



# Collaboration haptique étroitement couplée pour la manipulation moléculaire interactive

Jean SIMARD

sous la direction de Philippe TARROUX  
et l'encadrement scientifique de Mehdi AMMI

Université de PARIS-Sud

CNRS-LIMSI

12 mars 2012



# Sommaire

tel-00688036, version 1

16 Apr 2012

2

3

4

5

Introduction

Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire

Communication haptique pour améliorer la collaboration

Conclusion et perspectives

# Sommaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Introduction

- Le *docking* moléculaire
- Définition du *docking* moléculaire
- Manipulation moléculaire « centrée utilisateur »
- Distribution de la charge de travail
- Approches collaboratives pour la manipulation moléculaire
- Objectifs et démarche de la thèse

## Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

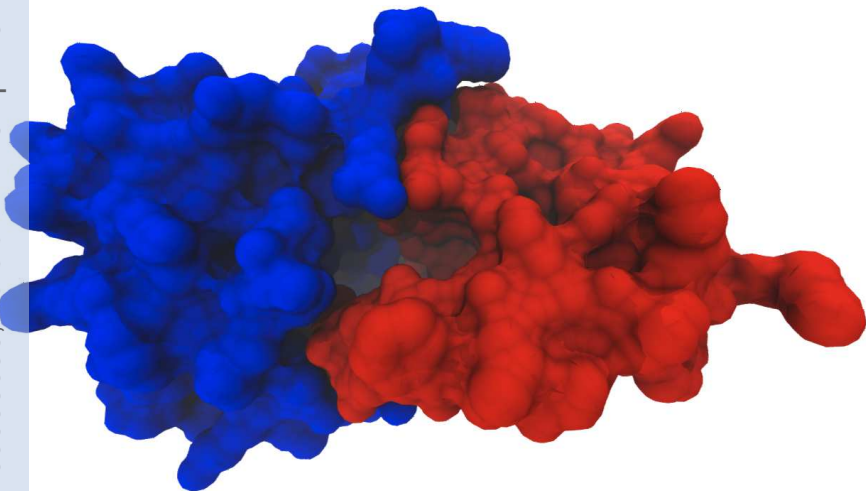
## Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire

## Communication haptique pour améliorer la collaboration

## Conclusion et perspectives

# Le *docking* moléculaire

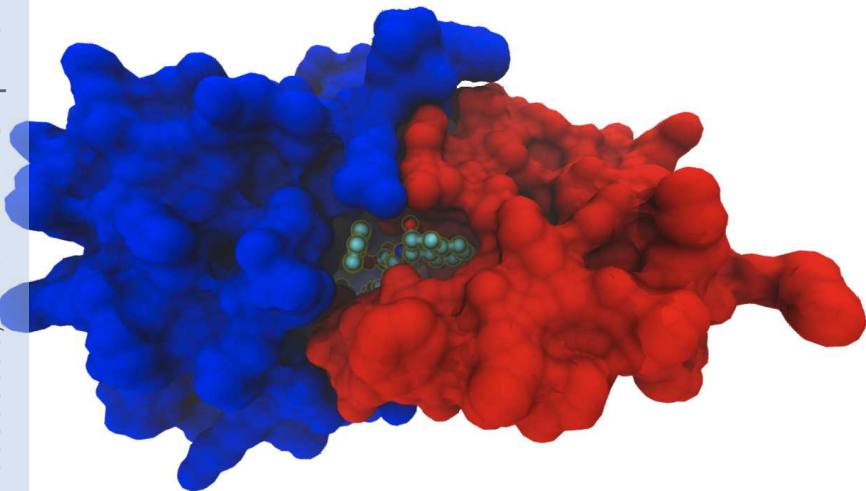
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



Protéase du VIH

# Le *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



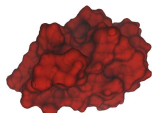
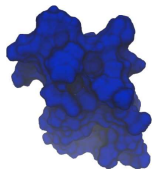
**Protéase du VIH avec un inhibiteur**

# Définition du *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



***Docking* moléculaire**

## Facteurs de complexité

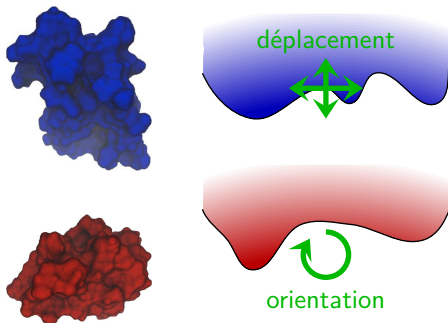
- **Nombreux atomes**
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Définition du *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



## *Docking* moléculaire

### Facteurs de complexité

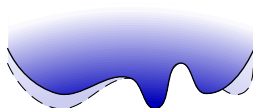
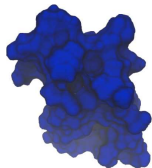
- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Définition du *docking* moléculaire

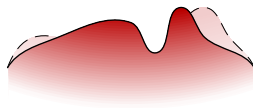
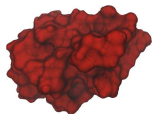
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



déformation



**Docking moléculaire**

## Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- **Flexibilité**
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

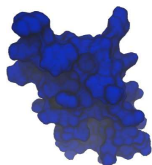


# Définition du *docking* moléculaire

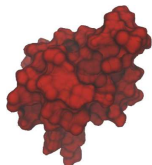
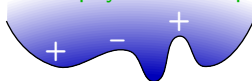
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

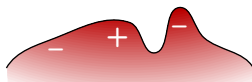
Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



facteurs physico-chimiques



facteurs physico-chimiques



*Docking* moléculaire

## Facteurs de complexité

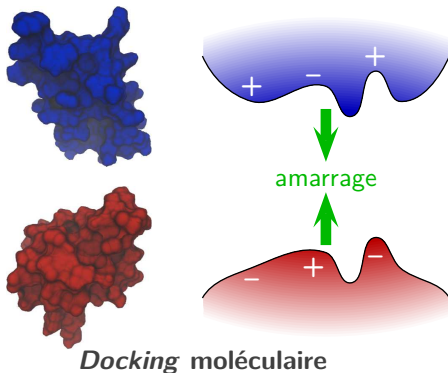
- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Définition du *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



## Facteurs de complexité

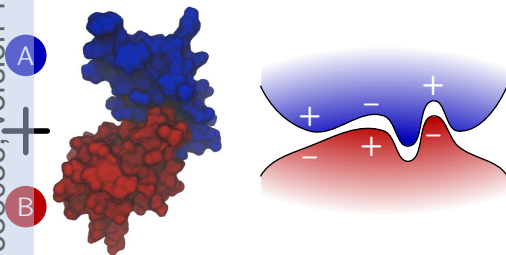
- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Définition du *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



*Docking* moléculaire

## Facteurs de complexité

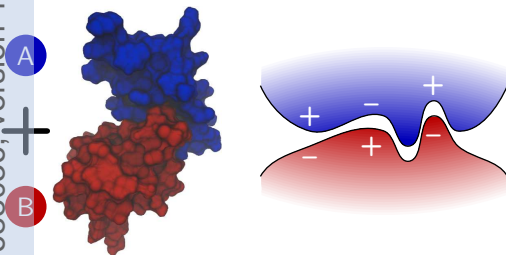
- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Définition du *docking* moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Définition

Consiste à prédire la configuration d'un complexe formés d'un ensemble de molécules



## *Docking* moléculaire

⇒ Résolution du *docking* couteux en temps de calcul

## Facteurs de complexité

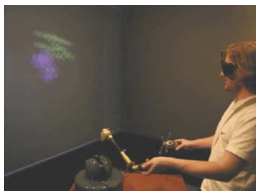
- Nombreux atomes
- Déplacement et orientation
- Flexibilité
- Physico-chimie
- Complémentarité
  - géométrique
  - physico-chimique

# Manipulation moléculaire « centrée utilisateur »

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



Interface tangible [WEGHORST 2003]



Guidage multimodal [FÉREY et al. 2009]



Interface haptique à 5 degrés de liberté [LAI-YUEN et al. 2006]

## Synthèse des approches existantes

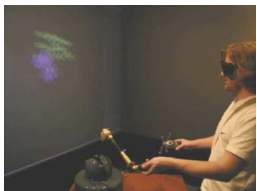
- Essentiellement de la perception
  - données
  - contraintes
- *docking* simple et/ou rigide

## Manipulation moléculaire « centrée utilisateur »

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



Interface tangible [WEGHORST 2003]



Guidage multimodal [FÉREY et al. 2009]



Interface haptique à 5 degrés de liberté [LAI-YUEN et al. 2006]

## Synthèse des approches existantes

- Essentiellement de la perception
  - données
  - contraintes
- *docking* simple et/ou rigide

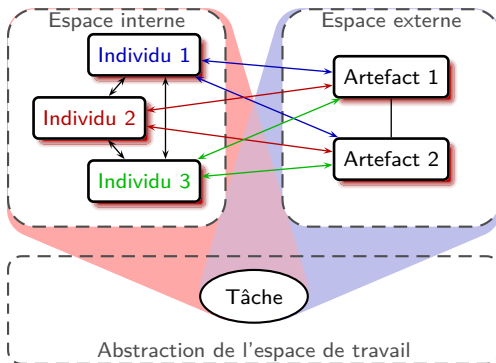
⇒ Charge de travail restreinte

# Distribution de la charge de travail

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Définition [CONEIN 2004]

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



**Système cognitif distribué [ZHANG et al. 2006]**

# Approches collaboratives pour la manipulation moléculaire

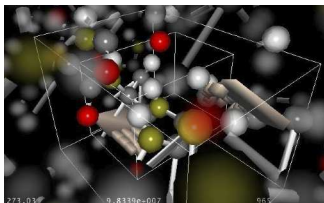
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



**Exploration moléculaire synchrone**  
[KRIZ et al. 2003]



**Manipulation guidée par des experts**  
[PARK et al. 2006]



**Désignation en environnement virtuel**  
[CHASTINE 2007]

## Synthèse des approches existantes

- Approches techno-centrées
- Approches coopératives



# Approches collaboratives pour la manipulation moléculaire

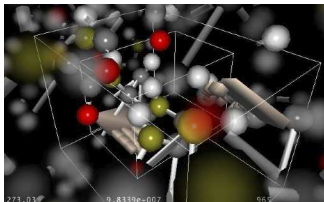
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



Exploration moléculaire synchrone  
[KRIZ et al. 2003]



Manipulation guidée par des experts [PARK et al. 2006]



Désignation en environnement virtuel [CHASTINE 2007]

## Synthèse des approches existantes

- Approches techno-centrées
- Approches coopératives

⇒ Apport du collaboratif?

# Objectifs et démarche de la thèse

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

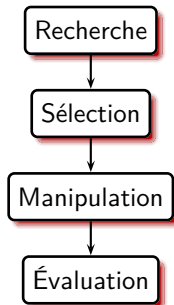
## Contexte de travail

### Manipulation interactive de structures moléculaires pour le *docking*

- 1 Étudier et analyser la contribution des approches collaboratives
- 2 Identifier et caractériser les limites et les contraintes
- 3 Proposer de nouvelles solutions pour améliorer les approches collaboratives
- 4 Évaluer les solutions proposées dans un scénario de *docking* moléculaire

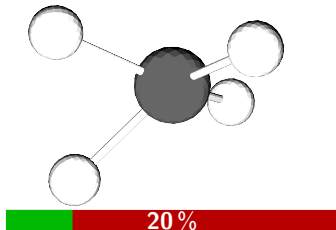
# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]

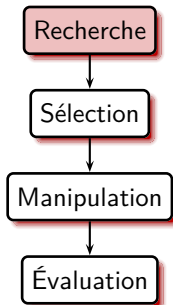


Manipulation moléculaire

Primitives Comportementales

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

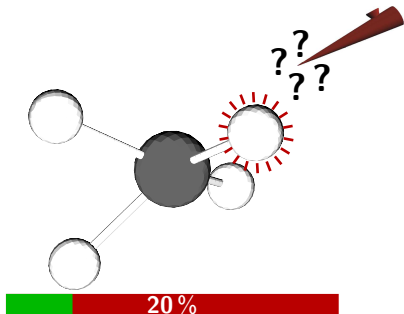
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



1

## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]

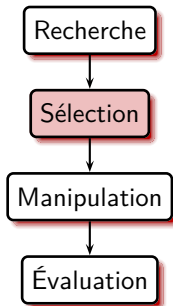


Manipulation moléculaire

Primitives Comportementales

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

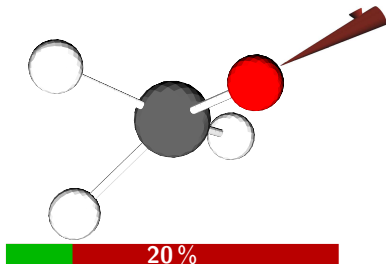
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



2

## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]

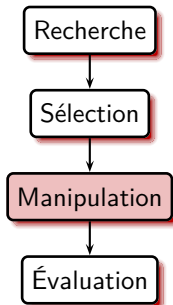


Manipulation moléculaire

Primitives Comportementales

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

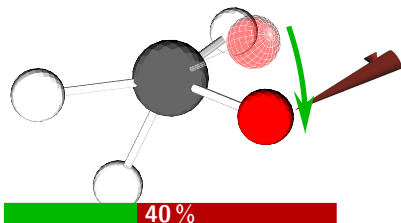
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



3

## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]

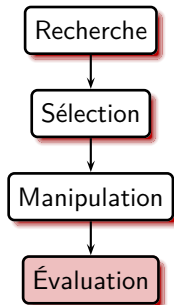


Manipulation moléculaire

Primitives Comportementales

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

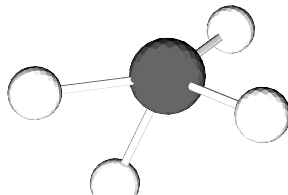


4

Primitives Comportementales

## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]



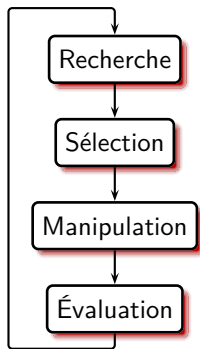
40%

Manipulation moléculaire

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

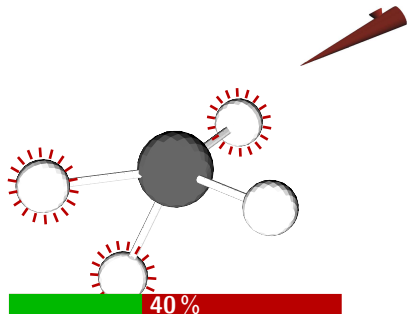
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

5



## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]



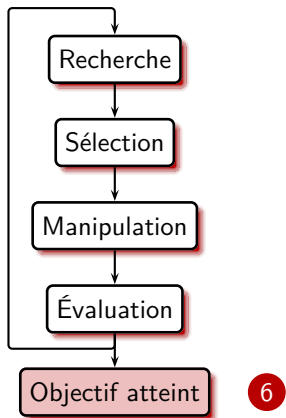
Manipulation moléculaire

Primitives Comportementales



# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

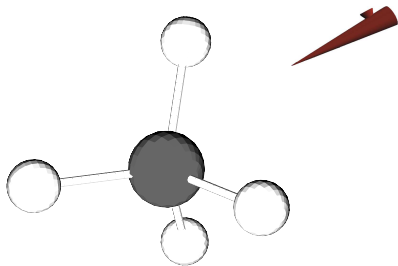
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



Primitives Comportementales

## Description

Selon les Primitives Comportementales Virtuelles [FUCHS et al. 2006 ; BOWMAN 1999]



100 %

Manipulation moléculaire

# Sommaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Introduction

Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

- Cahier des charges
- Organisation matérielle
- Outils d'interaction proposés

Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire

Communication haptique pour améliorer la collaboration

Conclusion et perspectives

# Cahier des charges

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Objectif

Développer une plateforme permettant la collaboration étroitement couplée pour la manipulation moléculaire

## Contraintes à respecter

- Collaboration interactive synchrone avec des molécules
- Simulation de la dynamique moléculaire
- Manipulation à l'aide de plusieurs interfaces haptiques
- Différents outils pour la manipulation moléculaire

## Solutions proposées

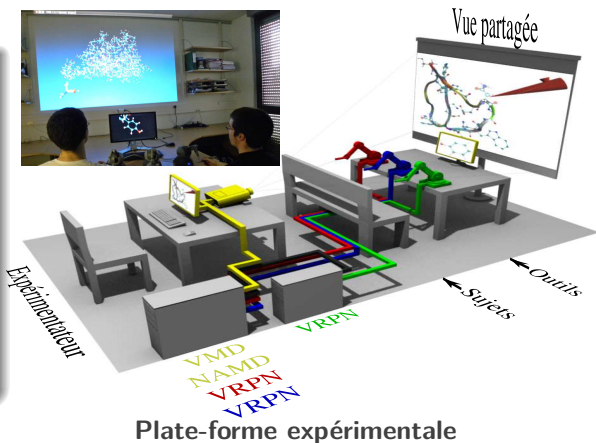
- Modularité logicielle
- Modularité matérielle
- Plateforme basée sur des logiciels de biologie
- Utilisation de modules dédiés à la réalité virtuelle
- Développement de nouveaux outils d'interaction

# Organisation matérielle

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Fonctionnalités

- Colocalisée, synchrone
- Vue partagée
- Communication orale et gestuelle
- Différents outils
  - déplacement
  - orientation
  - déformation
- Multiples interfaces

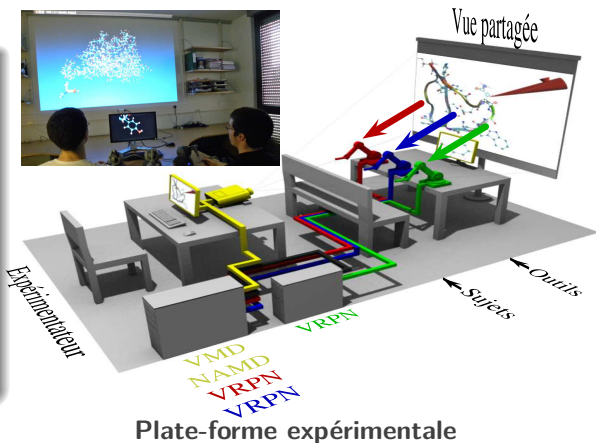


# Organisation matérielle

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Fonctionnalités

- Colocalisée, synchrone
- Vue partagée
- Communication orale et gestuelle
- Différents outils
  - déplacement
  - orientation
  - déformation
- Multiples interfaces



# Organisation matérielle

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Fonctionnalités

- Colocalisée, synchrone
- Vue partagée
- Communication orale et gestuelle
- Différents outils
  - déplacement
  - orientation
  - déformation
- Multiples interfaces

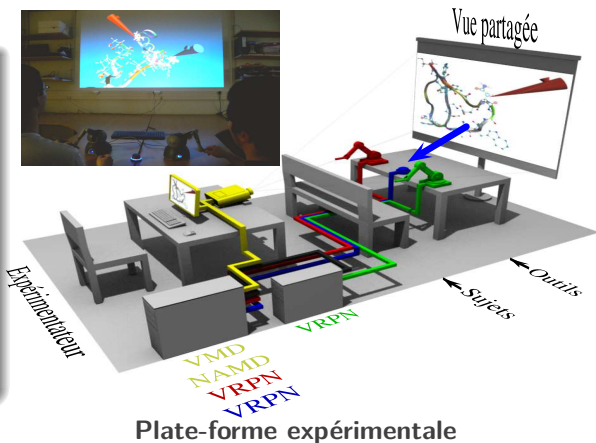


Plate-forme expérimentale

# Organisation matérielle

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Fonctionnalités

- Colocalisée, synchrone
- Vue partagée
- Communication orale et gestuelle
- Différents outils
  - déplacement
  - orientation
  - déformation
- Multiples interfaces

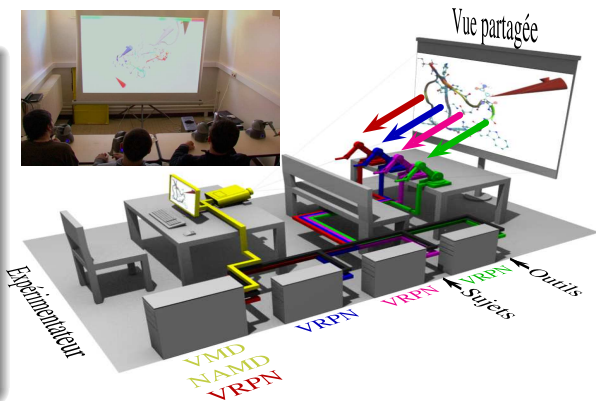


Plate-forme expérimentale

# Outils supplémentaires proposés

2012

16 Apr

version

tel-00688036

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

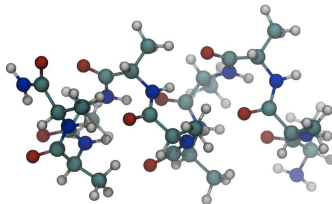
## Problème

Sélection difficile

- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- Champs de potentiel [SIMARD et al. 2009, G]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection



Outil de sélection amélioré



# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

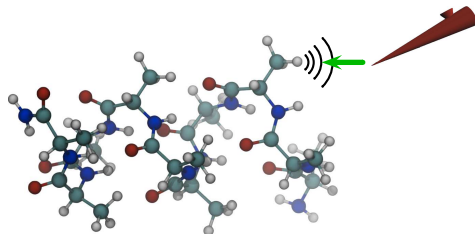
## Problème

Sélection difficile

- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- **Champs de potentiel**  
[SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection



Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

## Problème

Sélection difficile

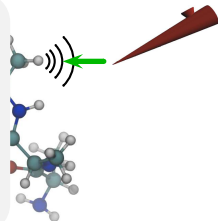
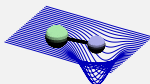
- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- **Champs de potentiel**  
[SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection

## Champs de potentiel

$$U(\vec{x}) = \phi \cdot \sigma \exp \left[ \frac{\sigma^2 - \vec{x}^2}{2\sigma^2} \right]$$



## Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 3 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

## Problème

Sélection difficile

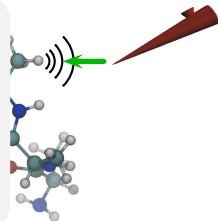
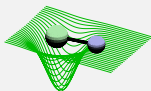
- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- **Champs de potentiel**  
[SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection

## Champs de potentiel

$$U(\vec{x}) = \phi \cdot \sigma \exp \left[ \frac{\sigma^2 - \vec{x}^2}{2\sigma^2} \right]$$



Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

## Problème

Sélection difficile

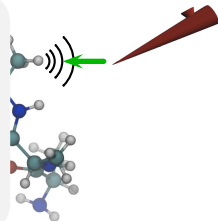
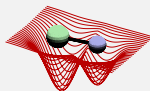
- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- Champs de potentiel [SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection

## Champs de potentiel

$$U(\vec{x}) = \phi \cdot \sigma \exp \left[ \frac{\sigma^2 - \vec{x}^2}{2\sigma^2} \right]$$



Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 6 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

## Problème

Sélection difficile

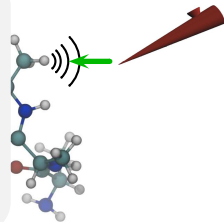
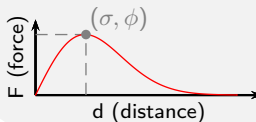
- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- Champs de potentiel [SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection

## Champs de force

$$F(d) = \phi \frac{d}{\sigma} \exp \left[ \frac{\sigma^2 - d^2}{2\sigma^2} \right]$$



## Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

2012

16 Apr

version 3.0

tel-00688036

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

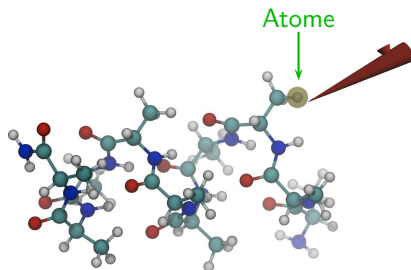
## Problème

Sélection difficile

- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- Champs de potentiel [SIMARD et al. 2009, GI]
- **Pointage visuel**
- Différents niveaux de sélection



Outil de sélection amélioré

# Outils supplémentaires proposés

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Objectif

Faciliter le processus de sélection d'une structure moléculaire dans VMD

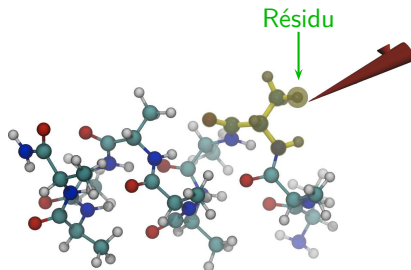
## Problème

Sélection difficile

- Atomes nombreux
- Cibles en mouvement

## Fonctionnalités

- Champs de potentiel [SIMARD et al. 2009, GI]
- Pointage visuel
- Différents niveaux de sélection



Outil de sélection amélioré

# Sommaire

tel-00688036, version 2 - 16 Apr 2012

1 Introduction

2 Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

3 **Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire**

■ **Étude 1 – Recherche et sélection collaborative de motifs**

- Objectifs
- Tâche proposée
- Résultats
- Synthèse

■ Étude 2 – Déformation collaborative de molécules

■ Étude 3 – Dynamique de groupe

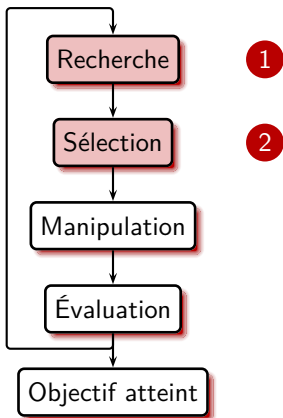
4 Communication haptique pour améliorer la collaboration

5 Conclusion et perspectives



# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



## Primitives Comportementales

# Objectifs

## Objectif principal

Étudier la contribution de la collaboration pendant une tâche de recherche et de sélection de structures moléculaires

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances (individuelles vs. collaboratives)
- 2 Des stratégies de travail émergent dans les binômes

## Variables

Nombre de sujets monôme (24 sujets) ou binôme (12 couples)

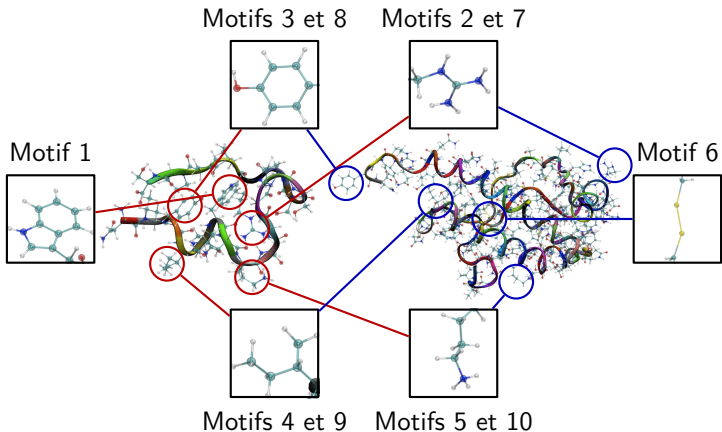
Complexité de la tâche Forme, nature, position, similarité. . .

# Tâche proposée

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

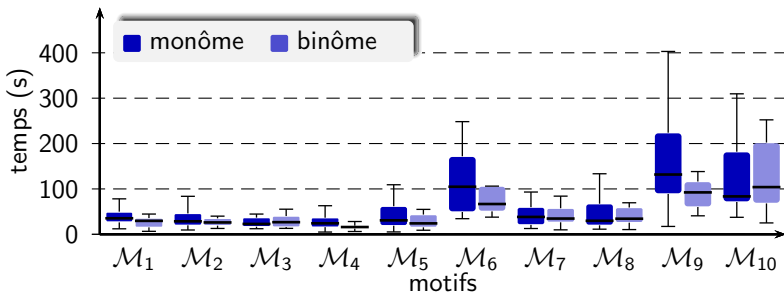
Objectif

Recherche d'un motif dans une molécule



## Répartition des motifs sur les molécules (TRP-CAGE et Prion)

# Amélioration des performances en collaboration

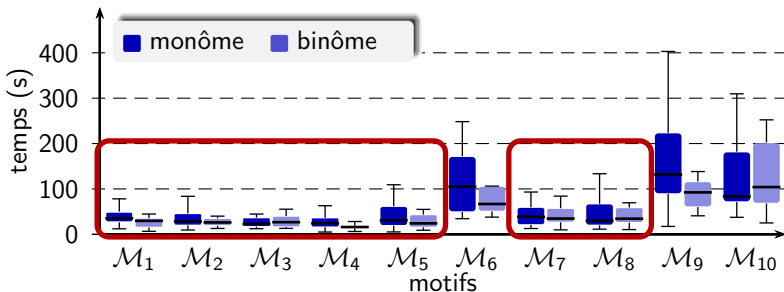


Temps de réalisation de la tâche

## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches

# Amélioration des performances en collaboration

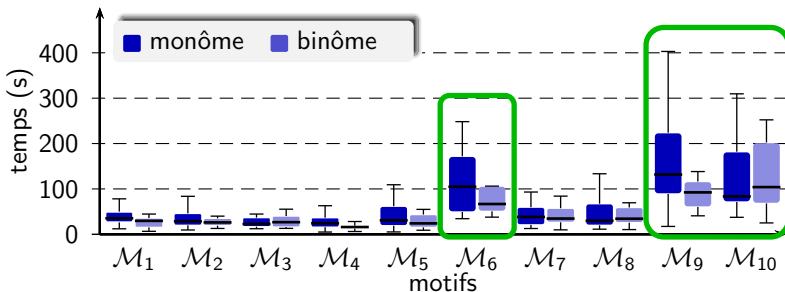


Temps de réalisation de la tâche

## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches

# Amélioration des performances en collaboration

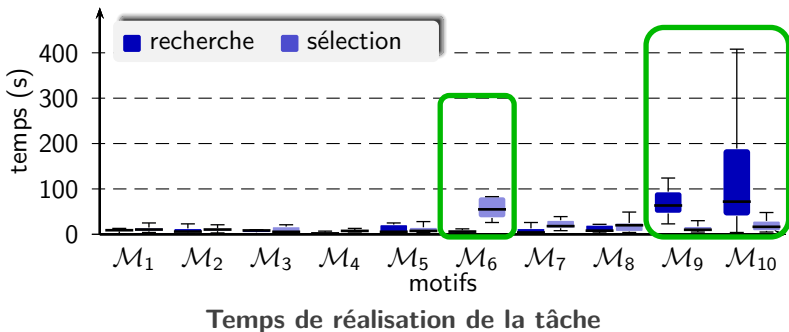


Temps de réalisation de la tâche

## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches

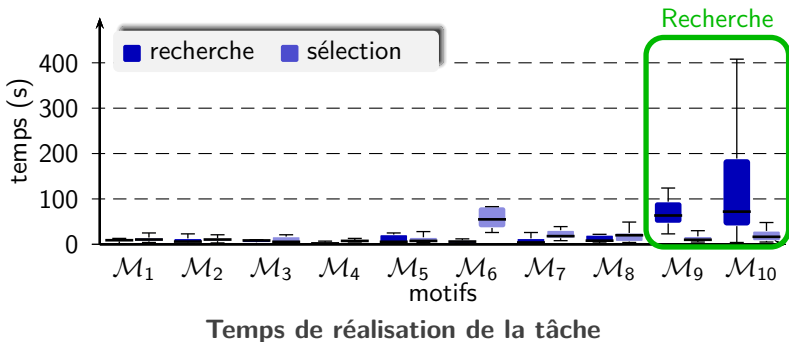
# Amélioration des performances en collaboration



## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches

# Amélioration des performances en collaboration

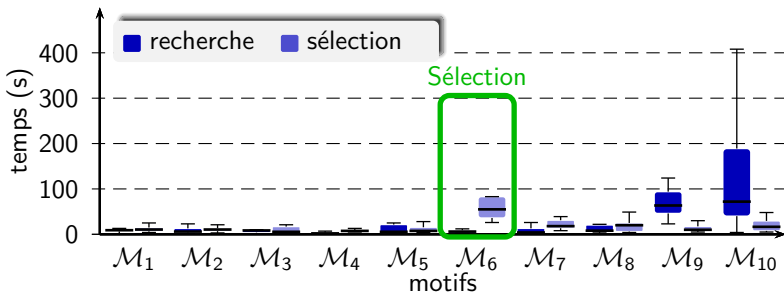


## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches



# Amélioration des performances en collaboration

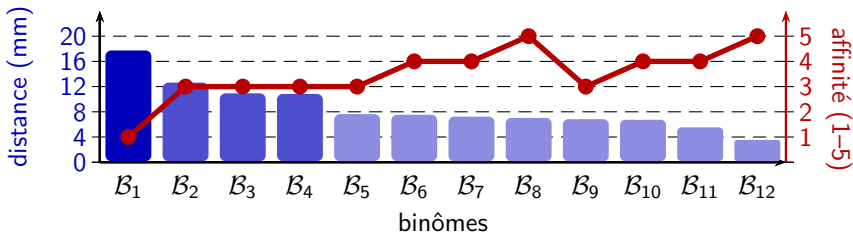


tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Résultat

- Pas d'évolution sur les tâches simples
- Une amélioration significative de la collaboration sur les tâches complexes
- Répartition différente du temps selon les tâches

# Stratégies de travail



**Distance moyenne entre les curseurs des sujets**

## Résultat

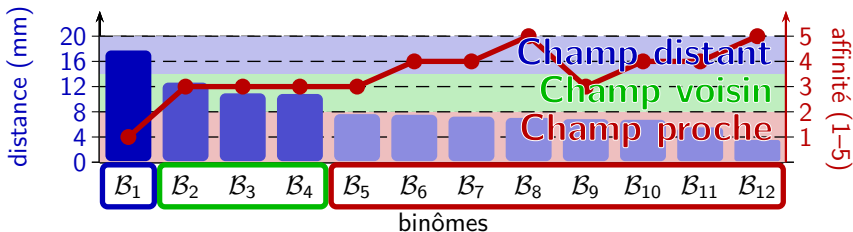
trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

Champs distants Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

Champs voisins Bonne collaboration avec conflits de coordination

Champs proches Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Stratégies de travail



Distance moyenne entre les curseurs des sujets

## Résultat

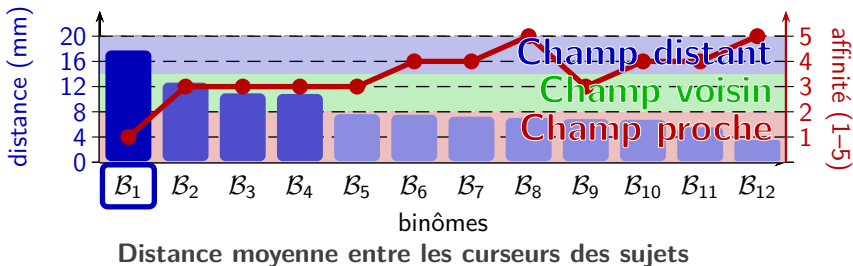
trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

Champs distants Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

Champs voisins Bonne collaboration avec conflits de coordination

Champs proches Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Stratégies de travail



## Résultat

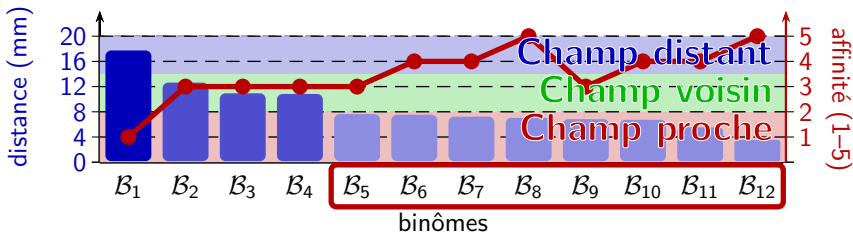
trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

**Champs distants** Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

Champs voisins Bonne collaboration avec conflits de coordination

Champs proches Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Stratégies de travail



Distance moyenne entre les curseurs des sujets

## Résultat

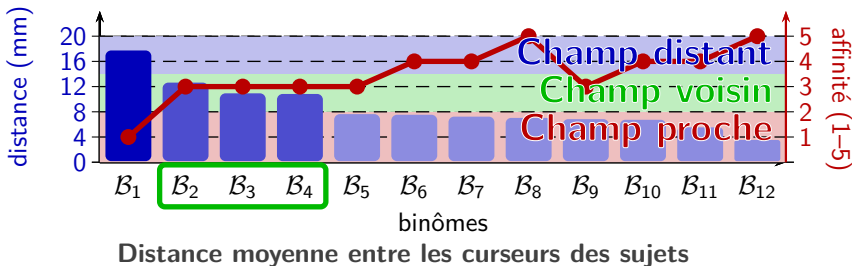
trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

**Champs distants** Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

**Champs voisins** Bonne collaboration avec conflits de coordination

**Champs proches** Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Stratégies de travail



## Résultat

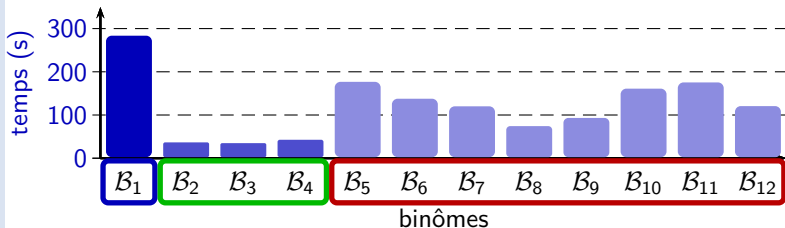
trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

**Champs distants** Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

**Champs voisins** Bonne collaboration avec conflits de coordination

**Champs proches** Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Stratégies de travail



Temps de réalisation de la tâche des binômes

## Résultat

trois stratégies liées à l'affinité entre les collaborateurs

**Champs distants** Peu de collaboration avec peu de conflits de coordination

**Champs voisins** Bonne collaboration avec conflits de coordination

**Champs proches** Forte collaboration mais conflits de coordination importants

# Synthèse

## Complexité de la tâche

### Résultats [SIMARD et al. 2010, JVRC-EGVE]

- Amélioration des performances sur les tâches complexes

### Limites

- Quel est le lien entre la complexité et la collaboration ?
- Comment définir une tâche *complexe* ?

## Stratégie de travail

### Résultats [SIMARD et al. 2010, ACM-VRST]

- Trois stratégies différentes
- Meilleurs résultats avec une stratégie en champs voisins

### Limites

- Modification du comportement naturel des groupes
- Conflits de coordination en champs voisins



# Sommaire

tel-00688036, version 4 - 16 Apr 2012

1 Introduction

2 Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

3 **Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire**

■ Étude 1 – Recherche et sélection collaborative de motifs

■ **Étude 2 – Déformation collaborative de molécules**

- Objectifs
- Tâche proposée
- Résultats
- Synthèse

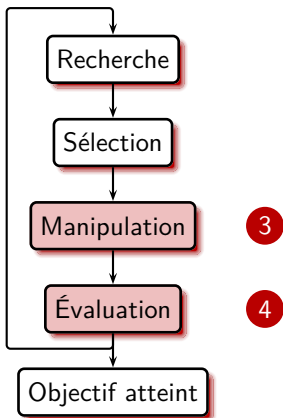
■ Étude 3 – Dynamique de groupe

4 Communication haptique pour améliorer la collaboration

5 Conclusion et perspectives

# Démarche pour l'étude de la manipulation moléculaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



## Primitives Comportementales

# Objectifs

## Objectif principal

Caractériser les scénarios qui nécessitent de la coordination

## Hypothèses

- 1 Le besoin en coordination influence la complexité et les performances
- 2 Amélioration de la répartition des ressources (bimanuelle vs. collaborative)

## Variables

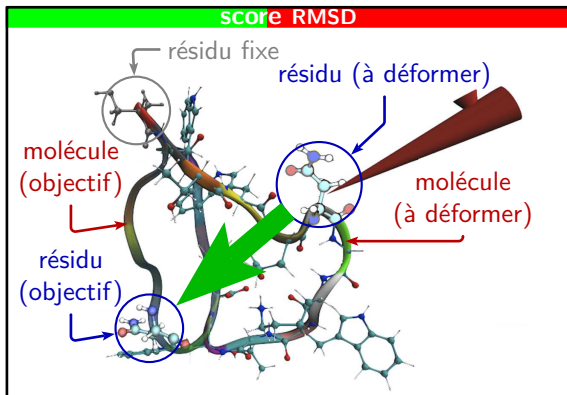
- Nombre de sujets monôme (12 sujets) ou binôme (12 couples)
- Complexité de la molécule 2 molécules
- Outil de déformation 2 configurations de déformation

# Tâche proposée

tel-00688036, version 1 - 16 Août 2012

## scénarios

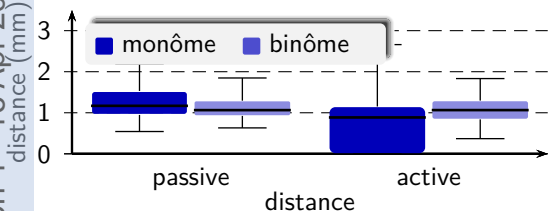
- 2 niveaux de manipulation
  - Résidu
  - Atome
- 4 scénarios
- 3 critères de complexité
  - Nombre d'atomes
  - Cassures
  - Champs de force



## Tâche de déformation

# Amélioration de la répartition des ressources

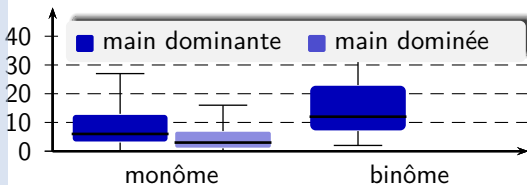
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



**Distances passive et active**

## Résultat

Espace de travail plus important en binôme



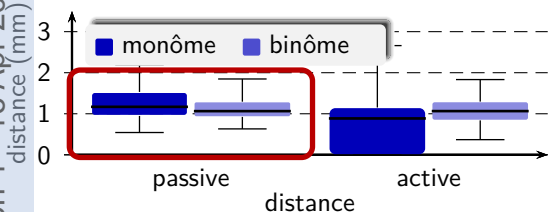
**Nombre de sélections**

## Résultat

Taux d'utilisation des ressources en binôme supérieur de 40 %

# Amélioration de la répartition des ressources

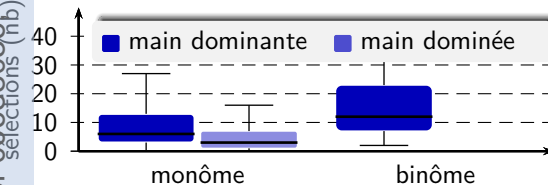
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



**Distances passive et active**

## Résultat

Espace de travail plus important en binôme



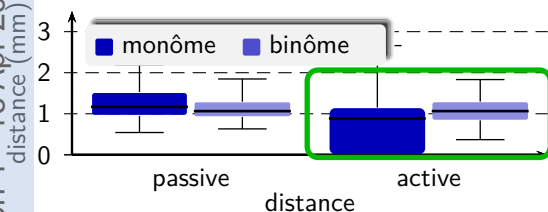
**Nombre de sélections**

## Résultat

Taux d'utilisation des ressources en binôme supérieur de 40 %

# Amélioration de la répartition des ressources

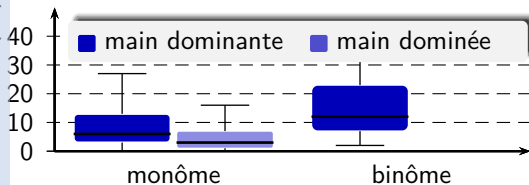
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



**Distances passive et active**

## Résultat

Espace de travail plus important en binôme



**Nombre de sélections**

## Résultat

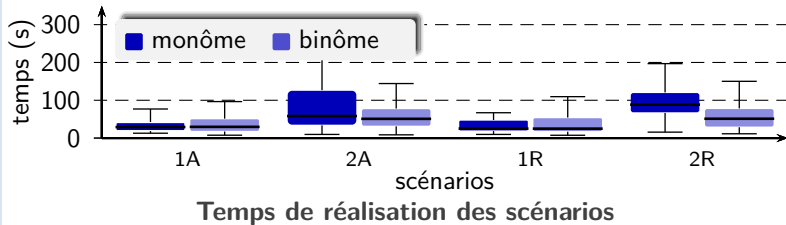
Taux d'utilisation des ressources en binôme supérieur de 40 %

# Influence de la complexité de la tâche

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Difficulté	Description	Exemple
1	1 manipulation	Tâche 1A
2	1 manipulation et 1 fixation	Tâches 1R et 2R
3	2 manipulations <b>coordonnées</b>	Tâche 2A

## Classification des tâches





# Synthèse

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Charge de travail

### Résultats [SIMARD et al. 2012, Elsevier IHCS]

- Gestion d'un plus grand espace de travail en binôme
- Meilleur taux d'utilisation des ressources disponibles en binôme

### Limites

- Comment répartir équitablement la charge de travail ?

## Conflits de coordination

### Résultats [SIMARD et al. 2011, Springer VR]

- Certaines manipulations nécessitent une coordination étroitement couplée

### Limites

- La coordination est plus intuitive en individuel mais...
  - ...espace de travail restreint
  - ...coordination limitée à deux outils

# Sommaire

tel-00688036, version 1-16 Apr 2012

Introduction

Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

**3** Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire

- Étude 1 – Recherche et sélection collaborative de motifs
- Étude 2 – Déformation collaborative de molécules
- **Étude 3 – Dynamique de groupe**
  - Notions importantes sur la dynamique de groupe
  - Objectifs
  - Protocole expérimental
  - Résultats
  - Synthèse

Communication haptique pour améliorer la collaboration

**5** Conclusion et perspectives

# Notions importantes sur la dynamique de groupe

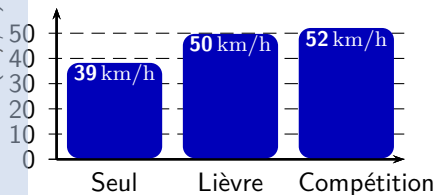
tel-00688036 v1 - 16 Apr 2012

## Facilitation sociale [TRIPLETT 1898]

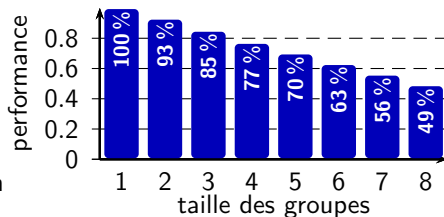
Une action collaborative préparée ou en progression possède une réponse ; la stimulation sociale provoque une augmentation de cette réponse par la perception de collaborateurs effectuant les mêmes mouvements.

## Paresse sociale [RINGELMANN 1913]

Tendance à fournir un effort moindre lorsqu'une tâche est effectuée en groupe plutôt que de manière individuelle.



Performances d'un cycliste



Performances au tir à la corde

# Objectifs

## Objectif principal

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

## Hypothèses

- 1 Amélioration des performances (binôme vs. quadrinôme)
- 2 Amélioration des performances par une étape de *brainstorming* [OSBORN 1963]

## Variables

Nombre de participants 8 binômes et 4 quadrinômes  
Tâches différentes 2 molécules  
Stratégie de travail Étape de *brainstorming*

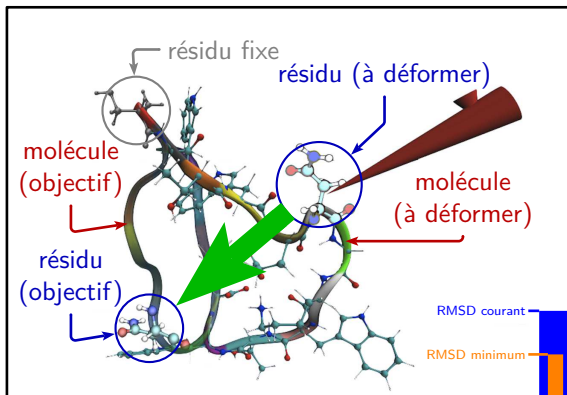
# Tâche proposée

tel-00688036, version 1 - 16 Août 2012

## scénarios

niveaux de complexité

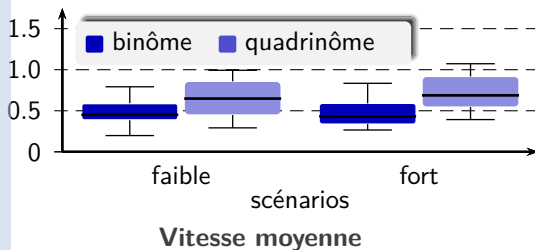
- faiblement couplé
- fortement couplé



## Tâche de déformation

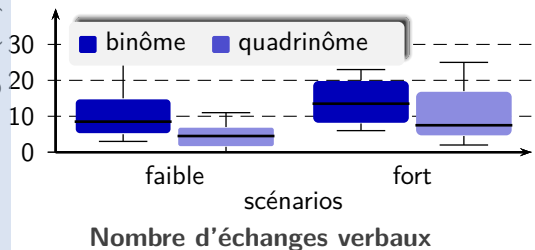
# Amélioration des performances par la facilitation sociale

tel-00688036, version 16 Apr 2012



## Résultat

Une vitesse de travail pour les quadrinômes supérieure de 50 % :  
**facilitation sociale**



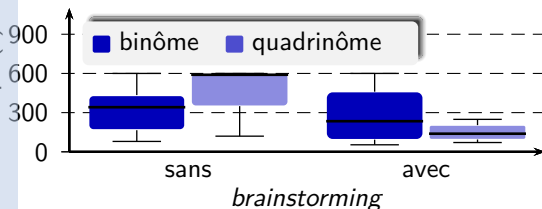
## Résultat

Moins d'échanges :  
 **paresse sociale**

- Spécialisation
- Personnalité
- Paresse

# Influence du *brainstorming*

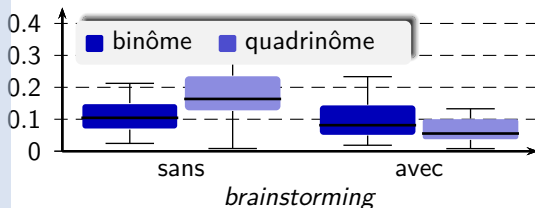
tel-006688036, version 1 - 16 Apr 2012



**Temps de réalisation**

## Résultat

Le *brainstorming* permet l'élaboration d'une stratégie : gain en performances



**Fréquence des sélections**

## Résultat

Meilleur rendement des actions effectuées

# Synthèse

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

## Paresse sociale

### Résultats [SIMARD et al. 2012, Elsevier IJHCS]

- Déséquilibre important dans la répartition des charges de travail
- Potentiel collaboratif non-exploité au maximum

### Limites

- Comment redonner de l'importance à chaque membre du groupe ?

## Brainstorming

### Résultats [SIMARD et al. 2011, JVRC-EGVE]

- Amélioration importante des performances
- Réduit les conflits de coordination
- Conflits de communication pendant le *brainstorming*

### Limites

- Comment optimiser cette étape ?



# Sommaire

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Introduction

Plateforme de manipulation moléculaire *Shaddock*

Caractérisation des approches collaboratives en environnement moléculaire

Communication haptique pour améliorer la collaboration

- Étude 4 – Métaphore haptique et stratégie de travail
  - Synthèse des résultats et solutions proposées
  - Présentation de la métaphore haptique de communication
  - Objectifs
  - Résultats

Conclusion et perspectives

# Synthèse des résultats et solutions proposées

Synthèse

Proposition

Complexité de la tâche

Stratégie de travail

**Synthèse et solutions**

# Synthèse des résultats et solutions proposées

## Synthèse

Complexité de la tâche

Stratégie de travail

Conflits de coordination

Charge de travail

## Proposition

## Synthèse et solutions

# Synthèse des résultats et solutions proposées

## Synthèse

## Proposition

Complexité de la tâche

Stratégie de travail

Conflits de coordination

Charge de travail

Paresse sociale

*Brainstorming*

## Synthèse et solutions

# Synthèse des résultats et solutions proposées

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

## Synthèse

Complexité de la tâche

Stratégie de travail

Conflits de coordination

Charge de travail

Paresse sociale

*Brainstorming*

## Proposition

Étapes de *docking*

Étude 4

## Synthèse et solutions

# Synthèse des résultats et solutions proposées

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

Étude 4

## Synthèse

Complexité de la tâche

Stratégie de travail

Conflits de coordination

Charge de travail

Paresse sociale

*Brainstorming*

## Proposition

Étapes de *docking*

Manipulation de résidu

## Synthèse et solutions

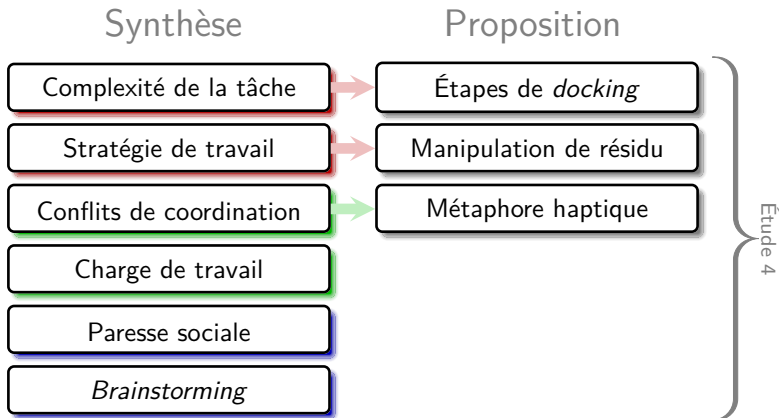
# Synthèse des résultats et solutions proposées

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3



## Synthèse et solutions

# Synthèse des résultats et solutions proposées

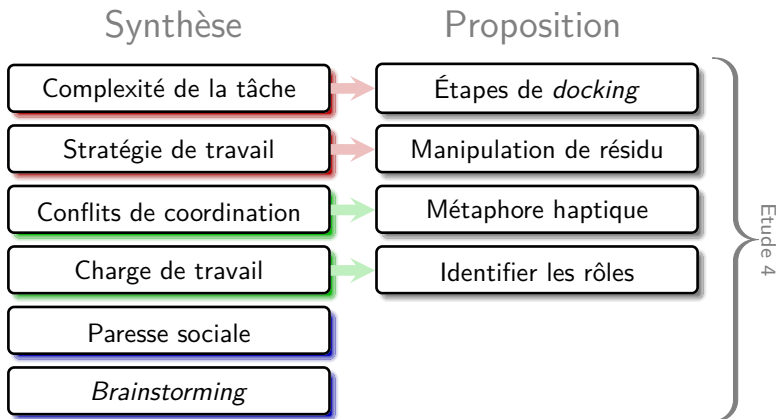
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

Étude 4





# Synthèse des résultats et solutions proposées

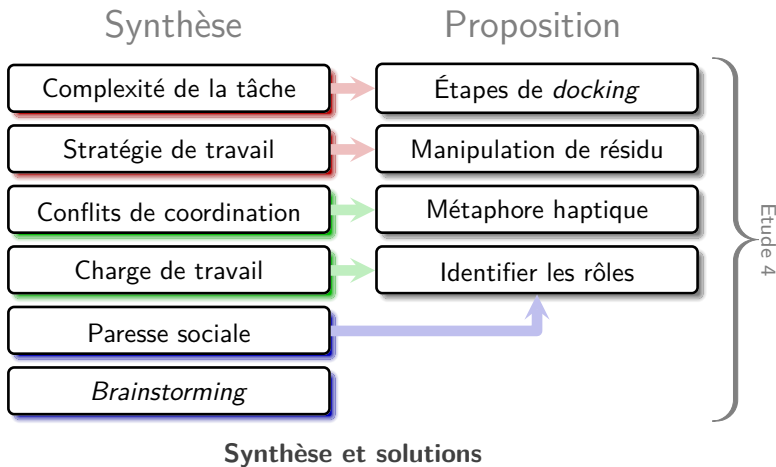
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

Étude 4



# Synthèse des résultats et solutions proposées

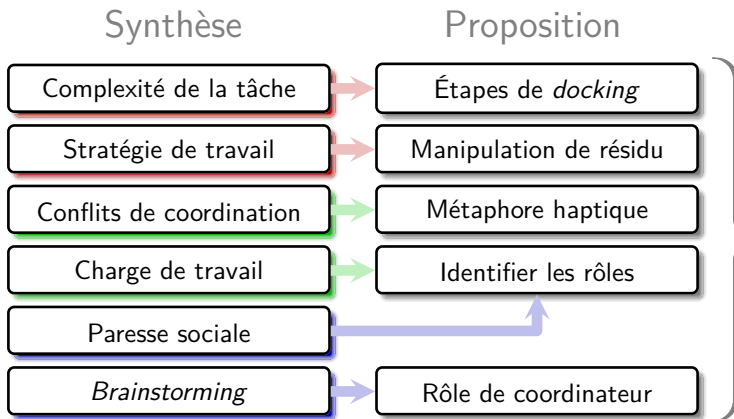
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

Étude 4



## Synthèse et solutions

# Synthèse des résultats et solutions proposées

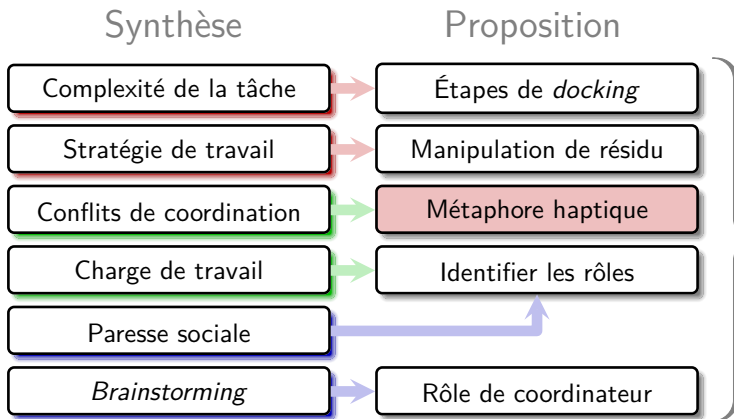
tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

Étude 1

Étude 2

Étude 3

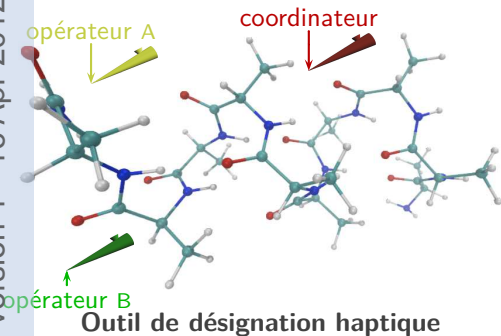
Étude 4



## Synthèse et solutions

# Présentation de la métaphore haptique de communication

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012



## Étapes de la désignation

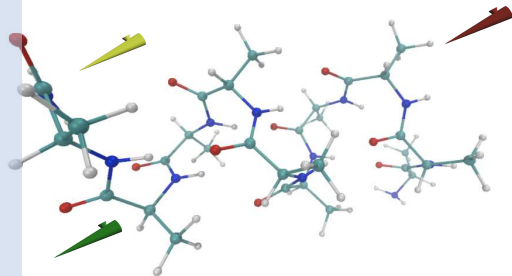
- 1 Recherche d'une structure (coordinateur)
- 2 Désignation de la structure (coordinateur)
- 3 Acceptation par l'opérateur A
- 4 Sélection par l'opérateur A

## Métaphore haptique

- Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

- Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$

# Présentation de la métaphore haptique de communication



Outil de désignation haptique

## Étapes de la désignation

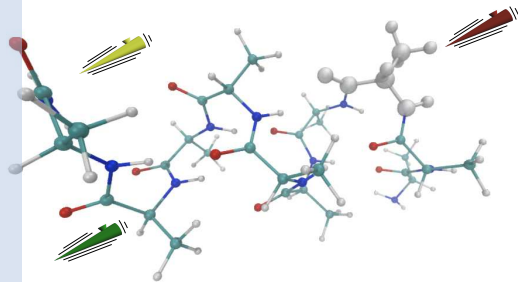
- 1 Recherche d'une structure (coordinateur)
- 2 Désignation de la structure (coordinateur)
- 3 Acceptation par l'opérateur A
- 4 Sélection par l'opérateur A

## Métaphore haptique

Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$

# Présentation de la métaphore haptique de communication



Outil de désignation haptique

## Étapes de la désignation

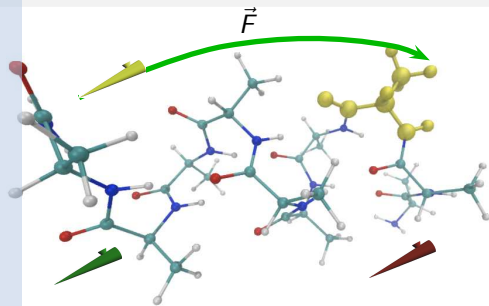
- 1 Recherche d'une structure (coordinateur)
- 2 Désignation de la structure (coordinateur)
- 3 Acceptation par l'opérateur A
- 4 Sélection par l'opérateur A

## Métaphore haptique

- Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

■ Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$

# Présentation de la métaphore haptique de communication



Outil de désignation haptique

## Étapes de la désignation

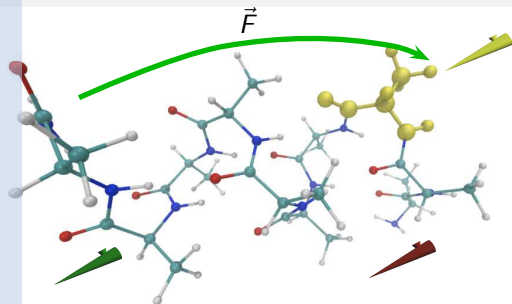
- 1 Recherche d'une structure (coordinateur)
- 2 Désignation de la structure (coordinateur)
- 3 Acceptation par l'opérateur A
- 4 Sélection par l'opérateur A

## Métaphore haptique

- Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

- Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$

# Présentation de la métaphore haptique de communication



Outil de désignation haptique

## Étapes de la désignation

- 1 Recherche d'une structure (coordinateur)
- 2 Désignation de la structure (coordinateur)
- 3 **Acceptation par l'opérateur A**
- 4 Sélection par l'opérateur A

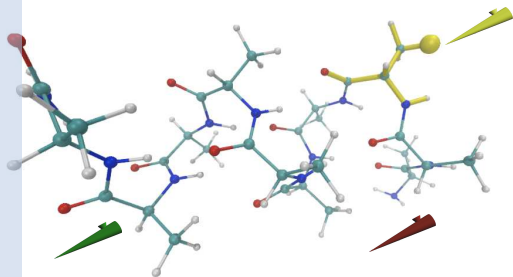
## Métaphore haptique

- Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

- Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$



# Présentation de la métaphore haptique de communication



Outil de désignation haptique

## Étapes de la désignation

- 1 Recherche d'une structure (coordonateur)
- 2 Désignation de la structure (coordonateur)
- 3 Acceptation par l'opérateur A
- 4 **Sélection par l'opérateur A**

## Métaphore haptique

- Notification visuo-haptique de la désignation aux opérateurs

- Guidage haptique 
$$\vec{F}(\vec{x}) = \begin{cases} k(t - t_0)(\vec{x} - \vec{x}_t) - b \frac{\partial \vec{x}}{\partial t} & \text{if } t \geq t_0 \\ 0 & \text{if } t < t_0 \end{cases}$$

# Objectifs

## Objectif principal

Évaluer la métaphore haptique pour améliorer la coordination

## Hypothèses

- La métaphore haptique améliore
  - 1 les performances
  - 2 la communication

## Variables

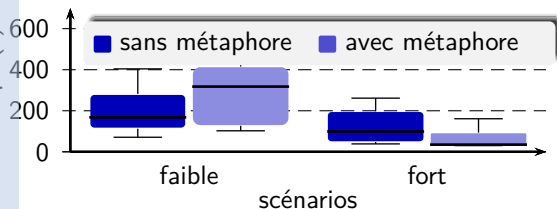
Nombre de participants 8 trinômes (composé de bio-informaticiens)

Tâches différentes 2 molécules

Métaphore haptique Avec ou sans métaphore

# Efficacité de la collaboration

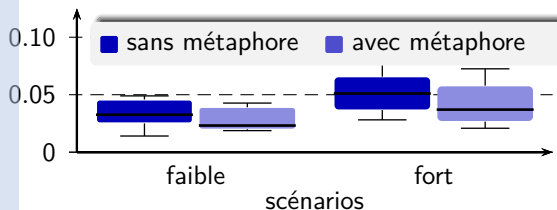
tel:068803636, version 1 - 16 Apr 2012



## Résultat

Manipulation plus efficace sur le scénario le plus complexe

## Temps de réalisation de la tâche

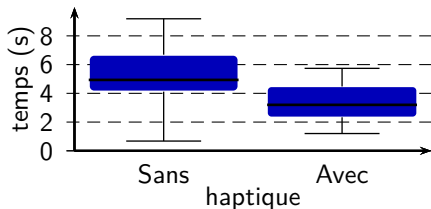


## Résultat

Meilleur rendement pour l'utilisation des ressources

## Fréquence de sélection d'un opérateur

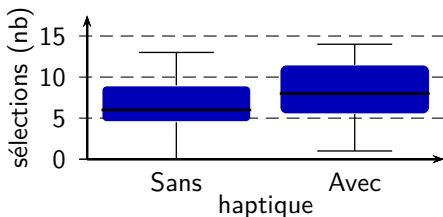
# Amélioration de la communication



## Résultat

Communication haptique plus efficace que la communication verbale

## Temps d'acceptation d'une désignation



## Résultat

Meilleur taux d'acceptation pour les désignations du coordinateur

## Taux de désignations acceptées

# Conclusion

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

- La plateforme *Shaddock*
  - Intégration pour la manipulation en environnement virtuel
  - Plateforme pertinente pour la déformation moléculaire, validée par des bio-informaticiens
- Étude des approches collaboratives
  - Mesure d'une amélioration pour les tâches étroitement couplées
  - Constatation de différentes stratégies de travail
  - Caractérisation des conflits de communication et de coordination
- Amélioration des approches collaboratives
  - Configuration de travail adaptée
  - Amélioration de la tâche de désignation : la communication haptique

# Perspectives

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

- Problématiques dans l'expérimentation des approches collaboratives
  - protocole expérimental pour l'évaluation des approches collaboratives
  - mesure des conflits de coordination et de communication
  - mesure de la charge de travail
  
- Étendre l'étude des approches étroitement couplées
  - apprentissage non-supervisé en collaboration
  - collaboration distante
  - multi-expertise dans la collaboration
  - domaines d'application (conception, assemblage, ...)

# Publications

## Journaux internationaux avec comité de lecture

- [1] GIRARD, Adrien, Mehdi AMMI, **Jean Simard** et Malika AUVRAY (2012). « Collaborative metaphor for haptic designation in complex 3D environments ». Dans : *IEEE Transaction on Haptics*. IEEE-TOH. (soumis).
- [2] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI et Malika AUVRAY (2012). « Collaborative strategies for 3D targets search during the molecular design process ». Dans : *IEEE Transaction on Systems, Man and Cybernetics*. IEEE-TOSMC. (accepté).
- [3] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI et Anaïs MAYEUR (2012). « Comparative study of the bimanual and collaborative modes for closely coupled manipulations ». Dans : *Elsevier International Journal of Human-Computer Studies*. Elsevier IJHCS. (accepté).
- [4] **Simard, Jean** et Mehdi AMMI (11/2011). « Haptic interpersonal communication : gesture coordination for collaborative virtual assembly task ». Dans : *Springer on Virtual Reality*. Springer VR, pages 1–14.

## Conférences internationales avec comité de lecture

- [1] **Simard, Jean** et Mehdi AMMI (06/2012). « Haptic communication tools for collaborative deformation of molecules ». Dans : *Proceedings of Eurohaptics*. EuroHaptics. (accepté).
- [2] GIRARD, Adrien, Mehdi AMMI, **Jean Simard** et Malika AUVRAY (03/2012). « Improvement of collaborative selection in 3D complex environments ». Dans : *IEEE Haptics Symposium*. Haptics Symp. Pages 281–288.
- [3] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI et Anaïs MAYEUR (09/2011). « How to improve group performances on collocated synchronous manipulation tasks? ». Dans : *Proceedings of Joint Virtual Reality Conference*. JVRC-EGVE.
- [4] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI et Malika AUVRAY (11/2010). « Closely coupled collaboration for search tasks ». Dans : *Proceedings of the 17th ACM symposium on Virtual Reality Software and Technology*. ACM-VRST, pages 181–182.
- [5] **Simard, Jean** et Mehdi AMMI (09/2010). « Gesture coordination in collaborative tasks through augmented haptic feedthrough ». Dans : *Proceedings of Joint Virtual Reality Conference*. JVRC-EGVE, pages 43–50.
- [6] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI et Malika AUVRAY (09/2010). « Study of synchronous and collocated collaboration for search tasks ». Dans : *Proceedings of Joint Virtual Reality Conference*. JVRC-EGVE, pages 51–54.
- [7] **Simard, Jean**, Mehdi AMMI, Flavien PICON et Patrick BOURDOT (05/2009). « Potential field approach for haptic selection ». Dans : *Proceedings of Graphics Interface*. GI, pages 203–206.

# Organisation logicielle

tel-00688036, version 1 - 16 Apr 2012

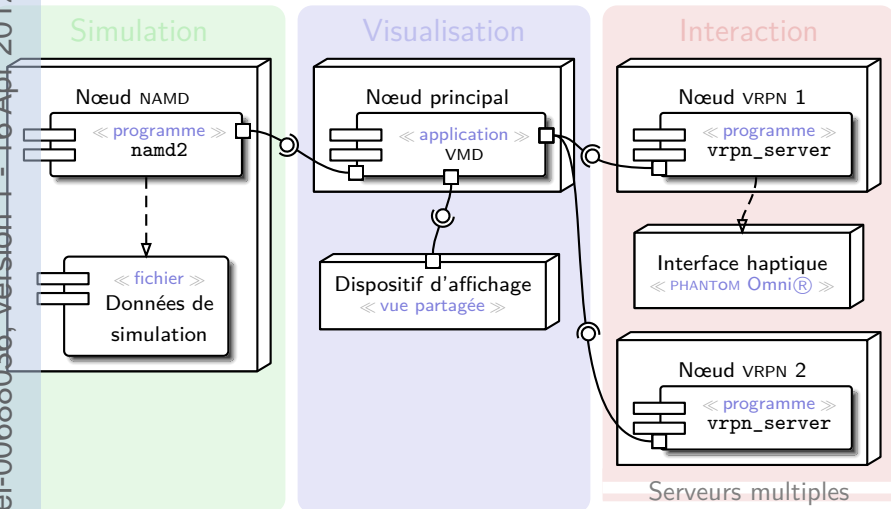
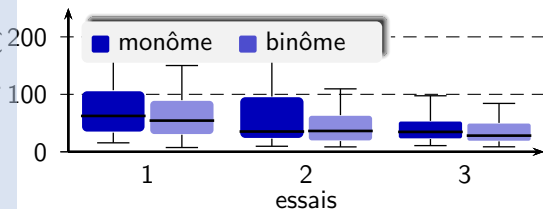


Diagramme de déploiement UML de la plateforme *Shaddock*



# Apprentissage en collaboration

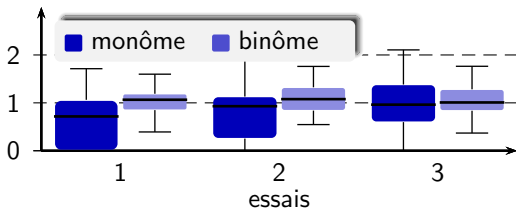
tel-006688036, version 1 - 16 Apr 2012



## Résultat

Apprentissage plus rapide avec une amélioration des performances

## Évolution du temps de réalisation de la tâche



## Résultat

Un grand espace de travail est rapidement couvert par les binômes

## Évolution de l'espace de travail