mathcal{V}_{i2}) **Résidu recherché** La seconde variable indépendante est une variable intra-population. (\mathcal{V}_{i2}) concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans 2 molécules (voir TABLE 2.1 page ci-contre). La première molécule est couramment nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] et a pour identifiant PDB 1L2Y sur la *Protein DataBase*¹. La seconde molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB 2KFL. 5 résidus sont présents sur chaque molécule (voir FIGURE 2.1 page 10) et chacun présente différents niveaux de complexité (voir TABLE 2.2 page ci-contre) :

Position La position du résidu peut se trouver sur le pourtour de la molécule, en position *externe* ou à l'intérieur, au milieu de l'amas d'atome (position *interne*). Un résidu en position externe ne nécessite pas de déformer la molécule pour le trouver et l'atteindre contrairement à un résidu en position interne qui sera plus complexe d'accès.

Forme La forme du résidu influe énormément sur la complexité de la recherche. On distingue 3 formes différentes :

Chaîne Un enchaînement d'atomes seuls les atomes d'hydrogène sont de part et d'autres de cet enchaînement.

Cercle Une chaîne d'atomes de carbone ou d'azote qui boucle sur elle-même.

Étoile Séries de chaînes d'atomes toutes reliées sur un atome central (la plupart du temps, un atome de carbone).

Couleurs Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l'oxygène, blanc pour l'hydrogène, *etc.*). Les atomes qui sont rares seront donc rapidement trouvés grâce à leur couleur différente. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbones) seront plus difficiles à filtrer à cause de leur nombre important.

Similarité Certains résidus à chercher sont très similaires à d'autres résidus également présents sur la molécule. De par leur similarité, ils vont mobiliser la recherche sur des résidus incorrects.

1. <http://www.pdb.org/>

Table 2.1 – Liste des résidus recherchés**(a)** Résidus sur la molécule TRP-CAGE**(b)** Résidus sur la molécule Prion

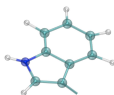

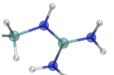
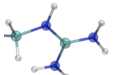
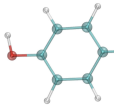
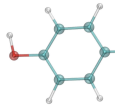
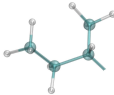
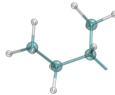


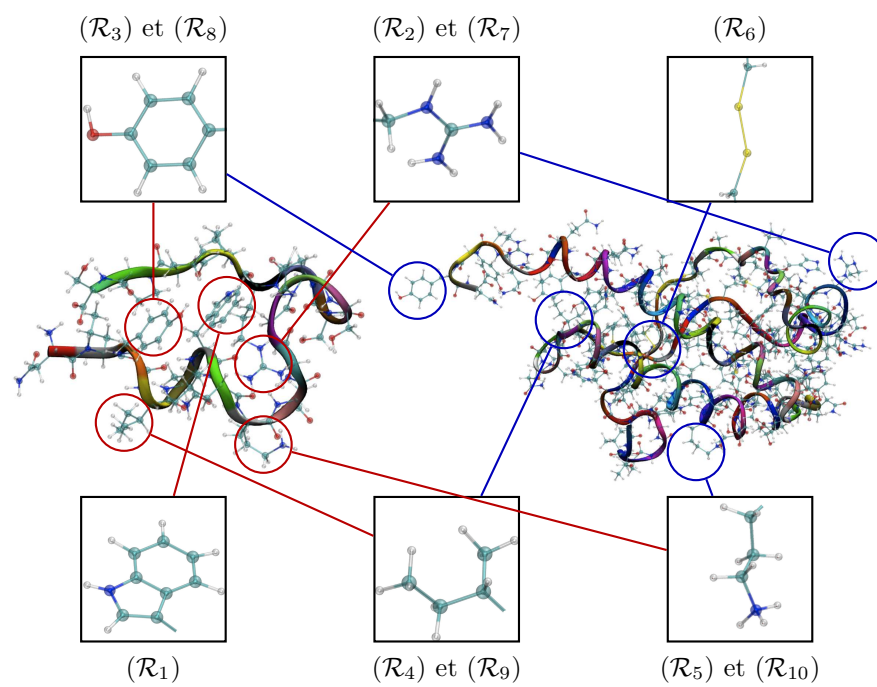
Résidu	Image	Résidu	Image
(\mathcal{R}_1)		(\mathcal{R}_6)	
(\mathcal{R}_2)		(\mathcal{R}_7)	
(\mathcal{R}_3)		(\mathcal{R}_8)	
(\mathcal{R}_4)		(\mathcal{R}_9)	
(\mathcal{R}_5)		(\mathcal{R}_{10})	

Table 2.2 – Paramètres de complexité des résidus

Résidu	Position	Forme	Couleurs	Similarité
(\mathcal{R}_1)	Interne	Cercle	8 C, 1 N	Non
(\mathcal{R}_2)	Interne	Étoile	1 C, 3 N	Non
(\mathcal{R}_3)	Interne	Cercle	6 C, 1 O	Non
(\mathcal{R}_4)	Externe	Chaîne	4 C	Non
(\mathcal{R}_5)	Externe	Chaîne	4 C, 1 N	Non
(\mathcal{R}_6)	Interne	Chaîne	2 C, 2 S	Non
(\mathcal{R}_7)	Externe	Étoile	1 C, 3 N	Non
(\mathcal{R}_8)	Externe	Cercle	6 C, 1 O	Non
(\mathcal{R}_9)	Interne	Chaîne	4 C	Oui
(\mathcal{R}_{10})	Interne	Chaîne	4 C, 1 N	Oui

Figure 2.1 – Répartition des résidus sur les molécules



Variables dépendantes

2.3.3 Tâche

2.3.4 Procédure

2.4 Résultats

Chapitre 3

La manipulation collaborative

Chapitre 4

Les dynamiques de groupe

Troisième partie

Propositions pour le travail collaboratif

Chapitre 5

Travail collaboratif assisté par haptique

Quatrième partie

Synthèse

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Glossary

monôme

Groupe constitué d'une unique personne. 8

résidu

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. 8

variable dépendante

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les *variables indépendantes*. 25

variable indépendante

Facteur pouvant varier et être manipuler sur une expérimentation (nombre de participants, tâche, *etc.*) ; ces variables vont avoir une incidence sur les *variables dépendantes*. 8

variable intra-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 8

Acronyms

cnrs-limsi

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR3251) associé aux universités
PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. 7

Acronyms

Annexe A

Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design