

Thèse en Informatique

---

Jean SIMARD

# Interactions haptiques collaboratives pour la manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

Thèse soutenue le 1<sup>er</sup> 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
<b>I Le sujet</b>	<b>1</b>
1 Introduction	3
<b>II Étude du travail collaboratif</b>	<b>5</b>
<b>2 La recherche collaborative</b>	<b>7</b>
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
<b>3 La manipulation collaborative</b>	<b>13</b>

## 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*<sup>1</sup>. 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).

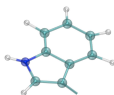

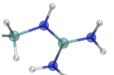
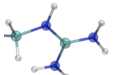
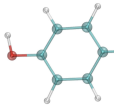
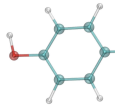
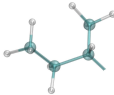
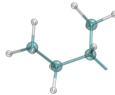


**Couleurs** Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l'oxygène, blanc pour l'hydrogène, *etc.*). Les atomes qui sont rares seront donc rapidement trouvés grâce à leur couleur différente. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbones) seront plus difficiles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

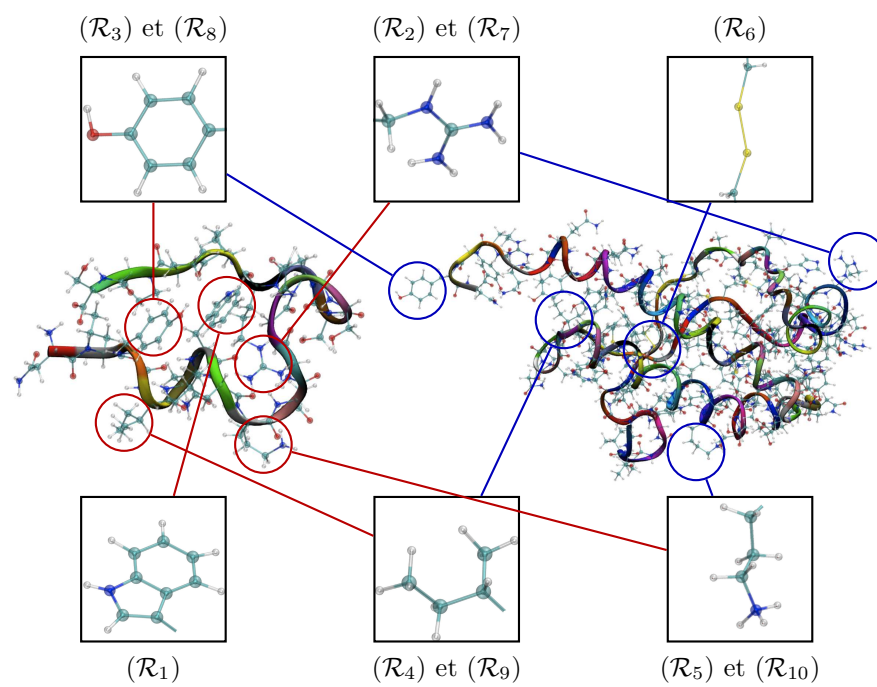
**Table 2.1** – Liste des résidus recherchés**(a)** Résidus sur la molécule TRP-CAGE**(b)** Résidus sur la molécule Prion

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. 7

**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*. 7, 8

**variable intra-population**

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 7, 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