

# Collaboration haptique étroitement couplée pour la déformation moléculaire interactive

---

Jean SIMARD

Université de PARIS-Sud

CNRS-LIMSI

---

12 mars 2012



# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion et perspectives

# Sommaire

## 1 Introduction

- *Docking* moléculaire
- Distribution des charges de travail
- Objectifs de la thèse

## 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock

## 3 Étude du travail collaboratif

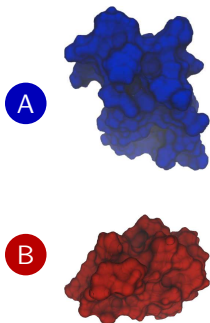
## 4 Aide au travail collaboratif

## 5 Conclusion et perspectives

# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



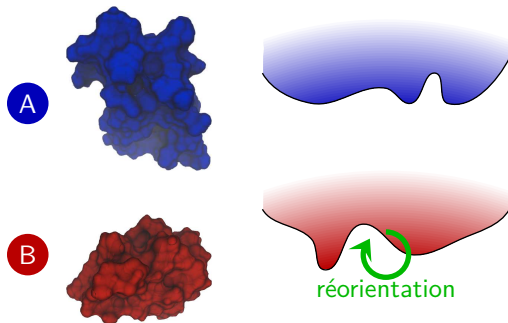
## Facteurs de complexité

**Figure:** *Docking* moléculaire

# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



## Facteurs de complexité

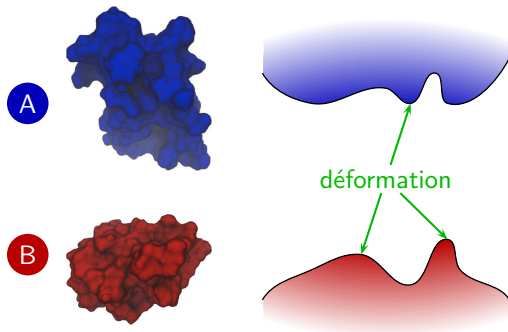
- Nombreux atomes

**Figure:** *Docking* moléculaire

# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



**Figure:** *Docking* moléculaire

## Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation

# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.

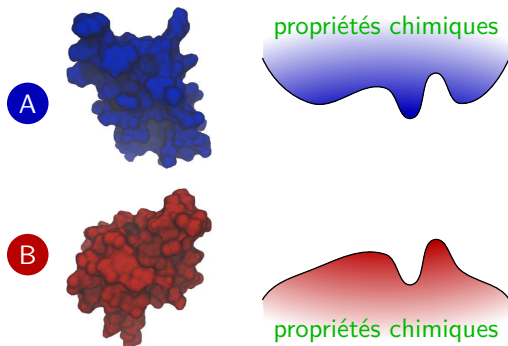


Figure: *Docking* moléculaire

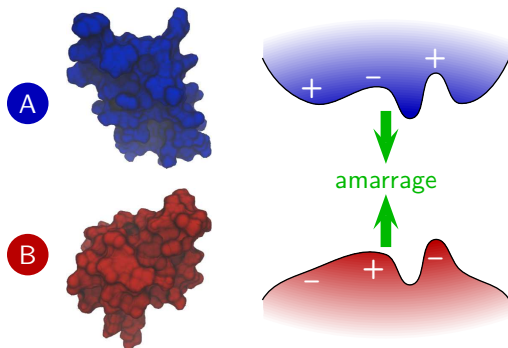
## Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité

# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



**Figure:** *Docking* moléculaire

## Facteurs de complexité

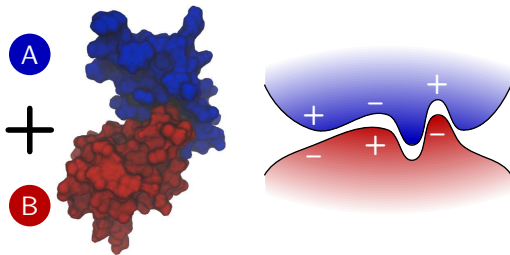
- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité
- Facteurs chimiques



# Docking moléculaire

## Définition

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



## Facteurs de complexité

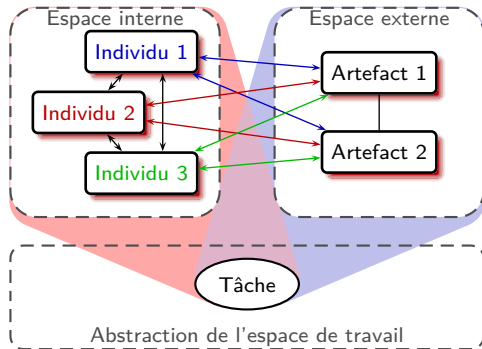
- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité
- Facteurs chimiques
- Complémentarité
  - géométrique
  - électrostatique

**Figure:** *Docking* moléculaire

# Distribution des charges de travail

## Définition

Étendre la capacité cognitive d'analyse d'un individu pour inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.



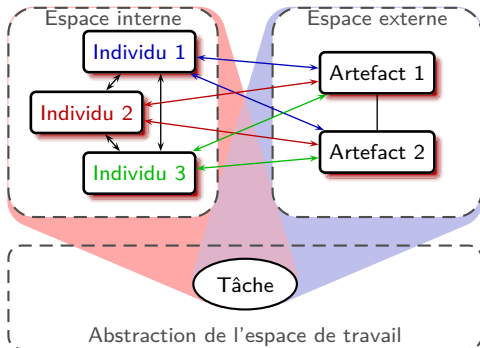
**Figure:** Système cognitif distribué

## Travaux sur la collaboration

# Distribution des charges de travail

## Définition

Étendre la capacité cognitive d'analyse d'un individu pour inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.



**Figure:** Système cognitif distribué

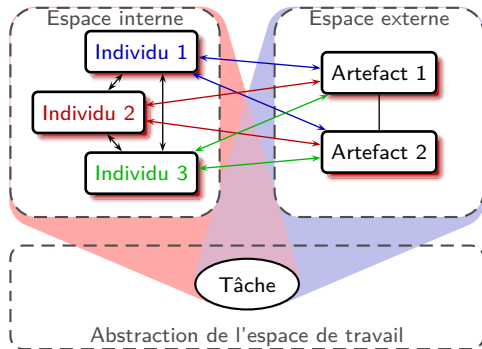
## Travaux sur la collaboration

- manipulation colocalisée [Kriz-2003]

# Distribution des charges de travail

## Définition

Étendre la capacité cognitive d'analyse d'un individu pour inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.



**Figure:** Système cognitif distribué

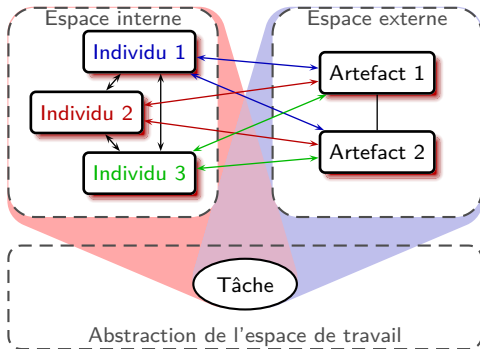
## Travaux sur la collaboration

- manipulation colocalisée [Kriz-2003]
- un manipulateur guidé par deux partenaires [Park-2006]

# Distribution des charges de travail

## Définition

Étendre la capacité cognitive d'analyse d'un individu pour inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.



**Figure:** Système cognitif distribué

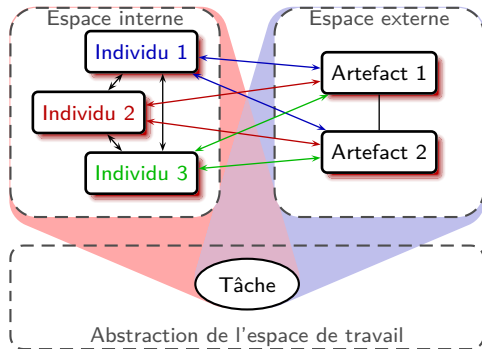
## Travaux sur la collaboration

- manipulation colocalisée [Kriz-2003]
- un manipulateur guidé par deux partenaires [Park-2006]
- inter-référencement [Chastine-2007]

# Distribution des charges de travail

## Définition

Étendre la capacité cognitive d'analyse d'un individu pour inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.



**Figure:** Système cognitif distribué

## Travaux sur la collaboration

- manipulation colocalisée [Kriz-2003]
- un manipulateur guidé par deux partenaires [Park-2006]
- inter-référencement [Chastine-2007]
- gestion des droits [Ma-2007]

# Objectifs de la thèse

## Problématique

- Quels sont les avantages du travail en collaboration ?
- Quelles problématiques supplémentaires la collaboration apporte-t-elle ?
- Comment améliorer la collaboration dans un environnement de travail complexe ?

## Objectifs

Analyser le travail collaboratif dans le contexte du *docking* moléculaire pour proposer des outils haptique adaptés.

- 1 Étudier le travail collaboratif dans les tâches de manipulation moléculaire
- 2 Identifier les faiblesses de cette configuration de travail
- 3 Proposer des solutions appropriées pour assister le travail
- 4 Évaluer ces solutions en situation réelle

# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
  - Cahier des charges
  - Organisation logicielle de la plateforme Shaddock
  - Organisation matérielle de la plateforme Shaddock
  - Outils supplémentaires proposés
- 3 Étude du travail collaboratif
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion et perspectives



# Cahier des charges

## Objectif

Élaborer une plateforme pour étudier le travail collaboratif dans le contexte de la manipulation interactive de molécules.

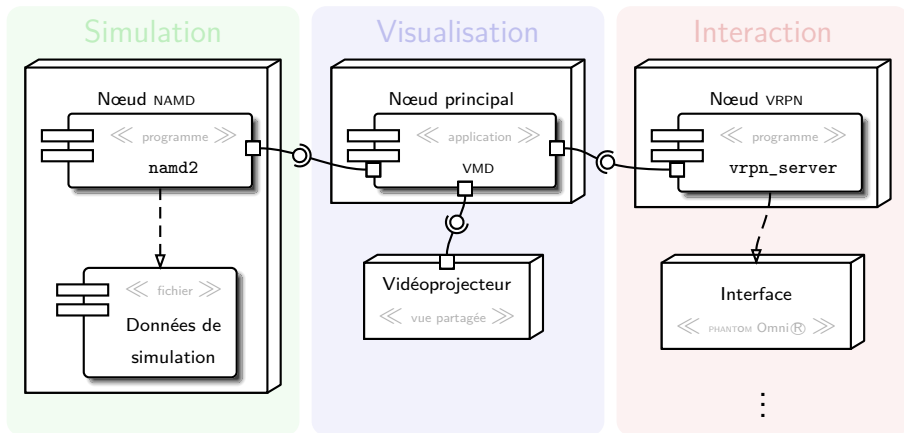
## Contraintes

- Travail en collaboration
- Interaction temps-réel avec des molécules
- Manipulation à l'aide d'interface haptique
- Simulation temps-réel de la dynamique des molécules

## Solutions

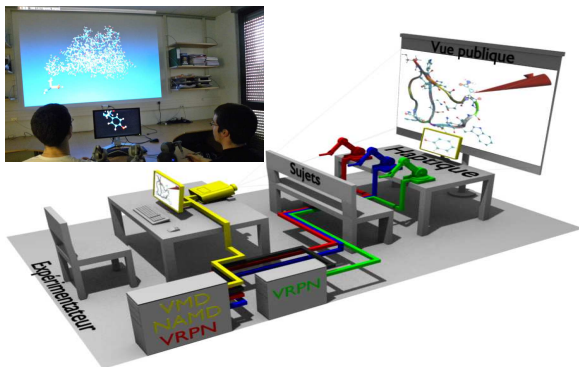
- Modularité
- Composant logiciels existants en biologie
- Modules dédiés à la réalité virtuelle
- Développement de nouveaux outils

# Organisation logicielle de la plateforme Shaddock



**Figure:** Diagramme de déploiement UML de la plateforme Shaddock

# Organisation matérielle de la plateforme Shaddock



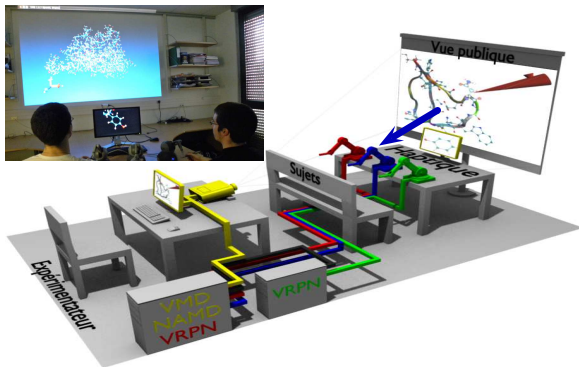
**Figure:** Plate-forme expérimentale

- Configuration **colocalisée** et **synchrone**

■ **Communication** orale et gestuelle autorisée

■ Outil de **déformation** de la molécule (Omni de SensAble®)

# Organisation matérielle de la plateforme Shaddock



**Figure:** Plate-forme expérimentale

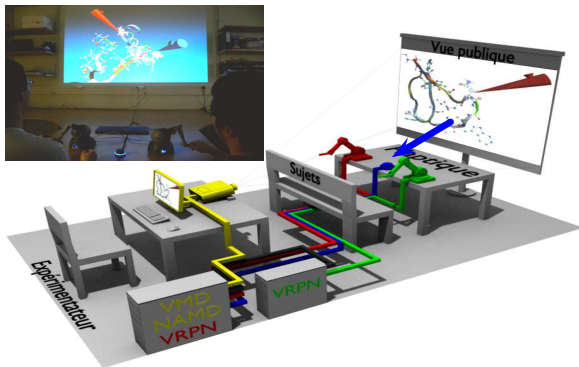
- Outil pour **déplacer** la molécule (Omni de SensAble®)

- Vue monoscopique, unique, **publique** et vidéoprojetée

- Affichage **déporté** des objectifs



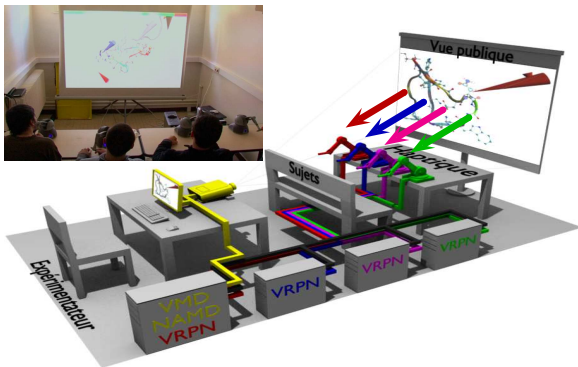
# Organisation matérielle de la plateforme Shaddock



**Figure:** Plate-forme expérimentale

- Outil pour **orienter** la molécule (SpaceTraveler de 3Dconnexion®)

# Organisation matérielle de la plateforme Shaddock



**Figure:** Plate-forme expérimentale

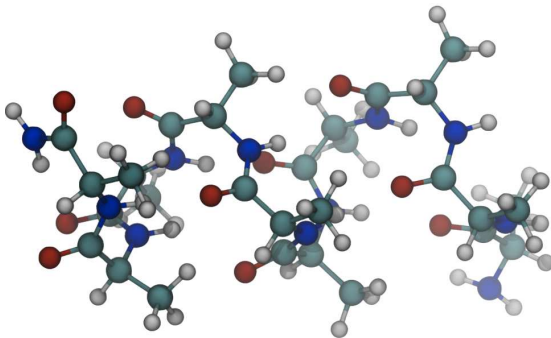
- Nombre d'outils quasiment illimité

- Collaboration **asymétrique** entre les participants

# Outils supplémentaires proposés

## Objectif

Faciliter le processus de sélection dans l'application VMD



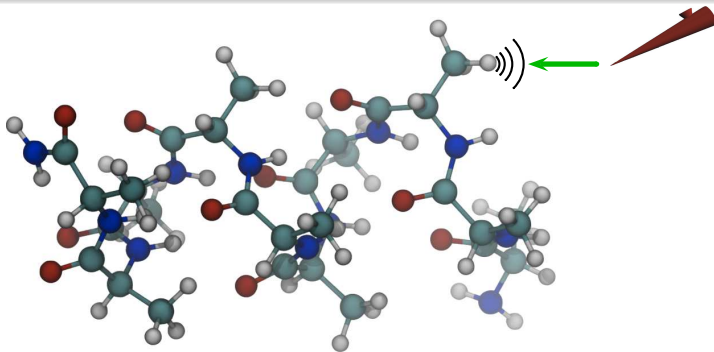
**Figure:** Outil de sélection amélioré

- Pointage d'une cible difficile

# Outils supplémentaires proposés

## Objectif

Faciliter le processus de sélection dans l'application VMD



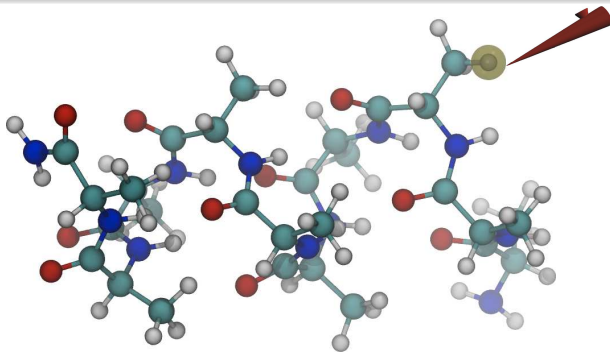
**Figure:** Outil de sélection amélioré

- Modèle haptique d'attraction sur les atomes

# Outils supplémentaires proposés

## Objectif

Faciliter le processus de sélection dans l'application VMD



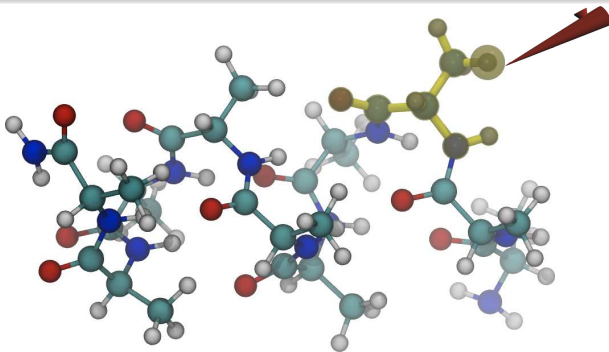
**Figure:** Outil de sélection amélioré

- Possibilité de pointer un atome. . .

# Outils supplémentaires proposés

## Objectif

Faciliter le processus de sélection dans l'application VMD



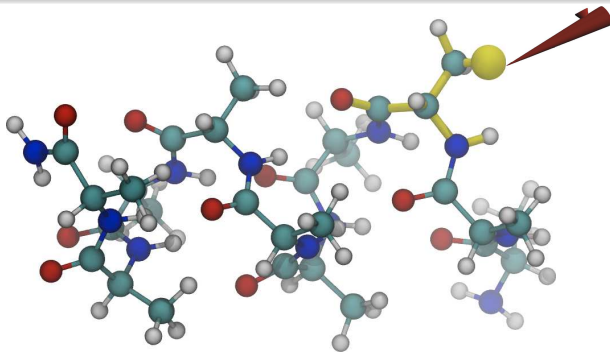
**Figure:** Outil de sélection amélioré

- ... ou un résidue (ou d'autres structures moléculaires)

# Outils supplémentaires proposés

## Objectif

Faciliter le processus de sélection dans l'application VMD

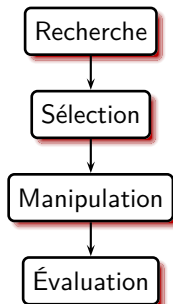


**Figure:** Outil de sélection amélioré

- Pour enfin le sélectionner



# Les étapes de l'étude

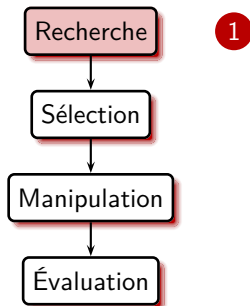


## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



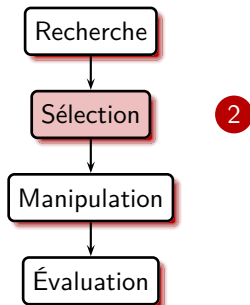
## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



## Description

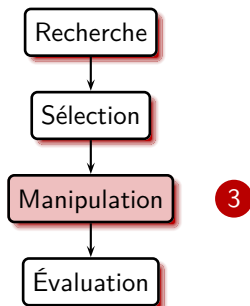
Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

**Sélection** Sélectionner une structure moléculaire (atome, résidue, ...)

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

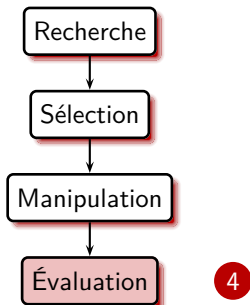
**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

**Sélection** Sélectionner une structure moléculaire (atome, résidue, ...)

**Manipulation** Déplacer ou déformer la molécule

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

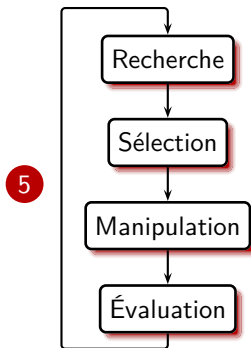
**Sélection** Sélectionner une structure moléculaire (atome, résidue, ...)

**Manipulation** Déplacer ou déformer la molécule

**Évaluation** Évaluer l'équilibre physico-chimique de la molécule

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

**Sélection** Sélectionner une structure moléculaire (atome, résidue, ...)

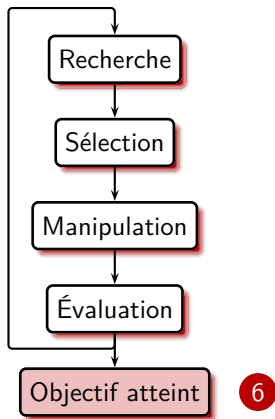
**Manipulation** Déplacer ou déformer la molécule

**Évaluation** Évaluer l'équilibre physico-chimique de la molécule

**Recommencer** Si l'évaluation n'est pas satisfaisante

**Figure:** Manipulation moléculaire

# Les étapes de l'étude



## Description

Basé sur les PCV de **Fuchs-2006**

**Recherche** Identifier une tâche élémentaire

**Sélection** Sélectionner une structure moléculaire (atome, résidue, ...)

**Manipulation** Déplacer ou déformer la molécule

**Évaluation** Évaluer l'équilibre physico-chimique de la molécule

**Recommencer** Si l'évaluation n'est pas satisfaisante

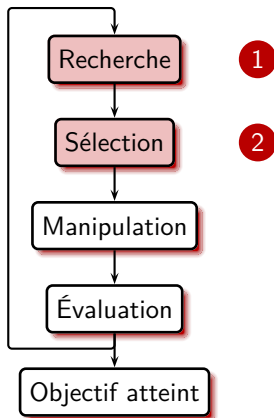
**Figure:** Manipulation moléculaire

# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
  - Étude 1 – Recherche collaborative de résidus
    - Objectifs
    - Protocole expérimental
    - Résultats
    - Synthèse
  - Étude 2 – Déformation collaborative de molécule
  - Étude 3 – Dynamique de groupe
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion et perspectives



# Les étapes de l'étude



**Figure:** Manipulation moléculaire

# Objectifs

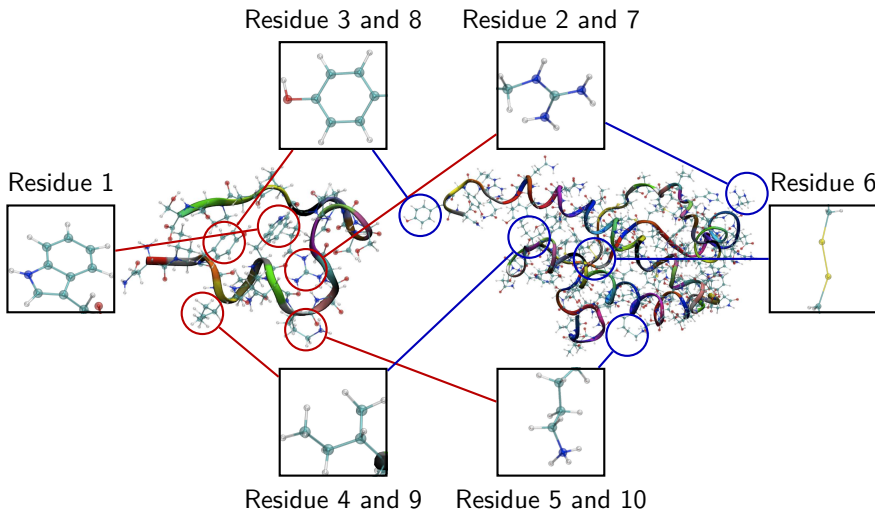
## Objectif principal

Étudier la contribution et les contraintes de la collaboration dans une tâche de recherche de structures moléculaires dans un environnement complexe

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances (individuel → collaboratif)
  - Comparer les performances en collaboration et seul
  - Valider le contexte de travail (tâche complexe)
- 2 Identifier les stratégies de travail
  - Identifier et caractériser les stratégies de travail
  - Identifier les conflits de coordination et de communication
- 3 Utilisabilité de la plate-forme
  - Évaluer les outils proposés
  - Identifier les faiblesses

# La tâche



**Figure:** Répartitions des *residues* sur les molécules (TRP-Cage et Prion)

# Protocole

## Sujets

- 24 participants
- Différents niveaux d'expertise
- Étude intra-population

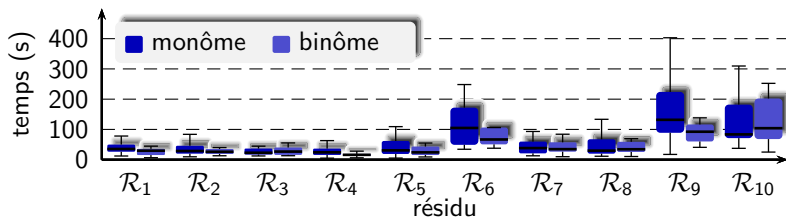
## Variables

Nombre de participants un (24 sujets) ou deux (12 couples)

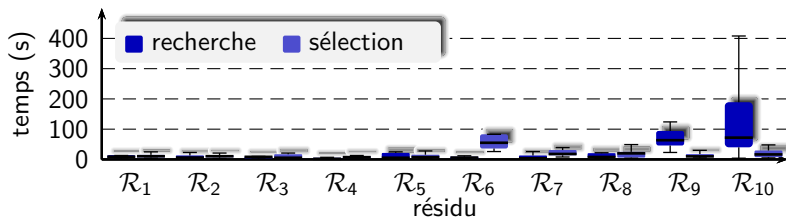
Taille de la molécule une petite (TRP-Cage) et une grande (Prion)

Caractéristiques du *residue* Forme, nature, position, similarités. . .

# Amélioration des performances en collaboration

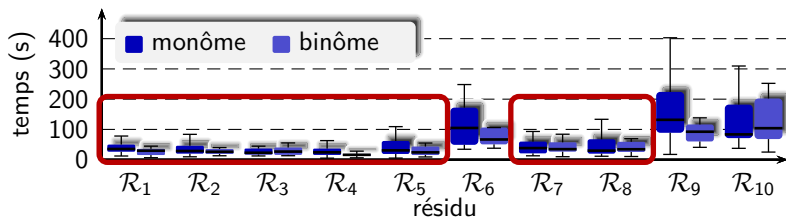


**Figure:** Temps de réalisation de la tâche

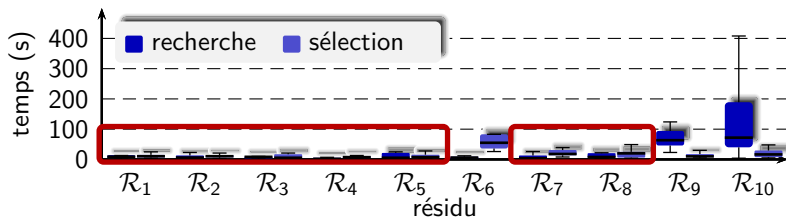


**Figure:** Temps de recherche et de sélection comparés

# Amélioration des performances en collaboration

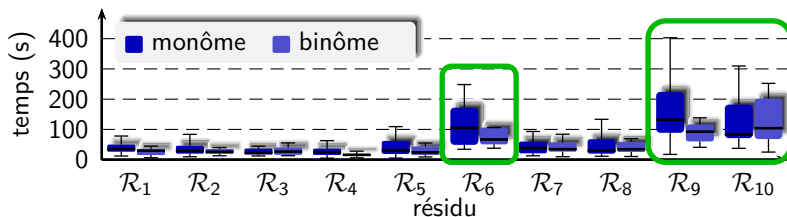


**Figure:** Temps de réalisation de la tâche

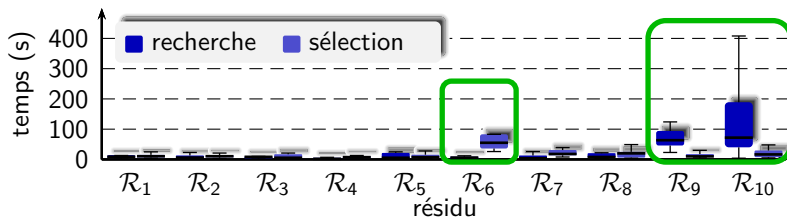


**Figure:** Temps de recherche et de sélection comparés

# Amélioration des performances en collaboration

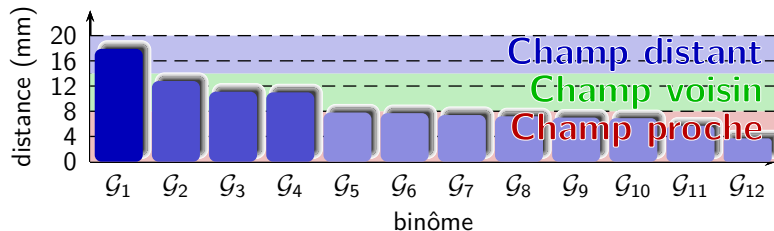


**Figure:** Temps de réalisation de la tâche

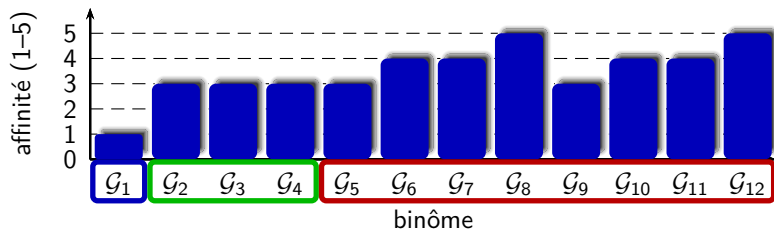


**Figure:** Temps de recherche et de sélection comparés

# Stratégies de travail



**Figure:** Distance moyenne entre le curseur des sujets



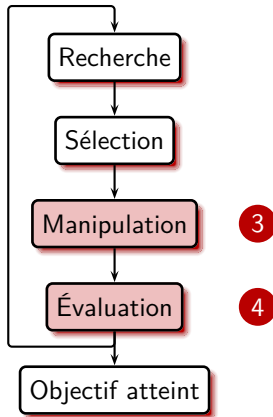
**Figure:** Affinité entre les sujets pour chaque binômes



# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
  - Étude 1 – Recherche collaborative de résidus
  - Étude 2 – Déformation collaborative de molécule
    - Objectifs
    - Protocole expérimental
    - Résultats
    - Synthèse
  - Étude 3 – Dynamique de groupe
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion et perspectives

# Les étapes de l'étude



**Figure:** Manipulation moléculaire

# Objectifs

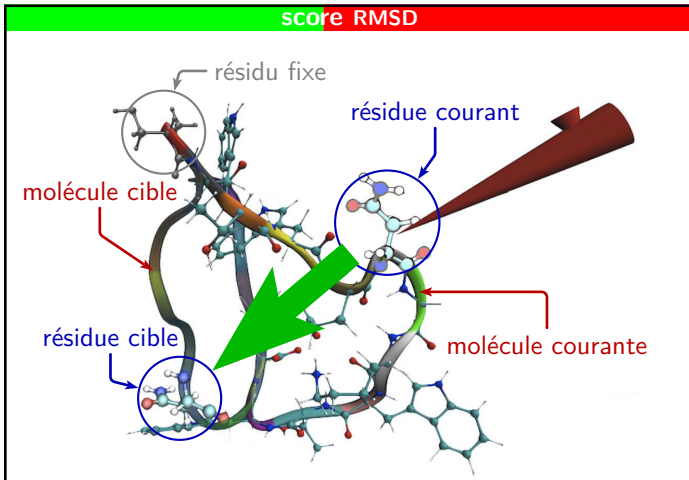
## Objectif principal

Quantifier et qualifier les conflits de coordination en fonction de la complexité de la tâche

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances (individuel → collaboration)
  - Coordination étroitement couplée
- 2 La complexité de la tâche influence différemment les performances individuelles et collaboratives
  - Tâches de difficulté variable
  - Identifier les tâches nécessitant une collaboration
- 3 Évaluation du travail collaboratif par les sujets
  - Questionnaire pour valider les améliorations de la plate-forme
  - Évaluation de la configuration de travail collaboratif

# La tâche



**Figure:** Tâche de déformation

# Protocole

## Sujets

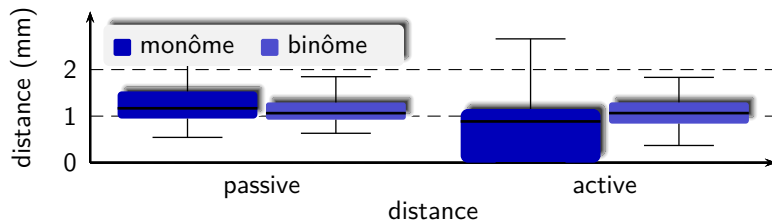
- 36 participants (12 couples et 12 sujets seuls)
- Sujets avec différents niveaux d'expertise
- Couples choisis pour leurs affinités
- Étude inter-population

## Variables

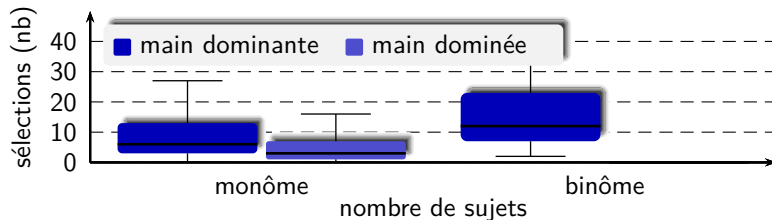
Complexité de la molécule 2 molécules (1 petite et 1 grande)

Outil de déformation 2 configuration de déformation (*atom* et *residue*)

# Amélioration des performances

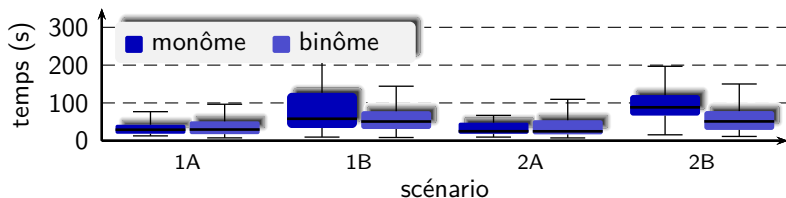


**Figure:** Distances passive et active



**Figure:** Nombre de sélections par main dominante/dominée

# Influence de la complexité de la tâche



**Figure:** Temps de réalisation des scénarios

Difficulté	Description	Exemple
Simple	<ul style="list-style-type: none"> <li>– 1 outil est nécessaire</li> <li>– 1 manipulation</li> </ul>	Tâche 1a
Avancé	<ul style="list-style-type: none"> <li>– 1 outil est suffisant mais 2 sont préférables</li> <li>– 2 manipulations peuvent être coordonnées</li> </ul>	Tâche 2a, 2b
Expert	<ul style="list-style-type: none"> <li>– 2 outils sont nécessaires</li> <li>– 2 manipulations <b>doivent</b> être coordonnées</li> </ul>	Tâche 1b

**Table:** Classification des tâches

# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
  - Étude 1 – Recherche collaborative de résidus
  - Étude 2 – Déformation collaborative de molécule
  - Étude 3 – Dynamique de groupe
    - Travaux existants
    - Objectifs
    - Protocole expérimental
    - Résultats
    - Synthèse
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion et perspectives



# Travaux existants

## Dynamique de groupe

- facilitation sociale [**Ringelmann-1913**]
- paresse sociale [**Roethlisberger-1939**]
- brainstorming [**Osborn-1963, Tuckman-1965**]

## Problématique

- Aucune étude de dynamique de groupe sur des tâches avec une interaction étroitement couplée

# Objectifs

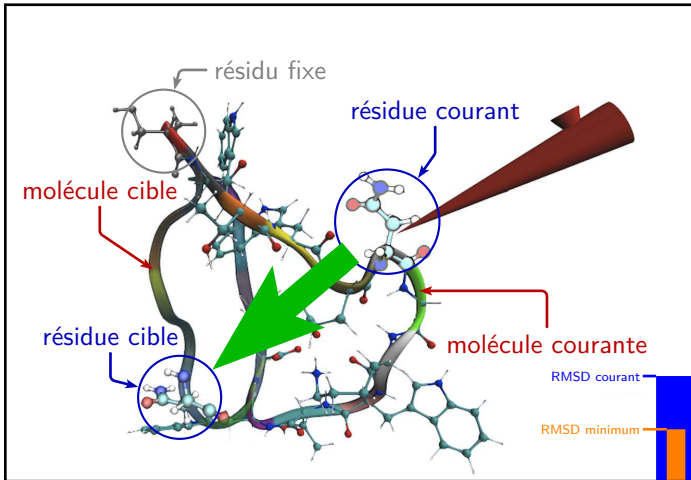
## Objectif principal

Observer la dynamique de groupe lors d'une coordination étroitement couplée

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances en quadrinôme
  - Variation de la taille d'un groupe
  - Quantification des conflits dans des groupes
- 2 Émergence d'un meneur
  - Observer la dynamique des groupes
  - Caractériser les différents rôles
- 3 Le *brainstorming* améliore les performances
  - Période pour organiser le travail
  - Limiter les conflits *a priori*

# La tâche



**Figure:** Tâche de déformation

# Protocole

## Sujets

- 16 participants
- Sujets avec expérience sur la plate-forme
- Étude intra-population

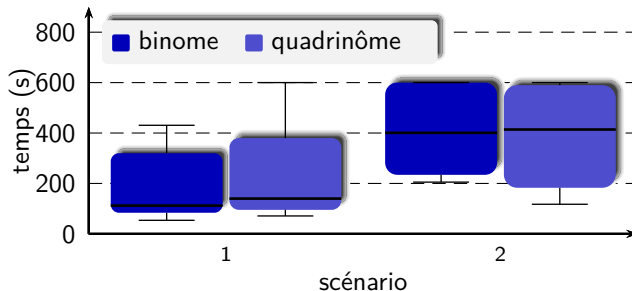
## Variables

Nombre de participants 8 couples et 4 groupes

Tâche différente 2 molécules (1 faiblement et 1 fortement couplée)

Stratégie Possibilité ou non d'établir une stratégie

# Analyse

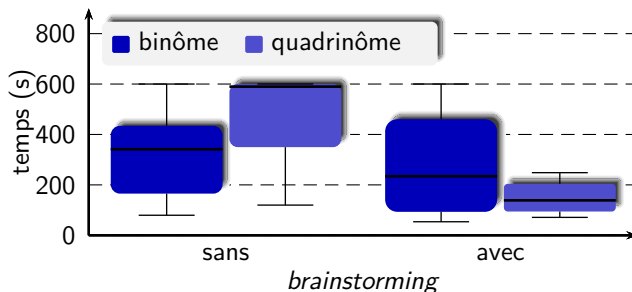


**Figure:** Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

## Travail collaboratif

- Pas de différences entre couples et groupes
- Conflits très importants dans les groupes

# Analyse



**Figure:** Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

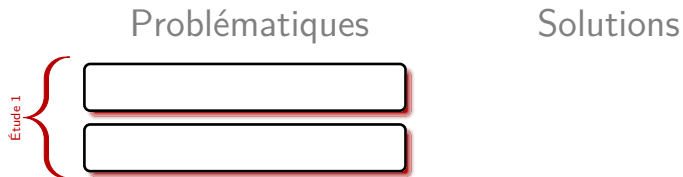
## Pré-élaboration d'une stratégie

- La pré-élaboration d'une stratégie est nécessaire pour un groupe
- L'organisation dans un couple n'apporte rien
- Sans stratégie, la perte d'efficacité est due aux conflits

# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Plateforme de manipulation moléculaire Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
- 4 Aide au travail collaboratif
  - Étude 4 – Assistance haptique et stratégie de travail
    - Synthèse des études effectuées
    - Objectifs
    - Protocole expérimental
    - Résultats
    - Synthèse
- 5 Conclusion et perspectives

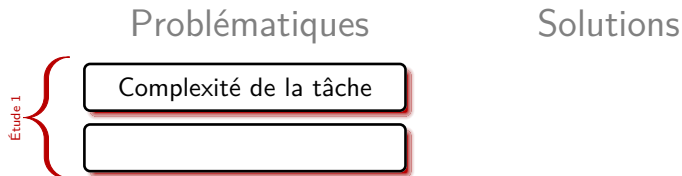
# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

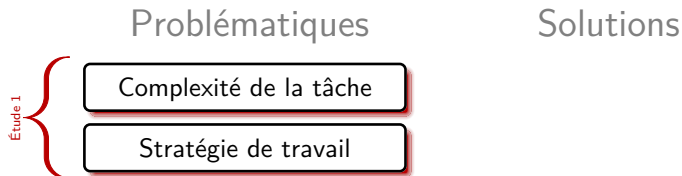


# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



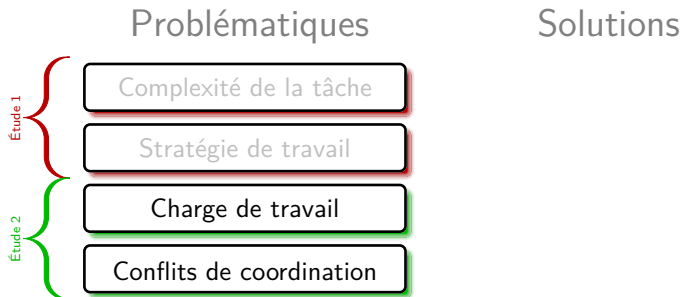
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



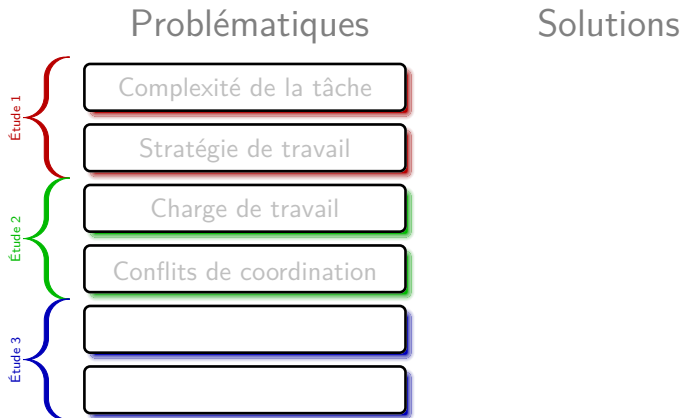
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



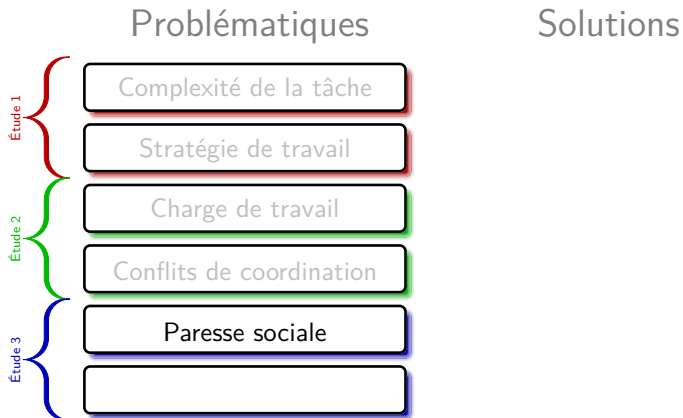
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



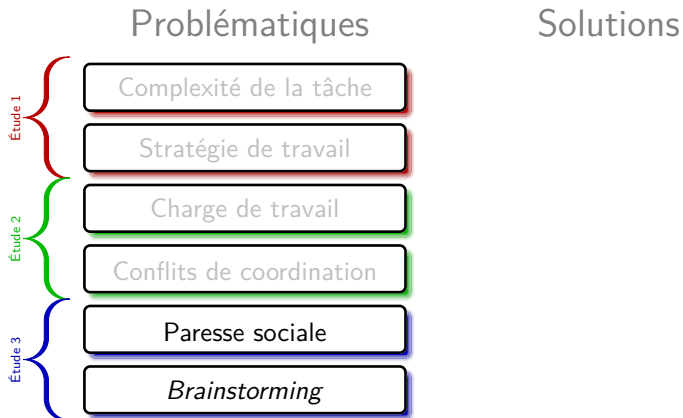
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

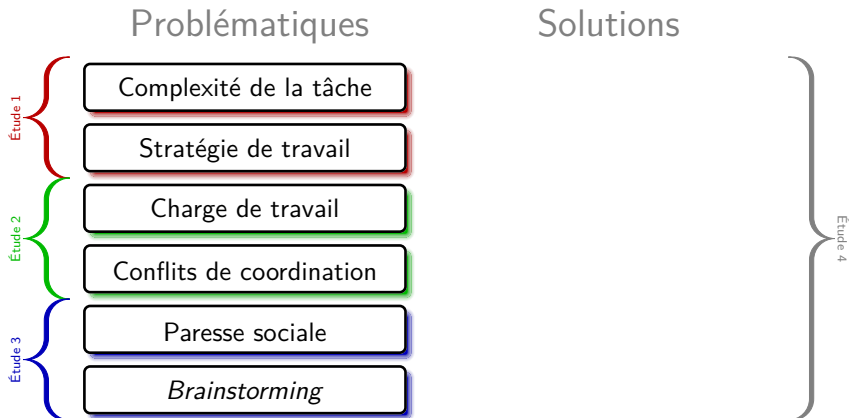
# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

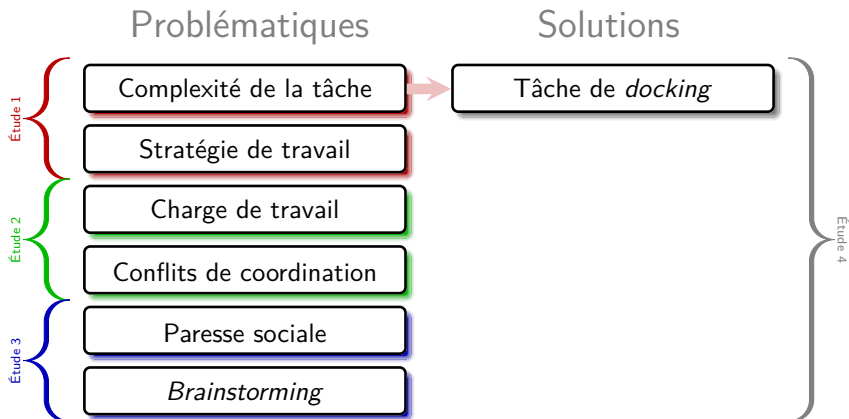


# Synthèse des études effectuées et solutions



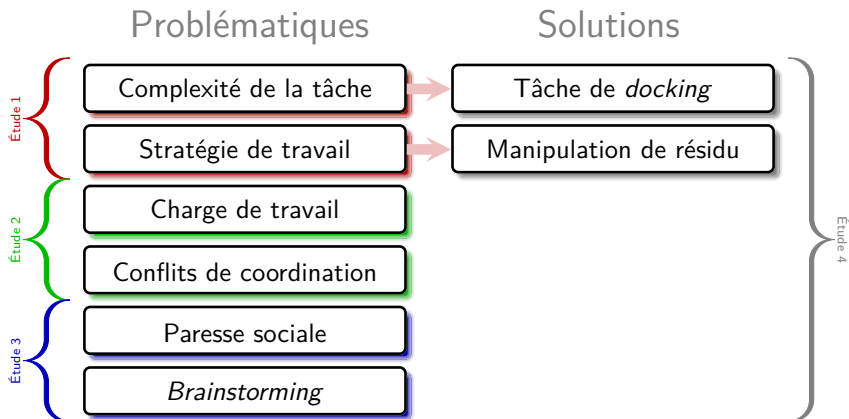
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



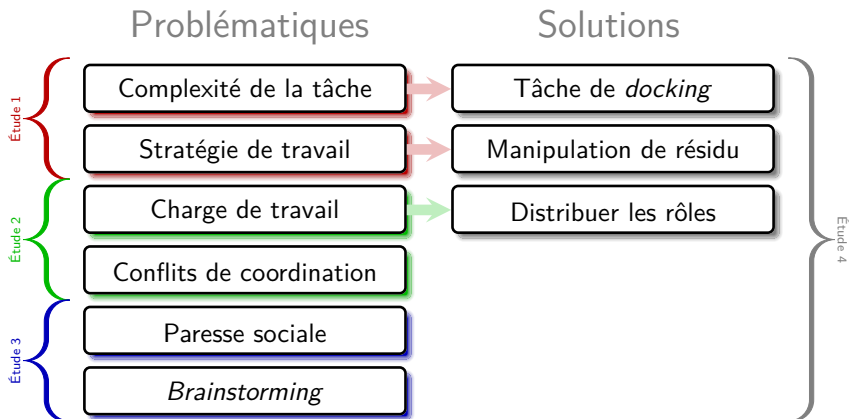
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



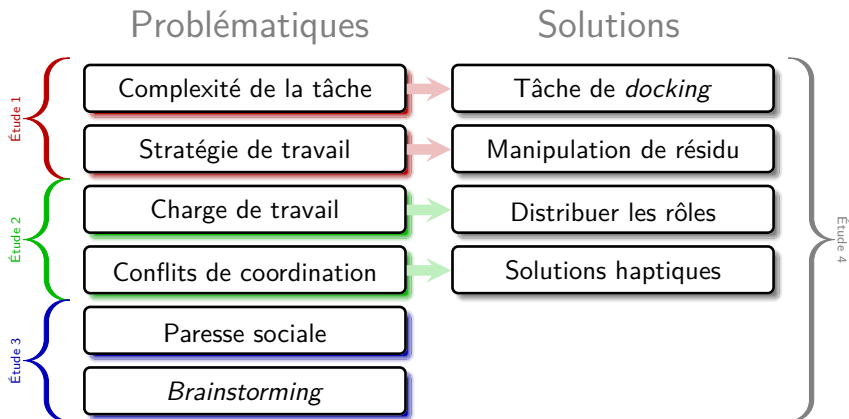
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



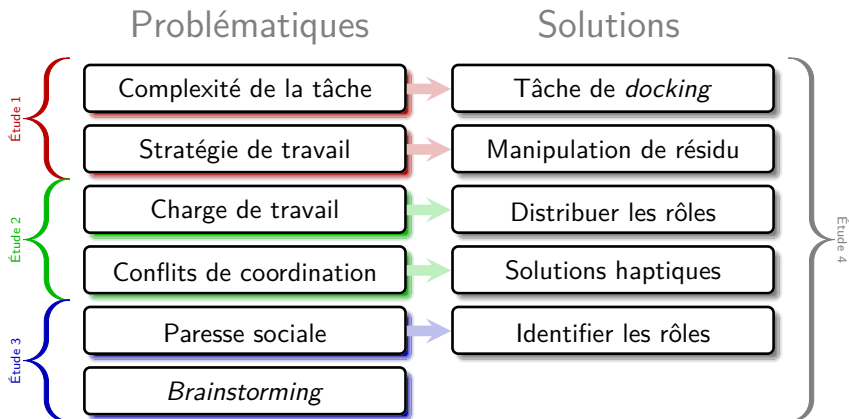
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



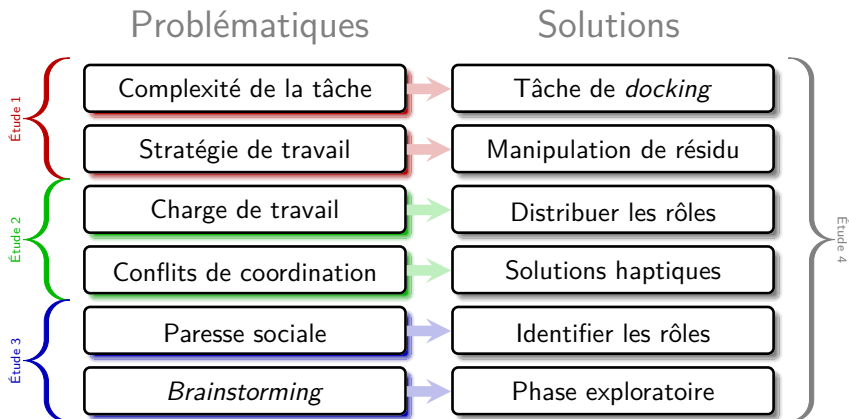
**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

# Objectifs

## Objectif principal

Proposer et évaluer des outils haptiques pour assister la coordination

## Hypothèses

- 1 Performances améliorées par l'assistance haptique
  - Rapidité d'exécution
  - Qualité de la solution atteinte
- 2 L'assistance haptique améliore la communication
  - Temps de réaction réduits
  - Meilleure compréhension des intentions de chacun
- 3 Les experts sont satisfaits des outils proposés
  - Évaluer les outils proposés
  - Identifier les faiblesses



# Protocole

## Sujets

- 24 participants
- Sujets avec expérience sur la plate-forme
- Étude intra-population

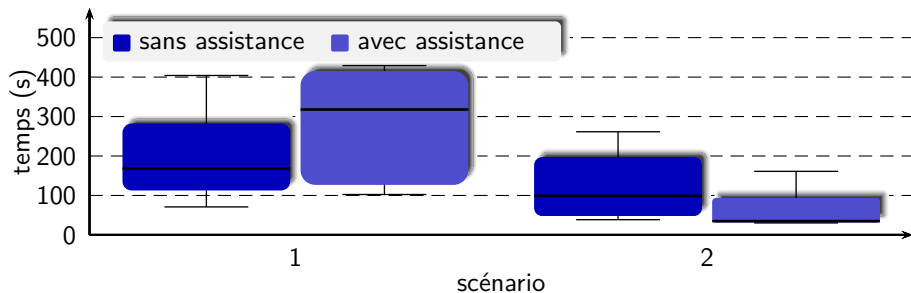
## Variables

Nombre de participants 8 trinômes

Tâche différente 2 molécules (1 déformation et 1 docking moléculaire)

Assistance Avec ou sans assistance haptique

# Analyse

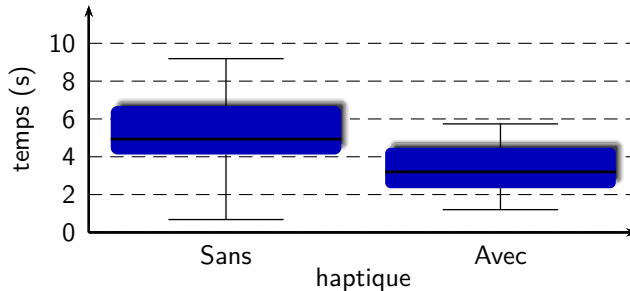


**Figure:** Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario

## Assistance haptique

- Pas de différences sur les tâches simples
- Apport important sur les tâches complexes

# Analyse



**Figure:** Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique

## Communication haptique

- Amélioration du temps de réaction
- Communication haptique et non verbale

# Conclusion

## Travail collaboratif

- Adapté pour l'appréhension de tâches très complexes
- Nécessité d'améliorer les canaux de communication

## Communication haptique

- Remplace la communication verbale dans certains cas
- Plus efficace et plus rapide

## Plateforme Shaddock

- Plateforme validée
- Des améliorations sont encore nécessaires

# Perspectives

## Travail collaboratif

- Collaboration distante
- Collaboration multi-experts
- Apprentissage en collaboration

## Expérimenter le travail collaboratif

- Comment mesurer les conflits de coordination et de communication ?
- Comment définir un protocole expérimental pour le collaboratif ?

# Questions

Merci pour votre attention

# Références