

UNIVERSITE VICTOR SEGALEN BORDEAUX 2
INSTITUT DE COGNITIQUE - ECOLE DOCTORALE SHS
MASTER SCIENCES DE LA COGNITION - NIVEAU 2 - MENTION
RECHERCHE

REALITE VIRTUELLE ET CHIMIE

VISUALISATION ET INTERACTION AVEC DES DONNEES COMPLEXES :
APPLICATION A LA CHIMIE MOLECULAIRE

- MEMOIRE -

JEUNEHOMME François-Xavier

Né le 04 décembre 1978 à Nancy

Laboratoire Sciences Cognitives - EA - 487 - Université Victor Segalen Bordeaux 2

Directeur de Recherche : Pr. Christophe SCHLICK

Responsables : Mlle Gwenola THOMAS & Mlle Florence TYNDIUK

Date de remise : le lundi 14 juin 2004

REMERCIEMENTS

Les travaux présentés dans ce mémoire ont été réalisés au sein de l'équipe « cognition artificielle » du laboratoire de Sciences Cognitives de l'Université Victor Segalen Bordeaux 2. Je tiens donc à remercier Monsieur Bernard Claverie, le directeur du laboratoire, de m'avoir accueilli et Monsieur Christophe Schlick, le directeur de l'UFR Sciences et Modélisation, pour avoir été mon directeur de recherche.

Je remercie également Mademoiselle Gwenola Thomas, maître de conférence de l'Université Bordeaux 1, qui fût ma maître de stage, pour ses précieux conseils et pour avoir supporté mon mauvais caractère pendant une année complète.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Mademoiselle Florence Tyndiuk, doctorante au laboratoire de Sciences Cognitives, car elle a été une responsable avisée dans ses recadrages, mais surtout pour son incroyable patience, son immense disponibilité et sa gentillesse naturelle.

Je souhaite remercier Monsieur Michel Laguerre, directeur de recherche CNRS à Institut Européen de Chimie et Biologie, pour avoir réussi à consacrer une part de son temps pour répondre à mes questions malgré son emploi du temps très chargé.

J'adresse également ma reconnaissance à l'équipe du projet EPSN : Olivier Coulaud, directeur de recherche INRIA, Michaël Dussere, Ingénieur à l'INRIA et Aurélien Esnard, doctorant au LaBRI.

Enfin, je tiens à remercier deux collègues de Master 2 : Michel Minot pour son soutien pendant ces deux dernières années et Grégory Wallet pour ses précisions sur le behaviorisme.

REALITE VIRTUELLE ET CHIMIE

VISUALISATION ET INTERACTION AVEC DES DONNEES COMPLEXES : APPLICATION A LA CHIMIE MOLECULAIRE

SOMMAIRE

INTRODUCTION	1
1 APPROCHE THEORIQUE	2
1.1 LA REALITE VIRTUELLE	2
1.1.1 Définition.....	2
1.1.2 Exemples de mondes virtuels.....	2
1.2 L'INTERACTION EN REALITE VIRTUELLE.....	3
1.2.1 Immersion et interaction en 3D.....	3
1.2.2 Interfaces comportementales, schèmes et métaphores	4
1.2.2.1 Le concept de schème	4
1.2.2.2 Utilisation des métaphores	4
1.2.3 Méthodologie du design et de l'évaluation de dispositif de réalité virtuelle	4
1.3 LA CHIMIE ET LA REALITE VIRTUELLE.....	6
1.3.1 Visualisation d'informations	6
1.3.1.1 VRML : Virtual Reality Modeling Language	6
1.3.1.2 PDB : Protein Data Bank	7
1.3.2 Simulations de Dynamiques Moléculaires.....	7
1.3.2.1 Quelques exemples de simulations.....	7
1.3.2.2 Le cas particulier du docking	8
1.3.3 Extraction d'Informations dans les Simulations.....	8
2 MISE EN ŒUVRE EXPERIMENTALE	9
2.1 LA METHODE MKSM	9
2.1.1 Modèle d'Activité.....	9
2.1.2 Modèle des Tâches.....	9
2.2 DISPOSITIFS D'INTERACTION	10
2.2.1 Dispositifs Moteurs.....	10
2.2.2 Dispositifs Sensoriels.....	11
3 EXPERIMENTATION	12
3.1 PROFIL UTILISATEUR.....	12

3.1.1	Constitution d'un Profil.....	12
3.1.2	Expert en Chimie Moléculaire.....	12
3.1.3	Personnes Utilisant Occasionnellement ces Outils	14
3.1.4	Utilisateurs Naïfs.....	14
3.2	ANALYSE DES ACTIVITES	14
3.2.1	Construction du Questionnaire.....	14
3.2.2	Dépouillement des réponses	14
3.2.3	Elaboration du modèle d'activités.....	15
3.3	ANALYSE DES TACHES.....	15
3.4	PROPOSITION D'UNE INTERFACE.....	16
3.4.1	Niveau des P Fonctionnelles	16
3.4.2	Niveau des P Mentales	16
3.4.3	Niveau des P Sensori-motrices	16
3.5	INSTRUMENTATION ET PROTOTYPAGE	17
3.5.1	Niveau des P Fonctionnelles	17
3.5.2	Niveau des P Mentales	17
3.5.3	Niveau des P Sensori-motrices	17
CONCLUSION.....		19
BIBLIOGRAPHIE		
ANNEXES.....		

INDEX DES ILLUSTRATIONS, FIGURES ET ANNEXES

Figure 1 :	Schéma triadique de l'interfaçage en réalité virtuelle (Fuchs, 2001).....	4
Figure 2 :	Schéma anthropocentré de l'interaction en réalité virtuelle (Fuchs, 1996).....	5
Figure 3 :	Exploitation du format PDB de représentations des protéines par VMD	7
Illustration 1 :	Mur immersif affichant une dynamique moléculaire.....	11
Figure 4 :	Schéma d'une sous-tâche concernant l'interaction en chimie	15
Annexe 1 :	Questionnaire utilisé pour effectuer l'enquête utilisateur	1
Annexe 2 :	Tableau des caractéristiques de chacun des interacteurs et leur utilisation courante.....	2
Annexe 3 :	Modèle d'activité d'un utilisateur expert en chimie moléculaire	3
Annexe 4 :	Modèle des tâches d'un utilisateur expert en chimie moléculaire.....	3

INTRODUCTION

Ce stage a été effectué en collaboration avec le laboratoire de Sciences Cognitives¹ et le Labri²(Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique) dans le cadre du projet EPSN (Environnement pour le Pilotage de Simulations Numériques distribuées). L'objectif du projet EPSN est d'analyser, de concevoir et de développer une plate-forme logicielle permettant de piloter et de diriger une application numérique distribuée par la visualisation.

L'objectif est de coupler les potentialités de la réalité virtuelle avec des algorithmes de résolution haute performance pour visualiser les résultats obtenus, et pour pouvoir avec ceux-ci pendant la résolution. L'IECB³ (Institut Européen de Chimie et Biologie), un des laboratoires associés au projet, était confronté au problème suivant : leur expert en chimie moléculaire, M. Laguerre (2003) visualise au quotidien, grâce à un logiciel 3D particulier, des simulations de dynamiques moléculaires qui nécessitent plusieurs jours (voir plus) de calculs informatiques. L'extraction des informations importantes est délicate du fait de la complexité du résultat de ces calculs.

Nous avons donc tenté d'améliorer cette exploitation en étudiant les caractéristiques de l'interaction en 3 dimensions. Etant donné qu'il s'agit de réalité virtuelle, les idées de Fuchs (1999) sont apparues comme une solution possible : Fuchs (1999) propose une méthode d'évaluation et de conception d'interfaces de réalité virtuelle basée sur deux concepts clés : l'Interaction et l'Immersion (I²).

Après avoir parcouru le champ théorique, nous avons déterminé une démarche de travail tout en faisant une revue de l'ensemble des outils à disposition (tant au niveau logiciel que matériel). Nous avons donc réalisé un profil utilisateur, une analyse des activités et une analyse des tâches. A partir de ces données et en se basant sur la méthode proposée par Fuchs, il a alors été possible de concevoir un prototype d'interface tentant d'améliorer les conditions d'exploitation des résultats des dynamiques chimiques virtuelles.

¹ <http://www.sm.u-bordeaux2.fr/scico/>

² <http://www.labri.fr/>

³ <http://www.iecb-polytechnique.u-bordeaux.fr/>

L'histoire de la réalité virtuelle peut être retracée à travers celle de son évolution technologique. Le Sensorama de Heilig dans les années 1960 fût le premier pas ; ce dispositif permettait de simuler une promenade à vélo mais il était limité par le manque d'interactions. Puis avec l'arrivée de nouveaux moyens matériels et de nouveaux environnements logiciels, de nombreux outils vont être mis en œuvre : en 1966, Sutherland du MIT crée un prototype de casque - écran ; puis General Electric met au point les premiers logiciels de simulation ; ensuite, l'université d'Utah apporte le premier casque opérationnel ; et enfin, F. Brooks (1990) introduit la notion de retour de force. Les conditions techniques étaient alors suffisantes pour permettre l'émergence du premier véritable système de réalité virtuelle ; c'est donc en 1982 que J. Lanier y arrive grâce à la mise au point du Data Glove, un gant de données qui facilite l'interaction en permettant à l'utilisateur de transmettre des commandes aux systèmes.

1.1 LA REALITE VIRTUELLE

Le VRAIS (Virtual Reality Annual International Symposium), en 1994, fût la première conférence internationale sur ce thème. La technologie continue son évolution à travers l'amélioration des outils d'interaction (afin de percevoir et d'agir ergonomiquement, sur le monde virtuel). L'axe de développement principal concerne désormais, l'évolution du type des mondes virtuels mis en œuvre ; en effet, le défi actuel réside dans la fait d'atteindre un niveau d'immersion supérieur, pour que le sujet puisse percevoir et agir sur une situation comme si elle était réelle et qu'il se trouvait à l'intérieur de celle-ci.

1.1.1 DEFINITION

Lanier introduit l'expression « réalité virtuelle » au cours des années 1980. Papin (1999) nous rappelle que l'expression signifie « presque réel » ; il aurait donc fallu parler de réalité vicariante (« tenant lieu de réalité »). L'objectif premier était le réalisme, c'est-à-dire qu'il s'agissait d'obtenir une représentation aussi proche de la réalité que possible ; désormais, l'objectif est plutôt d'obtenir une représentation aussi crédible que possible.

Il est possible de citer quelques définitions : Fuchs (1999) propose : « la réalité virtuelle va permettre à un utilisateur de s'extraire de la réalité physique pour changer virtuellement de temps, de lieu et (ou) de type d'interaction : interaction avec un environnement simulant la réalité ou interaction avec un monde imaginaire et symbolique ». Guitton (1994) parle de « visualisation 3D interactive et immersive ». La réalité virtuelle peut donc se caractériser en définissant quelques termes clés de l'élaboration de son concept :

- L'interaction qui existe entre l'opérateur et le monde virtuel. Elle existe dans les deux directions, c'est-à-dire qu'il y a des interactions sensorielles (du monde vers l'opérateur) et des interactions motrices (de l'opérateur vers le monde).
- La médiation : les interactions doivent être médiatisées par un système de traitement de l'information.
- La 3D, puisque la perception s'appuie sur une possibilité d'observation et de visualisation 3D du monde. La représentation tridimensionnelle permet de « tromper » le système visuel et lui permet de reconstituer une image 3D.
- La notion de temps réel : les interactions doivent toujours avoir lieu en temps réel. C'est-à-dire avec des temps de réponse du système et de l'utilisateur du même ordre de grandeur que ceux d'un monde réel et de l'utilisateur afin de rendre les interactions crédibles et d'immerger le sujet.

1.1.2 EXEMPLES DE MONDES VIRTUELS

Afin de mieux délimiter le domaine de la réalité virtuelle, il est nécessaire de s'intéresser aux exemples d'application. Plusieurs ouvrages présentent de façon relativement complète les différentes composantes du domaine : Fuchs (1999), Burdea et Coiffet (1993), Pimentel et

Teixeira (1994) font l'état des lieux des différentes composantes du domaine résumé ci-dessous. Ces mondes peuvent être classés par la motivation inhérente à leur création.

La première de ces motivations est d'éviter des risques et de gagner du temps. Ainsi, un système de réalité virtuelle permet de former un conducteur : il peut s'agir d'un train (Lourdeaux 1999) mais aussi de la direction d'une centrale nucléaire. L'exemple le plus connu concerne les simulations de pilotage. Elles ont un but d'apprentissage, le système simule le pilotage dans un environnement et des conditions proches de la réalité, mais aussi dans des conditions inhabituelles, critiques ce qui permet de ne créer aucun risque physique.

La seconde motivation est la conception d'objets inexistantes ou inaccessibles : visite des sites historiques, des bâtiments, des automobiles ou des avions en projet de construction ; le visiteur peut se déplacer virtuellement à l'intérieur de ces lieux. S'il est équipé d'un système à retour de force, il est possible de tester le futur caractère fonctionnel de certains éléments : par exemple, un garagiste peut monter virtuellement une pièce particulière afin de tester l'efficacité de son processus de mise en place. Il est donc aussi possible de reconstituer des lieux dont la visite n'est plus possible par souci de préservation (tombeau de la reine Néfertiti, grottes de Lascaux) ou d'étudier une grotte sous-marine difficilement accessible.

Les mondes virtuels permettent aussi d'étudier des espaces invisibles : que ce soit dans les mondes financiers, afin de rendre des informations plus claires ou dans les milieux scientifiques, afin de pouvoir modifier l'échelle d'analyse (de l'astronomie à l'atome) ou pour visualiser des dimensions non visibles (température, pression, radioactivité...). L'accès à ces mondes virtuels constitue le plus souvent une grande aide au diagnostic voir même un réel outil de travail et d'analyse.

L'obtention de données expérimentales nouvelles constitue une autre motivation, à l'exemple de certaines expérimentations sur la perception : des recherches sont menées au laboratoire de physiologie et de perception de l'action de Berthoz (1997) afin d'étudier les informations vestibulaires, extéroperceptives et proprioceptives qui interviennent dans les processus de déplacement et de mémorisation de l'espace.

Enfin, un dernier objectif de la réalité virtuelle concerne ses visées thérapeutiques : le traitement de la claustrophobie, par exemple, un patient peut modifier la taille de la pièce jusqu'à atteindre « ses limites » et ainsi explorer un environnement de plus en plus petit tout en s'y sentant malgré tout à l'aise. Il existe aussi des applications pour aider un patient à gérer la présence d'un membre fantôme : il peut envoyer une commande à ses mains et observer l'effet correspondant sans ressentir l'impression de paralysies (Ramachandran et Hirstein, 1997) (André et al, 2001). De même, il existe de nombreuses méthodes : l'apprentissage d'enfants aveugles (Lumbreras et Sanchez, 1999), de concepts contre-intuitifs (Johnson et al, 1999).

1.2 L'INTERACTION EN REALITE VIRTUELLE

La plupart des recherches en réalité virtuelle contournent le problème de la modélisation et de la numérisation du monde virtuel : il n'y a que peu d'études qui analysent théoriquement l'interfaçage entre l'homme et le monde virtuel. Fuchs (1999) propose une approche théorique et pragmatique de la conception et de l'évaluation des périphériques de réalité virtuelle. Il introduit notamment de nouveaux concepts et de nouvelles méthodes : interfaces comportementales, trois niveaux différents d'immersion et d'interaction (sensori-moteur, mental et fonctionnel) ou I². Il est nécessaire de préciser que Fuchs (1999) préfère parler d'interfaces comportementales plutôt que d'« Interfaces Homme-Machine » (IHM) afin de montrer que ce type de périphériques exploite un comportement humain naturel sans entraînement préalable.

1.2.1 IMMERSION ET INTERACTION EN 3D

Chaque périphérique de réalité virtuelle est conçu de telle manière que l'homme soit au centre du système, l'application virtuelle lui étant dédiée. Le premier niveau de l'interface comportementale est composé de l'humain, du monde virtuel et des interfaces motrices et sensorielles permettant aux deux pôles d'échanger des informations. On parle d'immersion sensori-motrice puisque l'ordinateur est physiquement connecté au corps humain par ses réponses motrices et sensorielles. Mais ce niveau est restrictif car il ne représente qu'une partie du

problème. Il ne s'agit pas seulement d'un problème de conception du niveau physique de l'interface ; Il faut identifier à partir de quel modèle mental, une personne pense et agit. L'utilisateur doit pouvoir avoir un comportement direct dans le monde virtuel et donc l'interface doit être transparente pour lui. Ainsi, le lien direct de la Figure 1 représente le comportement désiré, alors que les liens passant par l'interface indiquent ce qui se passe en réalité. La perception effective est la perception sensorielle imposée à l'utilisateur ; elle doit être naturelle et cohérente. Il apparaît évident que les stimulations effectives peuvent impliquer des incohérences par rapport aux informations que l'utilisateur est habitué à recevoir, que le cerveau pourrait interpréter comme l'échec de ses actions. On peut d'ailleurs faire les mêmes remarques en ce qui concerne les fonctions effectives motrices. Ce problème d'inconsistances est inhérent aux techniques de réalité virtuelle et n'est pas simple à résoudre.

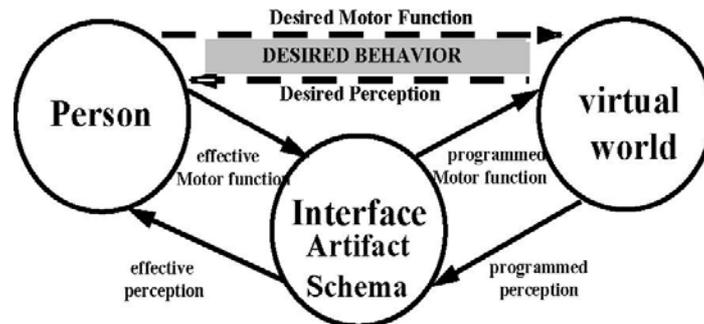


Figure 1 : Schéma triadique de l'interfaçage en réalité virtuelle (Fuchs, 2001)

1.2.2 INTERFACES COMPORTEMENTALES, SCHEMES ET METAPHORES

1.2.2.1 Le concept de schème

Piaget (1996) indique que les schèmes constituent, particulièrement dans leur dimension sensori-motrice, les moyens à l'aide desquels l'homme peut assimiler les situations et les objets. Fuchs (1999) fait donc le parallèle entre la compréhension du monde réel par le jeune enfant et la compréhension du monde virtuel par les utilisateurs ; le schème étant une structure mentale qui permet de répéter les mêmes actions et de les appliquer à de nouvelles situations. Fuchs va appliquer ces propriétés (reproductibilité, adaptabilité et inconscience de leur utilisation) pour obtenir une véritable interface comportementale proposant une immersion et une interaction naturelle. Ainsi, il postule qu'une personne exploite les mêmes processus pour organiser le monde virtuel, d'après un ensemble de règles d'espace-temps et de règles causales. Selon Fuchs, cette intelligence sensori-motrice permet de gérer une situation pour résoudre un ensemble de problèmes d'actions, c'est-à-dire en construisant un système complexe de schèmes et en organisant la réalité en fonction de ces règles.

1.2.2.2 Utilisation des métaphores

Le problème de schèmes est qu'ils ne sont pas applicables dans bien des cas de réalité virtuelle, tels les problèmes techniques, économiques ou théoriques. Mais pour contourner le problème, il est possible d'utiliser une métaphore virtuelle : au lieu d'exploiter le comportement naturel de l'être humain, il est possible de proposer une image symbolique des fonctions motrices ou perceptives désirées. Pourtant, il apparaît évident que leur utilisation nécessite plus de concentration et de ressources cognitives que l'exploitation de schèmes ; leur exploitation nous éloigne donc de la finalité de la réalité virtuelle : la transparence.

1.2.3 METHODOLOGIE DU DESIGN ET DE L'EVALUATION DE DISPOSITIF DE REALITE VIRTUELLE

La figure 2 propose un schéma général de la réalité virtuelle où sont définis les trois niveaux d'immersion et d'interaction (I^2) avec leurs caractéristiques particulières. Son modèle qui s'inscrit parfaitement dans une démarche anthropocentrée, comporte trois niveaux :

- Niveaux des I² sensori-motrices qui réalisent le lien avec le monde physique, niveau qualifié « d'immersion et interaction sensori-motrices » : le sujet est connecté à l'ordinateur par ses sens et ses réponses motrices via des interfaces matérielles. Ce premier niveau d'I² concerne donc les aspects informatiques temps réel pour l'ordinateur, les aspects physiques pour les interfaces matérielles et les aspects psychophysiques pour les caractéristiques sensori-motrices du sujet.
- Niveaux du mental qui correspond à la pensée de l'opérateur, à travers des schèmes (au sens Piagétien) qu'il a acquis dans des situations réelles, et qu'il utilise en interaction avec un monde virtuel : le sujet s'immerge mentalement dans le monde virtuel, le niveau inférieur d'I² devant lui être mentalement invisible (transparent). Ce second niveau d'I² concerne les processus mentaux exploités par le sujet et la modélisation comportementale du monde virtuel.
- Niveau de la tâche ou de la fonction à réaliser, caractérisé par l'expression « immersion et interaction fonctionnelles » : il concerne les objectifs de l'application de réalité virtuelle. Ces objectifs s'attachent à réaliser une immersion et une interaction du sujet pour des fonctionnalités données et non pour une simple immersion mentale de l'homme dans ce monde virtuel. Ces fonctionnalités sont décomposables en Primitives Comportementales Virtuelles (PCV) ; elles consistent à observer le monde virtuel, se déplacer dans celui-ci (orientation et locomotion), agir dessus (prendre des objets par exemple) et communiquer avec autrui ;

Ce schéma a pour but de clarifier les concepts d'immersion et d'interaction : il s'agit d'optimiser les I² fonctionnelles pour l'application et d'optimiser les I² mentales et sensori-motrices. Pour concevoir un périphérique de réalité virtuelle, la supposition est qu'il est préférable d'utiliser l'intelligence sensori-motrice de l'utilisateur, afin de faciliter ses I² dans le monde virtuel, plutôt que faire appel à son intelligence à un niveau sémiotique.

Dans ce sens, pour une Primitive Comportementale Virtuelle (PCV) donnée qui nécessite certaines caractéristiques, il faut plutôt privilégier le choix du schème par rapport à celui de la métaphore. Il faut donc d'abord déterminer les I² fonctionnelles désirées ; ensuite, déterminer les PCV nécessaires en fonction des I² fonctionnelles ; puis, concevoir l'interface comportementale des PCV (schèmes, métaphores, artéfacts, réponses motrices ou effectrices) ; il faut, alors, concevoir le logiciel d'assistance comportementale déduit de l'interface comportementale ; et enfin, concevoir le logiciel d'interaction (programmation, drivers...).

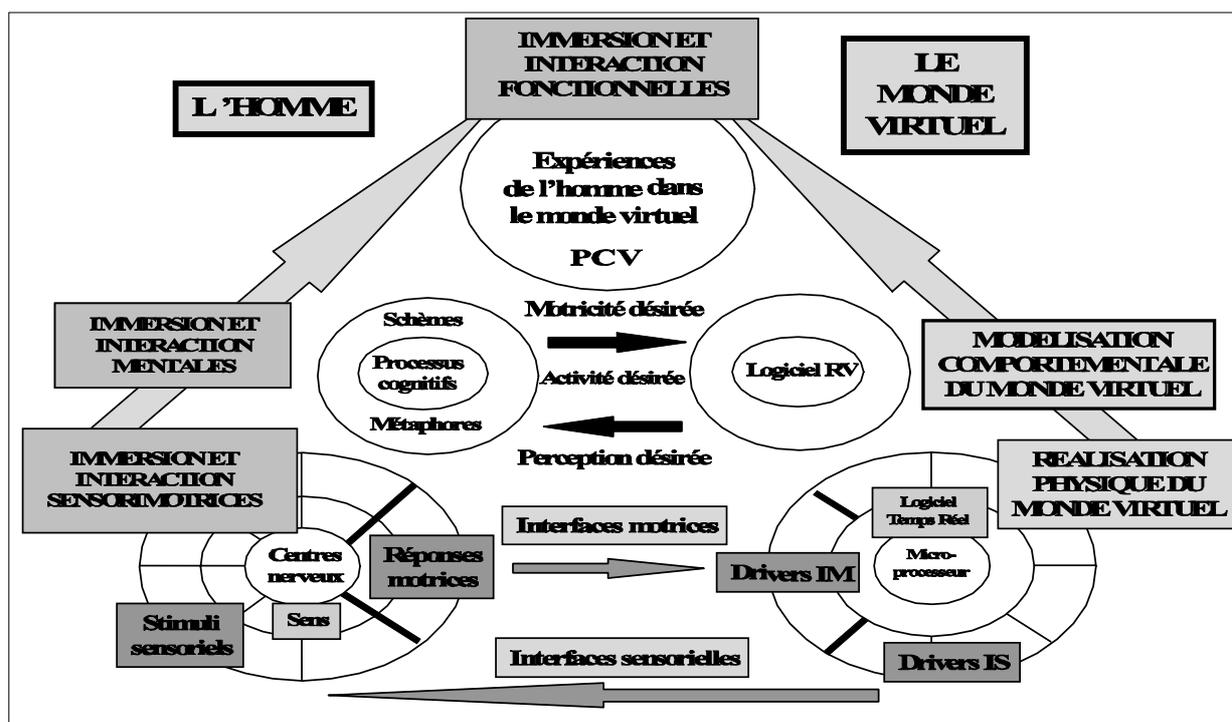


Figure 2 : Schéma anthropocentré de l'interaction en réalité virtuelle (Fuchs, 1996)

Le choix du schème, utilisé dans le monde virtuel, est très important puisqu'il doit être assimilé et familier de la population concernée, et doit délimiter les incohérences sensori-motrices. Il faut valider la conception de l'interface pour chaque niveau des I² sensori-motrices, mentales et fonctionnelles :

L'évaluation d'un périphérique de réalité virtuelle doit donc être basée sur la même démarche générale : il ne suffit pas d'évaluer le degré de réalisme, mais il faut se référer aux PCV requises et leur schème respectif afin d'obtenir les I² fonctionnelles attendues.

- Au niveau des I² sensori-motrices, l'évaluation est assez simple, puisque les caractéristiques métriques des interacteurs doivent correspondre aux caractéristiques psychophysiologiques des réponses motrices et sensorielles de l'utilisateur.
- Le niveau des I² mentales est plus difficile à évaluer, puisque difficilement quantifiable : il s'agit de tester différents schèmes, celui qui sera le plus efficace, sera celui qui a le temps d'entraînement, pour l'interface comportementale, le plus faible. Il est donc nécessaire d'utiliser des tests d'ergonomie traditionnels.
- Enfin, l'évaluation des I² fonctionnelles doit simplement être comparée aux fonctions similaires du monde réel.

1.3 LA CHIMIE ET LA REALITE VIRTUELLE

La définition plus ou moins nette de la réalité virtuelle étant posée, il est possible de s'intéresser à son apport concret en chimie ; et ils sont nombreux puisque l'on retrouve toutes sortes d'applications et d'outils spécifiquement conçus pour ce domaine ; en effet, l'immersion dans un univers inaccessible et l'interaction simulée avec des dimensions difficilement concevables permet de nombreuses possibilités : visualisation, obtention des données et extraction d'informations. Nous ne nous intéressons ici qu'aux outils de réalité virtuelle et pas aux interacteurs, car il n'existe pas d'interacteurs particuliers à ce domaine, si ce n'est que, comme nous le verrons plus loin, le Workbench est particulièrement bien adapté à ce type de travaux (Koutek, 2002).

1.3.1 VISUALISATION D'INFORMATIONS

Il faut faire attention à bien définir le terme de visualisation : en chimie, il est utilisé pour désigner l'interaction avec un ensemble de molécules mais qui n'a pas d'autre but que d'en tirer des informations visuelles (c'est le sens employé ici); en réalité virtuelle, il correspond à la visualisation d'un résultat final. Dans cette optique, les premières étapes consiste à représenter les atomes, les molécules, les forces, puis les mouvements, les évolutions et les modifications. Les problèmes rencontrés lors de ces étapes tenaient dans le problème du format employé qui doit être commun à une grande partie de la communauté scientifique pour permettre un échange d'informations efficace.

1.3.1.1 VRML : *Virtual Reality Modeling Language*

Ce langage de programmation est un outil de visualisation graphique en 3 dimensions. Il permet la création de scène 3D utilisant une collection de briques élémentaires (sphères, cônes, cubes, cylindres...). Ce langage est conçu pour « fonctionner en symbiose » avec le World Wide Web, incluant ainsi, les fonctionnalités d'hypertexte ; il est donc possible de surfer à travers cette réalité virtuelle. Pour un chimiste, les besoins concernent principalement la visualisation des transformations et des interactions moléculaires.

Le VRML permet de créer des modèles tridimensionnels riches, complexes et descriptifs des processus de manière relativement simple. Souvent, une expérimentation produit une multitude d'informations qui doivent être rationalisées et distribuées. Ainsi, même s'il existe des logiciels d'analyse des données, un problème apparaît lorsque ces données doivent être partagées avec d'autres personnes étant donné qu'elles n'ont pas forcément le bon logiciel ou la bonne plateforme ; A l'inverse, le VRML offre une architecture indépendante et accessible. Ce format est donc l'exemple type la façon dont est exploité le premier niveau de réalité virtuelle en chimie.

1.3.1.2 PDB⁴ : Protein Data Bank

Le but de la visualisation est donc de faciliter l'échange entre biologistes et scientifiques de l'imagerie mais, la puissance des outils de visualisation moléculaire est très limitée. C'est pour cela qu'un format commun semble s'imposer actuellement dans la communauté des biologistes (ceux qui ont un regard très « chimique » de leur matière), il s'agit du PDB, c'est une base de données permettant de visualiser l'ensemble des protéines. Le schéma ci-dessous (Figure 3) montre comment le format PDB est intégré au format propriétaire de chaque logiciel de visualisation et de simulation (ici VMD : Visual Molecular Dynamics⁵).

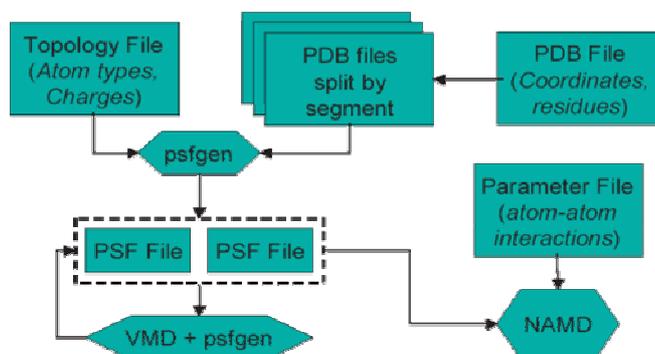


Figure 3 : Exploitation du format PDB de représentations des protéines par VMD

1.3.2 SIMULATIONS DE DYNAMIQUES MOLECULAIRES

Un des autres points remarquables sur la figure 3, concerne l'utilisation préalable d'un code calculant les champs de forces des diverses molécules impliquées dans la simulation ; comme nous le verrons plus loin, celui-ci est très important car il joue un rôle fondamental dans le résultat des simulations des dynamiques moléculaires. De la même manière que le PDB, il en existe plusieurs formats, mais celui qui tend à s'imposer s'appelle CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics⁶) ; c'est actuellement le moteur de simulation des dynamiques moléculaires le plus performant et le plus utilisé. Sur la figure 3, c'est NAMD (Scalable Molecular Dynamics⁷) qui se charge de faire les calculs de cette simulation en fonction des données qui lui sont transmises : positions des atomes et leur champ de force. VMD affiche les résultats.

1.3.2.1 Quelques exemples de simulations

La réalité virtuelle peut ainsi être utilisée en tant qu'outil de calcul des interactions et dans la visualisation des modifications des liaisons (Stone et al, 2000). A ce titre, la 3D est devenue fondamentale en chimie pour comprendre le fonctionnement de certaines molécules ; car connaître les atomes qui les composent n'est pas suffisant. Comment, dans l'espace, se lient-ils les uns aux autres ? Les chercheurs savent, par exemple, que le virus HIV a besoin d'une molécule, d'une protéase pour se multiplier. Or, d'autres molécules en se « collant » à cette protéase, peuvent bloquer son action (Vonnez, 2000). L'une des conditions pour que cela se produise est que les deux molécules aient des formes qui s'imbriquent l'une dans l'autre, comme deux pièces d'un puzzle. En créant un modèle 3D de protéase, les chercheurs ont pu déterminer la forme que devrait avoir l'antiprotéase.

⁴ <http://www.rcsb.org/pdb/>

⁵ <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

⁶ <http://www.charmm.org/>

⁷ <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

Grâce à la réalité virtuelle, les simulations de dynamiques moléculaires permettent d'étudier la complexité et la dynamique des processus qui interviennent dans les systèmes biologiques : la stabilité des protéines, les modifications de conformations spatiales, le repliement des protéines (ou plus explicitement, leur activation), la reconnaissance des diverses molécules entre elles, les transports ioniques... De plus, elles apportent le moyen de poursuivre des recherches dans le domaine de la création de nouveaux médicaments et la détermination de la structure (rayons X ou résonance magnétique nucléaire). Dans la littérature actuelle, les simulations de dynamiques moléculaires de protéines dans un solvant, de complexes ADN-protéine sont fréquents (McCammon et al, 1977). Il existe de plus en plus de manières distinctes pour effectuer ces simulations ; ainsi, il existe de nombreuses techniques spécialisées pour des problèmes particuliers allant de la mécanique quantique à des simulations classiques qui sont employées pour étudier les réactions enzymatiques (il faut néanmoins limiter les simulations à 25000 atomes pour que l'échelle de temps du calcul soit raisonnable) (Thirumalai et al, 2003).

1.3.2.2 *Le cas particulier du docking*

Cette technique de réalité virtuelle est une technique qui permet de calculer et de visualiser l'ensemble des mécanismes et interactions intervenant lors de la formation de complexes moléculaires et d'autre part d'interagir avec les résultats (Cavin, 2002). Les principaux défis dans ce domaine sont de prédire comment les molécules vont s'assembler et d'identifier les facteurs qui déterminent la spécificité de l'interaction (il est nécessaire de faire attention à ce terme puisqu'il désigne une interaction chimique et non l'interaction homme-machine). Malgré de nombreuses études, les algorithmes de docking de protéines restent peu efficaces, à la différence des méthodes de docking entre de petits ligands et leurs récepteurs, dont les algorithmes sont désormais performants au niveau du temps de calcul et au niveau de la fonction mesurant la qualité des complexes. Les manipulations s'effectuent en trois étapes successives de filtrage, de docking et de simulation où les experts orientent le processus en fonction de critères complexes pour en optimiser la convergence vers la solution cherchée (Cai et al, 2002). La phase de docking est une phase de validation des solutions obtenues par l'inspection et l'analyse interactives des solutions proposées ; il est donc nécessaire de posséder un outil de manipulation-analyse interactif qui soit précis en ce qui concerne les interactions entre objets et qui de plus, considère les objets comme des entités flexibles.

1.3.3 EXTRACTION D'INFORMATIONS DANS LES SIMULATIONS

Enfin, au-delà de la visualisation comme aide à la représentation et des simulations dynamiques comme outils d'obtention de données, la réalité virtuelle a, en chimie, un autre aspect encore plus intéressant, c'est celui de pouvoir être utilisé comme outils d'analyses ; c'est-à-dire que les chercheurs peuvent, grâce à eux, tirer des conclusions directement de la visualisation (O. Michielin 2002). Aujourd'hui, grâce à l'ordinateur, les chercheurs parviennent à simuler l'action de substances avant même qu'elles n'existent. L'expression « drug design » consacrée en chimie thérapeutique, témoigne bien de cette révolution de la pharmacie : les scientifiques actuels ne se contentent plus de tester des substances existantes ; ils en dessinent de nouvelles. Des médicaments déjà commercialisés sont ainsi nés sur un écran d'ordinateur. L'étude des relations entre la structure d'une molécule et son action n'est pas nouvelle ; Ce qui est nouveau, c'est que l'informatique exploite ces relations pour prévoir l'effet des composés (Smith, 2002).

Ensuite, l'outil informatique permet d'élaborer des hypothèses, de chercher des variations de la forme d'une molécule qui la rendraient encore plus active, de dessiner de nouvelles substances susceptibles de se lier à une cible connue, ou encore de retrouver la forme d'une cible en connaissant les substances qui s'y fixent. L'avenir de ces techniques a un objectif principal : « l'utopique organisme virtuel » (Slepchenko et al, 2003) : c'est l'espoir qu'un jour les ordinateurs seront suffisamment puissants pour modéliser le fonctionnement de l'ensemble des atomes d'un humain. Avec les meilleurs ordinateurs, les scientifiques simulent déjà le comportement d'ensembles de nombreuses molécules, comme des membranes. Ainsi, on peut se demander dans quelle mesure on pourra bientôt simuler le fonctionnement d'une cellule mais il semblerait qu'il faille encore une dizaine d'année avant de pouvoir en simuler une petite partie (Vonnez, 2000) !

Afin d'acquérir des données sur le problème posé, la visualisation et l'interaction avec des données complexes appliquées à la chimie moléculaire, il a d'abord fallu déterminer une démarche de travail, les différentes méthodes reprennent les mêmes éléments généraux, mais il a été décidé de suivre une démarche s'inspirant de la méthode MKSM (J.-L. Ermine, 2000). L'autre point que nous verrons, ici, concerne l'étude des périphériques : il a en effet été nécessaire d'évaluer chaque périphérique, ses avantages et ses inconvénients afin d'être à même de déterminer ceux qui seraient par la suite exploitables.

2.1 LA METHODE MKSM

La démarche de MKSM est une démarche de recueil des connaissances. Elle consiste à modéliser les connaissances, point de vue par point de vue auprès des « sources de connaissances » (experts et spécialistes) d'une entreprise ou d'un laboratoire. Elle utilise notamment le modèle d'activité et le modèle des tâches.

2.1.1 MODELE D'ACTIVITE

Le modèle d'activité présente la démarche générale menée ; il permet de recenser, caractériser, ordonner et hiérarchiser les activités du domaine traité. Le formalisme utilisé pour ce modèle est typique des modèles d'analyse fonctionnelle ; c'est-à-dire qu'il est constitué d'un ensemble de schémas organisés en une hiérarchie de décomposition. Un schéma correspondant à un niveau de la hiérarchie, il comprend les différentes activités qui sont représentées par des rectangles et l'ensemble des entrées et des sorties associées. Pour chaque activité les acteurs (personnes pour la conception et matériel pour le fonctionnement), les ressources (processus, procédures nécessaires à l'accomplissement) et les connaissances utiles (entrées : informations et matières utilisées par l'activité ; et sorties : les résultats) sont identifiés. Il s'agit de mettre en contexte des connaissances, d'analyser l'activité du système qui produit ou utilise des connaissances dans le but de replacer les connaissances du domaine dans le cadre d'une utilisation opérationnelle. C'est pour cela qu'il est décomposé en grande phases ou sous-activités du métier considéré ; les grandes phases sont articulées entre elles par échanges de données, flux de matière. C'est donc une analyse descendante, puisque guidée par les données, hiérarchique, modulaire et structurée.

2.1.2 MODELE DES TACHES

Le point de vue des tâches restitue le savoir-faire utilisé pour réaliser tout ou partie de certaines activités identifiées dans le modèle d'activité, les raisonnements de l'expert, ses décisions et les actions qu'elles induisent dans son travail. Le formalisme utilisé est constitué d'un ensemble de schémas organisés en une hiérarchie de décomposition. Un schéma correspond à un niveau de la hiérarchie de décomposition, il comprend les différentes tâches qui sont représentées par des rectangles et les structures dites « de contrôle » qui décrivent l'ordonnancement des sous-tâches en reliant ces sous-tâches par des signes caractéristiques.

Cette méthode de recueil des connaissances (MKSM) est composée d'interviews, d'actes de mobilisation, de mise en cohésion puis de consensus ; il est donc nécessaire pour analyser la connaissance à travers un point de vue sémiotique (son information, son sens et son contexte) et un point de vue systémique (sa structure, sa fonction et son évolution) de procéder de manière itérative : ainsi, il est nécessaire de boucler les étapes primordiales de cette démarche :

1. l'analyse des facteurs humains,
2. la participation des utilisateurs à la conception du modèle,
3. le développement d'un prototype et la détermination de l'instrumentation,
4. l'évaluation par l'étude des utilisateurs

2.2 DISPOSITIFS D'INTERACTION

Leur développement suit deux grandes philosophies :

- Les prothèses portées par l'opérateur pour percevoir et transmettre des informations ; par exemple les casques ou les gants. Ici, le couple minimal est la souris et l'écran.
- Les dispositifs situés dans l'environnement du système de réalité virtuelle, permettant à un opérateur de percevoir et transmettre avec ses moyens naturels (yeux, mains, corps) ; par exemple, des caméras peuvent capter les positions et déplacements de la tête ou du corps pour les traduire en actions dans le monde virtuel. Elle peut nous apparaître comme la catégorie la plus naturelle et la plus ergonomique ; mais elle est aussi plus difficile à mettre en œuvre étant donné qu'elle nécessite de s'adapter à l'utilisateur.

Dans la pratique, le matériel est souvent classé par rapport à son but : c'est-à-dire qu'il s'agit de dispositifs de commande, de perception ou outils-logiciels. La plupart des informations suivantes et celles du tableau de l'annexe 2, proviennent de Fuchs (1999) ou du cours de Guittou sauf précisions. L'annexe 2 résume les inconvénients et les avantages de chaque type de périphérique de réalité virtuelle, la liste ne se veut pas exhaustive, mais représentative des éléments que l'on trouve couramment.

2.2.1 DISPOSITIFS MOTEURS

- Traqueurs : leur rôle est de synchroniser les images avec les mouvements en captant la position et l'orientation de l'utilisateur et en les reportant sur l'environnement (Poupyrev, 1999); le traqueur de position comporte des émetteurs fixes et des récepteurs sur une partie du corps de l'utilisateur ; son principe de fonctionnement est de générer un signal grâce à une source et de mesurer la perturbation de ce signal par un capteur (l'envoi des données se faisant sous forme numérique). Il en existe à capteurs mécaniques, électromagnétiques, ultrasons et optiques.
- Interacteurs : leur but est de gérer les actions et les réactions de l'utilisateur.
 - Les joysticks (ou manches) : ils gèrent la navigation, le contrôle d'application ; lorsqu'il est haptique, il reproduit les perceptions du toucher - sens tactile - et le « retour de force » ou « d'effort » exercé par un objet sur l'utilisateur.
 - Le Phantom (Chen, 1999) : il fournit six degrés de liberté de mouvement et six autres pour le retour d'effort. La conception du système permet à l'utilisateur d'interagir avec l'ordinateur en prenant un stylet (ou une poignée...) à la main.
 - La souris 3D : elle peut exécuter des rotations et des translations sur six degrés de liberté. Elle permet la manipulation d'objets (par l'intermédiaire d'une boule). Les pressions exercées sont mesurées par une jauge.
 - Les gants de données (Richard, 1996) : ils ont pour rôle de saisir les mouvements de la main et permettre des actions de préhension et de pointage d'objets. Certains sont composés de fibres optiques ; le principe étant alors que plus un doigt est fléchi, plus le flux lumineux sera réduit.
 - La palette graphique (Bowman, 1997) : la simplicité de sa prise en main en font un outil de choix pour le déplacement, la sélection et la manipulation d'objets, mais étant donné qu'elle constitue un espace en 2 dimensions, elle fait souvent appel aux métaphores pour être utilisée correctement.

2.2.2 DISPOSITIFS SENSORIELS

- Lunettes stéréoscopiques: elles permettent de percevoir la profondeur en affichant des images décalées ; ces images captées par la rétine, sont ré-assemblées par le cerveau en une seule et même image possédant des caractéristiques tridimensionnelles. Le filtrage vert-rouge ayant tendance à disparaître, la solution adoptée est de fermer alternativement la perception de chaque œil ; il est alors nécessaire de doubler la fréquence d’affichage pour conserver un mouvement fluide. Elles sont dites actives lorsqu’un obturateur est synchronisé avec le projecteur et passives lorsqu’il s’agit de filtres polarisés.
- Casque VR : les personnes, une fois équipées d’un casque, n’ont plus accès à leur environnement réel ; des lentilles « grand angle » permettent d’augmenter le champ de vision, mais l’immersion reste limitée. Ici, il y a projection directe sur deux canaux différents.
- Grand écran : c’est un écran vidéo de dimensions importantes ; il est particulièrement bien adapté pour construire une image stéréoscopique : c’est la projection simultanée sur un canal des deux images décalées puis un filtrage intervient au niveau de l’utilisateur (Lunettes).
 - Workbench (Koutek, 2002) : c’est un bureau de travail virtuel qui peut afficher des images en 3D. C’est un système très immersif.
 - CAVE (Cruz-Neira, 1993) : l’utilisateur se trouve dans un cube où des scènes 3D sont projetées sur un nombre de face variable. C’est un système très immersif, la stéréo permet d’éliminer le support de projection, de façon à ce que l’on ne voit plus les coupures à l’écran.
 - Mur immersif : il permet d’obtenir des objets de taille humaine en taille réelle. Il peut être projeté directement, mais il y a alors des problèmes de masquage de l’affichage, ou rétroprojeté, mais il perd alors en luminosité.
- Dispositif mobile : il est composé de plusieurs écrans géants de manière à s’adapter au nombre de personnes et à l’application recherchée, mais cette mobilité n’est pas très facile à mettre en oeuvre.



Illustration 1 : Mur immersif affichant une dynamique moléculaire

Le cadre théorique et les outils nécessaires à la pratique expérimentale étant définis, il est enfin possible de construire un modèle d'activité et un modèle des tâches et de s'intéresser à l'application concrète des hypothèses des niveaux de I². La première étape a donc consisté à faire une évaluation des utilisateurs et à construire un profil utilisateur. Ensuite, il a fallu procéder à l'analyse des facteurs humains ; un questionnaire a donc été créé afin de mettre en place les modèles d'activités et les modèles des tâches. C'est alors qu'il a été possible de développer un prototype d'interfaçage. Enfin, nous verrons comment il aurait été nécessaire de procéder à l'évaluation de cette interface « comportementale » par divers utilisateurs.

3.1 PROFIL UTILISATEUR

Ainsi, lors de l'approche théorique, la première étape a pu être mise en œuvre à travers l'évaluation des points de vue existants. Il a donc été possible de se rendre compte grâce au cadre théorique étudié, que trois principaux profils (expert, occasionnel et naïf) se dégagent par rapport à l'utilisation des outils de réalité virtuelle des personnes interrogées.

3.1.1 CONSTITUTION D'UN PROFIL

Ici, c'est une technique d'enquête, très classique en sciences sociales, basée sur une pratique d'observations à faible structuration, qui a été utilisée (Blanchet, 2000) : il s'agit de compte rendus de visites, de travaux pratiques de pré-expérience aux contacts des experts et des stagiaires dans un laboratoire apportant des observations cadrées ou orientées par des préoccupations de recherche. Ils assument un inventaire des questions étudiables et des conditions réelles d'engagement de la recherche. C'est ainsi que les comptes-rendus des réunions de travail d'un collectif de gestion d'une classe, ou dans une entreprise, ou dans un laboratoire de recherche constituent un matériau appréciable pour des analyses psychologiques ou socio-analytiques sur le fonctionnement des groupes cités. On a ainsi des traces systématiques d'une observation narrative, susceptible d'apporter des repères pour l'étude de la dynamique de ce collectif.

3.1.2 EXPERT EN CHIMIE MOLECULAIRE

Le premier contact fût M. Laguerre (2003) puisqu'il est directement associé à ce stage et volontaire pour passer une partie de son temps à fournir des informations sur sa méthode de travail. Il a donc été possible de réaliser quelques interviews non directives. Celles-ci ont permis d'établir quelques-uns de ses besoins et sa méthodologie de travail. Il est donc possible de constituer son activité principale de recherche en quelques étapes :

1. Importation des molécules (à partir des formats existants tels PDB) puis mise en place de chacune d'entre elles dans une boîte (ensemble de 16 000 à 25 000 atomes). Cette construction peut être automatisée par des scripts mais ils sont relativement complexes à mettre en œuvre et pas toujours suffisamment précis.
2. Calcul de l'évolution du système pendant un certain nombre de nanosecondes : une fois la boîte remplie, il ne reste plus qu'à indiquer le temps durant lequel on désire observer, les interactions moléculaires et apporter les données au cluster de PC qui va se charger d'effectuer les calculs (actuellement, le temps de calcul moyen avoisine la semaine).
3. Visualisation des résultats afin de vérifier que le système a bien évolué comme attendu : il peut être nécessaire d'interrompre la simulation s'il apparaît que le système n'évolue pas du tout de façon conforme à la réalité attendue. Dans le cas où cela fonctionne, il s'agit de visualiser l'ensemble de la séquence afin de repérer visuellement des indices expliquant la façon dont le système a évolué, ou simplement de repérer ce qui a pu évoluer. C'est une étape assez longue, dont la fiabilité est faible, d'autant plus qu'il n'est pas actuellement possible de visionner une séquence de quelques nanosecondes en entier (seule une demi nanoseconde peut être affichée à la suite).

4. Analyse mathématique des fichiers binaires sans logiciel particulier : à partir de la visualisation de la séquence et des possibilités d'explications entrevues, l'expert va essayer de chercher à travers les données mathématiques les informations lui permettant de déterminer les mécanismes à l'origine du phénomène observé à plus large échelle. Par exemple, il peut chercher à déterminer la distance et les angles de certaines molécules par rapport à d'autres et y chercher des événements inattendus. A cette étape, il est possible de retourner en arrière afin de vérifier certaines intuitions que pourraient apporter les données mathématiques.
5. Sorties graphiques permettant la mise en valeur des conclusions mathématiques : une fois, l'explication du phénomène trouvée, le rendu tridimensionnel de la réalité virtuelle ne sert que dans une optique de publication ou de partage des connaissances.

L'autre point important qui a pu être mis en avant à travers ces réunions concerne, l'ensemble des besoins propres aux applications utilisées en chimie moléculaire pour la visualisation des dynamiques ; grâce à cela, on peut déterminer les PCV nécessaires au travail courant avec la réalité virtuelle et donc adapter au mieux les interacteurs pour qu'ils correspondent aux I² fonctionnelles attendues. Le principal problème concerne la manipulation de la boîte d'atomes : si en combinant les différents boutons de la souris, on peut facilement effectuer certaines translations, il est beaucoup plus difficile d'effectuer également des rotations selon les trois axes sans perdre le point d'observation. De plus, dans certains cas, il peut être particulièrement intéressant de tourner autour de certains atomes selon des angles discrets afin de savoir que l'on est revenu au point de départ. Dans ce cas, il n'existe pas de problème de manipulation car il n'y a pas d'interactions avec les données calculées au préalable, mais c'est le cas principalement pour le docking (une technique qui n'est pas utilisée dans le laboratoire observé).

Les autres problèmes concernent le rendu graphique puisque l'intérêt scientifique d'une telle simulation ne concerne que quelques atomes et liaisons particuliers or le nombre d'atomes compris dans une boîte est de 15000 à 20000. Il est donc indispensable de pouvoir utiliser un zoom pour accéder rapidement au site actif. Pourtant, afin qu'il soit efficace, il doit être accompagné d'informations sur la profondeur et sur les molécules environnantes ; il est donc nécessaire d'étudier les possibilités de transparences et/ou d'une carte combinée au zoom. En effet, bien qu'il existe des possibilités logicielles d'effectuer des transparences, elles sont actuellement très difficiles à mettre en œuvre. Un autre point intéressant, à propos du rendu graphique, concerne la possibilité de « color coding » (cela consiste à appliquer des couleurs particulières à différentes surfaces afin de les différencier le plus efficacement possible). Il faut d'ailleurs remarquer que la visualisation des atomes n'est pas forcément une obligation puisque la plupart du temps, il est nécessaire d'appliquer des fonctions différentes du simple espace électronique occupé comme les champs de force ou comme les différents niveaux structurels de certaines protéines. De même, le clignotement de certaines surfaces est un bon moyen de ne pas perdre un objet de vue.

Les problèmes sont donc assez simples : il existe une étape du traitement des informations qui ne peut être faite, jusqu'à présent que de manière intuitive, mais celle-ci étant très peu adaptée aux utilisateurs, elle est source de pertes de temps importantes et de frustrations. Des réponses aux problèmes apparaissent dans les tentatives de l'expert pour résoudre ses problèmes (l'essai de la vision stéréoscopique apporte un vrai plus, mais étant donné la taille de l'écran, le dispositif le rend rapidement malade, ... L'utilisation de la souris est une gêne aussi bien pour la manipulation que par la proximité de l'écran qu'elle impose...) mais il n'a pas conçu d'interface globale qui puisse répondre à ces différents problèmes. Néanmoins, il est à remarquer que l'expert arrive à utiliser au mieux les outils dont il dispose, il faut donc garder à l'esprit que la proposition d'un prototype d'interface ne doit pas se faire que dans sa seule optique (mais son optique doit être prise en compte dans l'intérêt des personnes désirant atteindre son niveau de maîtrise de l'outil).

3.1.3 PERSONNES UTILISANT OCCASIONNELLEMENT CES OUTILS

Ils représentent au sein du laboratoire les personnes ayant besoin des outils de réalité virtuelle mais qui n'arrivent pas à en tirer profit, du fait de l'inadaptation des techniques de manipulation aux PCV qui sont utilisées dans ces tâches. De ce fait, l'apprentissage étant trop long, ils se privent d'une source d'information considérable. C'est donc, à priori, à cette catégorie de personne, ayant une certaine connaissance des outils mais pas vraiment d'entraînement que doit s'orienter l'amélioration de l'interface comportementale. C'est pour cela qu'il est nécessaire d'effectuer un questionnaire auprès de ce type de personnes afin de déterminer leur tâche et donc d'en tirer un schéma de leur utilisation des outils de réalité virtuelle.

3.1.4 UTILISATEURS NAÏFS

La plupart des personnes concernées ne connaissent la visualisation tridimensionnelle des molécules qu'à travers des outils d'affichage de molécules simples comme ceux décrits dans la première partie théorique, c'est-à-dire sans dynamique et sans but d'extraction de connaissances. Leur représentation des phénomènes, sur lesquels ils travaillent, reste très scolaire. Il est donc difficile de pouvoir établir un modèle de leurs activités et de leurs tâches ; d'autant plus que leurs travaux sont très variés ; le questionnaire mis en place n'est donc pas orienté vers cette catégorie de personne, même si une place doit leur y être conservée.

3.2 ANALYSE DES ACTIVITES

C'est sur la base de ces profils types qu'a été réalisé un questionnaire permettant de préciser la nature des activités et des tâches que réalisent les différentes composantes.

3.2.1 CONSTRUCTION DU QUESTIONNAIRE

Ce questionnaire (voir Annexe 1) a donc été réalisé selon les principes rappelés par Ghiglione (1978) : « Il est habituel de considérer qu'une enquête complète doit commencer par une phase qualitative, sous la forme d'un ensemble d'entretiens non directifs et structurés, suivis d'une phase quantitative, l'application d'un questionnaire à un échantillon permettant une inférence statistique au cours de laquelle on vérifie les hypothèses élaborées au cours de la première phase et on les complète par des renseignements chiffrés ».

3.2.2 DEPOUILLEMENT DES REPONSES

Le dépouillement a été fait uniquement de manière qualitative étant donné le type de questions posées. La majorité des personnes, parmi la trentaine interrogées, répondent « non », lorsqu'on leur demande s'il utilise des outils de visualisation moléculaires en trois dimensions ; ils expliquent qu'ils n'en éprouvent « pas le besoin », qu'ils font « plutôt du travail de paillasse », qu'ils ne sont pas « familiarisés avec ce type de logiciel », qu'ils n'y a pas « d'utilité en rapport avec leur activité »... Ces personnes ont néanmoins toutes connaissances de l'existence de ce type de logiciel. De plus, il apparaît que la représentation moléculaire de ces personnes est systématiquement en deux dimensions.

La seconde catégorie concerne les personnes qui se servent concrètement des techniques de réalité virtuelle mais de façon occasionnelle : ce sont les personnes qui répondent se servir de ces logiciels par l'intermédiaire de quelqu'un et celles qui indiquent s'en servir d'elle-même mais pas en permanence : la réalité virtuelle intervient au « début », au « milieu » ou à la « fin » de leur recherche afin de « visualiser des structures ARN », « d'évaluer des distances intra et inter moléculaires », « de visualiser des résultats », « de visualiser des interactions »... dans le but de « prévoir des interactions protéine-ligand », de « prédire des conformations », « d'envisager les propriétés d'une molécule », de « minimiser » ou « maximiser l'énergie »... Ces réponses sont très intéressantes car ce type de personne n'utilisant ces logiciels que par à-coups, ils ne les maîtrisent pas et sont donc confrontées aux problèmes qui nous intéressent tout particulièrement dans notre démarche d'application du modèle de Fuchs. Ainsi, ils évoquent le « manque de simplicité d'utilisation » ou dans la « mise en œuvre », « le manque d'intuition » dans l'exploitation des interfaces, la trop grande nécessité d'avoir « des connaissances » sur le fonctionnement de ces

logiciels, le « manque intuition dans l'orientation des molécules » ou « dans le déplacement dans la scène », le manque « d'ergonomie » et bien sûr, le « manque de clarté de la visualisation ».

La dernière catégorie concerne les experts qui déclarent utiliser « tout le temps » ce type d'outils. Elle est moins intéressante car, si elle décrit au mieux leurs différentes utilisations : « modélisation moléculaire », « éducation », « esthétique », « tableaux de paramètres structuraux »... les problèmes évoqués ici, concernent les problèmes techniques des logiciels utilisés par chacun : « fonctions mal définies », « visualisation 3D non exacte », « manque d'assemblage par liaison faibles », « problèmes de programmation », « problèmes dans le calcul des conformations »... sauf dans quelques cas comme : « nécessité d'un grand écran », « problème de simplification des structures », « limites des transparences » ou dans « la représentation des surfaces », « mise en œuvre des animations »...

3.2.3 ELABORATION DU MODELE D'ACTIVITES

Le recueil des données obtenues par le questionnaire nous confirme grossièrement trois catégories de personnes : « l'expert » dont nous avons vu la démarche de travail plus haut, le « naïf » qui n'utilise la réalité virtuelle en chimie moléculaire qu'à des fins « ludiques » (non réellement intégrables dans le schéma de leurs activités) et l'utilisateur occasionnel qui nous intéresse plus particulièrement : son utilisation de la réalité virtuelle est très variée ; elle se place à différents moments de sa démarche de travail globale et on retrouve bien les trois différents niveaux d'utilisation théorique de la réalité virtuelle en chimie. Nous pouvons donc voir, en Annexe 3, un schéma représentant les différentes activités autour de la réalité virtuelle pour ce type d'utilisateur grâce à leurs réponses aux questionnaires.

3.3 ANALYSE DES TACHES

De la même manière, on peut analyser plus en détails l'enchaînement des sous-tâches dans le cadre d'une application ; par exemple, l'annexe 4 nous montre comment est organisé le travail d'un chimiste qui doit prédire les interactions entre une protéine et son ligand. Dans ce processus, notre intérêt se porte tout particulièrement sur la sous-tâche où la réalité virtuelle intervient ; elle est décrite par un modèle des tâches, c'est la Figure 4.

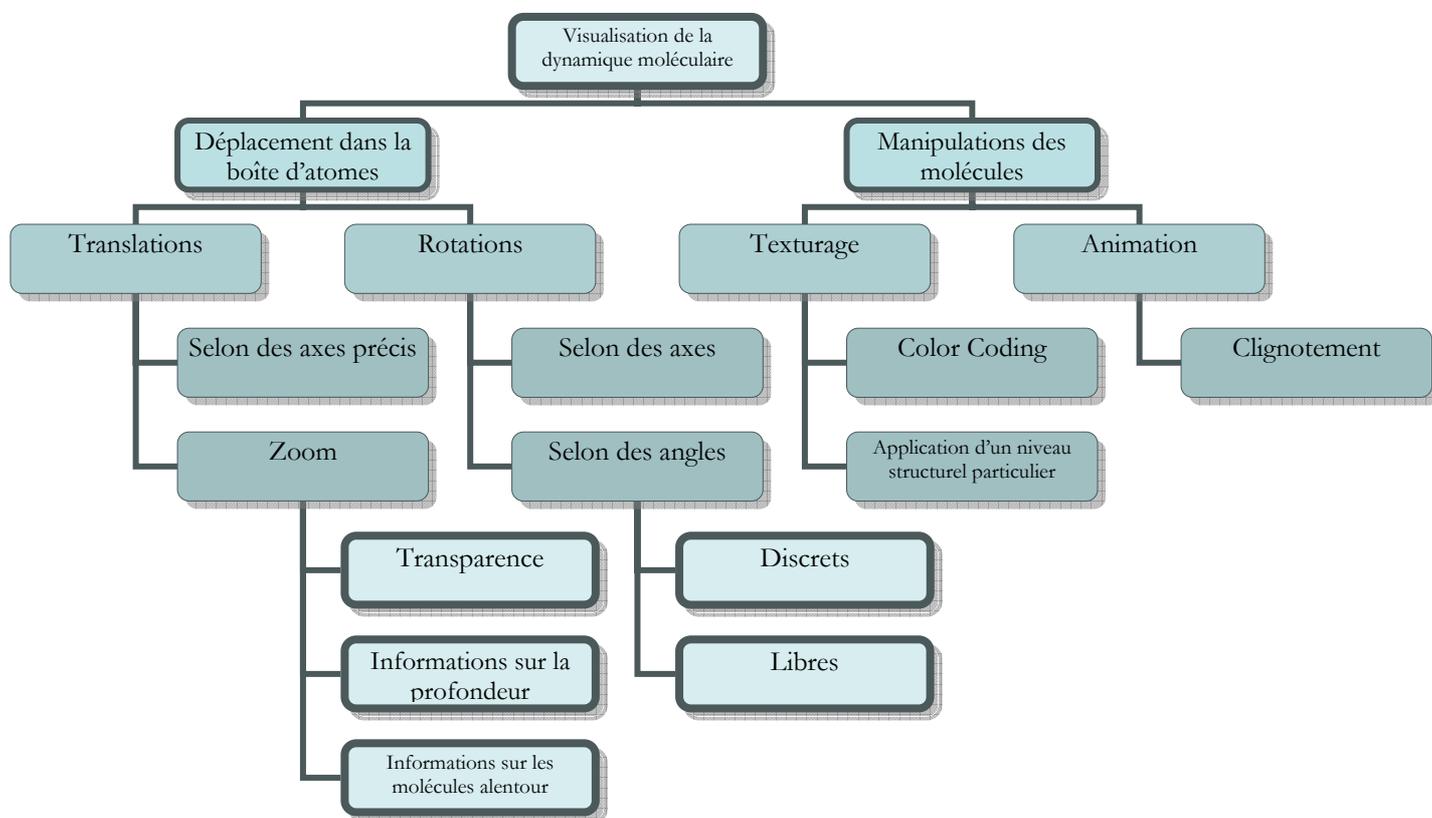


Figure 4 : Modèle d'une sous-tâche concernant l'interaction en chimie

3.4 PROPOSITION D'UNE INTERFACE

Dans le cadre de la démarche de construction d'une base de connaissance, l'étape suivante consiste à imaginer le type d'interface que l'on peut proposer pour effectuer la mise en œuvre pratique de tests de validation. C'est ici qu'interviennent, enfin, les outils théoriques développés par Fuchs (1999), puisqu'il faut d'une part, prendre en compte le matériel existant et de l'autre, les nécessités imposées par la pratique de la chimie et de la biologie moléculaire. Il est donc possible de résumer les contraintes et les avantages de chaque type d'interacteurs et de visualiseurs en fonction des besoins de la chimie moléculaire, vue par le modèle des tâches mis en place (Figure 4 et Annexe 4), d'après le tableau de l'annexe 2.

3.4.1 NIVEAU DES I² FONCTIONNELLES

C'est le niveau des tâches ou des fonctions à réaliser ; les interacteurs et visualiseurs doivent donc correspondre à des nécessités (les PCV) apparues dans le modèle des tâches : visualisation des molécules combinée à un modèle d'interaction comprenant diverses fonctions (color coding, modification du type de représentation des molécules...), mais aussi le travail collaboratif afin d'améliorer l'étape d'analyse où l'intuition est importante. Il est déjà possible de se rendre compte que le Phantom n'est pas adapté à ce niveau ; en effet, sa structure le rend impossible à déplacer. De la même manière, la souris a besoin d'un support et ne peut donc pas être utilisée en groupe devant un écran géant.

3.4.2 NIVEAU DES I² MENTALES

Il s'agit de vérifier que les pensées de l'opérateur dans son interaction avec le monde virtuel correspondent aux schèmes utilisés dans une situation réelle comparable : ici, il existe un problème en ce qui concerne la chimie puisqu'il n'existe pas de situation réelle du niveau moléculaire. Nous pouvons donc être un peu moins restrictif et considérer que les schèmes mis en œuvre « naturellement » doivent être privilégiés, même s'ils mettent en œuvre des pensées métaphoriques ; c'est donc à travers les entretiens et la réalisation des différents modèles qu'il faudrait vérifier que les schèmes utilisés sont les bons.

Les schèmes utilisés sont les rotations (selon des angles discrets ou variés pour regarder et tourner la scène dans tous les sens), les déplacements (afin de pouvoir se déplacer n'importe où dans la scène), la préhension des molécules (pour les placer dans la boîte ou pour leur appliquer diverses fonctions)... On pourrait penser que le schème de représentation des forces interatomiques est important ; d'ailleurs, G. Sankaranarayanan (2003) décrit la manière de concevoir une interface haptique utilisable en biologie moléculaire et la manière de la tester (elle pourrait donc servir à sentir ces forces). Mais, au cours de l'élaboration des modèles à l'IECB, la pertinence des interfaces haptiques n'est pas apparue puisqu'elles sont essentiellement utiles en ce qui concerne le docking alors que les tâches effectuées dans ce laboratoire ne contiennent pas ce type de sous-tâches.

3.4.3 NIVEAU DES I² SENSORI-MOTRICES

A ce niveau, il faut valider les interactions de l'utilisateur directement dans les logiciels de simulation des dynamiques moléculaires. En ce qui concerne les interacteurs, le choix est complexe à faire : tout d'abord, nous avons vu qu'il est primordial dans le type de tâches observée de pouvoir effectuer des rotations complètes et selon des axes précis (Figure 4). Il apparaît donc que les gants de données et les traqueurs de position ne peuvent pas convenir aux actions attendues, du moins, pas de la manière dont Fuchs (1999) le décrit, c'est-à-dire sans métaphores. C'est d'ailleurs le problème que rencontre la palette graphique, puisque son utilisation seule ne peut s'envisager qu'à travers une utilisation complètement métaphorique (dans le cas qui nous intéresse, au moins) donc très éloignée de ce que l'on attend dans le cadre de cette étude.

Le joystick, lorsqu'il est sans fil, peut effectuer les différentes rotations et translations nécessaires avec les deux mains, sans compter que sa base est, bien souvent, équipée de nombreux boutons pouvant chacun exécuter des scripts et donc, utiliser des fonctions avancées

des différents logiciels de simulation des dynamiques moléculaires utilisés. Il est vrai qu'il faut faire appel aux métaphores pour les déplacements, mais ce sont des métaphores plus transparentes. Il faut, de toute façon, noter que l'utilisation de métaphores est indispensable pour utiliser les diverses fonctions (color-coding, transparences...) donc il est nécessaire de faire ce compromis par rapport à la théorie de Fuchs (2000). De plus, la possibilité de programmer des fonctions à ses boutons supplémentaires est très intéressante, à ce niveau, puisqu'elle permet d'adapter l'ergonomie des logiciels de visualisation moléculaire.

En ce qui concerne les visualiseurs, il apparaît évident que la meilleure solution serait le Workbench (Koutek, 2002), mais il semble qu'un écran géant, son rétroprojecteur permettant de projeter des images stéréoscopiques et des lunettes pour les décrypter, soit une meilleure solution étant donné son coût moindre, tout en conservant la stéréoscopie. De plus, l'écran géant permet de réduire les problèmes induits par la stéréoscopie (nécessaire en vue d'améliorer la précision de la perception des différentes molécules et de leur profondeur) puisque, la distance d'affichage étant plus grande, les efforts d'accommodation sont moindres. Il apparaît donc que le joystick combiné à un écran géant et des lunettes stéréoscopiques semble être le meilleur compromis « facilité de mise en œuvre - gain sur les différentes I² ».

3.5 INSTRUMENTATION ET PROTOTYPAGE

Il est nécessaire de préciser qu'aucun dispositif d'interaction n'étant disponible et/ou compatible avec les logiciels utilisés par les chimistes, il n'a pas été possible de tester un dispositif dans le cadre de ce stage et, par la même, toutes les informations fournies ici, sont purement théoriques. Nous voici d'un côté avec une interface actuelle simple qui équipe toutes les machines actuelles (écran simple et souris) mais dont la plupart des personnes interrogées se plaignent pour son manque d'ergonomie et la complexité de l'apprentissage de son utilisation (voir le dépouillage du questionnaire) et de l'autre, une interface composée d'un écran géant, d'une paire de lunettes stéréoscopiques et d'un joystick sans fil. Comment comparer les deux ?

3.5.1 NIVEAU DES I² FONCTIONNELLES

Afin de comparer les deux interfaces à un niveau fonctionnel, il suffit d'effectuer des tests pratiques comparables à ce qui se fait dans le travail de tous les jours de l'expert : il faut ainsi comparer le temps nécessaire pour composer un boîte d'atomes, par exemple, ou le temps nécessaire pour se positionner à un endroit précis dans une scène de visualisation d'une dynamique ou la précision obtenue lors d'une rotation à 360° sur un axe précis...

3.5.2 NIVEAU DES I² MENTALES

En ce qui concerne le test de ce niveau, la mise en place est complexe, puisqu'il faudrait tester les différents schémas et déterminer celui qui sera le plus efficace, c'est-à-dire celui qui aura le temps d'entraînement le plus court. Mais de toute manière, il n'existe pas de schéma réel de la manipulation de molécules donc il n'est pas réellement possible de faire de test sur ce niveau.

3.5.3 NIVEAU DES I² SENSORI-MOTRICES

La sélection d'objets et le positionnement sont parmi les interactions les plus fondamentales entre les humains et leur environnement que ce soit pour un bureau virtuel, un environnement en 3D ou le monde réel. Les recherches précédentes sur l'évaluation de la performance de l'utilisateur ont montré que la manipulation était directement liée aux propriétés et aux fonctions des périphériques d'affichage et d'entrée.

Mais il s'agit également de l'ergonomie du logiciel ; des études antérieures (Bowman, 1997) ont produit des techniques d'observation intéressantes en comparant diverses techniques de manipulation. L'évaluation de Bowman (1997) nous suggère que la méthode de manipulation « ray-casting » est sans doute plus efficace en ce qui concerne la sélection des objets tandis que la technique « Go-Go » de Poupyrev (1997) semble supérieure pour la manipulation d'objets. Il semble donc nécessaire de tester l'interface proposée avec les méthodologies de test qu'ils ont

mis en place pour ces deux types d'outils d'interaction pour confirmer que son ergonomie satisfait aux besoins des utilisateurs.

Il faut donc procéder à ces tests de comparaison des interacteurs : pour la sélection, Bowman (1997) propose une méthodologie qui consiste à faire varier la distance entre l'utilisateur et un objet à sélectionner, la taille de l'objet à sélectionner et la densité des objets entourant cet objet. Cela semble être parmi les facteurs les plus importants pour déterminer la vitesse, la précision, la facilité d'utilisation et le confort des techniques de sélection d'objets. En ce qui concerne la partie manipulation, il indique qu'il faut faire varier le rapport entre la taille de l'objet et la taille d'une cible (ce niveau correspond à la précision requise pour le positionnement de l'objet), le nombre de degrés de liberté requis (afin de tester le caractère expressif des techniques) et la distance à laquelle de l'utilisateur doit être placé l'objet. Lors de ces tests, les variables dépendantes sont la vitesse de sélection, le nombre d'erreurs commises dans la sélection, la vitesse de positionnement et des données qualitatives concernant le confort de l'utilisateur. Voici donc globalement la méthodologie des tests à effectuer pour comparer l'interface proposée à celle existante dans le but d'évaluer la pertinence du choix effectué en ce qui concerne la manipulation et la sélection dans les logiciels de simulation des dynamiques moléculaires.

CONCLUSION

La réalité virtuelle met en scène des situations où l'utilisateur est amené à utiliser pleinement ses facultés cognitives : perception, action, raisonnement, communication, apprentissage, émotion. Mais certaines de ces facultés doivent être reconsidérées, conjuguées au mode virtuel, de façon à bénéficier des possibilités originales des mondes virtuels telles que l'immersion, la téléprésence... Ces possibilités peuvent être la source de défis cognitifs dans la mesure où elles placent l'humain dans des conditions cognitives inhabituelles pour lui.

La cognition virtuelle est la particularisation de la cognition dans le cas où l'opérateur est plongé, immergé dans un monde virtuel. Certains stimuli et réponses ne sont plus échangés avec un environnement physique mais un monde virtuel. Dans ce cadre, la méthodologie proposée par P. Fuchs semble adaptée à l'amélioration des liens entre l'homme et la machine par le biais d'une interface comportementale ; néanmoins, il apparaît relativement complexe de la mettre en œuvre de façon stricte car les outils réellement utilisables (problèmes de coûts et d'encombrement) ne sont pas si nombreux. Il n'est pas aisé d'appliquer la démarche de mise en œuvre de P. Fuchs pas à pas car, ici, il ne s'agit pas de concevoir l'interface dans son ensemble, mais seulement sa partie « matérielle ». On peut, pourtant, penser que l'interface proposée pourrait déjà apporter un réel plus à la démarche de travail actuelle.

Il est possible de faire la même remarque à propos de la méthodologie de recherche utilisée, pour la construction des modèles d'activités et des modèles des tâches, puisqu'elle peut s'appliquer pour une entreprise possédant une motivation suffisante pour se restructurer en profondeur, mais dans un laboratoire possédant une structure bien établie... Il s'est, ainsi, avéré très difficile de la mettre en œuvre auprès des chercheurs et dans un laboratoire.

Evidemment, il aurait été intéressant de pouvoir effectuer le prototype d'interface cité afin de vérifier qu'en utilisant les schèmes concrètement utilisés par la navigation et la manipulation de molécules, on pouvait améliorer les niveaux d'interaction et d'immersion obtenus, mais cela n'aurait répondu qu'à la facette ergonomique du problème posé et en aucun cela aurait pu répondre aux autres critiques recueillies : certains outils d'affichage sont peu pratiques à mettre en œuvre à cause d'une défaillance au niveau de l'ergonomie logicielle, ou inexistantes, la réalisation pratique des simulations des dynamiques moléculaires est extrêmement complexe, les outils d'analyse sont soit inexistantes, soit inadaptés, soit inexacts en fonction des problématiques de chacun... l'amélioration « ergonomique » de l'interface n'aurait donc pu être efficace qu'à travers la mise en place d'une démarche concertée, avec par exemple, des séances de travail en groupe. Il faut néanmoins indiquer que ce travail constitue une bonne première étape dans ce travail puisqu'il pose les différents problèmes et propose également des solutions à tous les niveaux.

BIBLIOGRAPHIE

- J.M. André, J. Paysant, N. Martinet & J.M. Beis, « Classification et mécanismes des perceptions et illusions corporelles des amputés », Elsevier, Nancy, France, 2001.
- A. Berthoz, « Le sens du mouvement », Odile Jacob, Paris, France, 1997.
- A. Blanchet, R. Ghiglione, J. Massonat & A. Trognon, « Les techniques d'enquêtes en sciences sociales », Dunod, Paris, 2000.
- D. Bowman, "Interactions techniques for immersive virtual environments: design, evaluation and application", College of Computing, Georgia Institute of Technology, USA, 1997
- D. Bowman & L. Hodges, "An evaluation of techniques for grabbing and manipulating remote objects in immersive virtual environments, Proceedings of the ACM Symposium on interactive 3D graphics, 35-38, 1997.
- F. Brooks, M. Ouh-Young, J. Batter & A. Jérôme, "Project GROPE - Haptic Displays for scientific Visualization", Computer Graphics, vol 24 n° 4, pp 177-185, 1990.
- F. Brooks, "What's real about Virtual Reality?", Keynote address, Proceedings of IEEE Virtual Reality'99, Houston, TX, pp 2-3, 1999.
- G. Burdea & P. Coiffet, « La Réalité Virtuelle », Hermès, France, 1993.
- G. Burdea & P. Coiffet, "Virtual Reality Technology", John Wiley & Sons, New York, USA, 1994.
- G. Burdea, "Force and Touch Feedback for Virtual Reality", John Wiley & Sons, New York, USA, 1996.
- G. Burdea, "Haptic feedback for virtual reality, Rutgers University, Piscataway, USA, 1999.
- W. Cai, X. Shao, & B. Maigret, "Protein-ligand recognition using spherical harmonic molecular surfaces: towards a fast and efficient filter for large virtual throughput screening", J Mol Graph Model, 2002.
- X. Cavin, « Optimisation du docking protéine - protéine par le calcul et la visualisation haute performance », INRIA Lorraine, Nancy, France, 2002.
- E. Chen, "Six degree-of-freedom Haptic system for desktop virtual prototyping applications", Sensable Technologies Inc, Cambridge, USA, 1999.
- C. Cruz-Neira, D.J. Sandin & T.A. DeFanti, "Surround-Screen Projection-Based Virtual Reality: The Design and Implementation of the CAVE", Proc Siggraph 1993, ACM Press, New York, pp 135-142, 1993.
- J.-L. Ermine, M. Chaillot, P. Bigeon & B. Charreton et D. Malavieille, « MKSM: Méthode pour la gestion des connaissances, Ingénierie des systèmes d'Information », AFCET - Hermès, vol 4 n°4, pp 540-575, 1996.
- J.-L. Ermine, « Les systèmes de connaissances », Hermès Science Publications, 2000.
- P. Fuchs, G. Moreau & J.P. Papin, « Le Traité de la Réalité Virtuelle », Les Presses de l'école des Mines de Paris, Paris, France, 2001.
- P. Fuchs, « Les Interfaces de la Réalité Virtuelle », Les Presses de l'école des Mines de Paris, Paris, France, 1996.
- P. Fuchs, « Immersion et interaction naturelles dans un environnement virtuel », Actes de la conférence « Réalité virtuelle et cognition », ENST Paris, 1999.
- P. Fuchs, F. Nashashibi & D. Lourdeaux, "Three levels of Immersion and Interaction in a Approach of the VR Design", International Journal of design and innovation Research, vol 2 n° 1, pp 30-42, 2000.
- P. Fuchs, F. Nashashibi & D. Lourdeaux, "A theoretical approach of the design and evaluation of a virtual device", GTRV'99, Colloque scientifique international « Réalité Virtuelle et prototypage », Laval, France, 1999.
- R. Ghiglione & B. Matalon, « les enquêtes sociologiques, théories et pratiques », Armand Colin, Paris, 1978.
- P. Guitton & C. Schlick, « RRIFF: A Proposal for Interchange of Realistic Scene Descriptions », Computer Aided Design, vol. 26 n° 6, pp 238-247, 1994.
- M. Heilig. « Sensorama Simulator ». U.S. Patent 3 050 870. 1962.

A. Johnson, T. Moher & S. Ohlsson, "The Round the Earth Project", Collaborative VR for Elementary School Kids, SIGGRAPH Los Angeles, 1999.

M. Koutek, J. Van Hees, F. Post & A. Bakker, "Virtual spring manipulators for particle steering in molecular dynamics on the responsive workbench", 8th Eurographics workshop on virtual environments, Delft University of Technology, Delft, Pays-bas, 2002.

M. Laguerre, « Etude par dynamique moléculaire des récepteurs couplés aux protéines G dans un environnement membranaire complet », 13^{ème} congrès GFPP, Anglet Biarritz, 2003.

J. Lanier, M. Minsky, S. Fisher & A. Druin, (1989). « Virtual Environments and Interactivity: Windows to the Future », ACM SIGGRAPH Panel discussion, 1989.

D. Lourdeaux, P. Fuchs & J.-M. Burkhardt, « An intelligent tutorial agent for training virtual environments », 5th world multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics SCI'01, Orlando, Floride, 2001.

D. Lourdeaux, « Réalité Virtuelle et Formation : Conception d'Environnements Virtuels Pédagogiques », Thèse, Ecole des Mines de Paris, 2001.

M. Lumbreras & J. Sanchez, "3D aural interactive hyperstories for blind children, International journal of virtual reality", vol 4 n° 1, 1999.

D. Maman, « Recalage de modèles tridimensionnels sur des images réelles, application en réalité augmentée : modélisation interactive pour la télé-opération », thèse de l'Ecole des Mines de Paris, 1998.

J.A. McCammon, B.R. Gelin & M. Karplus, "Dynamics of Folded Proteins", Nature, Londres, 267, 585-590, 1977.

O. Michielin & M. Karplus, "Binding Free Energy Differences in a TCR-Peptide-MHC Complex Induced by a Peptide Mutation: A Simulation Analysis", Journal of Molecular Biology, 2002.

J. Piaget & B. Inhelder, « La psychologie de l'enfant », Que sais-je, 369, PUF, 1996.

K. Pimentel & K. Teixeira, « La Réalité Virtuelle, de l'autre côté du miroir », Addison Wesley France, Paris, France, 1994.

I. Poupyrev, S. Weghorst, M. Billinghurst & T. Ichikawa, "Egocentric object manipulation in virtual

environments: empirical evaluation of interaction techniques", Computer Graphics Forum, EUROGRAPHICS'98 issue, vol 17 n° 3, pp 41-52, 1998.

I. Poupyrev, S. Weghorst, M. Billinghurst & T. Ichikawa, "Manipulating objects in virtual worlds: categorization and empirical evaluation of interaction techniques", Journal of Visual Languages and Computing, Academic Press, vol 10 n° 1, pp 19-35, 1999.

I. Poupyrev, S. Weghorst, M. Billinghurst & T. Ichikawa, "A framework and testbed for studying manipulation techniques for immersive VR", University of Washington, Seattle, USA, 1997.

V.S. Ramachandran & W. Hirstein, "The perception of phantom limbs", Brain, Oxford University Press, Oxford, 1998.

P. Richard, R. England, A. Kheddar & P. Coiffet, "Effect of tactual feedback on performance in virtual manipulation tasks", Laboratoire de Robotique de Paris, Vélizy, France, 1996.

G. Sankaranarayanan & S. Weghorst, Role of haptics in teaching structural molecular Biology, Computer Society, Proceedings of the 11th Symposium HAPTICS'03, Human Interface Technology Laboratory, University of Washington, USA, 2003.

B.M. Slepchenko, J.C. Schaff, I. Macara & L.M. Loew, "Quantitative cell biology with the virtual cell", Trends in Cell Biology, vol 13 n° 11, 2003.

G.R. Smith & M.J.E. Sternberg, "Prediction of protein-protein interactions by docking methods", Current Opinion in Structural Biology, 2002.

J.E. Stone, J. Gullingsrud & K. Schulten, "A system for Interactive Molecular Dynamics Simulation", University of North Carolina, USA, 2000.

I. Sutherland, "A head-mounted three dimensional display", In Proc. Fall Joint Computer Conference, pp 757-764, 1968.

D. Thirumalai, D.K. Klimov & R.I. Dima, "Emerging ideas on the molecular basis of protein and peptide aggregation", Current Opinion in Structural Biology, 2003.

J.L. Vonnez, « S'il te plaît dessine-moi un médicament sur ton ordinateur », « Allez savoir ! », n°16, France, 2000.

Questionnaire sur la Visualisation Moléculaire en 3D

Age :

Sexe :

Statut :

Utilisez-vous un outil de visualisation moléculaire en 3 dimensions ?

 Vous-même Non Par l'intermédiaire de quelqu'un

↓
Où utilisez-vous ces logiciels ? (ex : Laboratoire, Domicile...)

↓
Merci de répondre à partir de la question précédée de ►

↓
A qui demandez-vous d'utiliser ces logiciels ? Indiquez son statut (pas son nom)

↓
Quand les utilisez-vous ? (ex : Au début, au milieu, à la fin d'une recherche...)

↓
Dans quel but les utilisez-vous ?

↓
Comment utilisez-vous la visualisation ? Comment traitez-vous les informations obtenues (sous quel format) ?

↓
Quels sont les problèmes que vous rencontrez lors de l'utilisation de ce type de logiciel ?

- Au niveau visuel,
- Au niveau des interactions,
- Au niveau des outils d'analyse,
- ...

► Pourquoi n'utilisez-vous pas vous-même ce type de logiciel ? (ex : problèmes d'interactions, de clarté de la visualisation, difficultés d'exploitations des données fournies...)

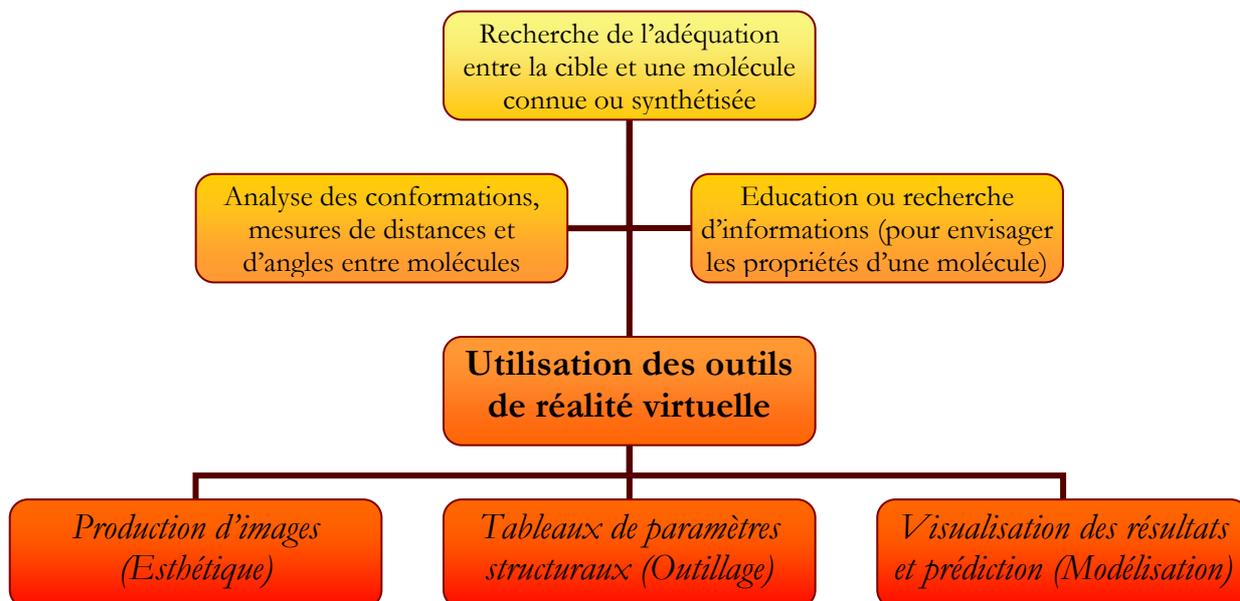
↓
De quelle manière vous représentez-vous une molécule de manière générale ? Indiquez la représentation que vous utilisez couramment de l'endol ou de l'eau, par exemple :

↓
Existe-t-il des limites à l'utilisation des informations fournies par ces outils ?

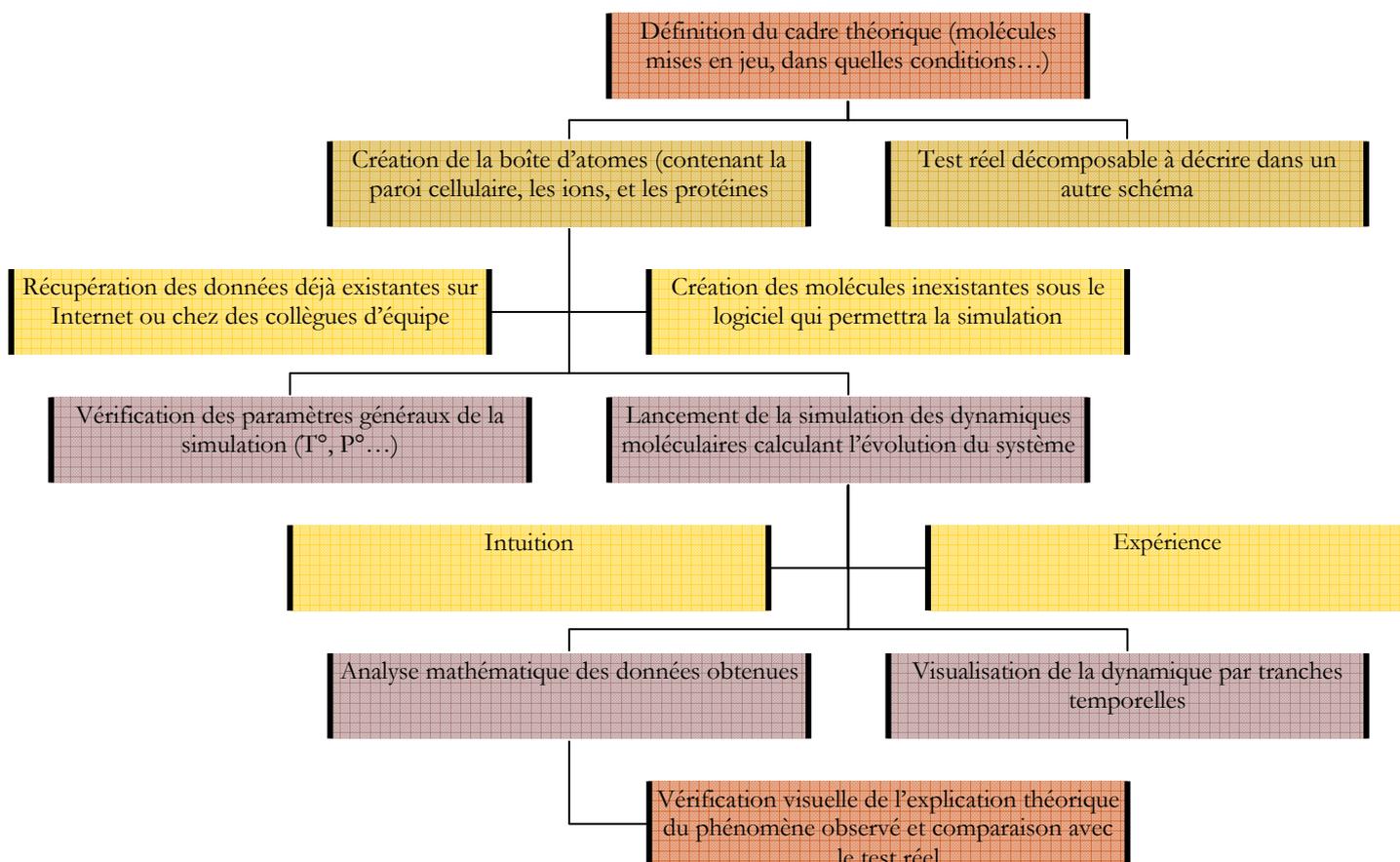
↓
Quelles améliorations attendriez-vous ?

Interacteurs		Avantages	Limitations	Utilisation
Traqueur de position	Général	Précision en distance et en angle - Bonne vitesse de mise à jour - Apprentissage rapide	Interférences (très sensible à l'environnement)	Manipuler le monde virtuel et ses objets
	Capteurs Mécaniques	Faible coût - Latence < 5ms - Apprentissage rapide	Peu de déplacement possible (restriction de la liberté de mouvement)	"
	Capteurs Electromagnétiques	Taille - Poids - Apprentissage rapide	Latence (traitement et filtrage du signal) - Interférences (avec toutes sources électriques)	"
	Capteurs Ultrasons	Faible coût - Peu encombrant - Apprentissage rapide	Précision - Réception directe nécessaire	"
	Capteurs Optiques	Latence quasi nulle - Apprentissage rapide	Occlusion (il faut beaucoup de caméras)	"
Joystick	Classique	Scripts d'action ou de déplacement facilement réalisables	6 ddl difficilement exploitables sinon inexistantes - Proche de la base - Action manuelle réfléchie et peu naturelle	Interagir avec des objets virtuels - Contrôle d'application - Navigation
	Retour de Force	Reproduction du toucher - Retour de l'effort	6 ddl difficilement exploitables sinon inexistantes - Proche de la base - Action manuelle réfléchie et peu naturelle	"
	Retour de Force - Sans Fil	Reproduction du toucher - Retour de l'effort - Pas de limitation de déplacement	6 ddl difficilement exploitables sinon inexistantes - Action manuelle réfléchie et peu naturelle	"
Phantom		Reproduction du toucher - Bonne fidélité au retour de l'effort - Permet de travailler dans un environnement de bureau	Nécessité d'être proche de l'interface - Encombrement	Manipuler le monde virtuel et ses objets
Souris	2D - 3 Boutons	Faible coût - Simplicité - Fiabilité	Nécessité d'un support - Les boutons sont utilisés 2 à 2 afin d'obtenir des mouvements sur les 3 axes - Nécessité d'être proche de l'interface	Manipulation - Modeleur 3D - Viewer 3D - Navigation
	2D - Sans Fil	Faible coût - Simplicité - Fiabilité	Nécessité d'un support - Les boutons sont utilisés 2 à 2 afin d'obtenir des mouvements sur les 3 axes	"
	3D	Ergonomie - Simplicité - Fiabilité - Faible coût - Scripts d'action ou de déplacement facilement réalisables	Nécessité d'un support - Précisions des mouvements (difficulté d'exécution des couples sans les forces et inversement)	"
Gants de Données	Optiques	Apprentissage rapide - Simplicité - Poids	Limitation des mouvements de la main - Pas de retour de force - Fragilité - Calibrage	Manipulation d'objets - Préhension - Pointage
	Mécaniques	Apprentissage rapide	Limitation des mouvements de la main - Limitations de l'utilisation à cause de l'encombrement des doigts mécanisés - Coût	"
Palette Graphique		Intuitif - Simplicité - Faible coût	Interaction 2D	Navigation - Sélection
Afficheurs		Avantages	Limitations	Utilisation
Casque VR		Illusion de relief - Augmentation du champ de vision - Faible coût	Immersion pas extraordinaire - Définition spatiale faible - Ne peut être utilisé longtemps - Inconfort psychologique - Lourd	Déplacement dans des mondes virtuels "réalistes"
Lunettes Stéréo		Illusion de relief - Faible coût - Simplicité - Poids - Superposition à la vue réelle possible	Champ visuel réduit mais de façon moins importante - Les personnes l'utilisant sont assez rapidement malade	Visualisation d'une 3D crédible
Grand écran	Classique	Eloignement de l'écran - Immersif (un peu) - Déplaçable	Lorsque l'opérateur tourne la tête, il ne peut plus voir le monde virtuel	Confort de visualisation plus important
	Workbench	Immersif - Utilisations multiples	Coût élevé - pas déplaçable	Un ou deux utilisateurs peuvent visualiser des objets 3D
	Cave	Immersion Importante - Utilisations multiples	Coût élevé - pas déplaçable	Travail collaboratif - Applications nécessitant la plus grande immersion de groupe - visites virtuelles
	Mur Immersif	Le nombre de personnes qui peuvent participer en même temps à une simulation est important	Non déplaçable - Fiabilité - Immersion un peu réduite - Lorsque l'opérateur tourne la tête, il ne peut plus voir son écran - Problème de place	Travail collaboratif - Visualisation d'objets en taille réelle
	Dispositif Mobile	Adaptation en fonction des besoins	Coût élevé	Travail collaboratif

Annexe 2 : Tableau des caractéristiques de chacun des interacteurs et leur utilisation courante



Annexe 3 : Modèle d'activité d'un utilisateur expert en chimie moléculaire



Annexe 4 : Modèle des tâches d'un utilisateur expert en chimie moléculaire

Dans la cadre du projet EPSN, un laboratoire de chimie, l'IECB, tente de trouver une solution à un problème récurrent auquel il est confronté : son pôle de simulation des dynamiques moléculaires n'arrive pas à exploiter au mieux les divers logiciels existants ; cette forme de réalité virtuelle utilisée est, en effet, extrêmement complexe car la densité d'informations y est très importante. Pour améliorer la visualisation moléculaire, nous avons choisi de proposer un système d'interaction. La théorie de Fuchs pour développer une interface « homme-machine » transparente pour l'utilisateur (qu'il appelle comportementale) a été mise en œuvre.

Cette théorie est décomposée en trois niveaux d'interaction et d'immersion (I² sensori-motrices, mentales et fonctionnelles) qui chacun ont guidé une étape de la démarche de prototypage de cette interface. Mais avant de mettre en œuvre ce côté pratique, il a été nécessaire de déterminer une démarche de travail. Nous avons donc utiliser les modèles d'activités et les modèles des tâches du profil utilisateur.

La mise en œuvre du schéma de Fuchs a permis de déterminer une interface (son aspect matériel tout du moins) adaptée aux tâches utilisées par les spécialistes de la chimie moléculaire ; elle est composée d'un écran géant couplé à des lunettes de vision stéréoscopique et d'un joystick sans fil. Un ensemble de tests expérimentaux est en cours d'élaboration.

F.-X. JEUNEHOMME