



**HAL**  
open science

## Interface moléculaire tangible, modulaire, articulée, sans fil et sans marqueur, basée sur l'internet des objets

Nicolas Férey, Bastien Vincke, Mohamed Anis Ghaoui

### ► To cite this version:

Nicolas Férey, Bastien Vincke, Mohamed Anis Ghaoui. Interface moléculaire tangible, modulaire, articulée, sans fil et sans marqueur, basée sur l'internet des objets. 33e conférence internationale francophone sur l'Interaction Humain-Machine (IHM'22), AFIHM, Apr 2022, Namur, Belgique. hal-03835651

**HAL Id: hal-03835651**

**<https://hal.science/hal-03835651>**

Submitted on 4 Nov 2022

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Interface moléculaire tangible, modulaire, articulée, sans fil et sans marqueur, basée sur l'internet des objets

IoT-based tangible interface with modular, articulated, markerless and wireless components

Nicolas Férey

nicolas.ferey@universite-paris-saclay.fr  
Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire  
Interdisciplinaire des Sciences du Numérique  
91400, Orsay, France

Bastien Vincke, Mohamed Anis Ghaoui

bastien.Vincke@universite-paris-saclay.fr  
mohamed-anis.ghaoui@universite-paris-saclay.fr  
Université Paris-Saclay, CNRS, Systèmes et Applications  
des Technologies de l'Information et de l'Énergie  
91400, Orsay, France

## ABSTRACT

*Rational drug design*, as car or building design, implies a detailed understanding of proteins' behavior. Proteins are the building blocks, the workers, the messengers, the transporters involved in the cell machinery and its components, and targeted by drugs. However, one of the major obstacles to this approach lies in the limitations of the human-computer interfaces to manipulate complex, three-dimensional, flexible objects during a simulation in progress. To address this problem, we designed a tangible molecular interface, allowing the manipulation of a modular and flexible physical molecular model, to build and manipulate a virtual molecular twin from this physical model, synchronized thanks to embedded sensors. We propose to present this tangible interface, allowing to open the discussion on the perspectives concerning this prototype.

## CCS CONCEPTS

• **Human-centered computing** → **Gestural input**; *Mixed / augmented reality*; • **Computing methodologies** → Molecular simulation.

## KEYWORDS

Tangible Interface, Human-Machine Interface, 3D Interaction, Molecular Simulation, Mixed Reality, Physical Molecular Model, Internet of Things, Rational Drug Design

## RÉSUMÉ

Concevoir de manière rationnelle des médicaments, comme on conçoit une voiture ou un bâtiment, implique une compréhension fine du fonctionnement des protéines, protéines constituant les briques, les ouvriers, les messagers, transporteurs, nécessaires au fonctionnement de la cellule et de ses composants, et ciblées par les médicaments. Cependant, un des freins majeurs à cette approche appelée *Rational Drug Design*, réside dans les limitations des interfaces humain-machine pour manipuler des objets moléculaires,

complexes, tridimensionnels et flexibles. Pour avancer sur cette problématique, nous avons conçus une interface tangible moléculaire, permettant la manipulation directe d'un modèle physique moléculaire modulaire et flexible, outillé par des capteurs électroniques, pour construire et manipuler le jumeau virtuel moléculaire de ce modèle physique. Nous proposons d'en faire la démonstration, en suscitant la discussion sur les perspectives d'évolution de notre prototype.

## MOTS-CLÉS

Interface Tangible, Interaction Humain-Machine, Interaction 3D, Réalité Mixte, Modèle Physique Moléculaire, Internet des Objets, Conception Rationnelle de Médicament

### ACM Reference Format:

Nicolas Férey and Bastien Vincke, Mohamed Anis Ghaoui. 2021. Interface moléculaire tangible, modulaire, articulée, sans fil et sans marqueur, basée sur l'internet des objets. In *IHM '22 : 33<sup>e</sup> conférence Francophone sur l'Interaction Homme-Machine*, April 05–08, 2022, Namur, Belgique. ACM, New York, NY, USA, 2 pages. <https://doi.org/10.1145/XXXXXXX.XXXXXXX>

## 1 UNE INTERFACE TANGIBLE MOLÉCULAIRE MODULAIRE SANS FIL EST SANS MARQUEUR

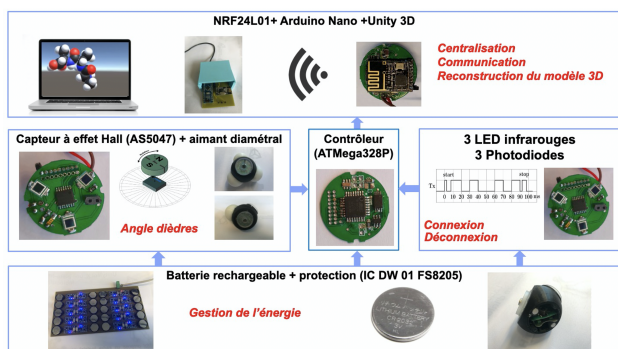
Historiquement, les modèles physiques font partie de la culture scientifique de la biologie structurale, car les phénomènes observés sont inaccessibles à la perception humaine. Arthur J. Olson et son équipe ont été parmi les premiers [2] à mener des recherches pour transformer des modèles physiques en interfaces tangibles, permettant de bénéficier des avantages de la manipulation bi-manuelle écologique d'objet physique en interaction directe. L'approche classique consiste à utiliser des marqueurs planaires prédéfinis ou bien des marqueurs infrarouges rétro-réfléchissants. Cette approche, fiable et précise, souffre cependant de son caractère intrusif du fait de marqueurs qui limitent l'utilisabilité dans un contexte opérationnel. Pour résoudre ce problème, plusieurs approches sans marqueur ont été explorées, basées sur le traitement d'image sans marqueur [4] pour reconstruire *in silico* un modèle tridimensionnel moléculaire numérique à partir d'un objet physique modulaire. Cependant ce type d'approche par traitement d'image ne permet pas de résoudre totalement des problématiques comme l'occultation de l'objet par les mains.

Inspiré par les travaux de Jacobson pour contrôler des personnages virtuels articulés avec des capteurs embarqués [3], nous avons

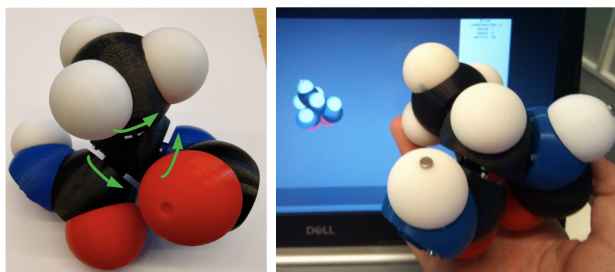
IHM '22, April 5-8, Namur, Belgium

© 2022 Copyright held by the owner/author(s). The definitive version of record was published in Extended Abstracts of IHM '22: Proceedings of the 33rd Conference on l'Interaction Humain-Machine (IHM '22), April 5-8, 2022, Namur, Belgium.

conçu et développé une interface tangible sans marqueur et sans fil [5] basée sur l'Internet des Objets (voire Figure 2) pour construire un jumeau virtuel d'un modèle physique moléculaire modulaire [1] à l'image de pièces de Légo, et articulé (voir Figure 3).



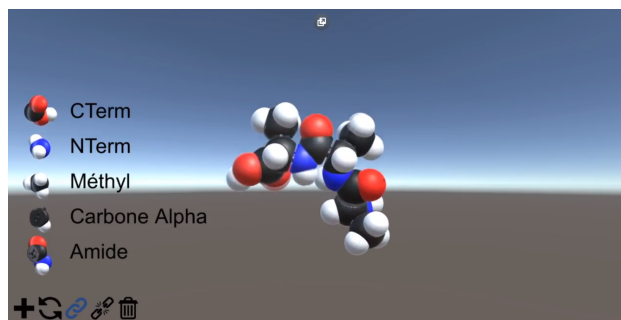
**FIGURE 1 : Autopsie d'un composant moléculaire de l'interface tangible. Les évènements à détecter à l'aide de méthodes sans contact, sont les connexions/déconnexions entre les composants, réalisé à l'aide d'un protocole infrarouge (led et récepteur infrarouge), et les angles entre les composants, grâce à un système d'aimant radial et de capteur à effet Hall. Ces données d'évènement sont transmises sans fil à un Arduino Nano qui centralise ces données et les communiquent à l'interface graphique**



**FIGURE 2 : A gauche, les degrés de liberté manipulables après l'assemblage des composants, exemple simple avec 3 composants. A droite, un utilisateur manipulant une biomolécule virtuelle grâce à l'interface tangible moléculaire. Pour plus de détails sur notre interface tangible moléculaire : <https://www.youtube.com/watch?v=VoGPPbrwy68>**

Le rendu graphique du jumeau virtuel du modèle physique et les interactions 3D pour le manipuler, ainsi que la connection avec le modèle physiques sont assurées grâce à *Unity 3D* dédiée pour jouer les scénarii d'usage et d'expérimentation (voir Figures 1 et 3).

Nous comptons profiter de la démonstration de cette interface tangible à *IHM22* pour discuter de ses perspectives d'évolution, notamment de tracker sans fil et sans marqueur, la position et l'orientation globale de ce type de modèles déformables, au delà de la reconstruction relative de la forme de l'objet articulé et modulaire.



**FIGURE 3 : Interface graphique utilisée basée sur *Unity 3D* lors de la démonstration et les expériences utilisateurs**

## 2 APPLICATIONS, USAGES ET PERSPECTIVES

Au delà du potentiel pédagogique de ce type d'interface pour l'apprentissage de la chimie et de la biologique moléculaire, cette interface est au coeur du projet *ANR PIRATE 21*, en temps qu'élément d'une plateforme de docking moléculaire en Réalité Mixte. Il s'agit de construire une molécule candidate personnalisée, principe actif d'un médicament, prenant en compte sa déformabilité physique lors de la manipulation et de contraintes données par des pharmacophores, pour étudier les interactions moléculaires avec sa protéine cible représentée en réalité augmentée, dans un contexte collaboratif. Cette approche est complémentaire d'approches haut débit ou par apprentissage automatique, en donnant la possibilité d'exploiter l'expertise et des connaissances de différents experts dans le processus de conception du médicament, avec une compréhension fines des interactions moléculaires pour optimiser l'efficacité et la spécificité du médicament. L'automatisation de la conception et de l'impression 3D de l'interface, ainsi que le tracking du modèle physique déformable sans marqueur pour l'augmenter d'éléments virtuels sont par la suite quelques uns des enjeux de recherche de ce projet. Nous recherchons des partenaires industriels pour valoriser et commercialiser cette approche.

## 3 ACKNOWLEDGMENTS

Nous tenons à remercier l'Institut FARMAN, qui a financé pendant 3 ans ce projet par des stages de fin d'étude d'étudiants en Master ou Ingénieurs, et qui nous a permis d'obtenir ensuite un financement de l'ANR en cours, dans le cadre du projet ANR-PIRATE 2021-2025.

## RÉFÉRENCES

- [1] Promita Chakraborty and Ronald N Zuckermann. 2013. Coarse-grained, foldable, physical model of the polypeptide chain. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 110, 33 (2013), 13368–13373.
- [2] Alexandre Gillet, Michel Sanner, Daniel Stoffler, and Arthur Olson. 2005. Tangible interfaces for structural molecular biology. *Structure* 13, 3 (2005), 483–491.
- [3] Alec Jacobson, Daniele Panozzo, Oliver Glauser, Cédric Pradalier, Otmar Hilliges, and Olga Sorkine-Hornung. 2014. Tangible and modular input device for character articulation. *ACM Transactions on Graphics (TOG)* 33, 4 (2014), 82.
- [4] Xavier Martinez, Nicolas Férey, Jean-Marc Vézien, and Patrick Bourdot. 2019. 3D reconstruction with a markerless tracking method of flexible and modular molecular physical models : towards tangible interfaces. *Journal of Virtual Reality and Broadcasting* 14, 2 (2019).
- [5] Bastien Vincke, Mohamed Anis Ghaoui, Nicolas Férey, and Xavier Martinez. 2020. Physical, Modular and Articulated Interface for Interactive Molecular Manipulation. *Sensors* 20, 18 (2020).