

# Collaboration haptique étroitement couplée pour la déformation moléculaire interactive

---

Jean SIMARD

Université de PARIS-Sud

CNRS-LIMSI

---

1<sup>er</sup> février 2012

images/logo-ups.eps

images/logo-limsi.eps

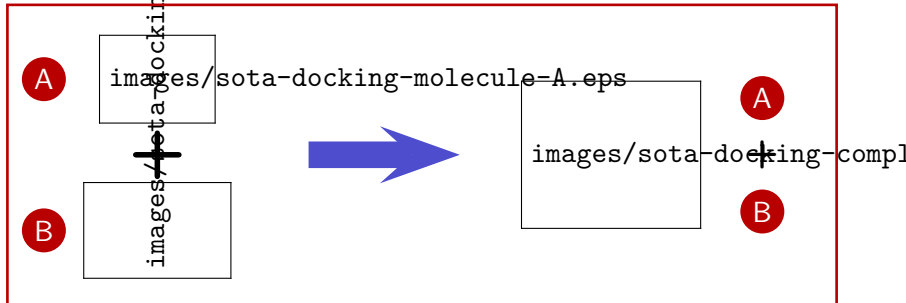
# Sommaire

- 1 Introduction
- 2 Shaddock
- 3 Étude du travail collaboratif
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion

# Définition

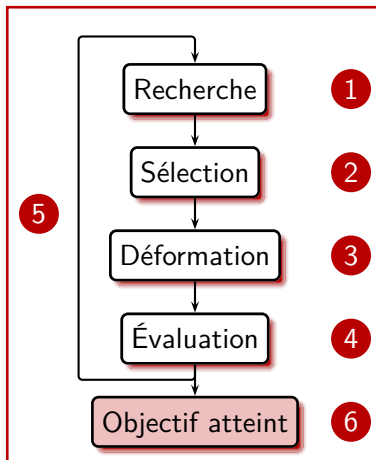
## Docking moléculaire

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



**Figure:** Illustration de l'amarrage moléculaire

# Déroulement

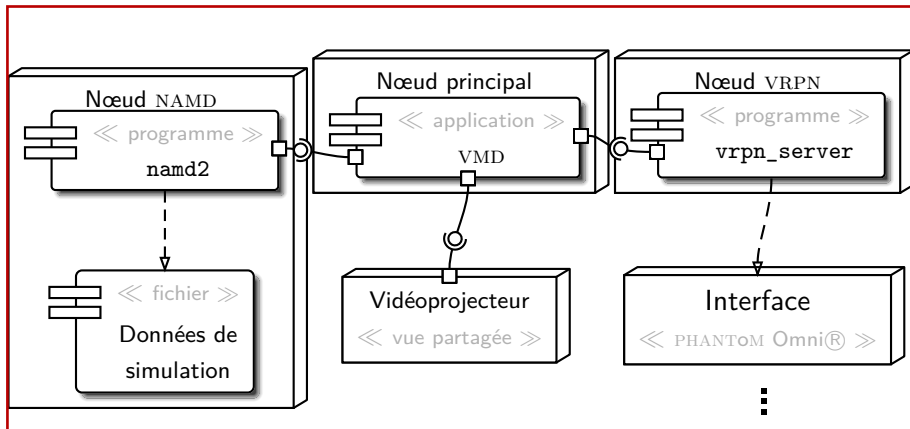


**Figure:** Processus de déformation moléculaire

# Sommaire

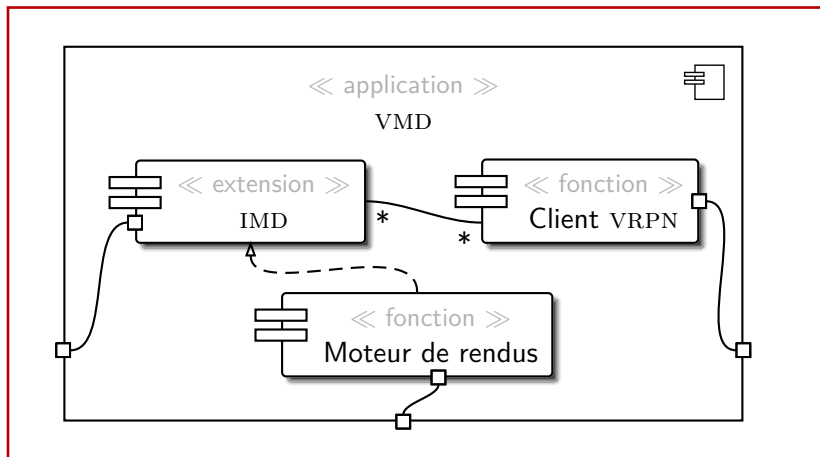
- 1 Introduction
- 2 Shaddock
  - Structure globale
  - Structure du module principal
- 3 Étude du travail collaboratif
- 4 Aide au travail collaboratif
- 5 Conclusion

# Shaddock



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

## VMD



**Figure:** Diagramme de composant UML du nœud VMD

# Sommaire

## 1 Introduction

## 2 Shaddock

## 3 Étude du travail collaboratif

### ■ Étude 1 – Recherche collaborative

- Travaux existants
- Protocole expérimental
- Objectifs
- Résultats
- Synthèse

### ■ Étude 2 – Déformation collaborative

### ■ Étude 3 – Dynamique de groupe

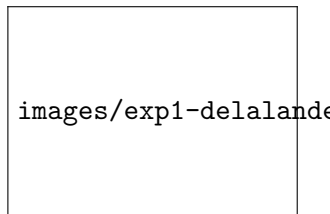
## 4 Aide au travail collaboratif



# Travaux existants

## Sélection moléculaire

- Logiciels de visualisation  
[**Humphrey-1996, Delano-2002**]
- Solution de réalité virtuelle [**Polys-2004**]
- Manipulation moléculaire interactive  
[**Delalande-2010**]

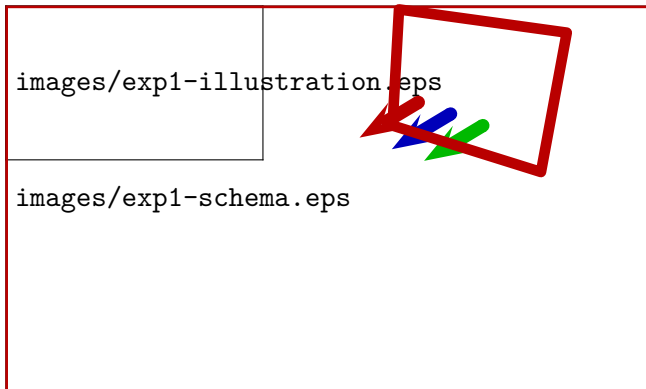


## Problématique

- Pas d'exploration collaborative dans un environnement moléculaire temps-réel

**Figure:** Plateforme  
FVNANO

# La plate-forme

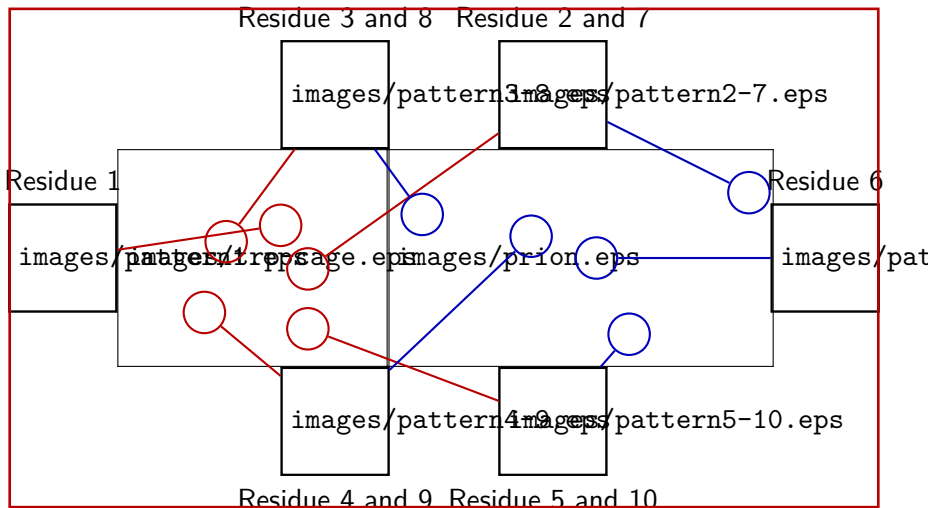


**Figure:** Illustration de la plate-forme expérimentale

■ Configuration **colocalisée** et **synchrone**

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

# 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...

# Objectifs

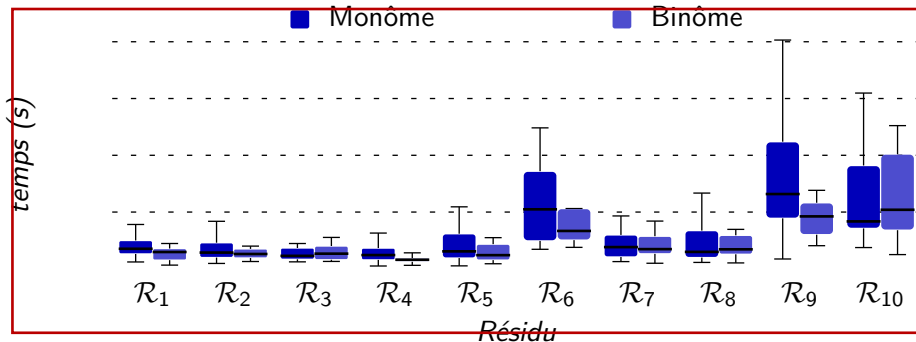
## Objectif principal

Observer les contraintes liées au travail collaboratif et souligner les avantages

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances en binôme
  - Comparer les performances en collaboration et seul
  - Valider le contexte de travail (tâche complexe)
- 2 Stratégies de travail dépendantes de la personnalité
  - Identifier et caractériser les stratégies de travail
  - Identifier les conflits de coordination et de communication
- 3 Bonne utilisabilité de la plate-forme
  - Évaluer les outils proposés
  - Identifier les faiblesses

# Analyse

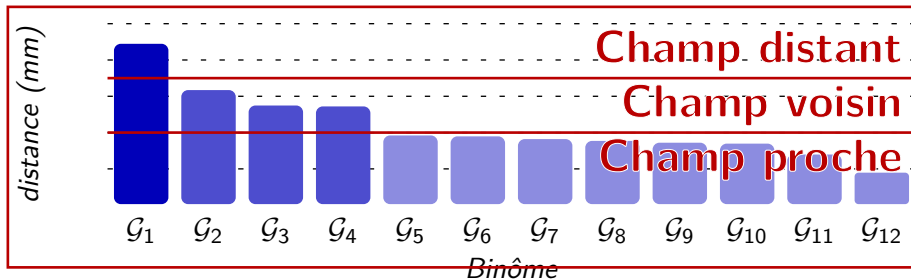


**Figure:** Temps d'exécution entre les sujets seuls et les couples

## Travail collaboratif

- Le travail collaboratif confirme son intérêt pour les tâches complexes

# Analyse



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

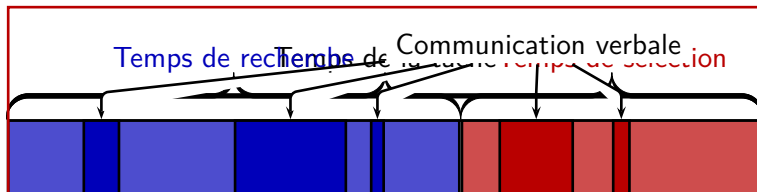
## Les groupes

- Stratégies de travail différentes
- Dépendance de la personnalité
- Des conflits d'interaction (dans les *mêmes régions*)

# Analyse

## La communication verbale

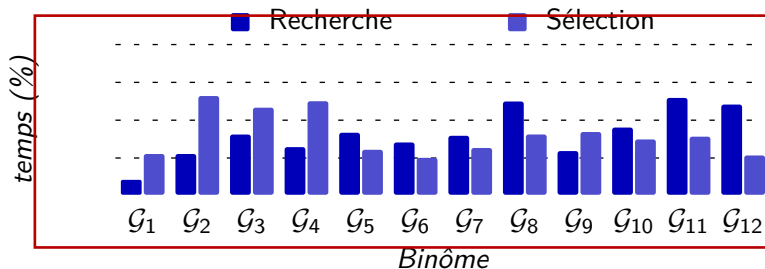
- Séparation entre temps de recherche et de sélection
- Mesure du temps de communication verbale



**Figure:** Schéma de la communication verbale



# Analyse



**Figure:** Temps de communication

## Travail collaboratif

- La communication prend une place importante
- Des conflits de communication (incompréhension, prise de parole. . .)

# Sommaire

## 1 Introduction

## 2 Shaddock

## 3 Étude du travail collaboratif

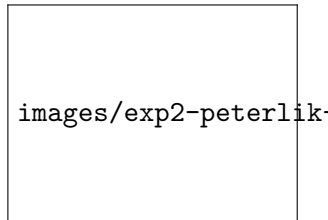
- Étude 1 – Recherche collaborative
- Étude 2 – Déformation collaborative
  - Travaux existants
  - Protocole expérimental
  - Objectifs
  - Résultats
  - Synthèse
- Étude 3 – Dynamique de groupe

## 4 Aide au travail collaboratif

# Travaux existants

## Déformation moléculaire

- Tissus cellulaires [**Peterlik-2009**]
- Sculpture sur glaise [**Muller-2006**, **Gorlatch-2009**]

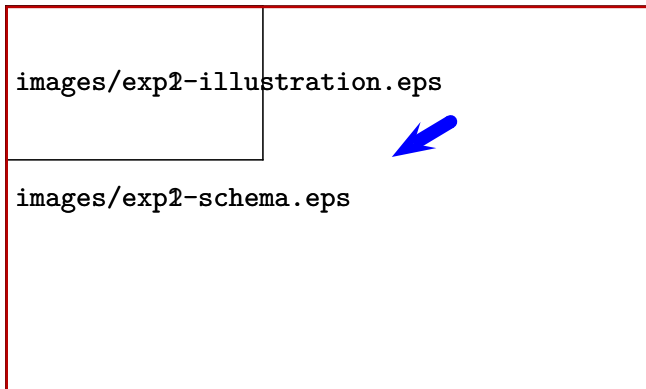


**Figure:** Déformation de tissus cellulaires

## Problématique

- Pas de déformation collaborative dans un environnement moléculaire temps-réel

# La plate-forme

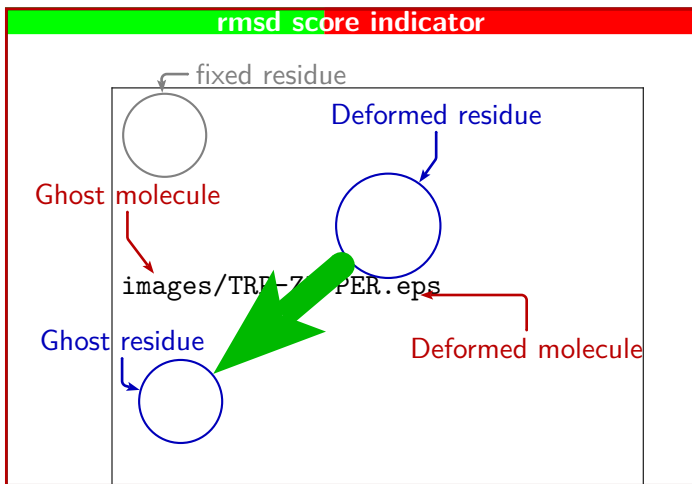


**Figure:** Illustration de la plate-forme expérimentale

- Utilisation de la première plate-forme modifiée

- Outil pour tourner la molécule (SpaceTraveler de 3dconnexion®)

# La tâche



**Figure:** La molécule TRP-Zipper déformée

# 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*)

# Objectifs

## Objectif principal

Proposer une tâche suffisamment complexe pour quantifier et qualifier les conflits de coordination

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances en binôme pour la déformation
  - Coordination étroitement couplée
- 2 Binômes plus performants sur les tâches complexes
  - 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

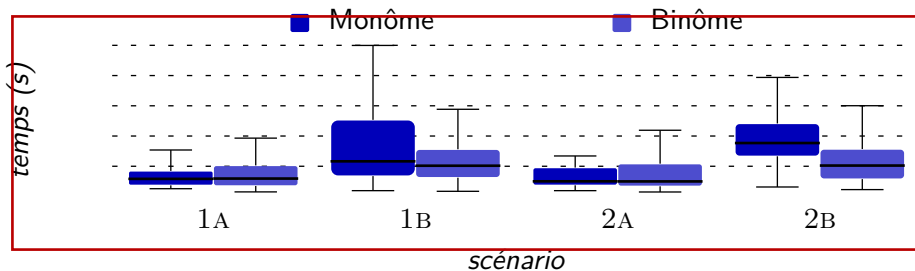
# Analyse

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 nécessaire mais 2 outils est mieux</li><li>– 2 manipulations peuvent être simultanées</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 simultanées</li></ul>	Tâche 1b

**Table:** Classification des tâches



# Analyse

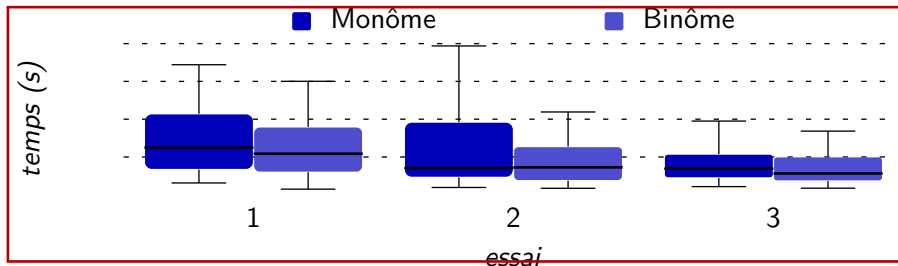


**Figure:** Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets

## Travail collaboratif

- Les conflits détériorent l'efficacité de la collaboration
- Tâches fortement couplées exclusives pour le travail collaboratif

# Analyse



**Figure:** Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

## Apprentissage

- Apprentissage plus rapide en couple
- Manque de donnée pour une conclusion définitive

# Sommaire

## 1 Introduction

## 2 Shaddock

## 3 Étude du travail collaboratif

- Étude 1 – Recherche collaborative
- Étude 2 – Déformation collaborative
- Étude 3 – Dynamique de groupe
  - Travaux existants
  - Protocole expérimental
  - Objectifs
  - Résultats
  - Synthèse

## 4 Aide au travail collaboratif

# Travaux existants

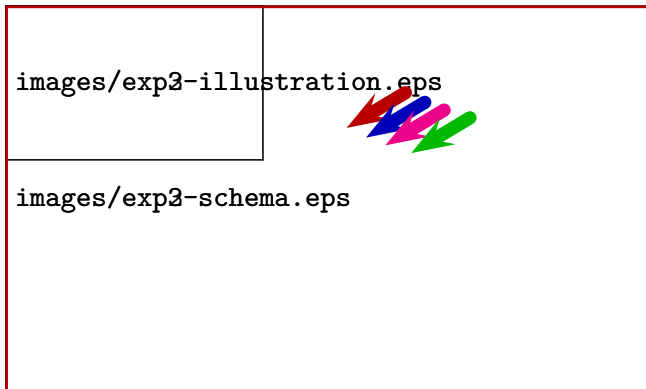
## Dynamique de groupe

- 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

# La plate-forme

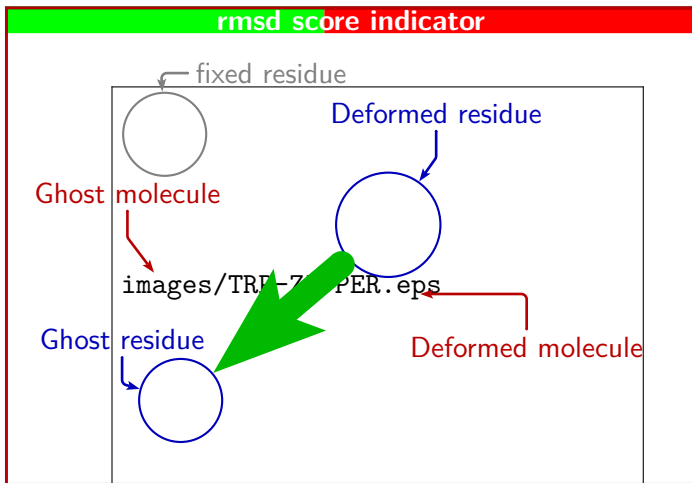


**Figure:** Illustration de la plate-forme expérimentale

- Utilisation de la seconde plate-forme modifiée

- Outil de déformation de la molécule (Omni de SensAble®)

# La tâche



**Figure:** La molécule TRP-Zipper déformée

# 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

# Objectifs

## Objectif principal

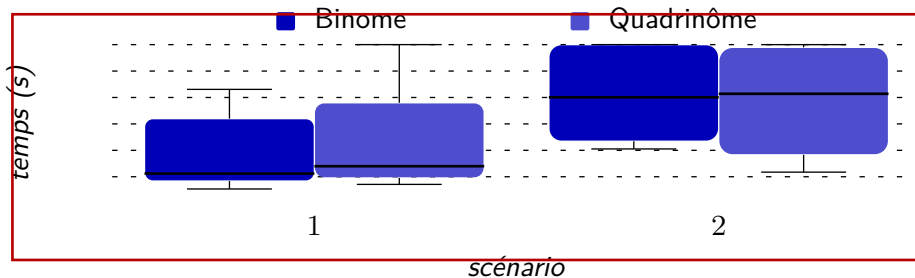
Observer la dynamique de groupe lors d'une coordination étroitement couplée

## 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*



# Analyse

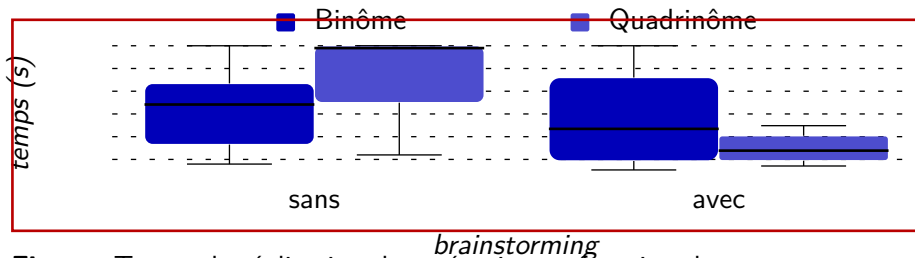


**Figure:** Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

## 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 Shaddock

## 3 Étude du travail collaboratif

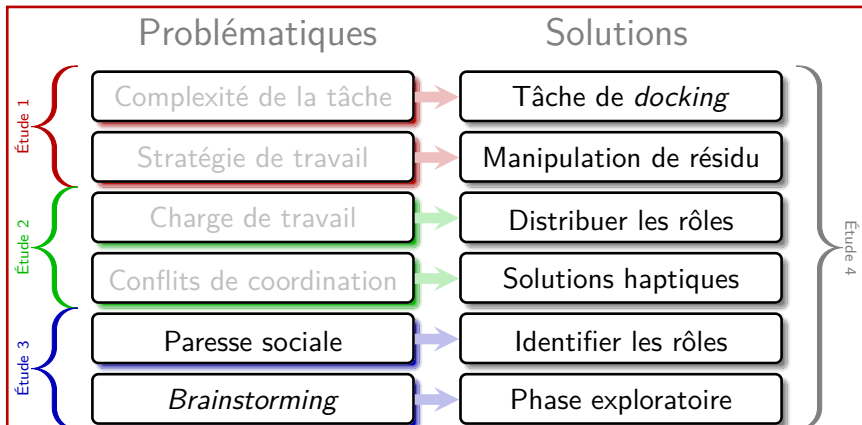
## 4 Aide au travail collaboratif

### ■ Étude 4 – Assistance haptique et stratégie de travail

- Synthèse des études effectuées
- Objectifs
- Protocole expérimental
- Résultats
- Synthèse

## 5 Conclusion

# Synthèse des études effectuées et solutions



**Figure:** Synthèse des problématiques

# Objectifs

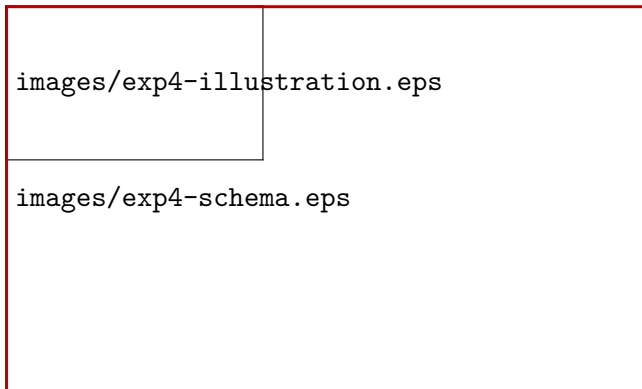
## Objectif principal

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

# La plate-forme



**Figure:** Illustration de la plate-forme expérimentale

- Outil de déformation de la molécule (Omni de SensAble®)
- Outil de désignation

# Protocole

## Sujets

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

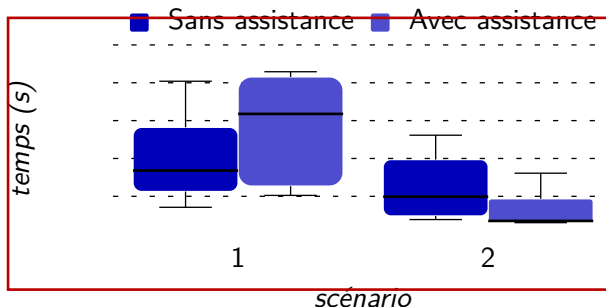
## Variables

Nombre de participants 8 trinômes

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

Assistance Avec ou sans assistance haptique

# Analyse



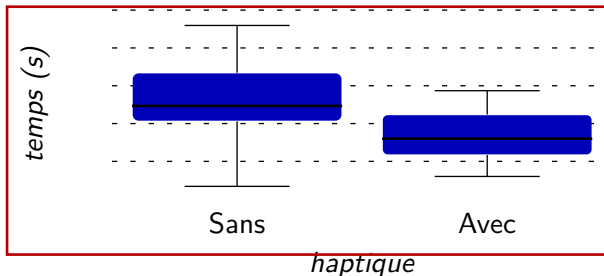
**Figure:** Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario

## 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

## Communication

- Comment mesurer les conflits de coordination et de communication ?

# Questions

Merci pour votre attention

# Références