

Collaboration haptique étroitement couplée pour la déformation moléculaire interactive

Jean SIMARD

Université de PARIS-Sud

CNRS-LIMSI

1^{er} 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.

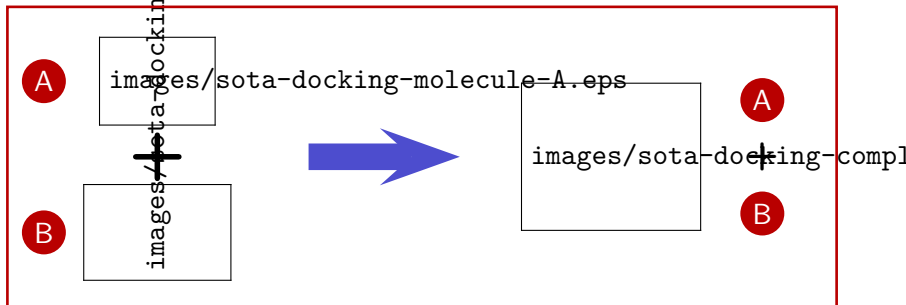


Figure: Illustration de l'amarrage moléculaire

Déroulement

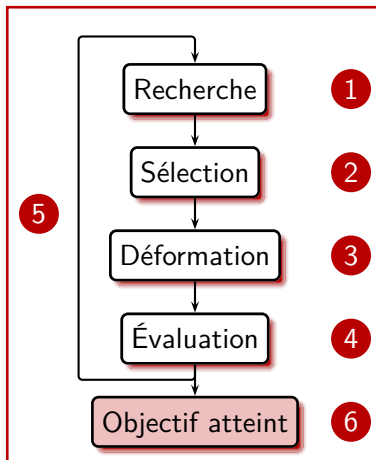


Figure: Processus de déformation moléculaire

Shaddock

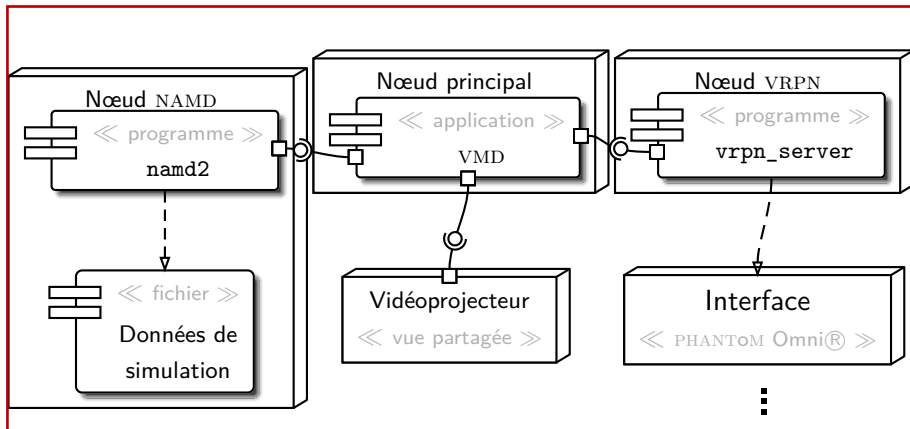


Figure: Diagramme de déploiement UML de la plateforme Shaddock

VMD

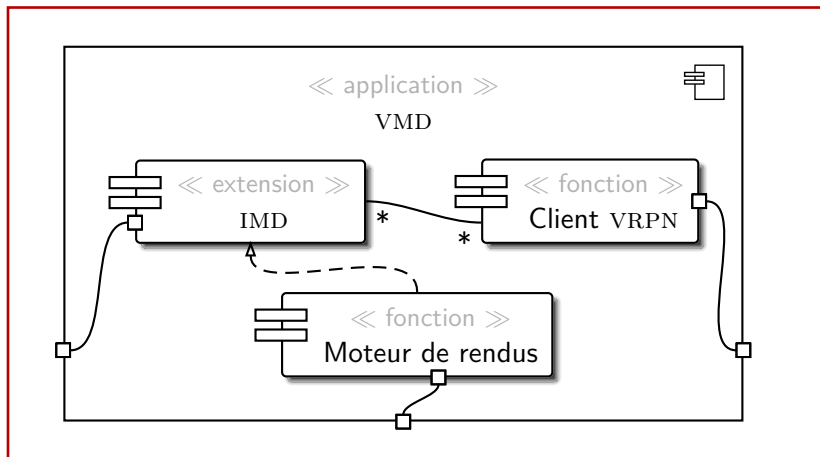
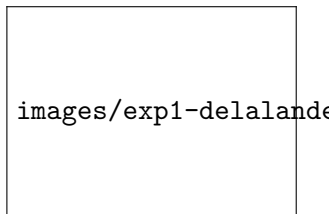


Figure: Diagramme de composant UML du nœud VMD

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

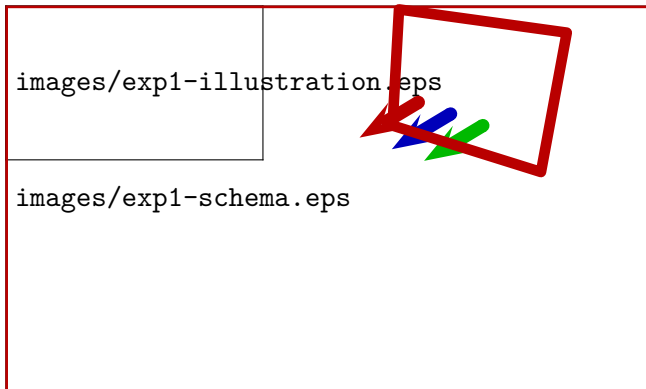


Figure: Illustration de la plate-forme expérimentale

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

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

La tâche

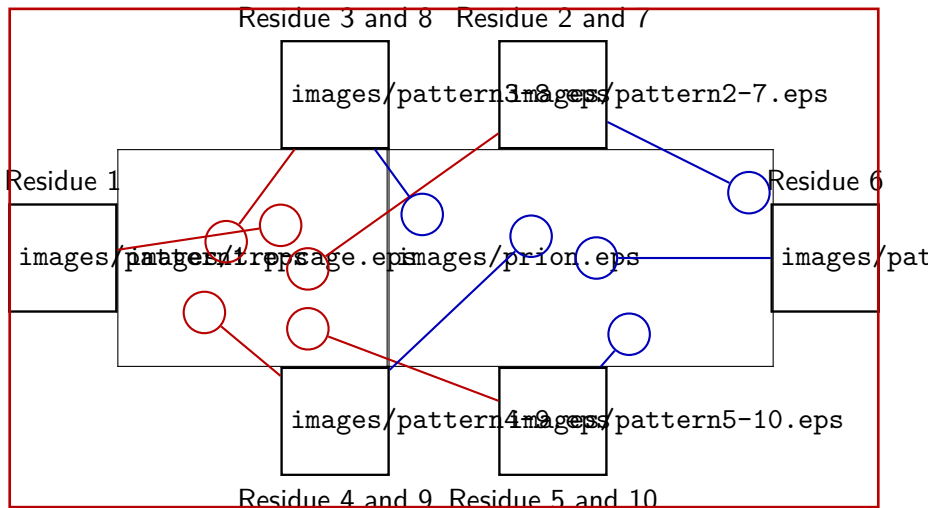


Figure: Répartitions des *residues* sur les molécules (TRP-Cage et Prion)

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

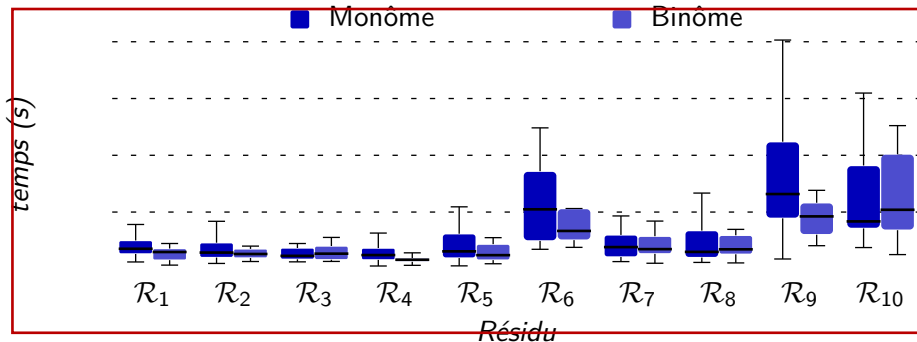


Figure: Temps d'exécution entre les sujets seuls et les couples

Travail collaboratif

- Le travail collaboratif confirme son intérêt pour les tâches complexes

Analyse

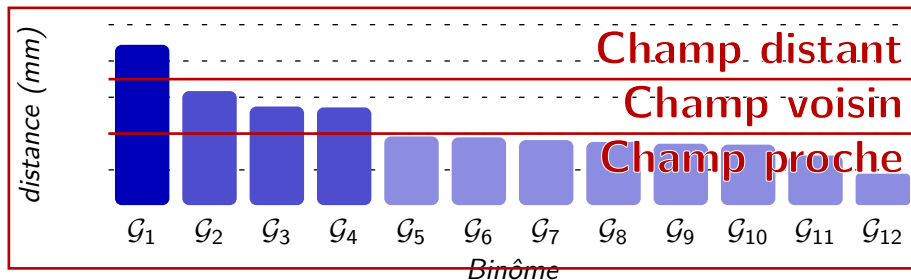


Figure: Distance moyenne entre le curseur des sujets

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

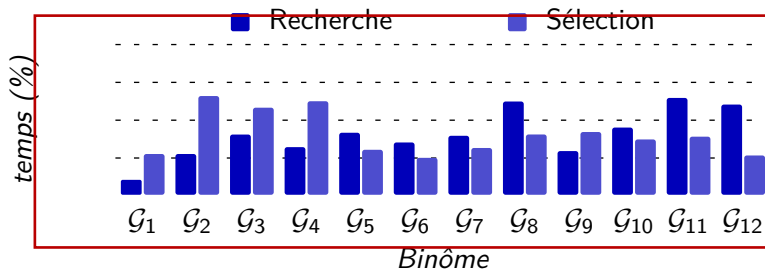


Figure: Temps de communication

Travail collaboratif

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

Travaux existants

Déformation moléculaire

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

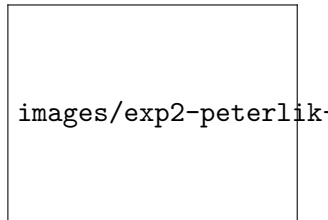


Figure: Déformation de tissus cellulaires

Problématique

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

La plate-forme

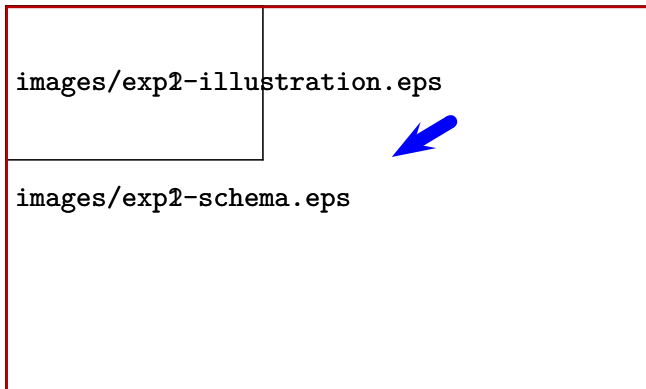


Figure: Illustration de la plate-forme expérimentale

- Utilisation de la première plate-forme modifiée

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

La tâche

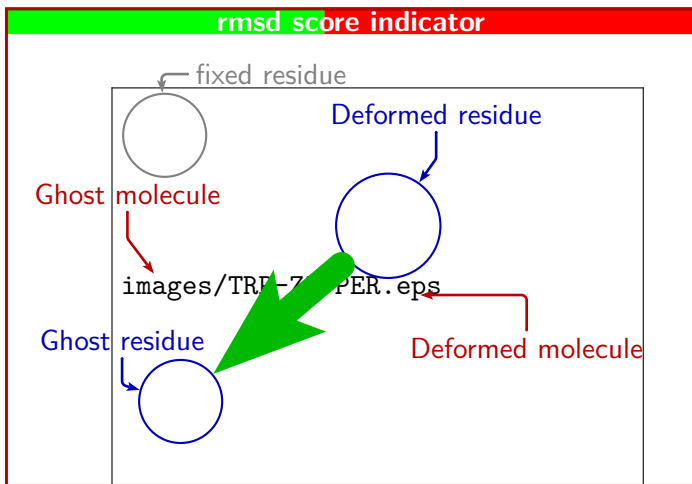


Figure: La molécule TRP-Zipper déformée

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">– 1 outil est nécessaire– 1 manipulation	Tâche 1a
Avancé	<ul style="list-style-type: none">– 1 outil est nécessaire mais 2 outils est mieux– 2 manipulations peuvent être simultanées	Tâche 2a, 2b
Expert	<ul style="list-style-type: none">– 2 outils sont nécessaires– 2 manipulations doivent être simultanées	Tâche 1b

Table: Classification des tâches

Analyse

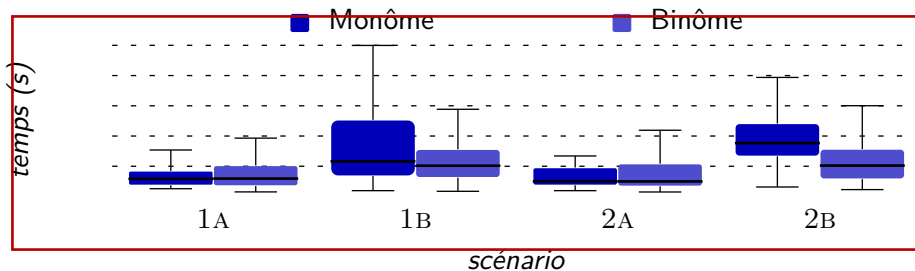


Figure: Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets

Travail collaboratif

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

Analyse

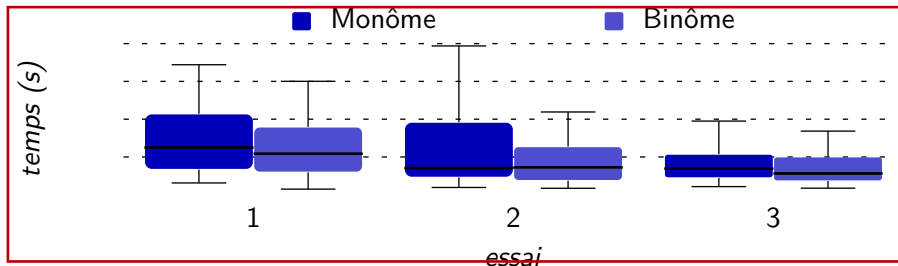


Figure: Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

Apprentissage

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

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

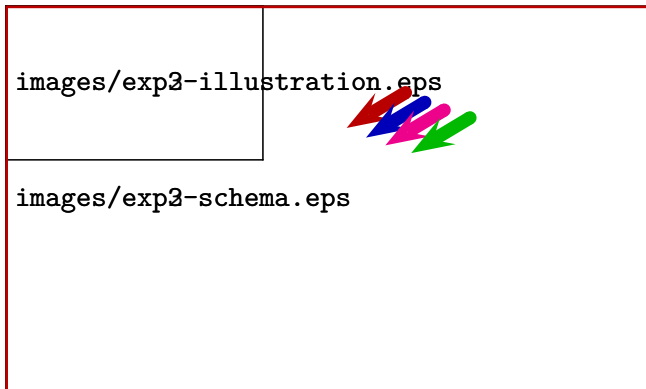


Figure: Illustration de la plate-forme expérimentale

- Utilisation de la seconde plate-forme modifiée

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

La tâche

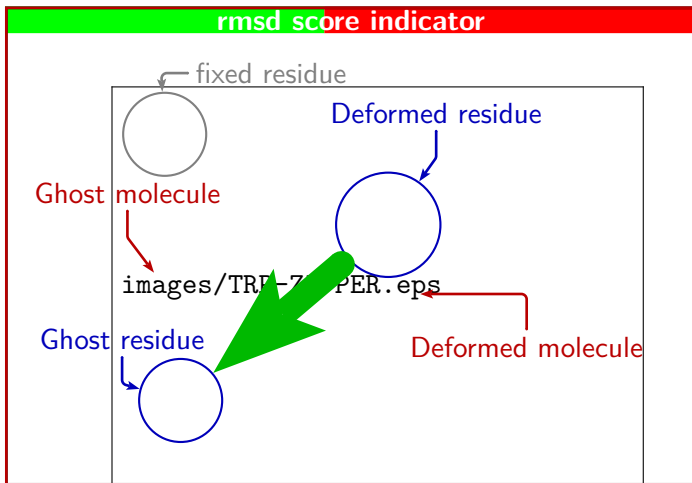


Figure: La molécule TRP-Zipper déformée

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

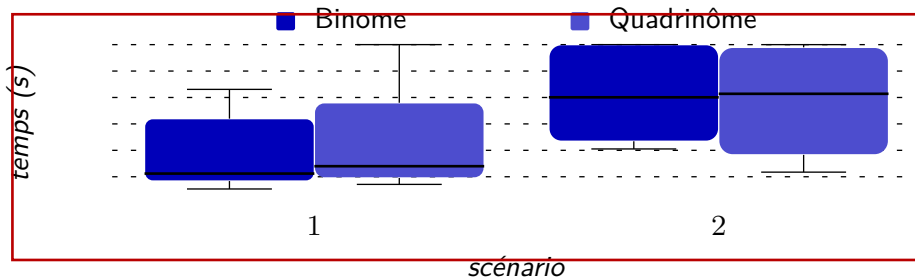


Figure: Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

Travail collaboratif

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

Analyse

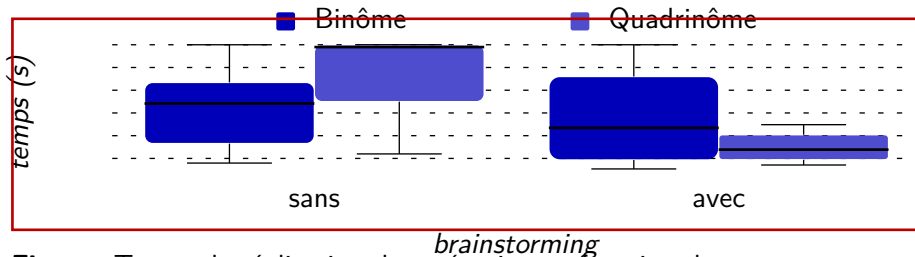


Figure: Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

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

Synthèse des études effectuées et solutions

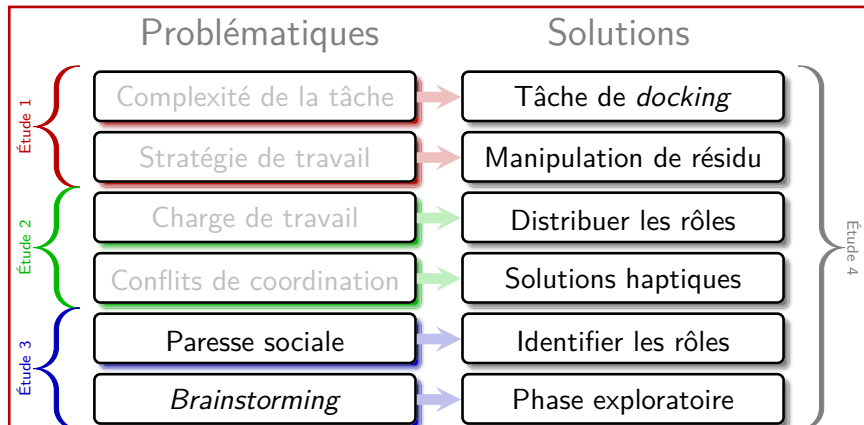


Figure: Synthèse des problématiques

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

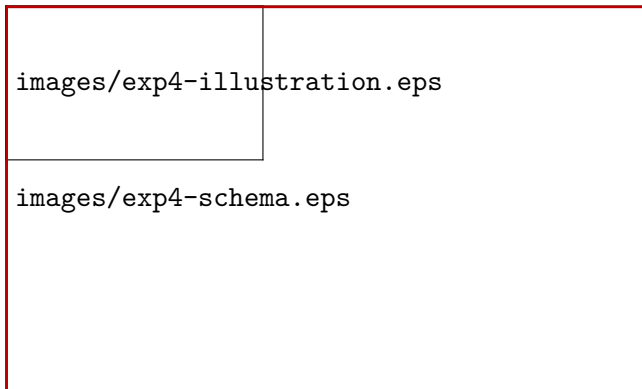


Figure: Illustration de la plate-forme expérimentale

- 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

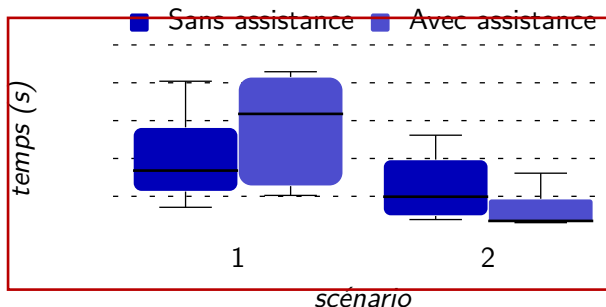


Figure: Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario

Assistance haptique

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

Analyse

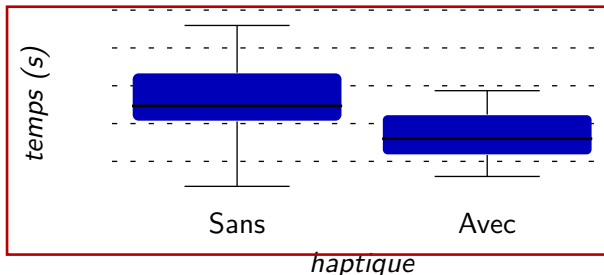


Figure: Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique

Communication haptique

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

Conclusion

Questions

Merci pour votre attention

Références