

DS principale et secondaires: DS 9:922

ED de rattachement: ED S&I

Titre du sujet proposé: Etude et conception des Interactions Naturelles Utilisateur pour l'immersion mobile
(*Study and design of Natural User Interactions for mobile immersion*)

Nom du Directeur de thèse: Samir OTMANE (Professeur)

Nom de l'unité de recherche (et de l'équipe si nécessaire) : Laboratoire IBISC / Equipe IRA2 (Interaction, Réalité Augmentée et Robotique Ambiante).

Etablissement de rattachement : Université d'Evry Val d'Essonne

Résumé : La Réalité Mixte (RM) et la Réalité Augmentée (RA) permettent la création de nouveaux types d'interfaces utilisateurs et commencent à avoir des répercussions importantes dans le milieu industriel et dans notre société. Ce domaine est fortement interdisciplinaire, impliquant à la fois la vision par ordinateur, l'infographie, les interfaces utilisateurs avec des interactions 2D/3D, les facteurs humains, l'informatique mobile et les capteurs. Les concepts de la RM/RA s'appliquent à un large éventail d'applications (médical, divertissement, militaire, conception et fabrication, maintenance, robotique/télé-robotique, biologie...) passant du domaines de recherche purement universitaire vers celui des industriels et des consommateurs. Depuis peu de temps, nous assistons à l'émergence de nouveaux concepts tels que les NUIs (Natural User Interfaces) [O'Hara 2012] et l'immersion mobile. Cette dernière combine ainsi les technologies de la réalité augmentée/mixte et celles des Interfaces Homme Machine en utilisant des dispositifs mobiles de plus en plus puissants et légers. De nombreuses questions sont posées et que ce projet de thèse de doctorat doit traiter : *Comment peut-on immerger un utilisateur dans un monde de réalité mixte tout en garantissant sa mobilité ? Comment maintenir la cohérence sensorielle entre l'action d'un utilisateur dans son environnement réel et la réaction du système dans un environnement de réalité mixte/augmentée ?*

Mots-clés :

Interaction augmentée, Techniques d'interaction pour la RM/RA, modèles et architectures logicielles des systèmes de RM/RA mobiles, évaluation et expérience utilisateur.

Abstract: Mixed Reality (MR) and Augmented Reality (AR) allow the creation of fascinating new types of user interfaces, and are beginning to show significant impact on industry and society. The field is highly interdisciplinary, bringing together computer vision, computer graphics, user interfaces, 2D/3D interactions, human factors, wearable computing, mobile computing, and sensors. MR/AR concepts are applicable to a wide range of applications (medical, entertainment, military, design, manufacture, maintenance and robotics/telerobotics, biology...) moving from pure academic research into industrial and potential consumer areas.

Recently, new concepts such as Natural User Interfaces [O'Hara 2012] and mobile immersion have emerged. Mobile immersion combines augmented/mixed reality technologies with new mobile human machine interfaces. Many issues require to be highlighted and must be addressed in this doctoral thesis: *How to immerse a user in a mixed reality world while ensuring mobility? How to keep the sensory consistency between the user action in the real environment and the response of the system in a mixed/augmented reality environment?*

Keywords:

Augmented interaction, interaction techniques for MR/AR, models and software architectures for mobile MR/AR applications, user experience assessments,

[O'Hara 2012] Kenton O'Hara, Richard Harper, Helena Mentis, Abigail Sellen, and Alex Taylor. On the Naturalness of Touchless: Putting the "Interaction" Back into NUI. Transactions on Computer Human Interaction (TOCHI). ACM, 2012

DS principale et secondaires: DS 9:922

ED de rattachement: ED S&I

Titre du sujet proposé: Etude de la malléabilité dans les collecticiels mobiles
(*Study of tailorable mobile groupwares*)

Nom du Directeur de thèse: Samir OTMANE (Professeur)

Nom de l'unité de recherche (et de l'équipe si nécessaire) : Laboratoire IBISC / Equipe IRA2 (Interaction, Réalité Augmentée et Robotique Ambiante).

Etablissement de rattachement : Université d'Evry Val d'Essonne

Résumé : Avec l'apparition et l'avancement des technologies de l'Internet et de l'informatique mobile avec des dispositifs mobiles et hétérogènes et de plus en plus puissants, l'interopérabilité des applications collaboratives devient une nécessité. Les architectures logicielles des collecticiels mobiles doivent intégrer un critère important qui est celui de la souplesse de la coopération par l'échange de services accessibles à tous. Les architectures à base de services web (SW) sont devenues ainsi incontournables pour la coopération des systèmes hétérogènes et ont marqué le début d'une ère nouvelle de la conception logicielle. L'émergence des agents logiciels à base de services web et des systèmes multi-agents (SMA) permet aux systèmes collaboratifs d'offrir des services d'une manière plus souple et plus dynamique [Cheaib et al. 2011].

Dans cette thèse, nous cherchons à explorer de nouvelles approches pour l'interopérabilité et la malléabilité des collecticiels mobiles en se basant d'une part, sur les modèles d'architectures logicielles existants (basés sur les SW et les SMA) et d'autre part, sur les méthodes de l'informatique mobile et ubiquitaire.

Mots clés :

Collecticiel, modèle 3C, informatique mobile, service web, systèmes multi-agents, architecture logicielle pour collecticiel mobile

Abstract: With the emergence and the advancement of Internet technologies and mobile computing with heterogeneous and powerful mobile devices, the interoperability of collaborative applications becomes a necessity. Mobile groupware software architectures must incorporate an important criterion, which is the flexibility of the cooperation through the exchange of services accessible to all. Software architectures based on web services (WS) have become important for cooperation of heterogeneous systems and marked the beginning of a new era of software design. The emergence of software agents based on the multi-agent systems (MAS) and web services allows collaborative systems to provide services in more flexible and dynamic way [Cheaib et al. 2011].

In this thesis, we need to explore new approaches of interoperability and tailorability of mobile groupwares. We need to consider on the one hand, the existing models of software architectures (based on WS and MAS) and on the other hand, to explore new methods of ubiquitous and mobile computing technologies.

Keywords:

Groupware, 3C model, mobile computing, web services, multi-agent systems, software architectures for mobile groupware.

[Cheaib et al. 2011] N. Cheaib, S. Otmane, and M. Mallem. Tailorable groupware design based on the 3c model. International Journal of Cooperative Information Systems (IJCIS), Volume: 20, Issue: 4(2011) pp. 405-439
DOI:10.1142/S0218843011002286 the World Scientific, 2011.

DS principale de la thèse : DPST4 Chimie

DS secondaire de la thèse : DS401 : Chimie théorique, physique, analytique

Ecole Doctorale : «Science & Ingénierie» - Numéro 511

Sujet de thèse proposé : "Compréhension des processus de dissociations induites par collision: couplage entre spectrométrie de masse et modélisation et application à l'étude structurale de biomolécules"

Directeur de thèse : SALPIN Jean-Yves, jean-yves.salpin@univ-evry.fr; SPEZIA Riccardo, riccardo.spezia@univ-evry.fr

Laboratoire d'accueil : Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, Université d'Evry Val d'Essonne, CNRS UMR 8587

Résumé : Cette thèse a pour objectif d'étudier à l'échelle microscopique, le processus de dissociation induite par collision (CID), selon une approche originale couplant des expériences de spectrométrie de masse «tandem» et des simulations de dynamique moléculaire. Nous sommes intéressés à la structure et à la réactivité des biomolécules en phase gazeuse.

Mots clefs : Spectrométrie de masse, dissociation unimoléculaire, réactivité chimique en phase gazeuse, identification des biomolécules.

Abstract : The aim of this thesis is to study at a molecular level collision induced dissociation (CID) mechanisms, by coupling experimental « tandem » mass spectroscopy and molecular dynamics simulations. We will focus in particular on structure and reactivity of biomolecules in gas phase.

Keywords : mass spectrometry, unimolecular dissociation, gas-phase chemical reactivity, biomolecule characterization.

Description générale : L'une des thématiques du Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement (LAMBE) concerne l'étude de la réactivité en phase gazeuse de biomolécules, et la compréhension de ces mécanismes au niveau microscopique en couplant les expériences de spectrométrie de masse et la dynamique moléculaire. Ce sujet s'inscrit dans une ligne de recherche rassemblant les chercheurs de l'équipe expérimentale de spectrométrie de masse, et celle des physico-chimistes théoriciens du laboratoire.

En particulier, le candidat s'intéressera à comprendre les mécanismes de fragmentation induits par collisions des ions formés en phase gazeuse, les systèmes considérés étant à la fois étudiés par simulations et expériences.

Cette étude sera développée selon une double optique:

- d'une part fondamentale, visant à caractériser les mécanismes de fragmentation. En particulier, l'objectif consistera à établir le lien entre les fragmentations observées expérimentalement, et celles obtenues par simulation.

- d'autre part analytique, en mettant à profit la réactivité observée en vue de la caractérisation structurale de molécules tels que des acides aminés et des polypeptides.

Collaboration prévue: Texas Tech University, Korea National University of Education

DS principal de la thèse : DPST4 Chimie et Sciences des Matériaux

DS secondaire de la thèse : DS401 : Chimie théorique, physique, analytique

Ecole Doctorale : S&I Science & Ingénierie - ED 511

Sujet de thèse proposé : **Modélisation par dynamique moléculaire ab initio (DFT-MD) d'interfaces solide/liquide : structure, dynamique, réactivité chimique et spectroscopie vibrationnelle.**

Directeur de thèse : Prof Marie-Pierre GAIGEOT, mgaigeot@univ-evry.fr, Co-encadrant Dr Alvaro Cimas

Laboratoire d'accueil : LAMBE Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, Université d'Evry Val d'Essonne, CNRS UMR 8587 ; Equipe : « Interactions des assemblages moléculaires complexes : théorie et modélisation »

Résumé : La thèse porte sur la modélisation par dynamique moléculaire ab initio de type DFT-MD (formalisme de la Fonctionnelle de la Densité DFT) de l'interface entre un solide de platine (Pt) et l'eau liquide, dans des conditions de contrôle du potentiel électrochimique. Le but est de comprendre l'organisation de l'eau à l'interface en interaction avec les hydrogènes adsorbés de la surface, en termes de liaisons hydrogène formées entre l'eau et les sites de la surface, d'orientation des molécules d'eau, de dynamique des molécules, de réactivité chimique. Un point important est d'extraire les spectres vibrationnels non-linéaires VSFG (Somme de Fréquences) et linéaires Infrarouge et Raman (IR, Raman) des molécules d'eau à l'interface par ces simulations. Les signatures théoriques sont comparées aux signatures expérimentales obtenues par le groupe du Dr Bertrand Busson au laboratoire LCP d'Orsay, avec qui cette étude est menée en collaboration. Ce groupe est spécialiste de spectroscopie SFG à ces interfaces.

Abstract : The PhD consists in the investigation of solid/liquid water interfaces by DFT-based molecular dynamics simulations. The interfacial system of interest is the platinum/water interface, under electrochemical conditions. The goal is to extract the knowledge and understanding of the water interfacial structural organisation, in particular the water molecules interacting with the adsorbed hydrogens at the platinum surface, the hydrogen bond networks formed at the interface, orientation of water molecules at the interface, dynamics of interfacial water, chemical reactivity. One pivotal aspect of the investigation is the calculation of non linear SFG spectra (Sum Frequency Generation) from the MD simulations, as well as IR and Raman spectra of the interfacial water. Theoretical SFG signatures are compared to the experimental signatures obtained by the group of Dr Bertrand Busson at LCP in Orsay, collaborator and specialist of SFG spectroscopy on these interfaces.

Description générale : Les interfaces entre un solide et un liquide sont particulièrement importantes dans le milieu environnemental d'intérêt au laboratoire LAMBE, et apparaissent dans diverses situations par exemple en géochimie, en électrochimie, ou dans les batteries. Les surfaces de platine d'intérêt dans ce travail, en contact avec de l'eau liquide, sont répandues en électrochimie et électrocatalyse. Nous étudierons ces interfaces par des simulations de dynamique moléculaire ab initio de type DFT-MD, alors que l'équipe de notre collaborateur Bertrand Busson au LCP à l'Université d'Orsay acquiert les signatures spectroscopiques de ces interfaces par des expériences de type SFG (Sum Frequency Generation).

Le/La doctorant(e) sera formé(e) aux méthodes de simulation de dynamique moléculaire DFT-MD les plus novatrices de la littérature actuelle, et en deviendra un(e) expert(e). Une partie du travail de thèse consiste à accumuler et analyser les trajectoires de dynamique moléculaire afin d'en extraire les propriétés structurales, dynamiques et de

spectroscopie des molécules de l'interface. Ceci est réalisé en développant des codes d'analyses, ce qui demande des expertises acquises en cours de thèse en écriture de codes numériques.

Le groupe encadrant la thèse est expert des simulations de dynamique moléculaire DFT-MD et est en particulier l'un des groupes pionniers pour l'application de ces simulations à la spectroscopie vibrationnelle incluant les effets anharmoniques. Le groupe a fait la démonstration du calcul SFG à partir de trajectoires DFT-MD (publié au J.Phys.Chem.Letters 2013). Le groupe a publié 5 articles en 2012 sur la modélisation des interfaces solide/liquide.

Collaborations prévues: Université Paris Sud Orsay, Dr Bertrand Busson (expériences) ; ENSCP Paris Tech, Dr Dominique Costa (simulations) ; University of Mainz, Dr Marialore Sulpizi (simulations)

Mots clefs : Interfaces, solide/liquide, spectroscopie vibrationnelle de surfaces VSFG, simulations DFT-MD, dynamique moléculaire, électrochimie, platine, eau

Pré-requis pour la candidature : une formation en chimie théorique, ou en chimie-physique, ou en physico-chimie, ou en physique, est demandée. Une connaissance des méthodes ab initio et/ou de dynamique moléculaire est un plus.

Initial background of the applicants : background in theoretical chemistry, or chemistry or physics is expected. Knowledge of ab initio methods and/or molecular dynamics simulations would be an advantage.

DS principale: DSPT8/SPI- Code RSD/82

DS secondaire: 821 (Mécanique des fluides)

ED de rattachement: S&I

Titre du sujet proposé : Optimisation d'un réseau de capteurs en vue de l'identification de sources de pollution atmosphérique par la méthode de l'assimilation de données renormalisées

PhD proposal: Sensors network optimization for identification of point source emission of pollution by an inverse method

Unité de recherche: LMEE (Z-Q. FENG) Equipe : Mécanique *des Fluides et Environnement*

Etablissement de rattachement: UEVE

Directeur de thèse : Amer CHPOUN

Co-directeurs de thèse: Gregory TURBELIN Pierre NGAE

Résumé-L'équipe *Mécanique des Fluides et Environnement* du Laboratoire de Mécanique et d'Energétique (LMEE) de l'université d'Evry travaille sur l'identification de sources d'émission de contaminants atmosphériques, ou de pollutions, basée sur une approche novatrice d'inversion de données : "l'assimilation de données renormalisées". Cette théorie de traitement de l'information permet, dans une situation météorologique connue, d'identifier la source d'émission à partir de concentrations atmosphériques mesurées, à divers moments, par un réseau de capteurs répartis sur la zone d'intérêt.

L'objectif du travail de thèse consiste à optimiser, sur un site donné, l'implantation des détecteurs et leur nombre, leurs performances étant supposées fixées, afin de bénéficier d'une surveillance fiable dans toutes les circonstances météorologiques envisageables.

Ce travail s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec l'IIT-Delhi (Indian Institute of Technology-Delhi et en liaison avec la DGA (Délégation Générale à l'Armement/Ministère de la défense).

The *Fluid Mechanics and Environment* research group of the LMEE laboratory at the university of Evry is carrying out research activity about atmospheric dispersion of pollutants. Recently, a new research topic about identification of point source emission of pollutants was initiated with the collaboration of the Indian Institute of Technology (IIT-Delhi). The method of identification is based on a theory called "renormalized data assimilation" which is an inverse method. The method can provide within a certain margin of uncertainty the position of point sources emission from the data measured by a network of pollutant concentration sensors for a given meteorological situation. The main objective assigned to the present PhD work is to optimize the implementation of a network of sensors for a given site and for variable meteorological conditions.

Mots clés : Identification de source- Méthode inverse- Dispersion-Pollution

Contact :

1. Grégory TURBELIN, Maître de conférences
2. Tél : 01 69 47 75 13 gregory.turbelin@ufrst.univ-evry.fr
3. Pierre NGAE, Maître de conférences
Tél : 01 69 47 75 62 pierre.Ngae@ufrst.univ-evry.fr
4. Amer CHPOUN, Professeur
Tél : 01 69 47 75 37 a.chpoun@iut.univ-evry.fr