

Thèse en Informatique

Jean SIMARD

⁵ Interactions haptiques collaboratives pour la
manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

Thèse soutenue le 1^{er} décembre 2011 en présence de

Martin DUPONT (rapporteur) Directeur de recherche au CNRS-LIMSI
Martin DUPOND (examineur) Directeur de recherche au CNRS-LIMSI

Table des matières

	Table des matières	iii
	Table des figures	ix
	Liste des tableaux	xiii
5	1 Le sujet	1
	1.1 État de l'art	1
	1.2 Contexte	1
	1.2.1 L'amarrage moléculaire	1
	Bibliographie	4
10	2 SHADDOCK – Manipulation collaborative de molécules	5
	2.1 Introduction	5
	2.2 Architecture matérielle et logicielle	6
	2.2.1 L'interface haptique	6
	2.2.2 Configuration de travail collaboratif	9
15	2.2.3 Une architecture client/serveur	10
	2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation	12
	2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire	13
	2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire	15
	2.4 Les outils d'interaction	16
20	2.4.1 Les outils existants	16
	2.4.2 Les nouveaux outils d'interaction	17
	Bibliographie	21

Table des matières

	3	Recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire	25
		3.1 Introduction	25
		3.2 Contexte	26
5		3.3 Expérimentation de recherche de résidu en simulation moléculaire	27
		3.3.1 Tâche	27
		3.3.2 Spécificités du protocole expérimental	32
		3.4 Résultats	36
		3.4.1 Amélioration des performances en binôme	36
10		3.4.2 Stratégies de travail	39
		3.4.3 Résultats qualitatifs	47
		3.5 Synthèse	48
		3.5.1 Résumé des résultats	48
		3.5.2 Perspectives	49
15		Bibliographie	51
	4	Déformation collaborative de molécule	53
		4.1 Introduction	53
		4.2 Contexte	54
		4.3 Expérimentation de déformation de molécule	56
20		4.3.1 Tâche	56
		4.3.2 Spécificités du protocole expérimental	59
		4.4 Résultats	64
		4.4.1 Amélioration des performances en binôme	64
		4.4.2 Gain de performance sur les tâches complexes	70
25		4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	74
		4.4.4 Résultats qualitatifs	79
		4.5 Synthèse	80
		4.5.1 Résumé des résultats	80
		4.5.2 Perspectives	81
30		Bibliographie	83

	5 Les dynamiques de groupe	87
	5.1 Introduction	87
	5.2 Contexte	88
	5.3 Expérimentation sur les dynamiques de groupe	90
5	5.3.1 Tâche	90
	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental	91
	5.4 Résultats	95
	5.4.1 Évolution des performances	95
	5.4.2 Avantage du remue-ménages pour les quadrinômes	99
10	5.4.3 Définition d'un meneur	103
	5.5 Synthèse	106
	5.5.1 Résumé des résultats	106
	5.5.2 Perspectives	107
	Bibliographie	109
15	6 Travail collaboratif assisté par haptique	111
	6.1 Introduction	111
	6.2 Contexte	112
	6.3 Expérimentation avec assistance haptique	112
	6.3.1 Tâche	112
20	6.3.2 Spécificités du protocole expérimental	115
	Bibliographie	121
	7 Conclusion et perspectives	123
	Glossaire	125
	Acronymes	129
25	Annexes	133

Table des matières

	A Dispositif expérimental	133
	A.1 Matériel expérimental	133
	A.2 Présentation des molécules	134
	A.2.1 Liste des molécules	134
5	A.2.2 Représentation des molécules	135
	A.3 Outils de manipulation	137
	Bibliographie	138
	B Méthode expérimentale	139
	B.1 Première expérimentation	139
10	B.1.1 Hypothèses	139
	B.1.2 Sujets	140
	B.1.3 Variables	140
	B.1.4 Procédure	142
	B.2 Seconde expérimentation	143
15	B.2.1 Hypothèses	143
	B.2.2 Sujets	144
	B.2.3 Variables	144
	B.2.4 Procédure	145
	B.3 Troisième expérimentation	146
20	B.3.1 Hypothèses	146
	B.3.2 Sujets	146
	B.3.3 Variables	147
	B.3.4 Procédure	148
	B.4 Quatrième expérimentation	149
25	B.4.1 Hypothèses	149
	B.4.2 Sujets	150
	B.4.3 Variables	150
	B.4.4 Procédure	151
	Bibliographie	154

C	Questionnaires	155
	C.1 Première expérimentation	155
	C.2 Seconde expérimentation	161
	C.2.1 Questionnaire pour les monômes	161
5	C.2.2 Questionnaire pour les binômes	161
	C.3 Quatrième expérimentation	162
	C.3.1 Le questionnaire SUS	162
	C.3.2 Évaluation du score SUS	163
	Bibliographie	164

Table des matières

Table des figures

	1.1	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes	3
	2.1	Diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK	7
	2.2	Diagramme de composant UML du nœud VMD	8
5	2.3	Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL	9
	2.4	Classification des tâches collaboratives selon ELLIS et al. [1991]	9
	2.5	Illustration des représentations de molécules sur VMD (<i>Visual Molecular Dynamics</i>)	14
	2.6	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés	18
10	2.7	Les quatre étapes de la désignation	19
	3.1	Répartition des résidus sur les molécules	31
	3.2	Schéma du dispositif expérimental	33
	3.3	Photographie du dispositif expérimental	33
	3.4	Représentation de la molécule Prion pour l'expérimentation	34
15	3.5	Temps de réalisation par résidu	36
	3.6	Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu	37
	3.7	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu	37
	3.8	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})	40
20	3.9	Affinité entre les sujets pour chaque binôme	40
	3.10	Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme	41
	3.11	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme	41

Table des figures

	3.12	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection des sujets pour chaque binôme	41
	3.13	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme	42
5	3.14	Couplage physique et structure entre les résidus	44
	4.1	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible . . .	57
	4.2	Schéma du dispositif expérimental	61
	4.3	Photographie du dispositif expérimental	61
	4.4	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A	62
10	4.5	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B	63
	4.6	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A	63
	4.7	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B	64
	4.8	Illustration des rendus pour l’affichage de la molécule	65
	4.9	Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets	65
15	4.10	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets	66
	4.11	Nombre de sélection de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets	67
	4.12	Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets	68
20	4.13	Temps de réalisation des scénarios	70
	4.14	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets	70
	4.15	Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets	71
25	4.16	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets	72
	4.17	Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets	72
30	4.18	Temps de réalisation de chaque essai	74
	4.19	Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets	75

	4.20	Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets	75
	4.21	Distance active entre les effecteurs terminaux sur chaque essai en fonction du nombre de sujets	76
5	4.22	Vitesse moyenne sur chaque essai en fonction du nombre de sujets	77
	5.1	Schéma du dispositif expérimental	92
	5.2	Photographie du dispositif expérimental	92
	5.3	Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1	93
10	5.4	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2	94
	5.5	Temps de réalisation des scénarios	95
	5.6	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants	95
15	5.7	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants	96
	5.8	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants	96
	5.9	Nombre d'échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants	97
20	5.10	Temps de réalisation avec ou sans remue-ménages	99
	5.11	Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages	99
	5.12	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages	100
25	5.13	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages	100
	5.14	Nombre d'ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages	101
	5.15	Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de (\mathcal{G}_1)	103
30	5.16	Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de (\mathcal{G}_1)	104
	5.17	Profil de force du groupe (\mathcal{G}_1) sur la molécule Prion	105
	6.1	Schéma du dispositif expérimental	116

Table des figures

	6.2 Photographie du dispositif expérimental	116
	6.3 Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1 . .	117
	6.4 Représentation de la molécule NUSE :NUSG pour le scénario 2	118
	A.1 Représentation des atomes avec CPK	136
5	A.2 Représentation de la structure principale de la molécule avec <i>NewRibbon</i>	136
	A.3 Représentation des atomes fixés en gris	137
	B.1 Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu	141

Liste des tableaux

	3.1	Liste des résidus recherchés	28
	3.2	Paramètres de complexité des résidus – Carbone en <i>cyan</i> , Azote en <i>bleu</i> , Oxygène en <i>rouge</i> et Soufre en <i>jaune</i>	30
5	3.3	Synthèse de la méthode expérimentale	35
	4.1	Paramètres de complexité des tâches	59
	4.2	Synthèse de la procédure expérimentale	66
	5.1	Synthèse de la procédure expérimentale	94
	6.1	Synthèse de la procédure expérimentale	120

Liste des tableaux

Liste des *À faire*

(Section 6.3.2.0) Images à compléter	116
(Section B.4.2.0) Nombre de sujets	150

Liste des *À faire*

Chapitre 1

Le sujet

Sommaire

5	1.1 État de l'art	1
	1.2 Contexte	1
	1.2.1 L'amarrage moléculaire	1
	Bibliographie	4

1.1 État de l'art

1.2 Contexte

1.2.1 L'amarrage moléculaire

15 Le contexte de l'expérimentation est l'amarrage moléculaire plus communément nommé *docking* moléculaire. Ce processus implique une analyse et une manipulation complexe reposant sur plusieurs expertises. Il est basé sur une décomposition en trois niveaux de modélisation, traités du niveau le plus grossier au niveau le plus fin :

20 **Niveau inter-moléculaire** Cette déformation au niveau macro-moléculaire applique des transformations de grande amplitude sur chaque molécule. L'objectif est de trouver la meilleure concordance entre les molécule en terme de position et d'orientation.

Niveau intra-moléculaire Cette déformation au niveau moléculaire fait suite à la déformation inter-moléculaire. L'amarrage de ces deux molécules (ou plus) introduit de nombreuses interfaces qui doivent être optimisées en fonction de critères variés (la complémentarité des surfaces, les forces électrostatiques, les forces de VAN DERWAALS [MÜLLER 1994], *etc.*).

Niveau atomique Cette déformation très fine va chercher à optimiser la position des atomes au niveau de l'interface. L'intérêt de cette étape sera portée sur plusieurs types d'interaction (les ponts hydrogènes, les zones hydrophobiques et hydrophylles, les ponts salins, *etc.*).

Pour chacun de ces différents niveaux, le processus de manipulation est similaire et peut être séparé en tâches élémentaires (voir figure 1.1 page ci-contre) :

Recherche Cette tâche concerne l'identification et la recherche d'une cible (atome, résidu, hélices- α , feuillet- β , *etc.*) en fonction de critères multiples (articulations, bilan énergétique, régions hydrophobique, *etc.*).

Sélection Une fois la cible trouvée, la tâche consiste à accéder puis à sélectionner la cible par l'intermédiaire d'un périphérique d'entrée (une souris, une interface haptique, *etc.*).

Déformation La tâche consiste à déformer la structure en manipulant la cible précédemment sélectionnée, que ce soit au niveau inter-moléculaire, intra-moléculaire ou atomique. L'objectif inhérent à cette tâche est d'atteindre l'objectif fixé (par exemple, minimiser l'énergie totale du système).

Évaluation Cette dernière partie va évaluer le travail précédemment réalisé en observant différents indicateurs (énergie potentielle, énergie électrostatique, complémentarité des surfaces, *etc.*). En fonction de la synthèse des résultats de cette dernière phase, un nouveau cycle pourra recommencer (recherche, sélection, déformation, évaluation, *etc.*).



Figure 1.1 – Processus de déformation moléculaire en quatre étapes

Bibliographie

[MÜLLER 1994]

- MÜLLER, Paul (1994). « Glossary of terms used in physical organic chemistry ». Anglais. Dans *Pure and applied chemistry* 66.5, pages 1077–1184 (cf. page 2).
- 5

Chapitre 2

SHADDOCK – Manipulation collaborative de molécules

Sommaire

5	2.1 Introduction	5
	2.2 Architecture matérielle et logicielle	6
	2.2.1 L'interface haptique	6
	2.2.2 Configuration de travail collaboratif	9
10	2.2.3 Une architecture client/serveur	10
	2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation . .	12
	2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire	13
	2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire	15
	2.4 Les outils d'interaction	16
15	2.4.1 Les outils existants	16
	2.4.2 Les nouveaux outils d'interaction	17
	Bibliographie	21

2.1 Introduction

Le chapitre 1 page 1 nous a permis d'identifier des problématiques de recherche. C'est autour de ces problématiques que la plate-forme SHADDOCK a été élaborée.

25 Nous commencerons par présenter les choix de matériels et d'architecture logicielle (voir section 2.2 page suivante). Certaines propriétés particulières sont nécessaires pour le choix de l'interface haptique permettant la manipulation

interactive ; elles seront détaillées dans la section 2.2.1. L'ensemble des éléments de la plate-forme sont organisés selon une architecture client/serveur ; les raisons de ce choix sont expliquées dans la section 2.2.3 page 10.

Ensuite, la plate-forme de simulation moléculaire en temps-réel est présentée (voir section 2.3 page 12). Tout d'abord, un logiciel de visualisation complet est nécessaire pour obtenir des affichages détaillés et complexes de molécules ; le logiciel est présenté dans la section 2.3.1 page 13. Puis un logiciel de simulation est utilisé afin d'obtenir un comportement physique réaliste de la molécule ; les différentes solutions existantes ainsi que le logiciel retenu sont présentés dans la section 2.3.2 page 15. Enfin, un module spécifique permettant d'obtenir des simulations moléculaires en temps-réel est présenté dans la section 2.3.2 page 16.

Le logiciel de visualisation moléculaire utilisé propose des premiers outils d'interaction avec les molécules. Ces outils sont présentés dans la section 2.4.1 page 16. Cependant, les outils existants n'ont pas été suffisants dans certains cas. De plus, notre étude du travail collaboratif a mené à la proposition de nouveaux outils haptiques présentés dans la section 2.4.2 page 17.

Les différents éléments de cette plate-forme sont résumés dans deux diagrammes UML (*Unified Modeling Language*). Un diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK est présenté sur la figure 2.1 page suivante. L'application VMD est détaillée dans un diagramme de composant UML sur la figure 2.2 page 8.

2.2 Architecture matérielle et logicielle

2.2.1 L'interface haptique

Une plate-forme de manipulation interactive en temps-réel nécessite des outils d'interaction. De plus, le but final de cette thèse est d'apporter des solutions d'assistance haptique pour le travail collaboratif. Les types d'interfaces haptiques disponibles sur le marché sont relativement nombreuses et variées. Cependant, plusieurs contraintes nous ont permis de choisir le PHANTOM Omni® et le PHANTOM Desktop®.

Tout d'abord, nous cherchons à pouvoir effectuer de la manipulation dans un environnement en 3D ; il faut choisir une interface permettant au minimum six degrés de liberté (DDLs) en entrée et au minimum trois DDLs en retour haptique. En effet, un outil permettant de manipuler une molécule en translation et en rotation nécessite six DDLs en entrée. Cependant, il est

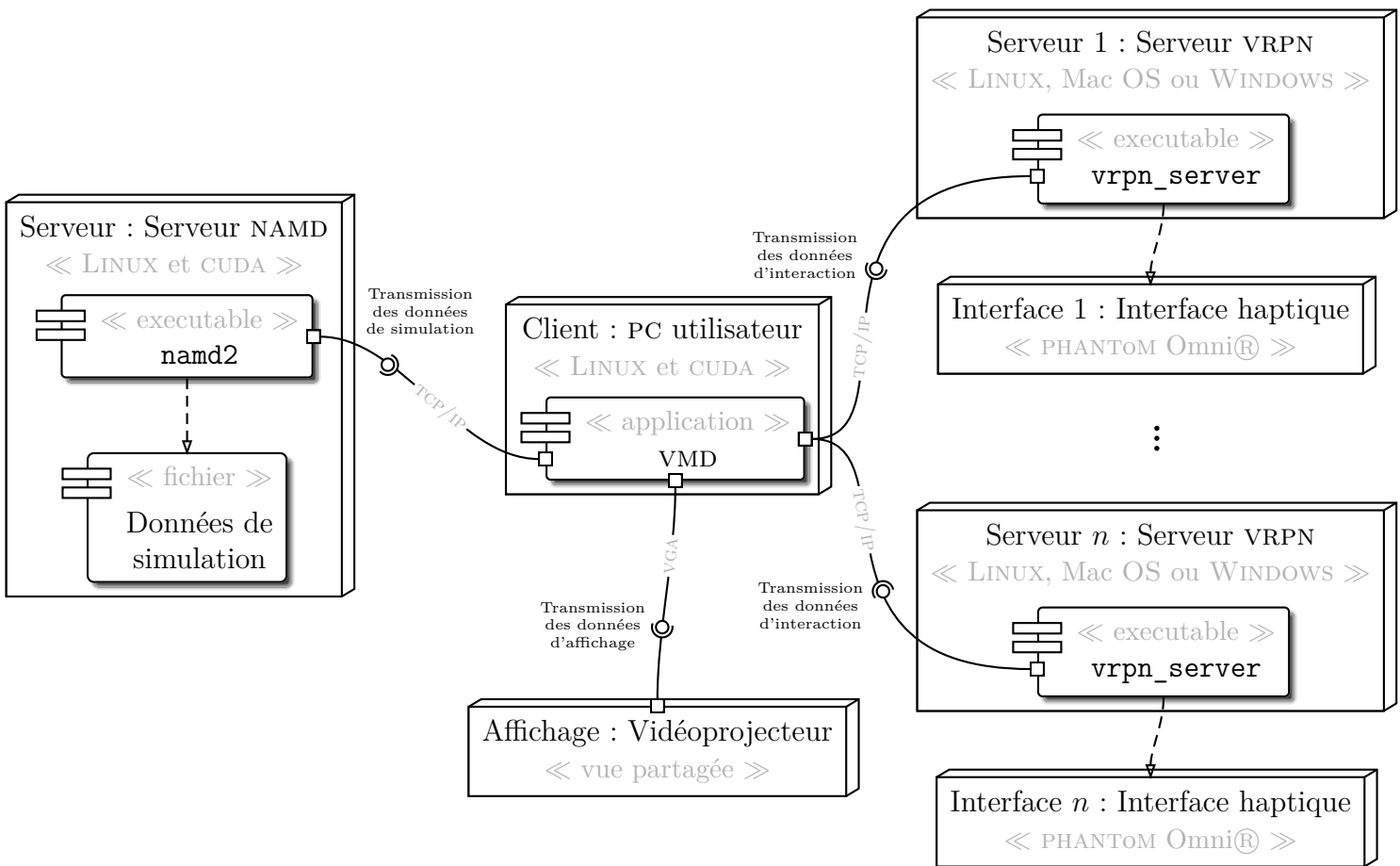


Figure 2.1 – Diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK



Figure 2.2 – Diagramme de composant UML du nœud VMD

également nécessaire que le périphérique possède au minimum trois DDLs en retour haptique (en translation) afin de créer des solutions d'assistance haptique. Évidemment, trois DDLs supplémentaires en retour haptique (pour la rotation) pourraient permettre des solutions d'assistance plus spécifiques
 5 mais les interfaces haptiques proposant six DDLs sont rares et relativement chères.

De nombreuses interfaces répondent au critères donnés comme le PHANTOM Premium® de chez SENSABLE ou le VIRTUOSE™ 6D35–45 de chez HAP-
 TION. Cependant, deux critères supplémentaires nous ont permis de choisir.
 10 Tout d'abord, nous souhaitons fournir des outils accessibles à des biologistes : il est préférable d'avoir un outil de taille modérée qui puisse se poser sur un bureau et se substituer à une souris. Deuxièmement, le PHANTOM Omni® fournit actuellement le meilleur rapport qualité/prix du marché en fonction de nos contraintes. En effet, dans le cadre du travail collaboratif, plusieurs
 15 interfaces haptiques sont nécessaires. De plus, le prix modéré peut amener les biologistes à adopter les outils sans avoir à investir de gros budgets ; ceci peut également faciliter l'intégration de ces solutions dans les laboratoires de biologistes. C'est donc l'interface PHANTOM Omni® [MASSIE et SALISBURY 1994] de l'entreprise SENSABLE qui répond le mieux à nos attentes pour la
 20 plate-forme SHADDOCK (voir figure 2.3 page suivante).

À l'origine, les interfaces haptiques de SENSABLE était programmable à l'aide de l'interface de programmation (API) GHOST [SENSABLE 2002]. Le travail de ITKOWITZ et al. [2005] a permis de fournir une nouvelle API plus facile à utiliser : OPENHAPTICS™. C'est à partir de cette API que les interfaces
 25 haptiques sont utilisées sur SHADDOCK. Cependant, nous verrons dans la sec-



Figure 2.3 – Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL

tion 2.2.3 page suivante que c’est un logiciel spécifique qui s’occupera de cette communication avec l’interface.

2.2.2 Configuration de travail collaboratif

Le chapitre 1 page 1 a permis de lister les principaux critères qui caractérisent une plate-forme pour le travail collaboratif. Le travail peut être synchrone ou asynchrone et il peut être distant ou colocalisé (voir figure 2.4).



Figure 2.4 – Classification des tâches collaboratives selon ELLIS et al. [1991]

Nous avons vu l’importance d’une bonne conscience périphérique des autres utilisateurs dans les travaux de CASERA et al. [2006] ou TANG et al. [2006] et plus particulièrement dans l’étude proposée par SALLNÄS [2010] : elle

montre l'amélioration des performances lorsque la conscience périphérique est augmentée. Les solutions de collaboration distantes doivent recréer cette conscience en transmettant les informations audio ou même visuelle. Pour conserver une bonne conscience périphérique, il est préférable de ne pas nu-
5 mérer les communications mais de conserver leur aspect réel : il faut une collaboration synchrone colocalisée ou collaboration face-à-face selon ELLIS et al. [1991] (voir figure 2.4 page précédente).

De plus, la conscience périphérique ne se limite pas seulement à la conscience physique des autres utilisateurs. En effet, les collaborateurs agissent sur
10 l'environnement ce qui permet de leur donner une existence virtuelle par l'intermédiaire des modifications de la scène. Ceci participe également à la conscience périphérique. Afin d'obtenir la meilleure conscience périphérique concernant l'environnement virtuel, les utilisateurs doivent partager le même environnement virtuel. C'est pour cette raison que la plate-forme SHADDOCK
15 propose une visualisation vidéoprojetée sur un grand écran. De cette façon, la vue est partagée par l'ensemble des utilisateurs.

2.2.3 Une architecture client/serveur

Deux types d'architectures ont été explorés pour les Environnements Virtuels Collaboratifs (EVC) : client/serveur ou pair-à-pair¹. Parmi les études
20 notables, IGLESIAS et al. [2008] propose une tâche d'assemblage collaboratif assisté par l'haptique. Une des problématiques soulevée est la difficulté de maintenir un environnement virtuel cohérent et fidèle pour tous les utilisateurs. Afin de parer à ce problème, les développeurs ont retenu une architecture de type client/serveur : la simulation est effectuée par un processus
25 qui distribue les informations aux différents clients. D'ailleurs, ce papier fournit un bon état de l'art des différents type d'architectures en soulignant les avantages et inconvénients de chacune.

En effet, il est expliqué que les architectures de types pair-à-pair permettent d'avoir des synchronisation sur le réseau plus rapides : elles nécessitent moins
30 de paquet réseau pour la communication. Cependant, ce type d'architecture génère des retours haptiques instables. D'ailleurs, J. KIM et al. [2004] qui étudie le déplacement collaboratif d'une boîte virtuelle assisté par l'haptique signalent qu'ils ont dû ajouter une viscosité importante dans le retour haptique pour éviter les instabilités. Bien que les architectures pair-à-pair permettent
35 de bons résultats sur une connexion réseau relativement lente voire même sur

1. En anglais, *peer-to-peer* parfois abrégé en P2P.

un réseau susceptible d'avoir des coupures, elles ne sont pas adaptées pour des application collaboratives utilisant l'haptique.

D'autres travaux proposent des architectures client/serveur utilisant les interactions haptiques. P. HUANG et al. [2010] propose la manipulation d'un jeu de construction par blocs. La simulation est centralisée sur un serveur et les interactions haptiques sont produites par l'intermédiaire de clients. Il ne souligne aucune instabilité dans les interactions haptiques. NORMAN et HAMZA-LUP [2010] s'intéresse particulièrement aux influences du réseau sur les interactions visuo-haptiques. L'architecture client/serveur est la plus adaptée pour la gestion de simulation. Cependant, il conclue sur la nécessité d'avoir une information qui transite rapidement afin d'obtenir un rendu haptique le plus fidèle possible.

MARSH et al. [2006] propose une comparaison de ces deux types d'architectures et en vient à la conclusion que l'architecture pair-à-pair est la plus performante en terme de latence. Cependant, l'avantage d'une architecture client/serveur est la cohérence de la simulation entre les différents nœuds du système (et donc entre les utilisateurs). Cependant, ce type d'architecture nécessite deux fois plus de paquets sur le réseau qu'une architecture pair-à-pair. Par opposition, l'architecture de type pair-à-pair ne permet pas d'obtenir un rendu haptique stable alors que l'architecture de type client/serveur le permet.

Dans notre cas, tous les utilisateurs se trouvent confrontés à la même simulation de façon colocalisée. L'affichage étant partagé, c'est l'architecture client/serveur qui est utilisée sur la plate-forme SHADDOCK. Cependant, nous venons de voir que l'architecture client/serveur n'est pas optimale en terme de performances sur le réseau. Heureusement, la proximité des utilisateurs durant l'expérimentation nous permet d'utiliser le réseau interne du laboratoire avec une bande passante suffisante pour compenser l'inefficacité de l'architecture client/serveur en terme de débit. La plate-forme SHADDOCK se distingue donc sous la forme d'une architecture de type client/serveur.

30 Serveur de périphériques

Afin de gérer ces connexions client/serveur pour les interfaces haptiques, nous utilisons le logiciel VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) développé par TAYLOR II et al. [2001]. La connexion avec le moteur de simulation est gérée par un autre module qui sera détaillé plus tard dans la section 2.3.2 page 16.

VRPN offre un moyen simple et relativement universel de connecter des périphériques principalement utilisés en réalité virtuelle. En effet, il fournit un serveur pour chaque périphérique. Ensuite, l'application cliente peut envoyer

et recevoir les informations nécessaires à la communication avec chacun des périphériques.

Dans notre cas, l'interface haptique est connectée physiquement à un ordinateur et un serveur VRPN commande cette interface. C'est seulement par
5 l'intermédiaire de ce serveur VRPN et à travers le réseau que le client (VMD dans notre cas) va accéder aux informations de l'interface haptique.

La compilation de VRPN en tant que serveur de PHANTOM Omni® sous le système d'exploitation LINUX (UBUNTU v10.04) a nécessité quelques modifications dans le code. Ces modifications ont été soumises au développeur de
10 VRPN qui les a intégrées dans les dernières versions.

L'avantage de cette architecture est la possibilité d'ajouter autant de serveurs et donc autant d'interfaces haptiques que nécessaire. Cependant, cela suppose également d'avoir autant d'ordinateurs que de serveurs ce qui complexifie la logistique. On pourra noter que la chaleur dégagée par l'ensemble de ces
15 machines additionnée à celle du vidéoprojecteur crée des températures durant l'expérimentation qui peuvent être désagréables. C'est pourquoi aucune des expérimentations proposée ne dure plus de 30 mn ou, le cas échéant, une pause est effectuée au bout de 30 mn afin d'aérer la salle d'expérimentation.

20 2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation

SHADDOCK permet d'effectuer la visualisation de molécules. La visualisation est un processus complexe qui nécessite des rendus variés et complets. En effet, devant le nombre important d'informations que possède une molécule,
25 il est primordial d'avoir accès à des rendus graphiques performants et complets sans surcharge. Cette tâche est effectuée par un logiciel de visualisation présenté dans la section 2.3.1 page suivante.

Ensuite, SHADDOCK simule une dynamique moléculaire. Un logiciel de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce logiciel puisse
30 interagir avec le logiciel de visualisation. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation. Le logiciel de simulation choisi est présenté dans la section 2.3.2 page 15. Cependant, les logiciels de simulation ne sont pas conçus pour effectuer des simulations en temps-réel. Pourtant, afin de proposer une dynamique moléculaire interactive aux utilisateurs, il
35 est nécessaire d'avoir accès à une simulation en temps-réel. Un module présenté dans la section 2.3.2 page 16 permet de faire communiquer le logiciel

de visualisation avec le logiciel de simulation afin d’obtenir une simulation en temps-réel.

2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire

Les outils de visualisation moléculaire disponibles sont relativement nombreux. Parmi les plus populaires, on peut citer PyMOL [SCHRÖDINGER 2010],
 5 VMD [HUMPHREY et al. 1996], CHIMERA [PETTERSEN et al. 2004], RASMOL [SAYLE et MILNER-WHITE 1995] sans compter les nombreux dérivés permettant un affichage en ligne tel que Jmol [SOURCEFORGE.NET 2006] pour ne citer que le plus connu. PyMOL et VMD se distinguent particulièrement
 10 par leurs nombreuses fonctionnalités et leur large utilisation dans le milieu spécialisé.

PyMOL est probablement le logiciel de visualisation le plus utilisé par les experts du domaine car c’est le plus complet pour fournir des rendus graphiques de molécules très complets. Cependant, PyMOL ne permet pas l’affichage de
 15 simulations temps-réel ni la manipulation interactive de molécules.

VMD possède également une large gamme de rendus graphiques. Contrairement à PyMOL, VMD est adapté pour le rendu graphique en temps-réel de données de simulation. Il permet également la manipulation interactive de molécules. Les fonctionnalités de VMD sont nombreuses et seulement cer-
 20 taines ont été utilisées dans le cadre des expérimentations qui vont suivre. Elles sont exposées dans les paragraphes suivants.

Les rendus graphiques

La possibilité d’avoir accès à des rendus graphiques divers et complets est primordiale pour la visualisation moléculaire. La complexité des molécules,
 25 le nombre important d’atomes, les nombreuses meta-informations, les structures particulières nécessitent d’avoir à sa disposition des moyens évolués et variés pour afficher une molécule. Quatre représentations différentes (voir figure 2.5 page suivante) ont été utilisées sur la plate-forme SHADDOCK :

CPK affiche tous les atomes de la molécule sous forme de sphères en les
 30 reliant par des cylindres ; c’est un affichage très chargé lorsque le nombre d’atomes est important mais la taille des sphères et des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.5a page suivante) ;

Licorice représente tous les liens entre les atomes par des cylindres, sans
 35 représenter les atomes ; la taille des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.5b page suivante) ;

NewRibbon produit une courbe spline sur les atomes C_α représentant l'armature principale de la molécule ; la courbe est représentée sous forme de ruban (voir figure 2.5c) ;

5 **HBonds** affiche les potentielles liaisons hydrogène sous forme de traits en pointillés ; les seuils physiques ainsi que les paramètres d'affichage de la ligne (couleur, largeur, *etc.*) sont modifiables (voir figure 2.5d).



Figure 2.5 – Illustration des représentations de molécules sur VMD

Chacune de ces représentations visuelles peut être affectée à tout ou partie de la molécule comme par exemple « le résidu 13 », « seulement les atomes de carbone » ou « tous les résidus entre 1 et 16 sauf les atomes d'hydrogène ».

10 De plus, pour chacune des représentations précédentes, différentes colorations sont possibles :

Couleur fixe donne une couleur unie prédéfinie (la couleur du curseur par exemple) ;

15 **Couleur des atomes** donne une couleur différente à chaque atome selon un code couleur standard dépendant de sa nature (rouge pour oxygène, blanc pour hydrogène, *etc.*) ;

Couleur des résidus donne une couleur différente pour chaque atome selon une palette de couleurs prédéfinie par VMD ;

Transparence rend transparent les objets tout en conservant la teinte ;

GoodSell accentue les contours des objets sous le principe du *cell shading*.

La génération automatique de fichier de simulation

La simulation nécessite de nombreuses informations. Une partie de ces informations découle directement de la molécule à l'état d'équilibre ; ces informations sont les suivantes :

- l'ensemble des liaisons entre atomes ;
- des angles simples ;
- des angles diédraux ;
- des angles de torsion.

La simple description des atomes et de leurs positions à l'état d'équilibre (fichier PDB) couplée aux données générées par CHARMM [BROOKS et al. 1983] permet de générer les fichiers nécessaires au logiciel de simulation. VMD fournit tous les outils permettant de générer ce fichier nécessaire à la simulation (fichier PSF) par l'intermédiaire d'une extension : *Automatic PSF builder*.

2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire

Les deux principaux logiciels de simulation existants sont NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*) [PHILLIPS et al. 2005] et GROMACS [BERENDSEN et al. 1995]. GROMACS est plus performant que NAMD, surtout dans les dernières versions [HESS et al. 2008] qui offre des performances jusqu'à quatre fois plus rapide que NAMD. NAMD est développé par la même université que VMD et la connexion entre les deux logiciels est facilitée. Enfin, NAMD peut être aisément connecté à VMD dans le cadre d'une simulation interactive contrairement à GROMACS. C'est pourquoi le logiciel NAMD a été retenu pour notre plate-forme.

Une des fonctionnalités de NAMD utilisée est la possibilité de « fixer » des atomes. En effet, la fixation d'atomes permet d'exclure partiellement certains atomes durant la simulation. Ces atomes interviennent dans le calcul des forces de la simulation mais eux-mêmes ne sont pas soumis aux forces de l'environnement. Cette fonctionnalité est nécessaire pour simuler un point d'ancrage de la molécule dans l'environnement virtuel. Sans ce point d'ancrage, la molécule pourrait dériver et sortir de l'espace de travail des utilisateurs sans possibilité de récupération.

Plate-forme de simulation moléculaire en temps-réel

Les logiciels de simulation ne sont pas prévus pour des simulations interactives en temps-réel. Cependant, l'*Institut für Theoretische und Angewandte Physik* (ITAP) a développé le protocole IMD (*Interactive Molecular Dynamics*) permettant d'utiliser NAMD couplé à VMD pour des simulations en temps-réel [STADLER et al. 1997]. L'extension IMD *connect* permet de connecter rapidement le logiciel VMD avec la simulation offerte par NAMD.

Cependant, entre le début du développement de notre plate-forme en 2008 et aujourd'hui, une nouvelle solution plus générique a été développée au sein de l'Institut de Biologie Physico-Chimie (IBPC). En effet, MDDRIVER [DE-LALANDE et al. 2009] est une interface permettant d'utiliser le protocole IMD avec d'autre logiciel de simulation comme GROMACS. C'est une interface capable de gérer différents logiciels de visualisation et de simulation. Cependant, cette nouvelle solution n'a pas encore été implémentée dans notre plate-forme.

2.4 Les outils d'interaction

2.4.1 Les outils existants

La manipulation des molécules est nécessaire sur la plate-forme SHADDOCK. VMD dispose déjà de différents outils permettant d'effectuer différentes manipulations sur les molécules.

Par défaut et sans configuration, la souris permet d'orienter la scène sur trois DDLS afin d'observer la molécule sous différents angles. Elle peut également être configurées pour translater la molécule ou obtenir diverses informations sur la molécules.

Il est également possible d'utiliser une souris 3D, automatiquement détectée lorsqu'elle est branchée sur l'ordinateur. Une souris 3D permet de translater et d'orienter la scène. La souris 3D SpaceNavigator® est utilisée dans le cadre de certaines de notre seconde expérimentation (voir chapitre 4 page 53).

Enfin, des outils apportant une dimension haptique sont disponibles par l'intermédiaire d'une connexion avec VRPN (voir section 2.2.3 page 11). Ces outils sont liés à des périphériques externes (des interfaces PHANTOM Omni® dans notre cas). Les outils proposés par défaut dans VMD ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 25). Ils sont les suivants :

grab qui permet de sélectionner une molécule dans son intégralité et de la déplacer dans la scène ;

tug qui permet de sélectionner un atome de la molécule et de lui appliquer une force (qui sera transmise à la simulation) pour déformer la molécule.

- 5 Cependant, de nombreux outils supplémentaires ont été développés au-fur-et-à-mesure des besoins identifiés durant les expérimentations. Ces nouveaux outils sont détaillés dans la section 2.4.2.

2.4.2 Les nouveaux outils d'interaction

10 Durant les différentes études présentées dans la ?? page ??, les analyses et les remarques d'utilisateurs ont permis d'améliorer les outils d'interaction et d'en proposer de nouveaux. Le développement de ces nouveaux outils a nécessité une modification du programme VMD par extension des outils déjà existants. Des fonctionnalités ont été ajoutées et sont présentées dans les sections suivantes.

15 Amélioration de la sélection

Durant le processus de recherche et de sélection, les utilisateurs ont souvent évoqué le besoin de connaître en continu leur position et de savoir à priori l'élément qui va être sélectionné. Pour que les utilisateurs connaissent à chaque instant l'élément qui peut être sélectionné, une information visuelle met en surbrillance l'élément pointé à chaque instant. La mise en surbrillance est un agrandissement en transparence de l'élément pointé. La couleur de cette mise en surbrillance est de la même couleur que le curseur de l'utilisateur.

25 Dans le cas d'une sélection par résidu, c'est l'ensemble du résidu qui est mis en surbrillance. Cependant, dans le cas d'une sélection par atome, la mise en surbrillance d'un seul atome pourrait être difficile à apercevoir au sein d'une molécule complexe. En effet, le nombre important d'atomes d'une molécule peut surcharger le rendu graphique. C'est pourquoi dans ce cas, l'ensemble du résidu auquel appartient l'atome pointé est mis en surbrillance. Cependant, 30 l'atome pointé est agrandi afin de le distinguer du reste du résidu.

Une fois l'élément pointé, l'utilisateur peut sélectionner l'élément. Lorsque les utilisateurs sélectionnent l'élément, la surbrillance passera de la transparence à l'opacité. Une illustration des effets visuels relatifs au pointage et à la sélection est affichée sur la figure 2.6 page suivante.

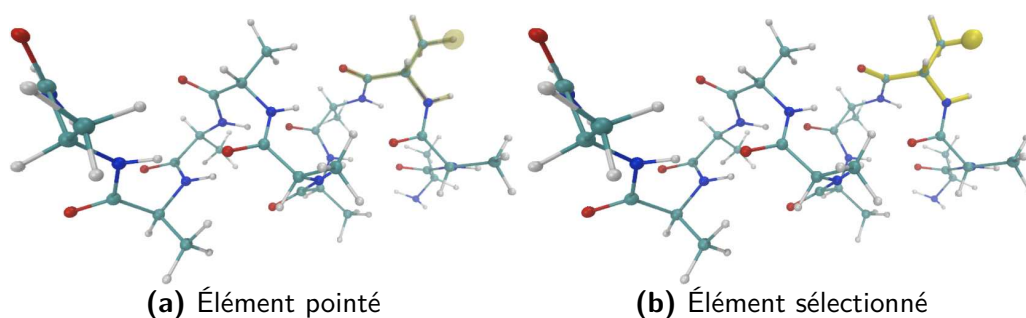


Figure 2.6 – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

Déformation par groupe d'atomes

L'outil *tug* permet de déformer la molécule en appliquant un effort à l'atome sélectionné. Cependant, la déformation par l'intermédiaire d'un seul atome possède deux désavantages.

- 5 Tout d'abord, la déformation d'une molécule atome par atome est un processus très fastidieux. Il serait plus efficace de déplacer un groupe d'atomes en une seule fois.

De plus, l'application d'un effort sur un atome provoque l'étirement de la molécule. Au repos, la molécule est dans état relativement stable. Déplacer un
 10 atome perturbe cet état de stabilité. De plus, certains atomes sont fortement liés et les éloigner peut perturber grandement l'état de stabilité. Il est donc préférable de déplacer tous ces atomes liés en une seule manipulation.

C'est pourquoi un outil appliquant une force à un groupe d'atomes permet de le déplacer tout en conservant la stabilité intrinsèque. Les groupes d'atomes
 15 dignes d'intérêt sont les résidus (une vingtaine d'atomes), les hélices- α ou feuillets- β (une vingtaine de résidus) et les molécules. Cependant, *VMD* n'est pas capable de fournir l'information sémantique regroupant les atomes en hélices- α ou en feuillets- β . La fonctionnalité de l'outil *tug* a donc été étendue aux résidus et aux molécules.

- 20 Cependant, appliquer le même effort à l'ensemble des atomes de la molécule produit un effort total très important. Si l'effort total est trop important, les perturbations envoyées à la simulation sont trop puissantes et peuvent produire des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation. En effet, *NAMD* peut décider de stopper la simulation s'il considère
 25 que la simulation diverge trop d'un état stable. Il est donc nécessaire de diviser l'intensité des forces appliquées proportionnellement au nombre d'atomes sélectionnés.

Outil de désignation

Un besoin récurrent constaté durant les expérimentations est la nécessité pour les utilisateurs de désigner un élément de la molécule. Parfois les utilisateurs éprouvent le besoin de désigner un élément de l'environnement virtuel pour un autre utilisateur. Les enregistrements audio ont également

L'outil de désignation a été conçu pour répondre à un processus en quatre étapes :

- a. Recherche d'une cible ;
- 10 b. Désignation d'une cible ;
- c. Acceptation d'une cible ;
- d. Sélection d'une cible.



Figure 2.7 – Les quatre étapes de la désignation

L' étape a consiste pour un utilisateur \mathcal{A} à rechercher une cible à désigner. Cette cible est choisie en fonction des objectifs de la tâche à réaliser et sera

Une fois la cible trouvée, l'utilisateur \mathcal{A} désigne la cible identifiée lors de l' étape b. La cible est alors mise en surbrillance de façon à être vue des autres utilisateurs (voir figure 2.7b).

L' étape c page précédente fait intervenir l'utilisateur \mathcal{B} . L'utilisateur \mathcal{B} peut accepter ou non cette désignation. S'il accepte la désignation, la cible est alors colorée de la couleur du curseur de l'utilisateur \mathcal{B} qui a accepté (voir figure 2.7c page précédente). Tant qu'elle n'est pas acceptée, la résidu reste en
5 surbrillance jusqu'à ce que la requête soit accepté ou modifiée.

L' étape d page précédente est la dernière étape. L'utilisateur \mathcal{B} ayant accepté doit maintenant sélectionner la cible pour achever le processus de désignation. Tant que l'utilisateur \mathcal{B} n'a pas sélectionné le résidu ciblé, le processus ne peut pas être considéré comme terminé et l'effet de surbrillance reste actif. Lorsque
10 la cible est sélectionnée, le processus de manipulation reprend normalement (voir figure 2.7d page précédente).

Bibliographie

[BERENDSEN et al. 1995]

BERENDSEN, Herman J. C., David van der SPOEL et Rudy van DRU-
NEN (sept. 1995). « GROMACS : a message-passing parallel molecular
5 dynamics implementation ». Anglais. Dans *Computer Physics Commu-
nications* 91.1–3, pages 43–56 (cf. page 15).

[BROOKS et al. 1983]

BROOKS, Bernard R., Robert E. BRUCCOLERI, Barry D. OLAFSON, Da-
vid J. STATES, Sundaramoorthi SWAMINATHAN et Martin KARPLUS (avr.
10 1983). « CHARMM : a program for macromolecular energy, minimization,
and dynamics calculations ». Anglais. Dans *Journal of computational
chemistry* 4.2, pages 187–217 (cf. page 15).

[CASERA et al. 2006]

CASERA, Steve, Hans-Heinrich NÄGELI et Peter KROPF (août 2006).
15 « Improving usability of collaborative scientific visualization systems ». Anglais. Dans *Proceedings of Visualization, Imaging, and Image Proces-
sing*. Tome 541, pages 180–186 (cf. page 9).

[DELALANDE et al. 2009]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAA-
DEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive
20 simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15,
pages 2375–2387 (cf. page 16).

[ELLIS et al. 1991]

ELLIS, Clarence A., Simon J. GIBBS et Gail REIN (jan. 1991). « Group-
ware : some issues and experiences ». Dans *Communication on ACM*
25 34.1, pages 39–58 (cf. pages 9, 10).

[HESS et al. 2008]

HESS, Berk, Carsten KUTZNER, David van der SPOEL et Erik LINDAHL
(nov. 2008). « GROMACS 4 : algorithms for highly efficient, load-balanced,
30 and scalable molecular simulation ». Anglais. Dans *Journal of chemical
theory and computation* 4.3, pages 435–447 (cf. page 15).

[P. HUANG et al. 2010]

HUANG, Pingguo, Yutaka ISHIBASHI, Norishige FUKUSHIMA et Shinji SU-
GAWARA (oct. 2010). « Interactivity improvement of group synchroniza-
35 tion control in collaborative haptic play with building blocks ». Anglais.
Dans *Proceedings of the 9th Annual Workshop on Network and Systems
Support for Games*. NetGames '10 2. Piscataway, NJ, USA : IEEE
Press, pages 1–6 (cf. page 11).

- [HUMPHREY et al. 1996]
HUMPHREY, William F., Andrew DALKE et Klaus SCHULTEN (fév. 1996). « VMD : Visual Molecular Dynamics ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics* 14.1, pages 33–38 (cf. page 13).
- 5 [IGLESIAS et al. 2008]
IGLESIAS, Rosa, Sara CASADO, Teresa GUTIÉRREZ, Alejandro GARCÍA-ALONSO, Wai YU et Alan MARSHALL (jan. 2008). « Simultaneous remote haptic collaboration for assembling tasks ». Anglais. Dans *Multimedia Systems*. Tome 13. 4. Springer, Heidelberg, Germany, pages 263–274
10 (cf. page 10).
- [ITKOWITZ et al. 2005]
ITKOWITZ, Brandon, Josh HANDLEY et Weihang ZHU (mar. 2005). « The OpenHaptics™ toolkit : a library for adding 3D™ navigation and haptics to graphics applications ». Anglais. Dans *Proceedings of the first joint eurohaptics conference and symposium on haptic interfaces for virtual*
15 *environment and teleoperator systems*. WHC '05. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 590–591 (cf. page 8).
- [J. KIM et al. 2004]
KIM, Jung, Hyun KIM, Boon K. TAY, Manivannan MUNIYANDI, Man-
20 dayam A. SRINIVASAN, Joel JORDAN, Jesper MORTENSEN, Manuel OLIVEIRA et Mel SLATER (juin 2004). « Transatlantic touch : a study of haptic collaboration over long distance ». Anglais. Dans *Presence : Teleoperators and Virtual Environments* 13.3, pages 328–337 (cf. page 10).
- [MARSH et al. 2006]
25 MARSH, James, Mashhuda GLENCROSS, Steve PETTIFER et Roger HUBBOLD (mai 2006). « A network architecture supporting consistent rich behavior in collaborative interactive applications ». Anglais. Dans *IEEE Transactions on visualization and computer graphics* 12.3, pages 405–416 (cf. page 11).
- 30 [MASSIE et SALISBURY 1994]
MASSIE, Thomas H. et Kenneth J. SALISBURY (nov. 1994). « PHAN-ToM haptic interface : a device for probing virtual objects ». Anglais. Dans *Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems*. Tome 55. 1. Massachusetts Institute of Technology,
35 Cambridge, United States, pages 295–300 (cf. page 8).
- [NORMAN et HAMZA-LUP 2010]
NORMAN, Jonathan et Felix G. HAMZA-LUP (avr. 2010). « Challenges in the deployment of visuo-haptic virtual environments on the internet ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 Second International Conference*

on Computer and Network Technology. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 33–37 (cf. page 11).

[PETTERSEN et al. 2004]

- 5 PETTERSEN, Eric F., Thomas D. GODDARD, Conrad C. HUANG, Gregory S. COUCH, Daniel M. GREENBLATT, Elaine C. MENG et Thomas E. FERRIN (oct. 2004). « UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 25.13, pages 1605–1612 (cf. page 13).

[PHILLIPS et al. 2005]

- 10 PHILLIPS, James C., Rosemary BRAUN, Wei WANG, James GUMBART, Emad TAJKHORSHID, Elizabeth VILLA, Christophe CHIPOT, Robert D. SKEEL, Laxmikant KALÉ et Klaus SCHULTEN (mai 2005). « Scalable molecular dynamics with NAMD ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 26.16, pages 1781–1802 (cf. page 15).

15 [SALLNÄS 2010]

SALLNÄS, Eva-Lotta (juil. 2010). « Haptic feedback increases perceived social presence ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 international conference on Haptics - generating and perceiving tangible sensations : Part II*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, pages 178–185 (cf. page 9).

20 [SAYLE et MILNER-WHITE 1995]

SAYLE, Roger A. et E. James MILNER-WHITE (sept. 1995). « RASMOL : biomolecular graphics for all ». Anglais. Dans *Trends in biochemical sciences* 20.9, pages 374–376 (cf. page 13).

[SCHRÖDINGER 2010]

- 25 SCHRÖDINGER, LLC, éditeur (août 2010). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 03/06/2011) (cf. page 13).

[SENSABLE 2002]

- 30 SENSABLE, Technologies Incorporated® (avr. 2002). *GHOST® software developer's toolkit programmer's guide*. Anglais. 4.0. SensAble Technologies Incorporated® (cf. page 8).

[SOURCEFORGE.NET 2006]

- 35 SOURCEFORGE.NET, éditeur (août 2006). *Jmol : an open-source Java viewer for chemical structures in 3D*. Anglais. URL : <http://www.jmol.org/> (visité le 03/06/2011) (cf. page 13).

[STADLER et al. 1997]

STADLER, Jörg, Ralf MIKULLA et Hans-Rainer TREBIN (juin 1997). « IMD : a software package for molecular dynamics studies on parallel computers ». Anglais. Dans *International Journal of Modern Physics* 8.5, pages 1131–1140 (cf. page 16).
5

[TANG et al. 2006]

TANG, Anthony, Melanie TORY, Barry PO, Petra NEUMANN et Sheelagh CARPENDALE (avr. 2006). « Collaborative coupling over tabletop displays ». Anglais. Dans *Proceedings of the SIGCHI conference on Human Factors in computing systems*. New York, NY, USA : ACM, pages 1181–1190 (cf. page 9).
10

[TAYLOR II et al. 2001]

TAYLOR II, Russell M., Thomas C. HUDSON, Adam SEEGER, Hans WEBER, Jeffrey JULIANO et Aron T. HELSER (nov. 2001). « VRPN : a device-independent, network-transparent VR peripheral system ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Virtual Reality Software and Technology 2001. New York, NY, USA : ACM, pages 55–61 (cf. page 11).
15

Chapitre 3

Recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire

5

Sommaire

10

15

20

3.1	Introduction	25
3.2	Contexte	26
3.3	Expérimentation de recherche de résidu en si- mulation moléculaire	27
3.3.1	Tâche	27
3.3.2	Spécificités du protocole expérimental	32
3.4	Résultats	36
3.4.1	Amélioration des performances en binôme	36
3.4.2	Stratégies de travail	39
3.4.3	Résultats qualitatifs	47
3.5	Synthèse	48
3.5.1	Résumé des résultats	48
3.5.2	Perspectives	49
	Bibliographie	51

3.1 Introduction

25

La majeure partie de la thèse est l'étude du travail collaboratif en envi-
ronnement virtuel complexe. L'environnement virtuel complexe choisi est la

simulation moléculaire. Nous nous intéresserons à la déformation moléculaire qui se découpe en quatre tâches élémentaires (voir figure 1.1 page 3). Nous nous proposons d'étudier ces quatre tâches élémentaires indépendamment les unes des autres. La première de ces expérimentations s'intéresse particulièrement
5 au deux premières tâches élémentaires : la *sélection* et la *recherche*. La seconde et la troisième expérimentation permettront d'étudier plus particulièrement les tâches élémentaires de *manipulation* et d'*évaluation*.

La thèse portant sur le travail collaboratif, cette première étude met en collaboration deux individus sur la tâche de recherche. La seconde étude utilisera
10 des binômes dans une tâche de manipulation. Finalement, la collaboration de groupe sera abordée au niveau de la troisième et dernière étude sur le travail collaboratif.

L'expérimentation est présentée en plusieurs parties. Nous commencerons par présenter les objectifs et les hypothèses de cette première expérimentation dans la section 3.2. Les détails de l'expérimentation seront abordés dans
15 la section 3.3 page suivante. Enfin, les résultats sont analysés dans la section 3.4 page 36 puis une synthèse de cette expérimentation est exposée dans la section 3.5 page 48.

3.2 Contexte

20 Dans cette première expérimentation, nous proposons d'étudier les deux premières des quatre tâches élémentaires (voir section 1.2.1 page 1) : la *recherche* et la *sélection*. Ces tâches sont cruciales car elles ont un impact important sur les tâches suivantes que sont la *déformation* et la *manipulation*. Les difficultés liées à la complexité de l'environnement virtuel moléculaire seront
25 étudiées à travers cette étude.

La recherche en environnement virtuel est une tâche élémentaire relativement peu explorée en biologie moléculaire. Cependant, on trouve de nombreux travaux concernant la « recherche de chemin » ou *wayfinding* en anglais. DARKEN [1996] consacre une thèse à la recherche de chemin en environ-
30 nement virtuel en adaptant des solutions du monde réel. Plus récemment, MÉNÉLAS [2010] s'est intéressé au rendu multi-modal pour la perception de la mécanique des fluides. Une des problématiques est la localisation de structures mécaniques particulières (vortex) dans le fluide à l'aide de retour audio-haptique.

35 La recherche étant une tâche qui peut s'avérer complexe devant la quantité d'informations toujours grandissante, la collaboration s'est imposé comme

une des solutions de ces dernières années. La recherche collaborative est un champ de recherche assez largement étudié, notamment en ce qui concerne les moteurs de recherche collaboratifs. PICKENS et GOLOVCHINSKY [2007] explorent la recherche collaborative indirecte en utilisant les données de cer-
5 tains utilisateurs pour améliorer les recherches d'autres utilisateurs. La thèse de FOLEY [2008] s'intéresse plus précisément à l'interaction synchrone des utilisateurs pour l'amélioration des résultats de recherche. Certaines études proposent même représenter les informations de l'internet dans un environ-
nement virtuel en 3D comme BENFORD et al. [1999] par exemple.

10 Cette première expérimentation a pour objectif d'explorer la recherche de résidus durant une simulation moléculaire. La recherche s'effectuera dans un EVC. L'expérimentation a pour objectif principal de comparer les performances d'un monôme et d'un binôme sur cette tâche de recherche. Les performances représentent à la fois le temps total pour réaliser la tâche mais
15 aussi les ressources mises en place pour accéder à ce résultat. Un binôme sera-t-il plus performant qu'un monôme ?

De plus, les méthodes et les stratégies de travail seront étudiées. C'est principalement l'évolution de ces stratégies au sein des binômes qui focalisera notre attention. Le travail en binôme permet de mettre en avant différentes straté-
20 gies de travail discriminées en fonction de la communication, des espaces de travail, de la répartition des tâches, *etc.*

Enfin, il est nécessaire de valider la plate-forme de manipulation proposée. Pour cela, l'évaluation sera confiée aux sujets. L'objectif est de vérifier l'utilisabilité de la plate-forme afin d'identifier les points faibles.

25 3.3 Expérimentation de recherche de résidu en simulation moléculaire

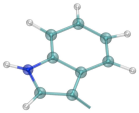

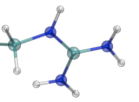
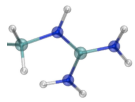
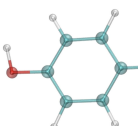
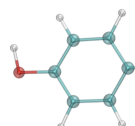
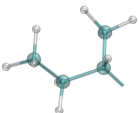
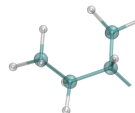
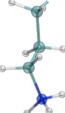
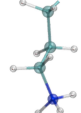
3.3.1 Tâche

La tâche proposée consiste à trouver puis à extraire des résidus d'une molécule. Les résidus sont des groupes d'atomes. Trois molécules sont propo-
30 sées dans le cadre de cette expérimentation. La molécule TRP-ZIPPER sera utilisée pour la procédure d'apprentissage de la plate-forme. Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisées pour la tâche de recherche et d'extraction de résidus : chaque molécule possède 5 résidus à extraire. Tous les résidus à
35 rechercher sont affichés dans la table 3.1 page suivante. Pour une description plus précises des molécules, se reporter à la section A.2 page 134.

Table 3.1 – Liste des résidus recherchés

(a) Résidus sur la molécule TRP-CAGE

(b) Résidus sur la molécule Prion

Résidu	Image	Résidu	Image
(\mathcal{R}_1)		(\mathcal{R}_6)	
(\mathcal{R}_2)		(\mathcal{R}_7)	
(\mathcal{R}_3)		(\mathcal{R}_8)	
(\mathcal{R}_4)		(\mathcal{R}_9)	
(\mathcal{R}_5)		(\mathcal{R}_{10})	

3.3. Expérimentation de recherche de résidu en simulation moléculaire

La figure 3.1 page 31 montre la répartition des résidus sur les deux molécules. Chaque résidu possède ses propres spécificités (position, couleur*etc.*). Les critères de complexité, résumés pour chaque résidu dans la table 3.2 page suivante, sont les suivants :

- 5 **Nombre de résidus** Le nombre total de résidus présents dans la molécule. Un nombre important des résidus surcharge visuellement l'environnement virtuel et augmente le nombre de cibles potentielles.

10 **Position** Le résidu peut se trouver soit à la périphérie de la molécule (position *externe*) ou au centre de la molécule (position *interne*). Un résidu en position externe ne nécessite pas de déformer la molécule pour le trouver et l'atteindre contrairement à un résidu en position interne qui sera plus complexe d'accès.

Forme La forme du résidu est un motif graphique plus ou moins complexe à identifier. On distingue trois formes différentes :

15 **Chaîne** Une chaîne d'atomes (la plupart du temps carbonés) avec des atomes d'hydrogène de chaque côté.

Cycle Une chaîne fermée d'atomes de carbone ou d'azote.

Étoile Séries de chaînes d'atomes toutes reliées sur un atome central (un atome de carbone pour la plupart du temps).

20 **Couleurs** Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l'oxygène, blanc pour l'hydrogène, *etc.*). Les atomes rares seront donc rapidement identifiés grâce à leur couleur singulière. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbonés) seront plus difficiles à filtrer à cause de leur fréquence d'apparition.

25 **Similarité** Certains résidus à chercher sont très similaires à d'autres résidus également présents sur la molécule. Les résidus similaires possèdent un atome de moins ou de plus par rapport au résidu recherché. À cause de cette similarité, les sujets vont mobiliser une partie du temps à identifier des résidus incorrects.

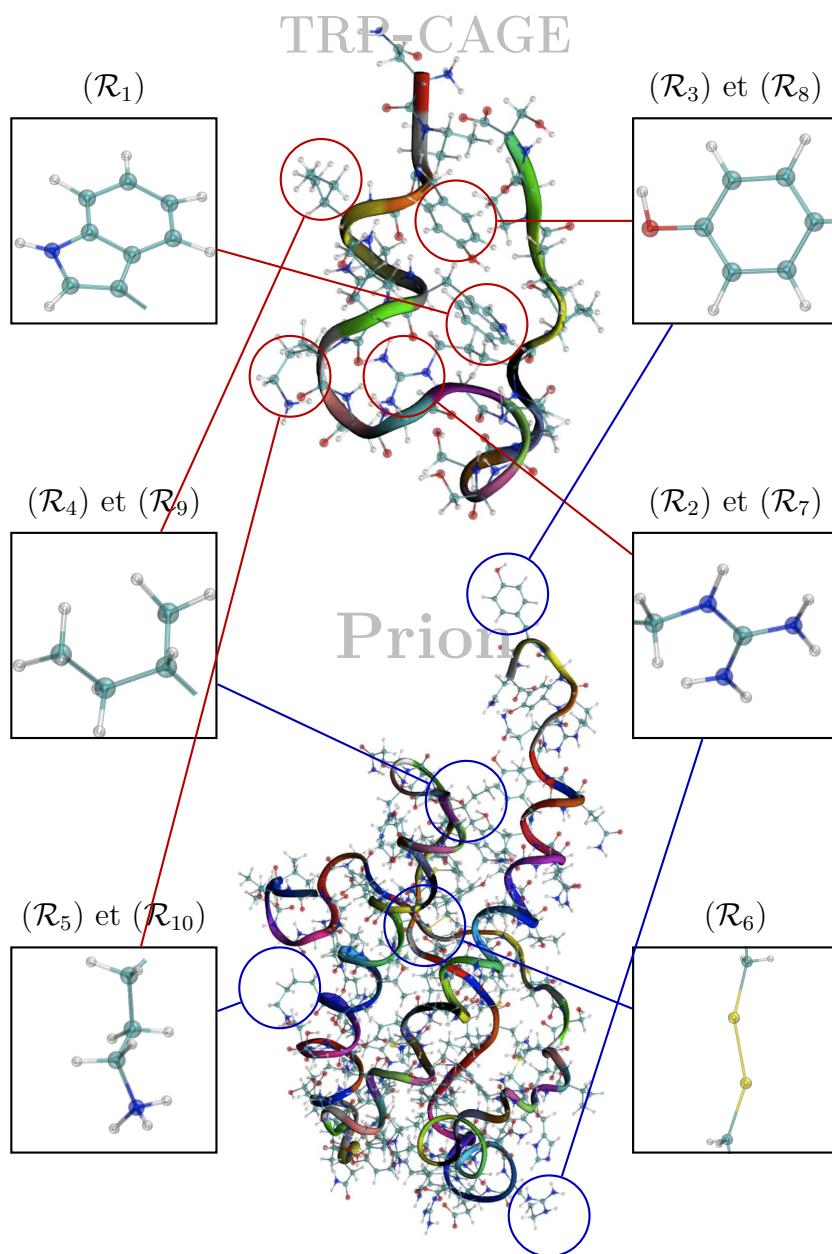
30 La tâche proposée nécessite deux étapes. Selon BOWMAN [1999], on distingue tout d'abord l'étape de recherche de l'objectif. Pour explorer la molécule afin d'identifier l'objectif, les sujets disposent de l'outil *grab*. Lorsque l'objectif recherché est identifié, les sujets entrent dans une seconde étape de sélection. Pour effectuer ces étapes de sélection, les sujets disposent de l'outil *tug*. Les outils *grab* et *tug* sont décrits dans la section 2.4.1 page 16.

35

Table 3.2 – Paramètres de complexité des résidus – C Carbone en *cyan*, A Azote en *bleu*, O Oxygène en *rouge* et S Soufre en *jaune*

Résidu	Nombre de résidus	Position	Forme	Couleurs	Similarité
(\mathcal{R}_1)	20	Interne	Cycle	8 C , 1 A	Non
(\mathcal{R}_2)	20	Interne	Étoile	1 C , 3 A	Non
(\mathcal{R}_3)	20	Interne	Cycle	6 C , 1 O	Non
(\mathcal{R}_4)	20	Externe	Chaîne	4 C	Non
(\mathcal{R}_5)	20	Externe	Chaîne	4 C , 1 A	Non
(\mathcal{R}_6)	112	Interne	Chaîne	2 C , 2 S	Non
(\mathcal{R}_7)	112	Externe	Étoile	1 C , 3 A	Non
(\mathcal{R}_8)	112	Externe	Cycle	6 C , 1 O	Non
(\mathcal{R}_9)	112	Interne	Chaîne	4 C	Oui
(\mathcal{R}_{10})	112	Interne	Chaîne	4 C , 1 A	Oui

Figure 3.1 – Répartition des résidus sur les molécules



3.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation est basée sur le dispositif expérimental décrit dans le chapitre A page 133. Cependant, certains choix expérimentaux concernant cette expérimentation de recherche en simulation moléculaire sont détaillés dans
5 les sections suivantes. Les détails à propos de la méthode expérimentale, présents dans la section B.1 page 139, sont résumés dans la table 3.3 page 35.

Matériel

Cette première expérimentation propose aux sujets d'effectuer une recherche
10 de résidus au sein d'une molécule de taille importante. Les sujets disposent déjà de deux outils de déformation *tug*. Cependant, un outil d'orientation de la molécule est mis à disposition pour des raisons détaillées dans la section 3.3.2 page 34. Ce nouvel outil nécessite l'ajout de quelques matériels.

L'outil d'orientation de la molécule est assuré par un PHANTOM Omni®
15 associé à l'outil *grab* (voir section 2.4.1 page 16). L'ajout d'un outil nécessite également l'ajout d'un ordinateur pour faire office de serveur VRPN. Dans ce cas, une machine de faible puissance est largement suffisante. L'interface est placée devant le sujet en charge de cet outil.

Durant l'expérimentation, il est demandé aux sujets de chercher des résidus
20 sur la molécule. Le résidu cible doit donc être affiché aux sujets. Afin de ne pas perturber la scène virtuelle, nous n'affichons pas le résidu sur l'écran de vidéoprojection. Un écran LCD 17 pouces est donc placé sur la table devant les sujets pour afficher en continu la cible à rechercher.

Pour finir, cette première expérimentation est destinée à mettre en évidence
25 les problèmes de communication qui peuvent survenir lors de la réalisation d'une tâche en collaboration. Afin d'analyser la communication entre les différents sujets de l'expérimentation, nous souhaitons enregistrer tous les échanges verbaux. C'est pourquoi, un micro a été installé sur la table face aux sujets afin de capter toutes les communications orales. L'enregistrement
30 est assuré par le logiciel AUDACITY®. Un filtrage du bruit de fond est effectué *a fortiori* afin de rendre plus audibles les enregistrements.

La figure 3.2 page suivante est un schéma récapitulatif de la disposition des tous les éléments dans la salle d'expérimentation. La figure 3.3 page ci-contre est une photographie de la salle d'expérimentation.

3.3. Expérimentation de recherche de résidu en simulation moléculaire

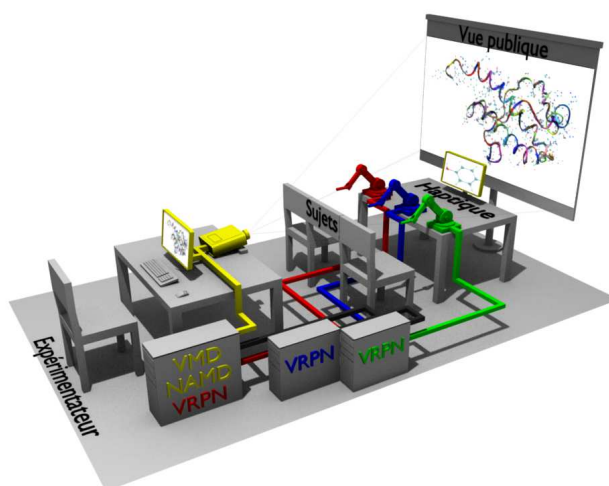


Figure 3.2 – Schéma du dispositif expérimental

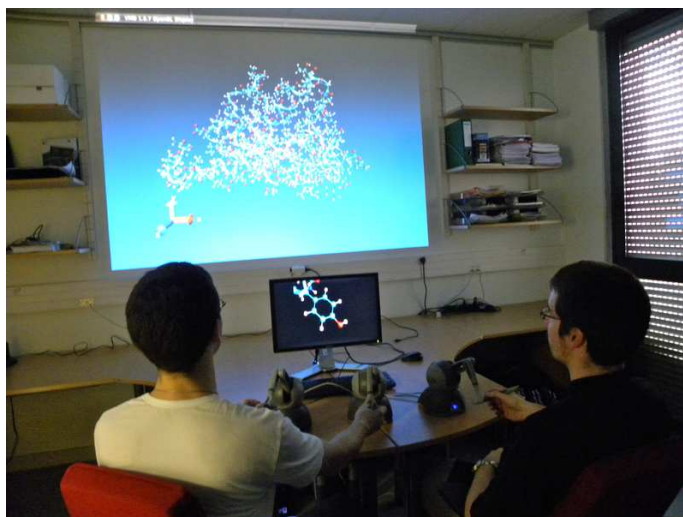


Figure 3.3 – Photographie du dispositif expérimental

Visualisation

Dans cette première expérimentation, c'est la molécule Prion qui a été utilisée. Cette molécule est suffisamment volumineuse pour ne pas nécessiter d'atome fixé dans la simulation. Une représentation de cette molécule durant la première expérimentation est sur la figure 3.4.

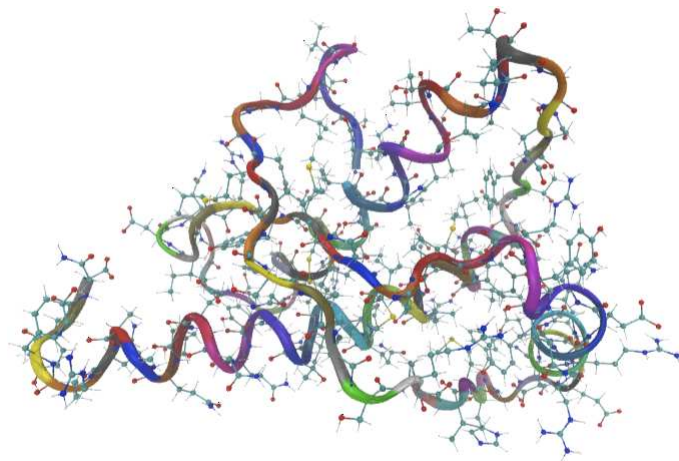


Figure 3.4 – Représentation de la molécule Prion pour l'expérimentation

Outils de manipulation

Durant une tâche de recherche, la déformation seule sur une molécule de taille importante va limiter les possibilités de recherche des sujets. En effet, tout résidu qui se trouverait derrière la molécule ne pourrait être trouvé que lorsque toute la partie sur le devant aura été déformée et écartée. C'est pourquoi, nous mettons un outil d'orientation de la molécule à disposition des sujets.

Cet outil, concrétisé par une interface haptique associé à l'outil *grab*, permet de sélectionner la molécule puis de déplacer et de l'orienter. Aucune modification par rapport à l'outil déjà proposé par *VMD* n'a été ajoutée. Cependant, l'outil n'est pas partagé entre les utilisateurs. En effet, il est demandé aux sujets dès le début de l'expérimentation, de choisir celui qui sera en charge de cet outil de manipulation et ceci tout au long de l'expérimentation. Il est à noter que pour les monômes, le sujet n'a accès qu'à un seul outil de déformation et un outil de manipulation.

Table 3.3 – Synthèse de la méthode expérimentale

Tâche	Recherche et sélection de motifs	
Hypothèses	(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme (\mathcal{H}_2) Stratégies variables en fonction des binômes (\mathcal{H}_3) Les sujets préfèrent le travail en binôme (\mathcal{H}_4) La plate-forme est appréciée des utilisateurs	
Variable in-dépendantes	(\mathcal{V}_{i1}) Nombre de sujets (\mathcal{V}_{i2}) Résidu à chercher	
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Temps de réalisation (\mathcal{V}_{d2}) Distance entre les espaces de travail (\mathcal{V}_{d3}) Communication verbales (\mathcal{V}_{d4}) Affinités entre les sujets (\mathcal{V}_{d5}) Force moyenne appliquée par le sujet (\mathcal{V}_{d6}) Réponses qualitatives	
Condition (\mathcal{C}_1)	Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)
Sujet \mathcal{A} 10 résidus	Sujet \mathcal{A} 10 résidus	Binôme \mathcal{AB} 10 résidus
Sujet \mathcal{B} 10 résidus	Binôme \mathcal{AB} 10 résidus	Sujet \mathcal{A} 10 résidus
Binôme \mathcal{AB} 10 résidus	Sujet \mathcal{B} 10 résidus	Sujet \mathcal{B} 10 résidus

3.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette première étude concernant la recherche et la sélection sur une tâche complexe de collaboration. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant, un test de BROWN et FORSYTHE [1974] permet de confirmer l'homoscédasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée à l'aide d'un test de FRIEDMAN [1940] adapté pour les variables intra-sujets non-paramétriques.

3.4.1 Amélioration des performances en binôme

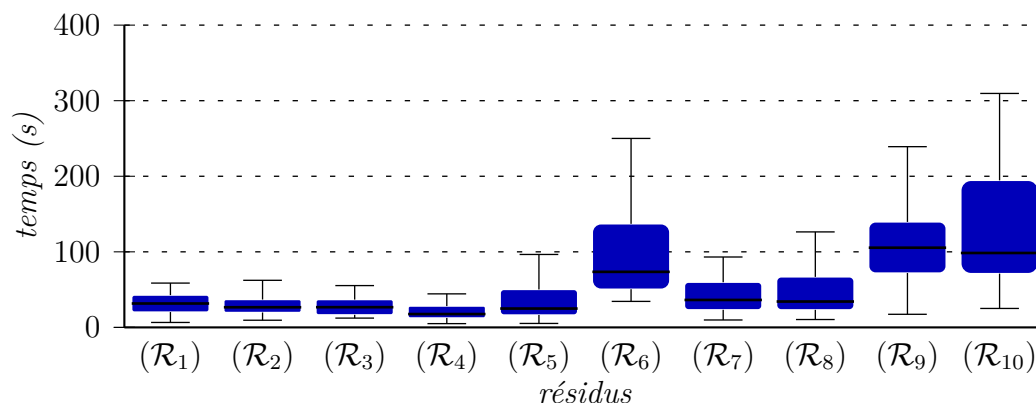


Figure 3.5 – Temps de réalisation par résidu

La figure 3.5 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour l'identification et l'extraction de chaque résidu (\mathcal{V}_{i2}). L'analyse montre qu'il y a un effet significatif des résidus (\mathcal{V}_{i2}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 163.1$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) obtiennent des temps de réalisation significativement plus longs que les autres résidus.

La figure 3.6 page suivante présente les temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de chaque résidu (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse ne montre pas d'effet significatif du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 3$, $df = 1$, $p = 0.082$). Cependant, en se limitant au groupe des trois résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) identifiés précédemment comme significativement plus longs à trouver et extraire, on montre un effet significatif

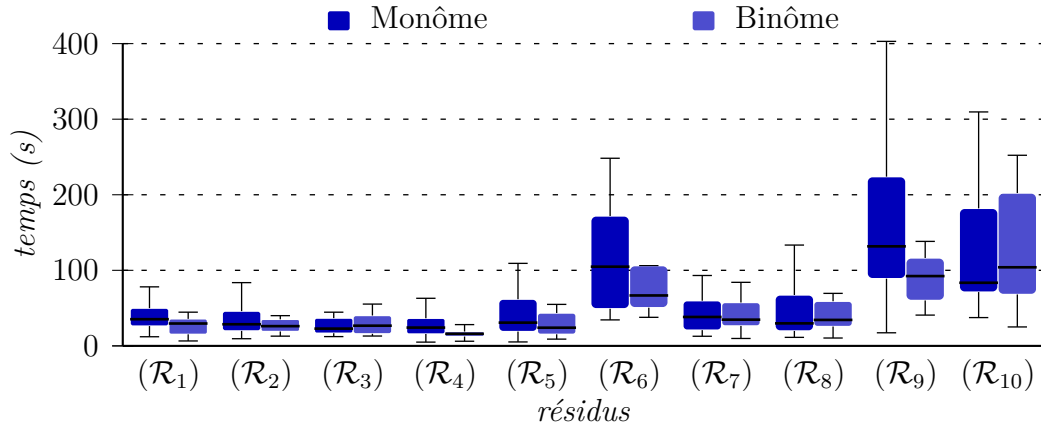


Figure 3.6 – Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu

du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 7.7$, $df = 1$, $p = 0.006$).

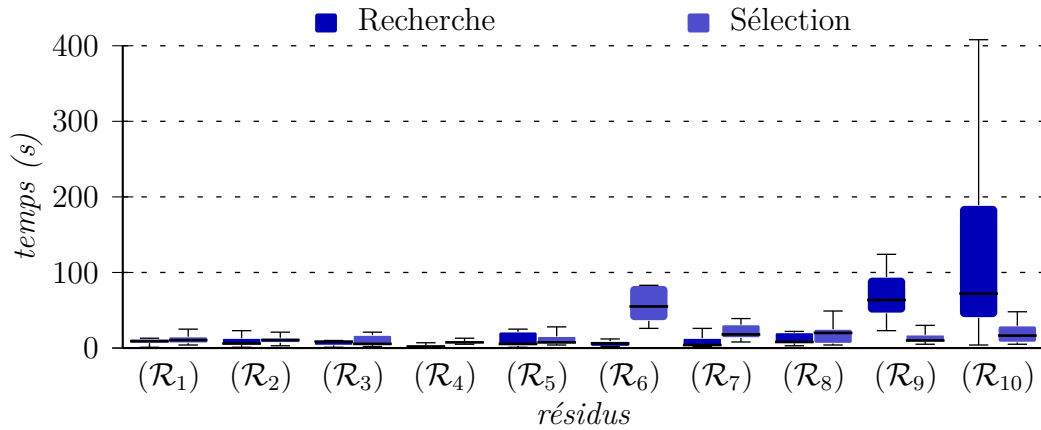


Figure 3.7 – Temps de recherche et de sélection comparés par résidu

La figure 3.7 présente les temps de recherche et de sélection par résidu (\mathcal{V}_{i2}). L'analyse montre un effet significatif des résidus (\mathcal{V}_{i2}) sur les temps de recherche ($\chi^2 = 97.6$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) obtiennent des temps de recherche significativement plus longs que les autres résidus. L'analyse montre également un effet significatif des résidus (\mathcal{V}_{i2}) sur les temps de sélection ($\chi^2 = 72.8$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que le résidu (\mathcal{R}_6) obtient un temps de sélection significativement plus long que les autres résidus.

Les cinq résidus (\mathcal{R}_1), (\mathcal{R}_2), (\mathcal{R}_3), (\mathcal{R}_4) et (\mathcal{R}_5) sont au sein de la molécule TRP-CAGE qui en compte un nombre total relativement limité (20 résidus). Les sujets construisent rapidement une carte mentale de la molécule ce qui leur permet de d'identifier rapidement les résidus recherchés. De plus, les
5 faibles contraintes physiques de la molécule (énergie totale du système peu élevée à cause du faible nombre d'atomes) la rende facile à déformer. Cela facilite la recherche des résidus qui sont dans une position interne à la molécule et qui nécessitent une déformation. Tous ces facteurs rendent les tâches de recherche et de sélection peu complexes sur la molécule TRP-CAGE ce qui
10 explique des temps de réalisation de la tâche très courts.

Les cinq résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_7), (\mathcal{R}_8), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) sont au sein de la molécule Prion qui en compte un nombre total relativement important (112 résidus). La construction complète d'une carte mentale est très complexe à cause du
15 nombre importants d'atomes qui sont continuellement en mouvement (dû à la simulation en temps-réel). Les sujets n'étant jamais confronté plus de deux fois à la même tâche (une fois en monôme et une fois en binôme), le phénomène d'apprentissage ne peut pas être effectué. En effet, les sujets ne se souviennent pas de la position d'un résidu d'une confrontation à l'autre (contrairement à la molécule TRP-CAGE pour certains cas). Les sujets
20 adoptent une stratégie en plusieurs étapes en fonction de la caractéristique de la tâche et du résidu à trouver. Tout d'abord, une recherche exploratoire permet d'identifier les résidus (\mathcal{R}_7) et (\mathcal{R}_8) qui se trouvent en position externe. Ensuite, lorsque cette première étape exploratoire ne permet pas d'identifier le résidu recherché, les sujets déforment la molécule afin d'accéder aux résidus
25 (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) qui se trouvent en position interne.

Le travail en binôme comparé au travail en monôme ne montre pas d'amélioration significative bien que la p -value soit très proche du seuil de significativité. Cependant, un test post-hoc a permis de d'identifier les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) comme ayant un temps de réalisation significativement
30 plus long. Sur ce groupe de résidus plus complexes, les binômes obtiennent une amélioration significative des performances par rapport aux monômes. Ce résultat confirme notre hypothèse (\mathcal{H}_1) exclusivement sur des tâches de fortes complexité.

Comme développé dans la procédure expérimentale, le temps de réalisation de
35 la tâche peut être séparé en deux parties : le temps de recherche et le temps de sélection (voir figure B.1 page 141). Les résidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) se distinguent par un temps de recherche significativement plus long que les autres résidus (excepté (\mathcal{R}_6)). En effet, ces deux résidus sont en présence d'autres résidus similaires au sein de la même molécule (voir table 3.2 page 30). Ces similarités
40 ont pour effet de monopoliser l'attention des sujets ce qui provoque une

hausse significative du temps de recherche du résidu au sein de la molécule.

De la même façon, le résidu (\mathcal{R}_6) se distingue par un temps de sélection significativement plus long que les autres résidus (excepté (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})). Ce résidu possède deux atomes de Soufre de couleur jaune. Cette particularité
 5 aisément identifiable malgré le nombre importants d'atomes de la molécules. Le temps de recherche est alors extrêmement court. Cependant, ce résidu est positionné au centre de la molécule. L'accès au résidu nécessite de *déplier* en grande partie la molécule afin de pouvoir le sélectionner et l'extraire.

10 L'analyse du rapport entre les temps de recherche et de sélection met en évidence trois configurations en fonction des différents résidus :

Temps de recherche et de sélection égaux Les sujets ont un temps similaire alloué à l'étape de recherche et de sélection. Les résidus concernés ne présentent pas de forte complexité (tous les résidus de la molécule TRP-CAGE et les résidus (\mathcal{R}_7) et (\mathcal{R}_8) de la molécule Prion) et sur
 15 lesquels, le travail collaboratif n'améliore pas les performances.

Temps de recherche prédominant Les sujets ont un temps important alloué à l'identification du résidu recherché. Une fois identifié, le résidu est facile à sélectionner puis à extraire. Les résidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) sont concernés. Dans cette configuration, le travail collaboratif améliore significativement les performances. En effet, l'étape de recherche est fortement parallélisable : l'espace de recherche est séparé entre les sujets
 20 (stratégie *diviser pour régner*).

Temps de sélection prédominant Les sujets ont un temps important alloué à la sélection et à l'extraction du résidu recherché. Le résidu est rapidement identifié mais il est difficile d'y accéder directement. Une
 25 phase de déformation est nécessaire pour le sélectionner. Le résidu (\mathcal{R}_6) est concerné. Dans cette configuration, le travail collaboratif améliore significativement les performances. En effet, l'étape de déformation peut bénéficier d'une action synchronisée entre plusieurs sujets : l'effort déployé est alors plus important ce qui permet de déformer la molécule plus rapidement.
 30

3.4.2 Stratégies de travail

Dans cette section, les données concernent exclusivement les binômes. Une numérotation des binômes a été effectuée afin de pouvoir comparer les mesures effectuées et ainsi, étudier les différentes stratégies.
 35

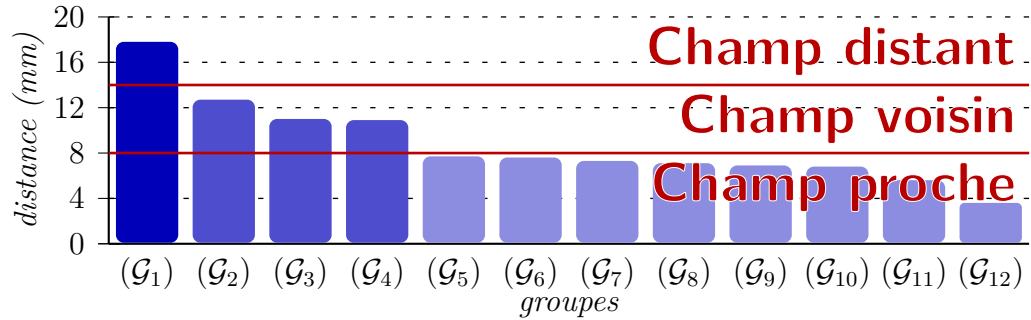


Figure 3.8 – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})

La figure 3.8 présente la distance moyenne entre les espaces de travail (\mathcal{V}_{d2}) de chaque binôme. Les binômes peuvent être classés en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.

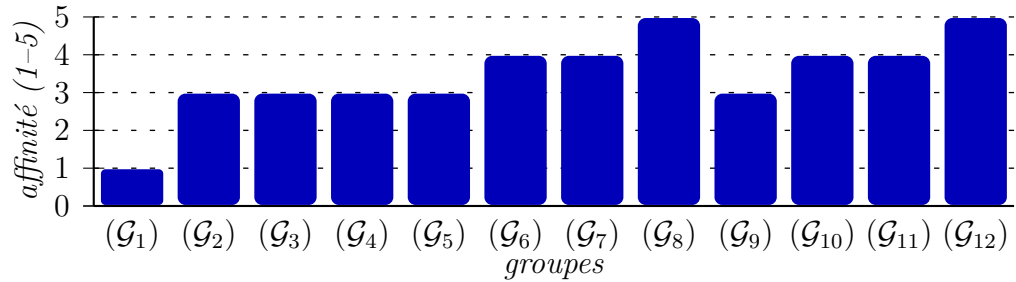


Figure 3.9 – Affinité entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.9 présente les affinités (\mathcal{V}_{d4}) de chaque binôme. Les notes, comprises entre un et cinq, montre que les binômes choisis ont des affinités relativement variées. L'affinité entre les sujets du groupe (\mathcal{G}_1) est très basse contrairement aux groupes (\mathcal{G}_8) et (\mathcal{G}_{12}) pour lesquelles l'affinité est très élevée.

La figure 3.10 page suivante présente les temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de chaque binôme. Le temps de réalisation de (\mathcal{G}_1) est particulièrement important (plus d'une fois et demi les autres groupes les plus longs). À l'opposé, on note que (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) obtiennent des temps de réalisation extrêmement bas.

La figure 3.11 page ci-contre présente les temps de communication verbale (\mathcal{V}_{d3}) de chaque binôme. (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) ont des temps de communication verbale inférieurs à 20 s. À l'opposé, (\mathcal{G}_1), (\mathcal{G}_5) et (\mathcal{G}_{11}) ont des temps de communication verbale qui approche les 60 s.

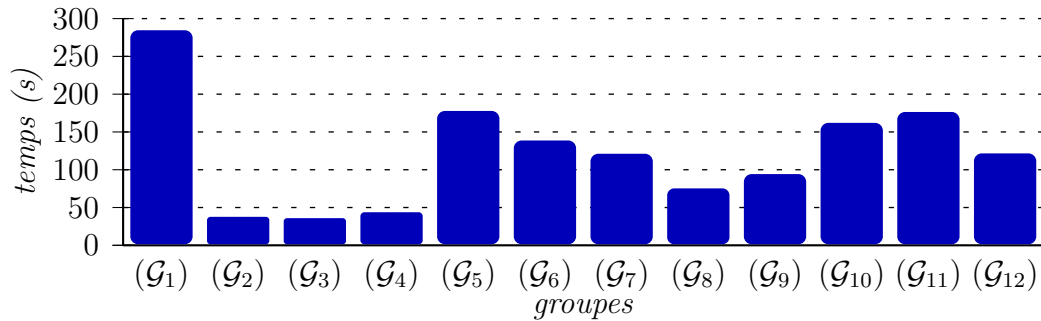


Figure 3.10 – Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme

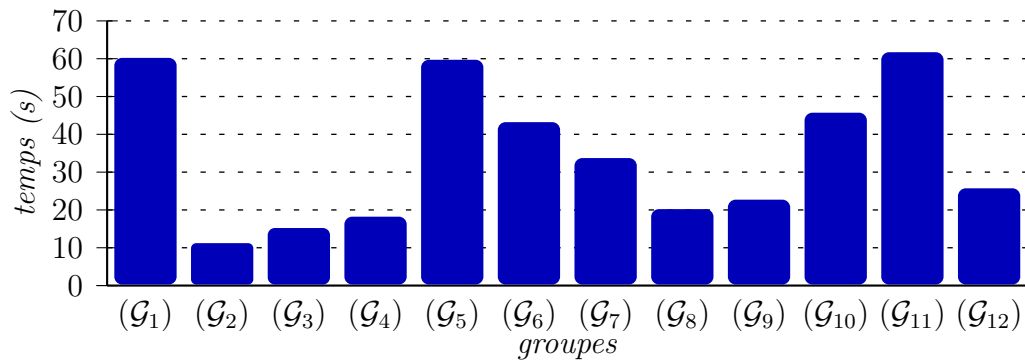


Figure 3.11 – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

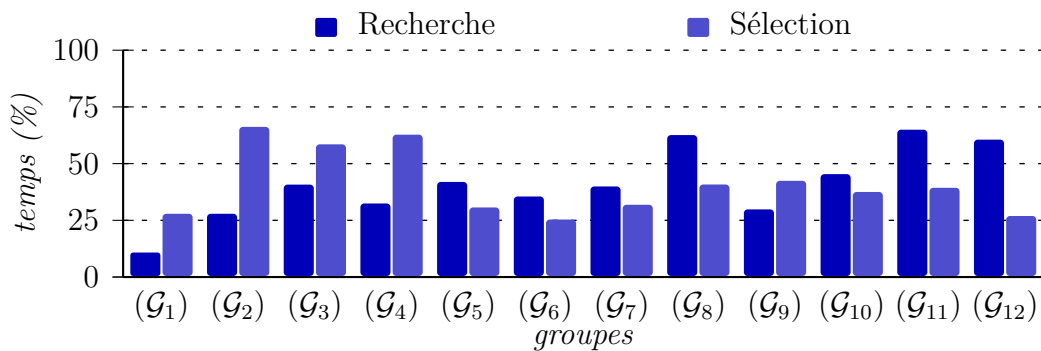


Figure 3.12 – Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection des sujets pour chaque binôme

La figure 3.12 page précédente présente les pourcentages de temps de communication verbale durant la phase de recherche et durant la phase de sélection de chaque binôme par rapport au temps total de réalisation de la tâche. Le pourcentage représente le rapport du temps de communication verbale durant la phase recherche ou de sélection rapporté respectivement au temps total de la phase de recherche ou de sélection. Les binômes (\mathcal{G}_1) à (\mathcal{G}_4) ainsi que (\mathcal{G}_9) communiquent plus durant la phase de sélection. Les binômes (\mathcal{G}_5) à (\mathcal{G}_8) et (\mathcal{G}_{10}) à (\mathcal{G}_{12}) communiquent plus durant la phase de recherche. Notons également que (\mathcal{G}_1) communique assez peu par rapport aux autres binômes.

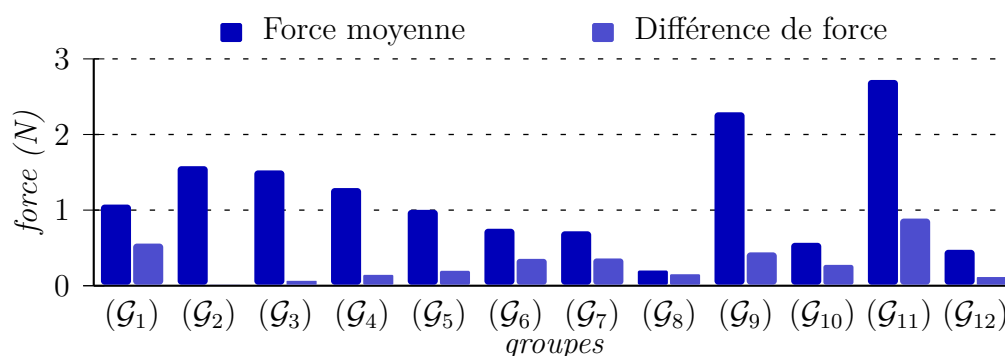


Figure 3.13 – Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.13 représente la force moyenne appliquée par les sujets (\mathcal{V}_{d5}) et la différence de force entre les sujets. La différence de force est la différence entre les forces moyennes de chaque sujet. (\mathcal{G}_9) et (\mathcal{G}_{11}) apporte un effort moyen très important par rapport aux autres binômes. (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) apporte un effort moyen important également tout en ayant une différence de force quasiment nulle entre les deux membres du binôme.

L'ensemble des résultats et analyses précédentes permet de différencier les binômes ce qui confirme notre hypothèse (\mathcal{H}_2). Les binômes se différencient pas des stratégies de travail variables. Les sections suivantes caractérisent les différentes stratégies de travail en fonction de plusieurs paramètres (distance entre les espaces de travail, affinités, temps de réalisation de la tâche, communication verbale, forces moyennes appliquées). Trois stratégies sont décrites distinguées en fonction des distances entre les espaces de travail.

Interaction en champ proche pour les distances inférieures à 8 mm ;

Interaction en champ voisin pour les distances comprises entre 8 mm et 14 mm ;

Interaction en champ distant pour les distances supérieures à 14 mm.

Les mesures de distances sont données dans le référentiel du monde réel.

Interaction en champ proche

Les interactions en champs proches, inférieure à 8 mm, correspondent, dans l'environnement virtuel, à des distances inférieures à 10 Å ce qui est environ l'envergure d'un résidu¹. 8 binômes sur 12 sont concernés par cette catégorie (binômes (\mathcal{G}_5), (\mathcal{G}_6), (\mathcal{G}_7), (\mathcal{G}_8), (\mathcal{G}_9), (\mathcal{G}_{10}), (\mathcal{G}_{11}) et (\mathcal{G}_{12})). Ces binômes travaillent en collaboration étroite sur les résidus. Étant donné la distance inférieure 10 Å, les binômes concernés travaillent sur les mêmes résidus.

Sur la figure 3.9 page 40, tous les binômes manipulant en collaboration étroite ont de fortes affinités ($\mu = 4$) : ce sont des collègues proches ou des amis. D'après la figure 3.10 page 41, ces binômes obtiennent des temps de réalisation de la tâche relativement moyens comparés aux autres stratégies de travail. Cela se traduit également par une communication variable selon les binômes comme affichée sur la figure 3.11 page 41.

Les temps de communication verbale sur la figure 3.12 page 41 montrent que les binômes de ce groupe passent plus de temps à communiquer durant la phase de recherche que durant la phase de sélection (excepté pour (\mathcal{G}_9)). Ces résultats mettent en évidence les difficultés du travail en champ proche liées aux nombreux conflits de coordination durant la phase de recherche.

En effet, les binômes avec de fortes affinités travaillent sur les mêmes résidus. Ils doivent donc coordonner leurs mouvements de manipulation pour déplacer un résidu et cette coordination nécessite une communication verbale importante. La collaboration est alors étroitement couplée mais il en résulte une perte de temps à cause de cette communication.

La figure 3.13 page précédente montre de fortes disparités entre les binômes concernant la force moyenne appliquée durant la manipulation. Des observations durant l'expérimentation ont permis de d'identifier deux stratégies adoptées par les sujets :

par contrôle où les deux sujets effectuent la même action pour obtenir un meilleur contrôle sur les structures manipulées ;

par guidage où un des deux sujets indique à son partenaire la déformation à effectuer ou la position à atteindre.

Ces deux stratégies impliquent une communication étroite entre les sujets afin de coordonner au mieux les actions (voir figure 3.8 page 40).

Les binômes ne travaillent pas de façon partagée comme le montre les différences importantes de forces appliquées (voir figure 3.13 page précédente). Un

1. « Å » désigne l'Ångström qui est une unité de mesure telle que $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$

des deux sujets effectue une majorité du travail contrairement à l'autre sujet. De plus, les interactions en champ proche génèrent de nombreux conflits de coordination nécessitant une communication verbale accrue. D'ailleurs, les communications verbales révèlent de nombreuses incompréhensions dans l'inter-référencement (« Pas dans cette direction », « Pas ici mais ici », « C'est juste derrière », *etc.*). En effet, la grande complexité des tâches considérées et une conscience incomplète de l'environnement et de l'état de son partenaire provoque des inter-référencements imprécis et entraîne une mauvaise coordination. Ces conflits de coordination et incompréhensions restreignent les performances du binôme.

Interaction en champ voisin

Les interactions en champ voisin, comprises entre 8 mm et 14 mm, correspondent, dans l'environnement virtuel, à des distances de l'ordre de résidus voisins (entre 10 Å et 20 Å). 3 binômes sur 12 se trouvent dans cette catégorie (binômes (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4)). Ces binômes travaillent en collaboration relativement étroite sur des résidus voisins. Comme indiqué sur la figure 3.14, les résidus voisins sont dépendants physiquement ou structurellement. En effet, les résidus interagissent entre eux : plus les distances sont courtes, plus les contraintes physiques sont fortes.

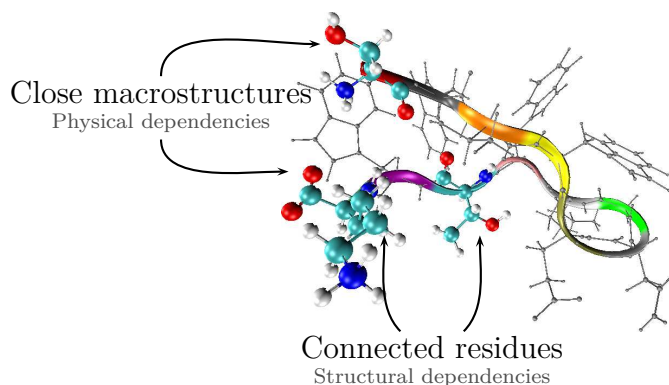


Figure 3.14 – Couplage physique et structure entre les résidus

Sur la figure 3.9 page 40, tous les binômes manipulant en collaboration moyennement couplées ont des affinités moyennes ($\mu = 3$) : ce sont des collègues de bureau ou d'équipe ne travaillant pas forcément sur les mêmes projets. La figure 3.10 page 41 montre que les binômes obtiennent de très bonnes performances sur les temps de réalisation de la tâche. De plus, la communication verbale est faible comme le montre la figure 3.11 page 41.

La manipulation en champ voisin permet d'être continuellement conscient des actions du partenaire ce qui évite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des résidus différents ce qui limite les conflits de coordination qui interviennent en champ proche.

- 5 La figure 3.12 page 41 montre un nombre de conflits de coordination plus faible durant la phase de recherche. En effet, la communication verbale est nettement moins importante durant la phase de recherche que durant la phase de sélection.

La figure 3.13 page 42 illustre une bonne répartition des efforts entre les deux
10 membres du binôme. En effet, la force moyenne est assez élevée par rapport à la plupart des autres binômes ce qui montre qu'aucun des deux sujets n'est moins actif (ce qui entraînerait une force moyenne moins élevée). La différence des forces moyennes quasi-nulle entre les deux sujets confirme ce résultat. Ceci peut s'expliquer par une bonne coordination pendant laquelle
15 les deux membres du binôme vont effectuer des actions complémentaires mais de même intensité. La stratégie adoptée peut être définie comme une stratégie *par manipulation complémentaire* : les deux sujets sont attentifs aux actions de leur partenaire afin d'avoir un meilleur contrôle du processus de déformation par une synchronisation améliorée.

- 20 L'analyse des communication verbales met en évidence les phases de communication de coordination (« Maintenant, prends ça », « peux-tu m'aider ici ? », « Bien ! », *etc.*). Les performances des binômes travaillant en champ voisin sont relativement élevées bien que quelques conflits de coordination similaires à ceux rencontrés en champs proches soient présents bien que plus
25 limités en nombre.

Interaction en champ distant

Les interactions en champ voisin, supérieures à 14 mm, correspondent, dans l'environnement virtuel, à des résidus sans interaction physique (supérieur à 20 Å). 1 binôme sur 12 est concerné par cette catégorie (binôme (\mathcal{G}_1)).
30 Ce binôme travaille de façon faiblement couplée. En effet, les membres de ce binôme travaillent de façon complètement indépendante, en limitant au maximum le nombre d'interactions.

Les affinités des membres de ce binôme sont très faibles (voir figure 3.9 page 40) : les membres ne se connaissent presque pas. De plus, le binôme
35 obtient de très mauvaises performances en ce qui concerne le temps de réalisation de la tâche comme le montre la figure 3.10 page 41. La figure 3.11 page 41 montre que le temps de communication verbale est assez important.

Cependant, le temps de réalisation étant nettement plus important, le taux de communication verbale est beaucoup plus faible que les autres groupes (voir figure 3.12 page 41). En effet, les membres du binôme travaillent à distance et ont peu d'interactions entre eux. Le peu d'interaction permet de
5 limiter le nombre de conflits de coordination ce qui implique le peu de communication verbale comme on peut le voir sur la figure 3.12 page 41. Cette figure montre également que ce binôme communique plus dans les phases de sélection que dans les phases de recherche. En effet, les phases de sélection forcent une collaboration étroite (spécificité de la tâche proposée) et
10 favorisent les conflits de coordination.

La figure 3.13 page 42 montre un effort moyen appliqué par les binômes peu élevé (comparé aux stratégies en champ voisin). De plus, les forces moyennes appliquées par chacun des deux sujets sont très inégales. Il y a une mauvaise répartition de la charge de travail au sein du binôme.

15 En effectuant des interactions en champ distants, les sujets se définissent leur propre espace de travail mais également leur propre stratégie en fonction des événements locaux à leur espace de travail. Les interactions entre les sujets sont limitées au maximum. Cette configuration réduit considérablement les conflits de coordination ainsi que la communication. Cependant,
20 elle nuit beaucoup aux performances du groupe dans son ensemble. En effet, les stratégies sont différentes et la phase de sélection nécessite une collaboration. De plus, l'inégalité de la répartition des charges de travail dévalue les performances.

Synthèse des stratégies de travail

25 Les binômes sont susceptibles d'adopter une des trois stratégies de travail vues dans les sections précédentes. Pour certaines, les interactions en champ distants semblent convenir mais au détriment des performances : la collaboration est quasiment inexistante. D'autres binômes interagissent en champ proches et obtiennent des performances moyennes : la collaboration est étroitement couplée mais souffre des nombreux conflits de coordination.
30

Cependant, ce sont les interactions en champ voisins qui produisent les meilleures performances. En effet, les conflits de coordination sont plus limités que pour des interactions en champ proche mais la collaboration est tout de même couplée. Les résultats montrent à la fois de bonnes performances en terme de temps de réalisation mais aussi en terme de répartition
35 des charges de travail tout en limitant les communications verbales. La plupart du temps, les communications verbales sont destinées à la résolution de

conflits de coordination : elles sont très chronophages et peuvent être évitées. C'est pour cette raison que nous proposerons des outils haptiques pour améliorer cette gestion des conflits de coordination (voir chapitre 6 page 111).

5 3.4.3 Résultats qualitatifs

Les résultats qualitatifs sont constitués de deux parties. La première permet de déterminer les impressions des sujets concernant la collaboration, les rôles et efficacité de chacun durant la tâche. La seconde partie a pour but d'évaluer la plate-forme. Toutes les notes sont comprises entre un et cinq (échelle de
 10 LIKERT [1932] à cinq niveaux).

Évaluation du travail en collaboration

Les résultats du questionnaire montre qu'une majorité des sujets de cette expérimentation ont apprécié et préféré la réalisation de la tâche en configuration collaborative ($\mu = 4.6$, $\sigma = 0.5$). De plus, le sentiment d'effectuer une
 15 tâche en collaboration est fort. L'hypothèse (\mathcal{H}_3) est confirmée par les sujets qui préfèrent le travail en collaboration que le travail en monôme. C'est un point important pour la poursuite de nos travaux de recherche sur le travail collaboratif : les sujets apprécient le travail en collaboration.

Durant les tâches collaboratives, les sujets considèrent qu'ils ont effectivement
 20 contribué à la réalisation de la tâche ($\mu = 4.1$, $\sigma = 0.9$). Cependant, les sujets considèrent qu'ils ne se sont imposés ni en meneur ou ni en suiveur ($\mu = 3$, $\sigma = 0.5$). En effet, des questions supplémentaires ont permis de mettre en évidence que chaque sujet a tendance à surestimer le rôle du partenaire ($\approx 70\%$).

25 La collaboration fonctionne grâce à une confiance mutuelle : chaque sujet considère que son partenaire a effectué le travail demandé. Aucune vérification n'est effectuée par un sujet sur le travail effectué par le partenaire : ceci permet de construire cette confiance mutuelle. De plus, ceci permet à chaque sujet de se sentir utile à la réalisation de la tâche et d'éviter les phénomènes
 30 de paresse sociale. Dans le cas où un sujet remet en cause le travail de son partenaire, le partenaire ne se sent plus utile et peut s'isoler, soustrayant ainsi son potentiel de l'action collaborative.

Concernant la communication, les participants estiment qu'ils exploitent principalement la communication verbale ($\mu = 4.5$, $\sigma = 0.6$) et, dans une propor-
 35 tion plus faible mais tout de même importante, virtuelle ($\mu = 3.5$, $\sigma = 0.8$).

En ce qui concerne la communication gestuelle, ils la considèrent quasiment inexistante ($\mu = 1.5$, $\sigma = 1$).

La communication gestuelle n'est pas ou peu utilisée pour plusieurs raisons. La principale raison est la difficulté de communiquer avec des gestes lorsque
5 les mains sont occupées par la manipulation. Deuxièmement, les sujets ont rapidement adopté le canal virtuel qui est plus précis dans les tâches de désignation qui constituent la plupart des besoins de communication. La communication verbale reste le canal principal de communication : c'est le canal le plus naturel pour communiquer. Cependant, il vient aussi en soutien
10 du canal virtuel. En effet, aucun outil visuel ou haptique n'a été fourni pour effectuer des tâches de désignation et le canal virtuel seul serait incapable de remplir seul cette mission.

Évaluation du système

L'évaluation du système en terme d'intuitivité comme en terme de confort
15 est relativement satisfaisante. En effet, en ce qui concerne l'intuitivité des graphismes et effets visuels, les participants les trouve accessibles ($\mu = 3.8$, $\sigma = 0.8$). Il est en va de même en ce qui concerne l'intuitivité des interactions avec le système ($\mu = 3.9$, $\sigma = 0.8$). Pour le confort, le visuel ($\mu = 3.7$, $\sigma = 0.7$) et les interactions ($\mu = 3.7$, $\sigma = 0.8$) jouissent d'une évaluation similaire.

20 Là encore, les sujets valident l'hypothèse (\mathcal{H}_4). La plate-forme est relativement bien évaluée. Il semble cependant nécessaire d'apporter encore des améliorations afin de répondre au mieux aux attentes des utilisateurs.

Ces résultats sont cependant à nuancer. Les écart-types sont relativement élevés ce qui veut dire qu'il y a de fortes disparités dans ces notations entre les
25 différents sujets : certains sujets se sont déclarés plutôt insatisfaits concernant le confort (visuel : 2, interaction : 2). De plus, les outils proposés durant cette expérimentation sont relativement simples et peu envahissants. Des outils plus complexes, plus informatifs seraient peut-être moins intuitifs au premier abord et pourrait mener à un inconfort.

3.5 Synthèse

3.5.1 Résumé des résultats

Dans ce chapitre, nous avons observé et comparé les performances de monômes et de binômes pendant une tâche de recherche et de sélection sur une

simulation moléculaire en temps-réel. L'objectif était de montrer l'intérêt du travail collaboratif dans l'amélioration des performances et d'identifier les différentes stratégies de travail. De plus, il fallait valider la pertinence du système mis en place.

- 5 La collaboration a prouvé son intérêt, notamment sur les tâches les plus complexes. Cependant, la complexité d'une tâche est relativement difficile à établir. Le nombre d'atomes (et donc le nombre de résidus) joue un rôle important dans cette complexité. Un grand nombre d'atomes surcharge l'environnement virtuel qui difficile à appréhender. Un deuxième facteur de complexité à prendre en compte est l'amplitude des contraintes physiques de la
- 10 molécule. Certaines zones de la molécule sont dans un état de stabilité tel qu'il est difficile de déformer les résidus de cette zone.

En observant et en analysant les différentes stratégies de travail, il ressort que les interactions en champ proche et les interactions en champ distant ne

15 sont pas des stratégies très performantes. En effet, le nombre de conflits de coordination durant les interactions en champ proche est très important alors que le potentiel de la collaboration est perdu dans des interaction en champ distant. Ce sont les interactions en champ voisin qui offre les meilleures performances, générant un bon compromis entre collaboration étroite et gestion

20 des conflits de coordination.

Enfin, il paraît nécessaire d'avoir de bonnes relations sociales avec ces partenaires afin d'apporter à la fois, une communication saine et un respect mutuel du travail effectué. Les résultats montrent de façon évidente que tout déséquilibre dans le groupe mène à des performances dégradées.

25 3.5.2 Perspectives

Basés sur les résultats précédents, certaines perspectives assez évidentes s'imposent et ont guidé les expérimentations qui suivent. Tout d'abord, il semble nécessaire de proposer des tâches suffisamment complexes pour pouvoir étudier plus en détail le travail collaboratif. Ceci se traduit soit par des tâches à

30 fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 53) ou par la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 87).

Les différentes stratégies observées ont permis de mettre en évidence l'intérêt du travail en champ voisin. Les propositions d'outils visuo-haptiques devront tenir compte de ce paramètre : ils devront encourager le travail rapproché en

35 fournissant une assistance en champ voisin tout en maintenant une distance minimum afin de limiter les conflits de coordination liés au travail en champ proche.

L'évaluation qualitative par questionnaire apporte également de nombreuses réponses intéressantes. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant un élément primordial de la communication : le canal virtuel est important. À l'aide d'observations durant les phases expérimentales, ce canal de communication
5 est principalement exploité pour des actions de désignation. Fournir des outils spécifiquement conçus pour la désignation devient une nécessité.

Enfin, ces évaluations qualitatives ont permis de valider l'EVC proposé. Des améliorations sont cependant nécessaires en ce qui concerne le rendu visuel et les interactions. De nombreux sujets ont par exemple demandé une mise
10 en surbrillance du résidu survolé. Une assistance haptique pour la sélection est également une des améliorations possibles. Ces améliorations ne sont pas implémentées dans les deux expérimentations suivantes pour ne pas alourdir les outils et ainsi ne pas biaiser l'étude. Cependant, ils sont implémentés pour la dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 111).

Bibliographie

[BENFORD et al. 1999]

BENFORD, Steve, Ian TAYLOR, David BRAILSFORD, Boriana KOLEVA, Mike CRAVEN, Mike FRASER, Gail REYNARD et Chris GREENHALGH (déc. 1999). « Three dimensional visualization of the World Wide Web ». Anglais. Dans *ACM Computing Survey* 31.4 (cf. page 27).

[BOWMAN 1999]

BOWMAN, Douglas A. (juin 1999). « Interaction techniques for common tasks in immersive virtual environments : design, evaluation, and application ». Anglais. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia Institute of Technology (cf. page 29).

[BROWN et FORSYTHE 1974]

BROWN, Morton B. et Alan B. and FORSYTHE (juin 1974). « Robust tests for equality of variances ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 69.346, pages 364–367 (cf. page 36).

[DARKEN 1996]

DARKEN, Rudolph Poul (1996). « Wayfinding in large-scale virtual worlds ». Anglais. Thèse de doctorat. Washington, DC, USA : The George Washington University, Department of Electrical Engineering et Computer Science (cf. page 26).

[FOLEY 2008]

FOLEY, Colum (juin 2008). « Division of labour and sharing of knowledge for synchronous collaborative information retrieval ». Anglais. Thèse de doctorat. Dublin City University, School of Computing et Centre for Digital Video Processing (cf. page 27).

[FRIEDMAN 1940]

FRIEDMAN, Milton (mar. 1940). « A comparison of alternative tests of significance for the problem of m rankings ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 11.1, pages 86–92 (cf. page 36).

[HOLM 1979]

HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 36, 37).

[LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 47).

[MANN et WHITNEY 1947]

MANN, Henry Berthold et Donald Ransom WHITNEY (mar. 1947). « On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 36, 37).
5

[MÉNÉLAS 2010]

MÉNÉLAS, Bob Antoine Jerry (sept. 2010). « Rendus sensorimoteurs en environnements virtuels pour l’analyse de données scientifiques complexes ». Anglais. Thèse de doctorat. Université de Paris Sud (cf. page 26).
10

[PICKENS et GOLOVCHINSKY 2007]

PICKENS, Jeremy et Gene GOLOVCHINSKY (oct. 2007). « Collaborative exploratory search ». Anglais. Dans *Workshop on Human-Computer Interaction and Information Retrieval*. Sous la direction de Michael BERNSTEIN et Robin STEWART. Massachusetts Institute of Technology, Computer Science et Artificial Intelligence Laboratory, pages 21–22 (cf. page 27).
15

[SHAPIRO et WILK 1965]

SHAPIRO, Samuel S. et Martin B. WILK (déc. 1965). « An analysis of variance test for normality (complete samples) ». Anglais. Dans *Biometrika* 52.3/4, pages 591–611 (cf. page 36).
20

Chapitre 4

Déformation collaborative de molécule

Sommaire

5	4.1 Introduction	53
	4.2 Contexte	54
	4.3 Expérimentation de déformation de molécule	56
	4.3.1 Tâche	56
10	4.3.2 Spécificités du protocole expérimental	59
	4.4 Résultats	64
	4.4.1 Amélioration des performances en binôme	64
	4.4.2 Gain de performance sur les tâches complexes	70
	4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	74
15	4.4.4 Résultats qualitatifs	79
	4.5 Synthèse	80
	4.5.1 Résumé des résultats	80
	4.5.2 Perspectives	81
20	Bibliographie	83

4.1 Introduction

Dans le précédent chapitre, nous avons effectué une première étude du travail collaboratif sur une tâche de recherche et de sélection. Cette étude montre la pertinence d'un travail en binôme pour la *recherche* et la *sélection* de résidus dans un environnement complexe. En effet, les binômes sont plus performants

sur des tâches très complexes et gardent des performances équivalentes aux monômes sur des tâches de complexité faible. Cette première expérimentation nous permet d'identifier certains points importants nécessaires pour nos prochaines études.

- 5 Tout d'abord, nous allons focaliser nos études sur des tâches de complexité importante. La caractérisation de la complexité d'une tâche dépend en grande partie de la nature de la tâche elle-même (par exemple, la forme ou la couleur d'un résidu. Cependant, le nombre total d'atomes (et donc de résidus) présents dans la molécule est un facteur de complexité qui ne dépendra pas
10 ou peu de la nature de la tâche. Ce facteur pourra être utilisé pour proposer des tâches complexes.

Les deux premières tâches élémentaires du processus de déformation moléculaire (voir figure 1.1 page 3) ont été étudiées dans cette première études. Cette seconde étude se rapproche d'un processus complet de déformation moléculaire puisqu'elle se focalisera sur la tâche élémentaire de *manipulation*.
15

Tout d'abord, nous présenterons les objectifs et les hypothèses de cette seconde expérimentation dans la section 4.2. Ensuite, la tâche et le dispositif expérimental, modifié pour cette nouvelle étude, est présenté dans la section 4.3 page 56. Les résultats seront analysés dans la section 4.4 page 64.
20 Enfin, la section 4.5 page 80 effectue une synthèse de cette seconde étude et propose des perspectives pour les expérimentations qui vont suivre.

4.2 Contexte

Après avoir étudié la tâche élémentaire de *recherche* et de *sélection*, cette seconde expérimentation se portera plus en détails sur la tâche élémentaire de
25 *déformation* en collaboration (voir figure 1.1 page 3). Cette tâche nécessite une grande synchronisation et favorise les collaborations étroites. La précédente expérimentation (voir chapitre 3 page 25) a souligné l'avantage de la collaboration sur des tâches nécessitant un couplage fort. Les tâches proposées dans cette expérimentation sont élaborées pour stimuler les interactions
30 entre les sujets.

L'utilisation d'interfaces haptiques pour la déformation d'objets flexibles n'est pas une idée nouvelle. SHEN et al. [2006] propose déjà une solution pour déformer des objets non-rigides et teste son modèle avec des interfaces PHANTOM Omni®. Les objets concernés sont plutôt simples comme
35 des sphères. Quelques années plus tard, PETERLÍK [2009] effectue une thèse sur les déformations de tissus cellulaires. Jusqu'à présent, l'utilisation de

l'haptique pour la déformation en temps-réel de molécules n'a pas été étudié. Nous pouvons tout de même citer SUBASI et BASDOGAN [2006] qui propose une approche de manipulation de molécule rigide utilisant l'haptique.

Les processus de déformation collaboratifs sont également peu étudiés. La littérature s'attarde principalement sur des EVCS. SÜMENGEN et al. [2007] propose une plate-forme permettant la déformation d'objets dans un EVC. L'objectif de cette plate-forme est de répondre à des contraintes de latence liées au réseau. Pour répondre à la problématique de latence, TANG et al. [2010] encode les paramètres du maillage pour accélérer la transmission. Les EVCS proposés sont destinés à des collaborations distantes et la problématique du temps-réel en est le sujet d'intérêt principal. Notre plate-forme se place dans un contexte colocalisé où les contraintes de réseau n'ont pas d'existence.

On peut tout de même trouver quelques exemples de manipulation collaborative à l'aide d'interface haptique. GAUTIER et al. [2008] propose par exemple une plate-forme de travail collaboratif pour la conception assistée par ordinateur (CAO). Son projet repose sur la manipulation de corps rigides. Pour des corps flexibles, MÜLLER et al. [2006] développe le logiciel CLAYWORKS qui permet la sculpture sur glaise. La manipulation s'effectue alors sur un objet malléable. Ici encore, l'accent est mis sur la collaboration distante comme le montre cette autre publication sur CLAYWORKS [GORLATCH et al. 2009].

L'expérimentation proposée dans cette nouvelle étude va de nouveau mettre en opposition un monôme et un binôme. L'objectif est comparer une manipulation bimanuelle en monôme avec une manipulation monomanuelle en binôme. L'expérimentation s'appuie sur un EVC permettant une collaboration colocalisée, s'affranchissant ainsi des problématiques de la collaboration distante.

De plus, nous mettrons en relation la performance des groupes en fonction de la complexité de la tâche. Ce point nous permet de confirmer les conclusions de la première étude mais dans un contexte de manipulation moléculaire.

Enfin, cette seconde étude est l'occasion d'observer l'effet du travail collaboratif sur l'apprentissage. En effet, le travail de groupe peut stimuler l'apprentissage et donc être bénéfique en terme de performances sur le court terme.

4.3 Expérimentation de déformation de molécule

4.3.1 Tâche

La tâche proposée est la déformation dans un EVC sur des molécules complexes.
 5

Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation d’une molécule. L’objectif est de la rendre conforme à un modèle. L’intégralité des atomes de la molécule à déformer est affiché. Trois molécules sont utilisées dans le cadre de cette
 10 expérimentation. Prion est une molécule très complexe et sera simplement utilisé dans la phase d’entraînement. TRP-ZIPPER et TRP-CAGE seront chacune utilisée dans deux scénarios distincts. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 134.

Lorsqu’un sujet sélectionne un atome ou un résidu, ce dernier est mis en
 15 surbrillance. De plus, l’atome ou le résidu correspondant sur la molécule cible est affiché afin de connaître la position finale de la sélection courante.

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, un score est affiché en temps-réel (voir figure 4.1 page ci-contre). Le score affiché est le *Root Mean Square Deviation* (RMSD) qui permet de mesurer la différence entre deux dé-
 20 formations d’une même molécule en calculant la différence entre chaque paire d’atomes (voir équation 4.1).

$$\text{RMSD}(\mathbf{c}, \mathbf{m}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|c_i - m_i\|^2} \quad (4.1)$$

où N est le nombre total d’atomes et c_i, m_i sont respectivement l’atome i de la molécule à comparer et de la molécule modèle.

25 Description des scénarios

Quatre scénarios sont proposés : deux molécules expérimentées dans deux niveaux de manipulation différents. Les deux niveaux différents de manipulation sont :

- inter-moléculaire (à l’échelle d’un résidu) ;



Figure 4.1 – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

– intra-moléculaire (à l'échelle d'un atome).

Les paragraphes suivants décrivent les quatre scénarios :

Scénario 1A Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle inter-moléculaire. Un résidu à l'extrémité – la molécule formant une chaîne – est fixé afin d'*ancrer* la molécule au sein de l'environnement virtuel et éviter d'éventuelles dérives hors du champ visuel. L'intégralité des onze autres résidus est libre de mouvement. La forme général de la molécule peut être comparée à un **V** : la chaîne de résidus de la molécule contient une cassure.

Scénario 1B Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l'échelle inter-moléculaire. Comme le scénario 1A, elle contient un résidu fixe à une extrémité. L'intégralité des dix neuf autres résidus est libre de mouvement. La forme général de la molécule peut être comparée à un **W** : la chaîne de résidus de la molécule contient deux cassures.

Scénario 2A Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle intra-moléculaire. Seulement trois résidus sont laissés libres tandis que tous les autres sont fixés. Les contraintes physiques de cette tâche sont relativement faibles. Cependant, la difficulté de cette tâche réside dans la recherche des résidus à déformer qui ne sont pas aisés à trouver.

Scénario 2B Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l'échelle intra-moléculaire. Seulement six résidus sont laissés libres tandis que les autres sont fixés. La déformation requise demande une grande dépense d'énergie. En effet, la molécule proposée se trouve dans une sorte de puit de potentiel (un *minima* local) et l'objectif est d'atteindre un autre puit de potentiel (un autre *minima* local). L'énergie nécessaire pour passer d'un puit à l'autre est relativement importante, à tel point qu'un seul outil de déformation n'est pas suffisant. La manipulation synchrone de deux résidus est la seule solution pour atteindre l'objectif.

Un résumé de la complexité des quatre tâches est exposé dans la table 4.1 page ci-contre selon les critères suivants :

Nombre d'atomes C'est le nombre total d'atomes que contient la molécule à manipuler ;

Résidu libre C'est le nombre de résidus de la molécules non fixés dans la simulation ;

Cassure Ce sont les cassures de la chaîne principale de la molécule ; elles représentent les jonctions entre hélices- α et/ou les feuillets- β ;

Champ de force Il représente la difficulté en terme de contrainte physique ; il exprime l'énergie minimum nécessaire pour atteindre l'objectif et se traduit par trois niveaux (*faible, moyen et fort*).

Table 4.1 – Paramètres de complexité des tâches

Scénario	1A	1B	2A	2B
Nombre d'atomes	218	304	218	304
Résidu libre	11	19	3	7
Cassure	1	2	0	1
Champ de force	Moyen	Moyen	Faible	Fort

Les outils disponibles

- 5 Des outils de déformation légèrement différents sont proposés en fonction de la tâche à réaliser. Pour les tâches de déformation au niveau inter-moléculaire, l'outil de déformation est l'outil *tug* pour les résidus : il permet de déformer d'un tenant l'intégralité d'un résidu. Pour les tâches de déformation au niveau intra-moléculaire, l'outil de déformation est l'outil *tug* pour les atomes : il
- 10 permet d'appliquer une force sur un seul atome. L'outil *tug* pour les résidus applique la même force à chaque atome du résidu. Il en résulte que l'outil *tug* pour les résidus permet d'appliquer un effort total plus important et perturbe plus fortement la simulation.

4.3.2 Spécificités du protocole expérimental

- 15 L'expérimentation, basée sur la dispositif expérimental présenté dans le chapitre A page 133, a subi quelques modifications qui seront détaillées dans les sections suivantes. Un résumé de la methode expérimentale se trouve dans la table 4.2 page 66 qu'on pourra retrouver de manière détaillée dans la section B.2 page 143.

20 Matériel

Pour cette seconde expérimentation, une unique modification a été effectuée par rapport à la plate-forme de base (voir section A.1 page 133). En effet, suite à la première expérimentation, nous avons beaucoup remis en cause la

présence de l'outil de manipulation. Cet outil permettant de modifier l'orientation de la molécule est nécessaire. Cependant, la forme sous laquelle il est présenté n'est pas idéale. L'outil de manipulation *grab* a posé quelques problèmes manifestes d'interaction à certains sujets qui ne réussissaient pas à s'approprier cet outil.

Après quelques échanges avec un bio-informaticien, il est apparu qu'une souris 3D serait un outil plus approprié qu'une interface haptique. En effet, le périphérique haptique possède des contraintes mécaniques qui ne permettent pas des rotations complètes ce qui amène à des problématiques connues d'interaction avec les objets virtuels : le débrayage [DOMINJON 2006]. La souris 3D ne souffre pas d'une telle contrainte et peut ainsi être proposée comme outil de manipulation en alternative à l'interface haptique associée à l'outil *grab*. Une souris 3D SpaceNavigator® est placée sur la table entre les deux sujets. Aucune consigne particulière n'est donnée sur l'utilisation de cet outil et chaque sujet peut l'utiliser au moment où il le souhaite : nous créons ainsi artificiellement un point de conflit pour l'accès à cet outil afin de stimuler les interactions.

En ce qui concerne l'utilisation des outils de déformation, chaque sujet d'un binôme possède à sa disposition un outil de déformation. Pour les monômes, le sujet peut utiliser les deux outils de déformation en configuration bimanuelle. Dans ce cas, il est forcé de lâcher un des deux outils afin d'utiliser la souris 3D. Pour des raisons d'équité entre les monômes et les binômes, l'utilisation de la souris 3D désactive toute sélection effectuée avec tous les outils de déformation.

Les figure 4.2 page suivante et figure 4.3 page ci-contre illustrent par un schéma et une photographie le dispositif expérimental.

Visualisation

Pour cette seconde expérimentation, quatre scénarios sont proposés et présentés dans la section 4.3.1 page 56. Ces molécules sont représentés avec les rendus graphiques de base (CPK et *NewRibbon*). Cependant, la tâche nécessite d'avoir à disposition la molécule dans son état stable. Cette molécule ne peut pas être représentées avec tous ces atomes pour deux raisons. Tout d'abord, l'intégralité des atomes serait une surcharge du rendu visuel. De plus, la précision de la déformation ne nécessite pas la présence des atomes. C'est pourquoi, la molécule dans son état stable sera affichée seulement avec un rendu *NewRibbon*, en transparence pour rester discret.

Des images représentant les différents scénarios dans leur état initial sont

4.3. Expérimentation de déformation de molécule

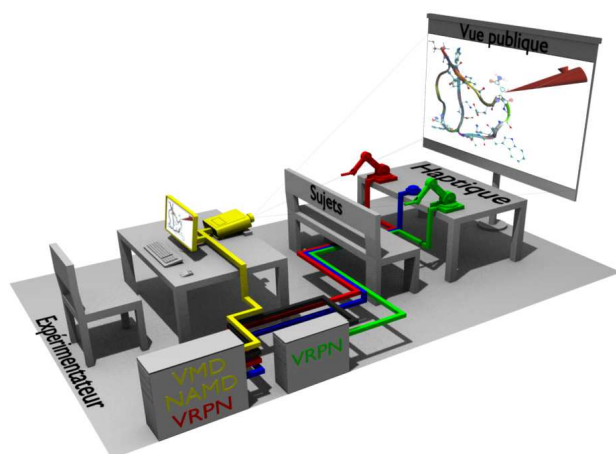


Figure 4.2 – Schéma du dispositif expérimental



Figure 4.3 – Photographie du dispositif expérimental

présentées. La figure 4.4 représente le scénario 1A, la figure 4.5 page suivante représente le scénario 1B, la figure 4.6 page ci-contre représente le scénario 2A et la figure 4.7 page 64 représente le scénario 2B.

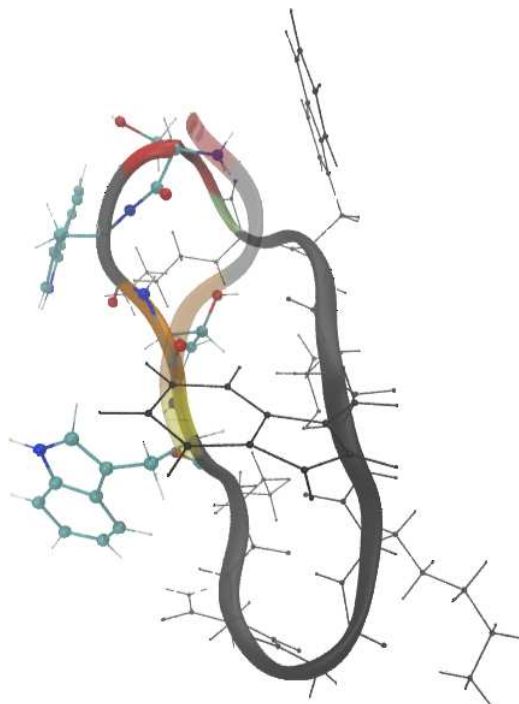


Figure 4.4 – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A

Outils de manipulation

- 5 Concernant l’outil d’orientation de la molécule, maintenant assuré par une souris 3D, une légère modification a été effectuée. Grâce au choix du matériel capable de différencier aisément les opérations de translation et les opérations de rotation, nous avons choisi de ne conserver que les DDLs en rotation. En effet, la molécule n’a pas vraiment besoin d’être déplacée à l’écran et c’est
- 10 surtout la possibilité d’orienter la molécule qui est nécessaire aux sujets. Ceci permet également d’éviter des molécules qui sortent de l’écran à cause d’une mauvaise manipulation. De plus, cela décharge d’une charge cognitive inutile.

En ce qui concerne les outils de déformation, quelques modifications concernant le rendu visuel ont été effectuées. La tâche consiste à reconstituer une

15 molécule dans son état d’équilibre. Pour assister les sujets, nous avons déjà vu qu’un rendu visuel en transparence de la molécule dans son état stable est affichée à l’écran. Pour augmenter l’aide visuelle apportée, nous allons



Figure 4.5 – Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B



Figure 4.6 – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A

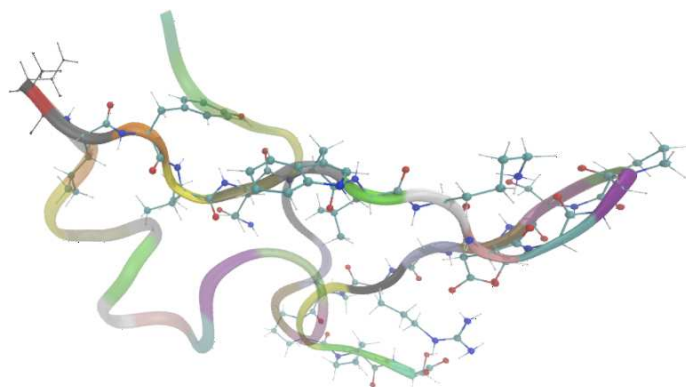


Figure 4.7 – Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B

également indiquer l'emplacement final d'un résidu sélectionné. En effet, dès qu'un sujet sélectionne un résidu, ce résidu est mis en surbrillance. Le résidu correspondant sur la molécule stable est également mis en surbrillance comme expliqué sur la figure 4.8 page ci-contre. Le résidu de la molécule
 5 stable est représenté par un rendu CPK avec des atomes grossis et coloré de la couleur du curseur du sujet concerné.

4.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette première étude concernant la recherche et la sélection sur une tâche
 10 complexe de collaboration. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant, un test de BROWN et FORSYTHE [1974] permet de confirmer l'homoscedasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée avec différents tests statistiques suivant les cas :

- 15 – test de FRIEDMAN [1940] pour les variables intra-sujets non-paramétriques ;
- test de KRUSKAL et WALLIS [1952] pour les variables inter-sujets non-paramétriques.

4.4.1 Amélioration des performances en binôme

La figure 4.9 page suivante présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) en fonction
 20 du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. L'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 4.9$, $df = 1$, $p = 0.027$).

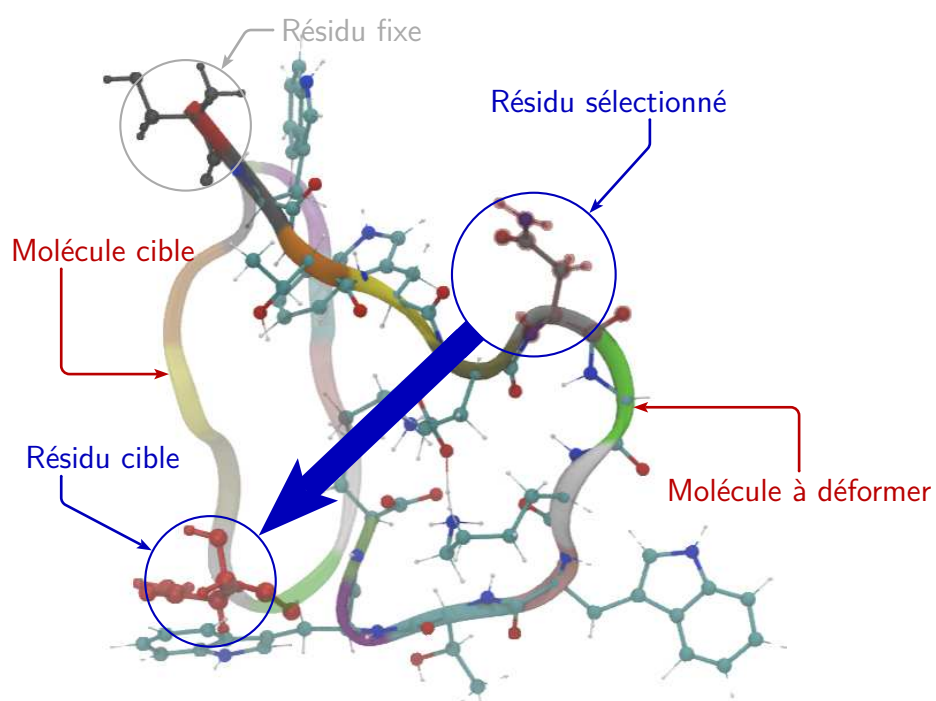


Figure 4.8 – Illustration des rendus pour l’affichage de la molécule

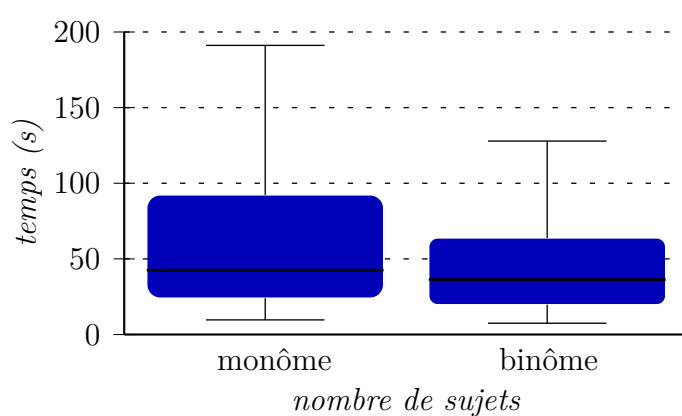
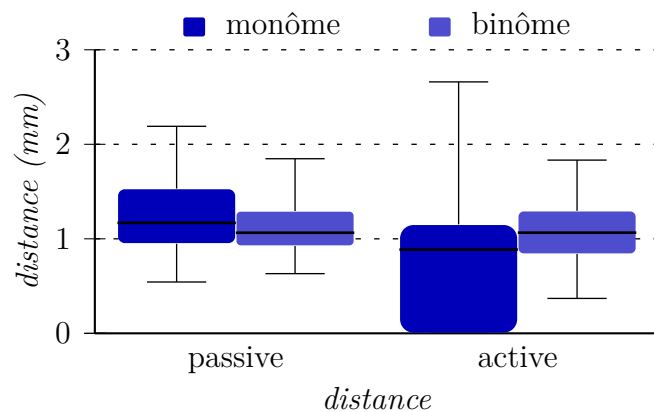


Figure 4.9 – Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets

Table 4.2 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation d'une molécule		
Hypothèses	(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme (\mathcal{H}_2) binômes plus performants sur les tâches complexes (\mathcal{H}_3) Apprentissage plus performant en binôme (\mathcal{H}_4) Les sujets préfèrent le travail en collaboration		
Variable indépendantes	(\mathcal{V}_{i1}) Nombre de sujets (\mathcal{V}_{i2}) Complexité de la tâche (\mathcal{V}_{i3}) Niveau d'apprentissage		
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Temps de réalisation (\mathcal{V}_{d2}) Nombre de sélections (\mathcal{V}_{d3}) Distance passive entre les espaces de travail (\mathcal{V}_{d4}) Distance active entre les espaces de travail (\mathcal{V}_{d5}) Vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d6}) Réponses qualitatives		
Condition (\mathcal{C}_1)	Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)	Condition (\mathcal{C}_4)
1 sujet Bimanuel	1 sujet Bimanuel	2 sujets Collaboratif	2 sujets Collaboratif
Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B
Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A
Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B
Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A


Figure 4.10 – Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets

La figure 4.10 page ci-contre présente la distance passive (\mathcal{V}_{d3}) et active (\mathcal{V}_{d4}) entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la distance passive (\mathcal{V}_{d3}) ($\chi^2 = 2.8$, $df = 1$, $p = 0.092$). De la même façon, l'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) ($\chi^2 = 21.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

On peut également observer l'évolution entre distance passive et active. L'analyse montre qu'il y a un effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un monôme ($\chi^2 = 42.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). Par contre, l'analyse ne montre pas d'effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un binôme ($\chi^2 = 2.5$, $df = 1$, $p = 0.114$).

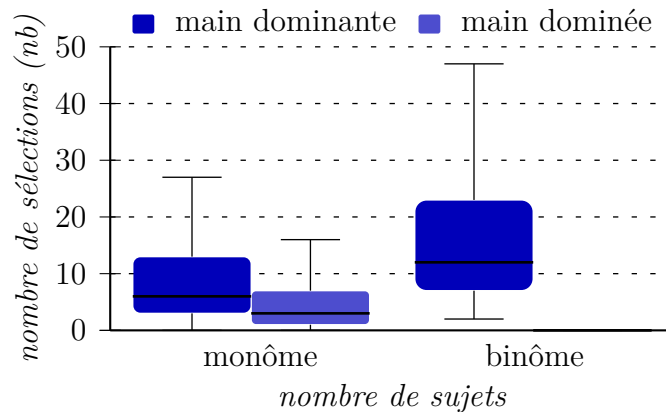


Figure 4.11 – Nombre de sélection de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets

La figure 4.11 présente le nombre de sélections de la main dominante et dominée (\mathcal{V}_{d2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. On constate un déséquilibre entre la main dominante et dominée des monômes. Les binômes n'utilisent que leur main dominante ce qui explique l'absence de valeur pour la main dominée. En cumulant le nombre total de sélections (main dominante et main dominée) pour les monômes et les binômes, on montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) ($\chi^2 = 6.3$, $df = 1$, $p = 0.012$).

Il faut noter que le nombre de sélections pour la main dominante des binômes comptabilise les sélections des deux sujets présents contrairement aux monômes : ceci explique le nombre plus élevé de sélections en binômes. Cependant, si on compare le nombre moyen de sélections par sujet (pour sa main dominante), on montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de

sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de sélections de la main dominante (\mathcal{V}_{d2}) ($\chi^2 = 0$, $df = 1$, $p = 0.912$).

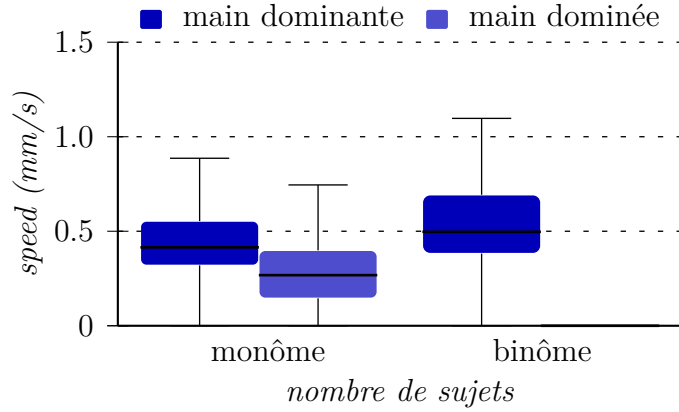


Figure 4.12 – Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets

La figure 4.12 présente la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) des effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) ($\chi^2 = 122.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). On observe un déséquilibre de vitesse moyenne entre la main dominante et dominée des monômes avec un effet significatif ($\chi^2 = 51.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). On observe également un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) de la main dominante ($\chi^2 = 23$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

Le premier résultat sur la figure 4.9 page 65 nous permet de confirmer notre hypothèse (\mathcal{H}_1) : les binômes sont plus performants que les monômes. Cependant, la suite de l'analyse va permettre de mettre en avant les paramètres précis pour lesquels il y a un gain de performances ainsi que les scénarios les plus favorables.

Pour commencer, l'observation des distances moyennes entre les effecteurs terminaux nous permet d'observer un déséquilibre de performances entre les monômes et les binômes (voir figure 4.10 page 66). En effet, lorsqu'on mesure cette distance de façon continue sur toute l'expérimentation, on constate une distance moyenne plus importante chez les monômes. Cependant, la mesure de cette distance seulement dans le cas où les deux effecteurs terminaux sont effectivement actifs nous montre que ce sont les binômes qui couvre le plus grand espace de travail. En effet, les monômes sont en manipulation bimanuelle ce qui est une configuration complexe sur le plan cognitif. Le sujet doit alors être capable de gérer deux effecteurs terminaux à chaque instant.

La difficulté de cette configuration a mené la plupart des sujets à utiliser seulement un effecteur terminal en laissant le second sur le côté afin que le curseur ne gêne pas à l'écran. Ceci a pour effet d'augmenter la distance moyenne bien que le deuxième effecteur terminal ne soit pas utilisé.

- 5 La distance active permet d'éviter ce biais de mesure. Cette mesure ne concerne alors que les monômes capables d'effectuer la tâche en utilisant leurs deux mains. On constate alors que les binômes sont capables de couvrir un plus grand espace de travail. En effet, les monômes ne sont pas capables de couvrir un espace aussi grand car ils ne peuvent focaliser visuellement que
10 sur une zone de travail à la fois. Par conséquent, les deux effecteurs terminaux se retrouvent dans cette zone limitée dans l'espace.

La figure 4.11 page 67 confirme ce déséquilibre. En effet, on constate un plus grand nombre total de sélections pour les binômes (19.4 sélections) que pour les monômes (14.1 sélections). Là encore, le sujet effectuant la tâche
15 en monôme n'est pas capable d'exploiter pleinement les deux outils en sa possession : la charge cognitive est trop importante. Cependant, les analyses statistiques montre que l'outil utilisé par la main dominante obtient un taux d'utilisation identique en monôme ou en binôme. Le sujet en monôme n'est pas capable d'exploiter pleinement les possibilités des deux outils
20 en configuration bimanuelle. Par opposition, les binômes en configuration monomanuelle répartissent correctement la charge de travail entre les deux outils.

On constate que la configuration bimanuelle a également un effet néfaste sur l'utilisation de l'outil associé à la main dominante. En effet, l'analyse montre
25 une différence significative entre la vitesse moyenne de la main dominante des monômes et des binômes. La configuration bimanuelle provoque une séquentialité dans les actions du sujet : il manipule avec un outil, puis avec l'autre mais rarement les deux en même temps. Cette séquentialité a pour effet des pauses alternatives entre les outils ce qui explique cette vitesse moyenne plus
30 basse.

Cette section nous a permis de constater que le travail en binôme permet de meilleures performances que le travail en monôme. Une analyse plus détaillée a mis en avant la difficulté du travail en configuration bimanuelle : la charge de travail cognitive à assumer avec deux outils est trop importante. Cette
35 difficulté a pour effet de fortement dégrader le taux d'utilisation d'un des deux outils. On constate également une légère dégradation de l'utilisation de l'outil associé à la main dominante. Pour résumer, il est préférable de partager les ressources disponibles (outils de manipulation dans notre cas) entre différents participants.

4.4.2 Gain de performance sur les tâches complexes

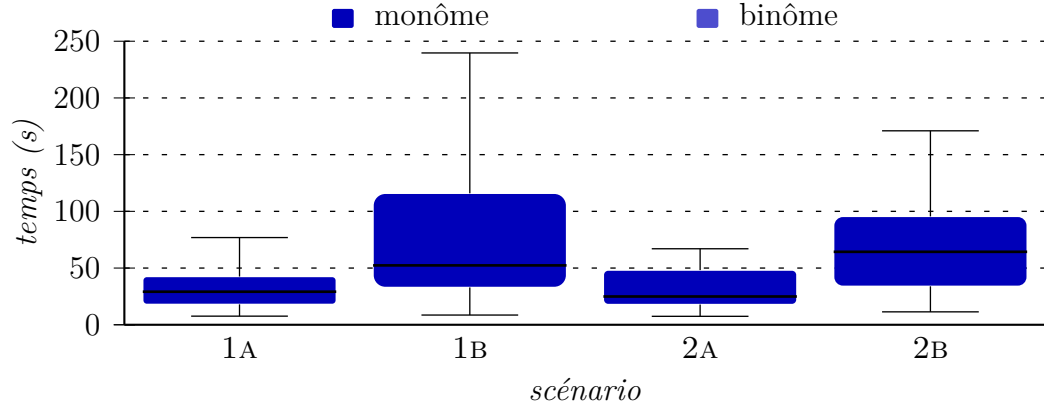


Figure 4.13 – Temps de réalisation des scénarios

La figure 4.13 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des différents scénarios (\mathcal{V}_{i2}). L'analyse montre un effet significatif des scénarios (\mathcal{V}_{i2}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 59.2$, $df = 3$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de trier les scénarios en deux classes de complexité : $\{1A, 2A\}$ et $\{1B, 2B\}$.

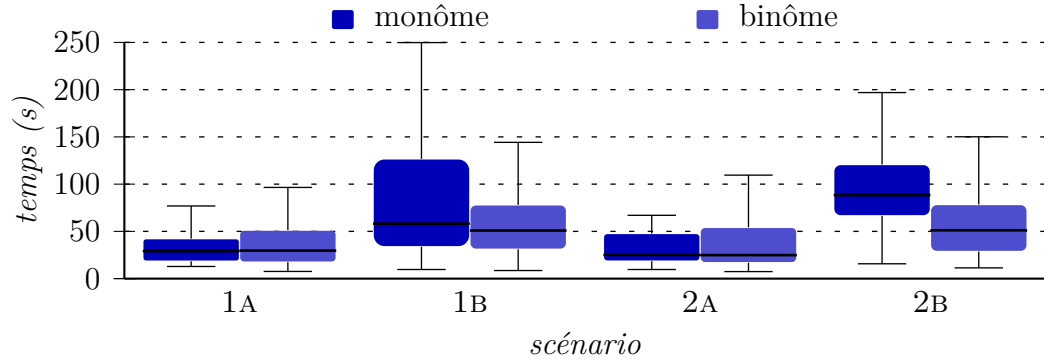


Figure 4.14 – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets

La figure 4.14 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des différents scénarios (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.713$). Cependant,

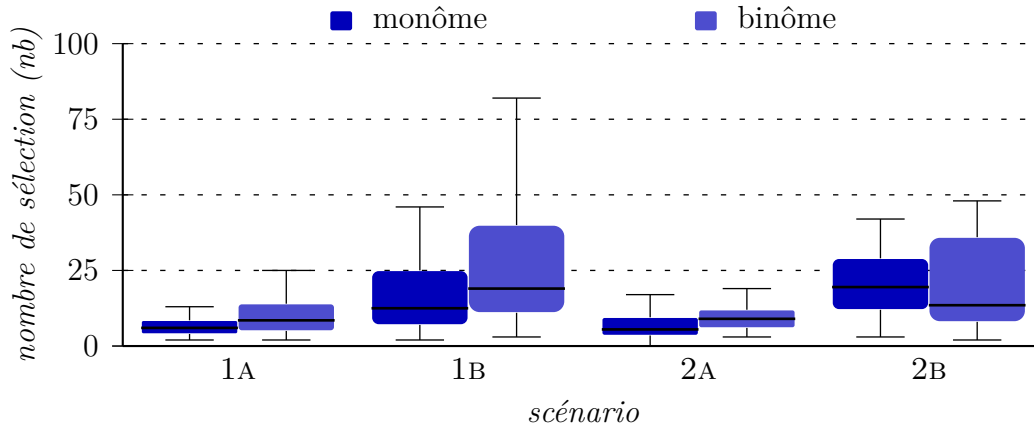


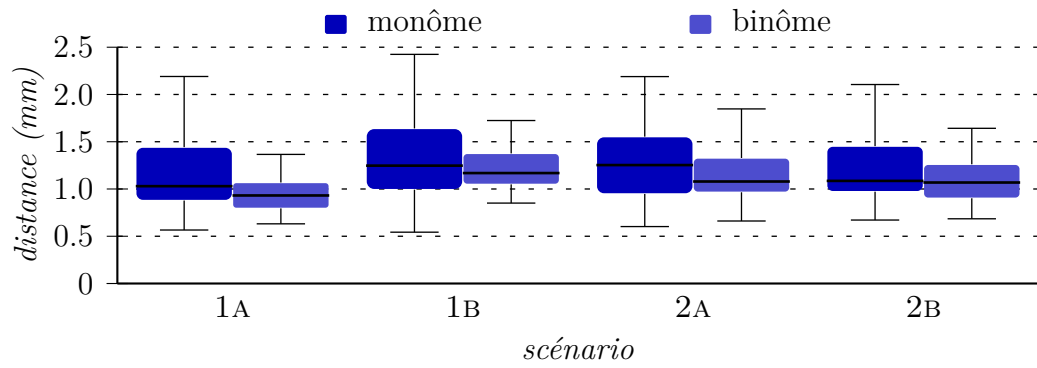
Figure 4.15 – Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets

l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 10.4$, $df = 1$, $p = 0.001$).

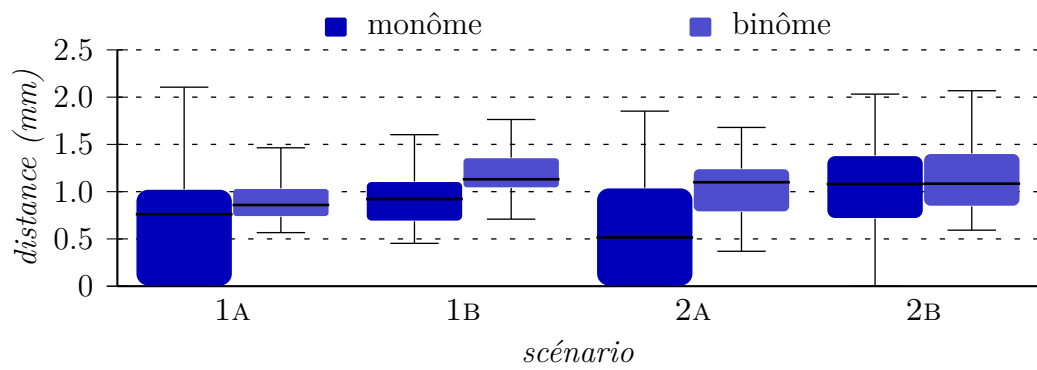
La figure 4.15 présente le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) des différents scénarios (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 11.5$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). Cependant, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 0.4$, $df = 1$, $p = 0.504$).

La figure 4.16 page suivante présente les distances passives (\mathcal{V}_{d3}) et actives (\mathcal{V}_{d4}) des différents scénarios (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la distance passive (\mathcal{V}_{d3}) pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 6.3$, $df = 1$, $p = 0.012$) mais pas d'effet significatif sur les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 1.6$, $df = 1$, $p = 0.207$). Cependant, on constate un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 17.3$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) ainsi que sur les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 9.7$, $df = 1$, $p = 0.002$).

La figure 4.17 page suivante présente la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) des différents scénarios (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5})



(a) Distance passive



(b) Distance active

Figure 4.16 – Distance passive et active entre les effecteurs terminaux sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets

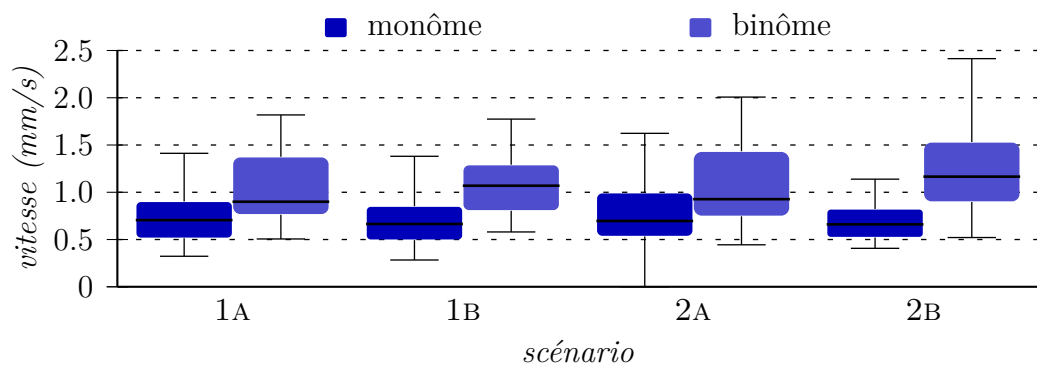


Figure 4.17 – Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets

pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 32.2$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). De même, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 72.5$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

L'analyse du temps de réalisation des différentes tâches nous permet de classer ces tâches par niveau de complexité : les scénarios 1A et 2A sont relativement simples alors que les scénarios 1B et 2B sont complexes. Ce résultat confirme un résultat obtenu dans la précédente expérimentation (voir section 3.5.1 page 48) : le nombre d'atomes tient un rôle prépondérant dans la complexité de la tâche à réaliser. En effet, les scénarios 1A et 2A concernent la molécule TRP-ZIPPER avec 218 atomes et 12 résidus alors que les scénarios 1B et 2B concernent la molécule TRP-ZIPPER avec 304 atomes et 20 résidus.

En observant les différences de performances entre les monômes et les binômes sur la figure 4.14 page 70, on constate que l'apport du travail collaboratif n'est vrai que dans le cas des tâches complexes. La spécificité des tâches complexes réside dans l'obligation d'avoir recourt aux deux outils pour achever la tâche. En effet, en observant la figure 4.16a page précédente, l'analyse montre une différence significative sur les scénarios simples. D'après la section précédente (voir section 4.4.1 page 64), les monômes ont tendance à délaissier le deuxième outil à cause de la difficulté de manipulation en configuration bimanuelle. L'outil délaissé augmentait ainsi la valeur de la distance passive mesurée en étant éloigné de la zone d'activité pour ne pas gêner. Étant donné que la distance passive mesurée pour les monômes est significativement plus importante que celle mesurée pour les binômes, on peut en déduire que les scénarios simples n'ont pas nécessité l'intervention de deux outils pour achever la tâche.

Cependant, dans le cas des scénarios complexes, l'analyse ne montre pas de différence significative. Dans le cas des scénarios complexes, l'utilisation d'un deuxième outil est nécessaire et malgré la difficulté de la manipulation en configuration bimanuelle, les monômes ont effectué la tâche à l'aide des deux outils. Les deux outils se trouvant tous les deux dans la zone de travail, la distance passive diminue. Ceci explique la similarité des valeurs mesurées entre les monômes et les binômes pour les scénarios complexes.

L'analyse du nombre de sélections vient appuyer ces conclusions. En effet, les monômes effectuent moins de sélections que les binômes dans la réalisation des scénarios simples. Dans les scénarios complexes, on comptabilise un nombre de sélections similaires entre les monômes et les binômes.

En observant à présent les distances actives sur la figure 4.16b page précédente, l'analyse confirme ce qui a été mesuré dans la section précédente (voir section 4.4.1 page 64) : l'espace de travail couvert par les binômes est

plus important que celui couvert par les *monômes*. De la même façon, l'analyse des vitesses moyennes confirme également les conclusions précédemment obtenues.

Dans cette section, nous avons apporté des précisions concernant les améliorations de performances des *binômes* par rapport aux *monômes*. En effet, les analyses montrent que cette amélioration de performances ne se produit que sur des scénarios de complexité élevée. Dans le cas de scénarios simples, le *monôme* parvient à réaliser la tâche avec un seul outil. Il s'affranchit ainsi des problèmes de coordination entre les deux outils ce qui lui permet de compenser le manque de ressources pour la manipulation.

Cependant, le cas des scénarios complexes force le *monôme* à manipuler dans une configuration *bimanuelle*. Dans la section précédente (voir section 4.4.1 page 64), nous avons montré que la configuration *bimanuelle* ne permet pas d'égaliser les performances d'un travail collaboratif. Nous pouvons donc conclure que les *binômes* sont plus performants dans le cadre de scénarios suffisamment complexes.

4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes

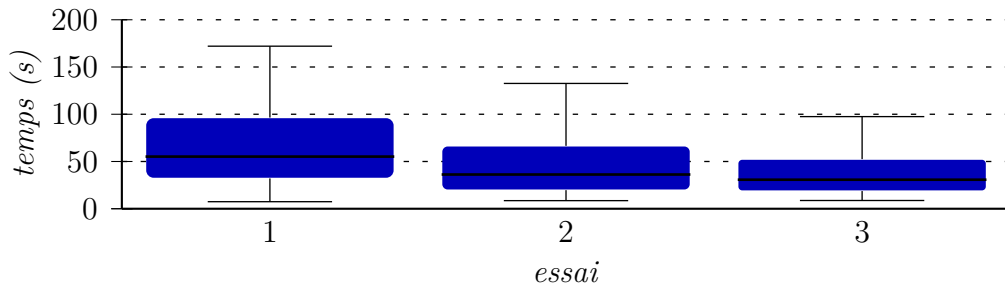


Figure 4.18 – Temps de réalisation de chaque essai

La figure 4.18 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des différents essais (\mathcal{V}_{i3}). On montre un effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 20.2$, $df = 2$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative entre le premier essai et le deuxième essai ainsi qu'entre le deuxième essai et le troisième.

La figure 4.19 page suivante présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des différents essais (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. On montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets

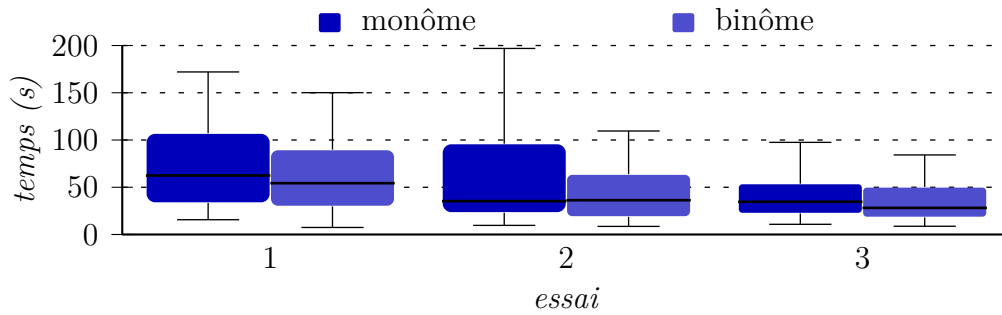


Figure 4.19 – Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

(\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour le premier essai ($\chi^2 = 1.3$, $df = 1$, $p = 0.263$), le deuxième essai ($\chi^2 = 1.2$, $df = 1$, $p = 0.276$) ou le troisième essai ($\chi^2 = 2.5$, $df = 1$, $p = 0.115$).

De plus, on montre un effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour les monômes ($\chi^2 = 7.1$, $df = 2$, $p = 0.028$) et pour les binômes ($\chi^2 = 19.8$, $df = 2$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative seulement à partir de dernier essai pour les monômes alors que l'évolution est significative dès le deuxième essai pour les binômes.

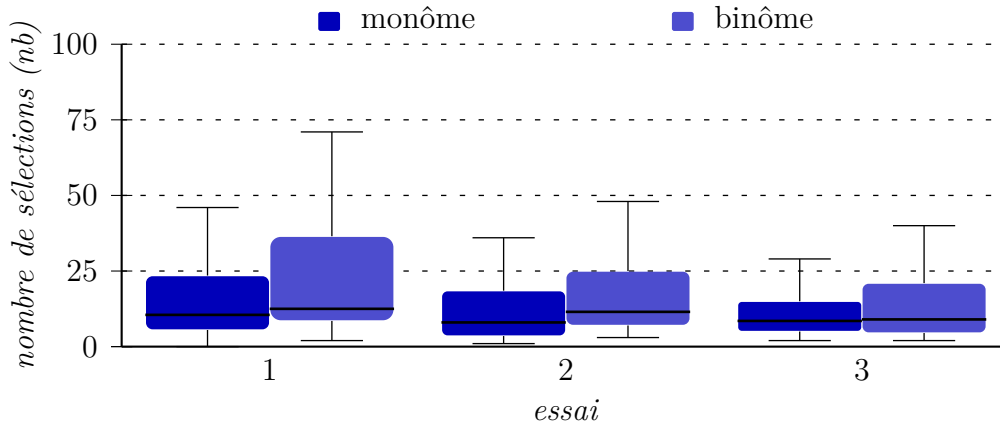


Figure 4.20 – Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets

La figure 4.20 présente le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) des différents essais (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. On montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de

sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour le premier essai ($\chi^2 = 3.3$, $df = 1$, $p = 0.068$) ou le troisième essai ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.715$). Cependant, on montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour le deuxième essai ($\chi^2 = 3.8$, $df = 1$, $p = 0.05$).

- 5 De plus, on montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour les monômes ($\chi^2 = 0.5$, $df = 2$, $p = 0.763$). Cependant, on montre un effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur le nombre de sélections (\mathcal{V}_{d2}) pour les binômes ($\chi^2 = 9.1$, $df = 2$, $p = 0.011$). Le test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction
10 de HOLM [1979] montre une diminution significative du nombre de sélections pour les binômes entre le premier et le dernier essai.

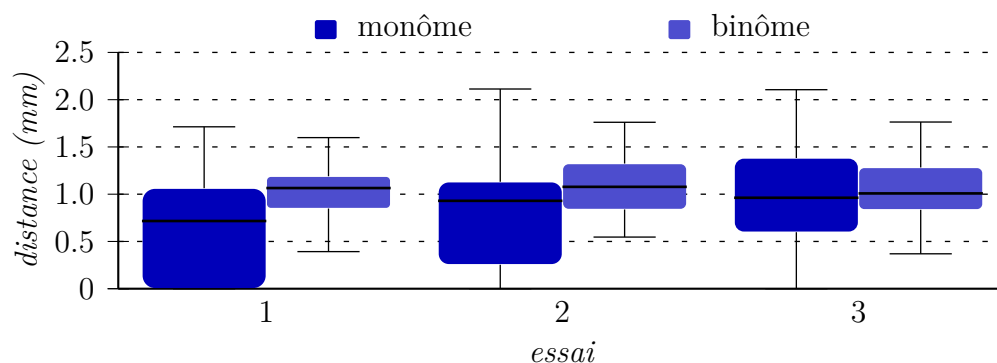


Figure 4.21 – Distance active entre les effecteurs terminaux sur chaque essai en fonction du nombre de sujets

La figure 4.21 présente la distance active (\mathcal{V}_{d4}) des différents essais (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience. La distance passive a été ignorée étant donné le biais de mesure décrit dans la section 4.4.1
15 page 64. L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) pour le premier essai ($\chi^2 = 21.4$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) et pour le deuxième essai ($\chi^2 = 8.5$, $df = 1$, $p = 0.004$) mais pas pour le troisième essai ($\chi^2 = 0.8$, $df = 1$, $p = 0.362$).

De plus, on montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) pour les binômes ($\chi^2 = 2.6$, $df = 2$, $p = 0.275$). Cependant, on montre un effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) pour les monômes ($\chi^2 = 7.3$, $df = 2$, $p = 0.025$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative entre le premier essai et le troisième essai.

25 La figure 4.22 page suivante présente la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) des différents essais (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) ayant réalisé l'expérience.

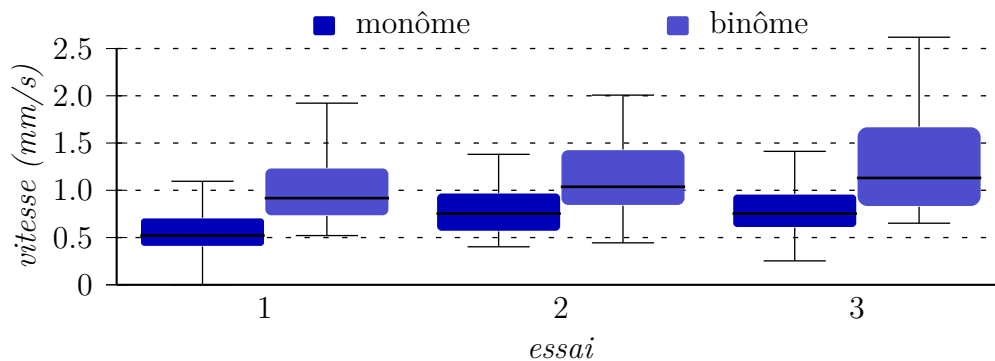


Figure 4.22 – Vitesse moyenne sur chaque essai en fonction du nombre de sujets

L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d5}) pour le premier essai ($\chi^2 = 50$, $df = 1$, $p \ll 0.05$), le second essai ($\chi^2 = 25.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) et le troisième essai ($\chi^2 = 33.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

- 5 De plus, on montre un effet significatif du numéro de l'essai (\mathcal{V}_{i3}) sur la distance active (\mathcal{V}_{d4}) pour les monômes ($\chi^2 = 40.5$, $df = 2$, $p \ll 0.05$) et les binômes ($\chi^2 = 9$, $df = 2$, $p = 0.011$). Le test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre dans chaque cas (monôme et binôme) une augmentation significative après le premier
10 essai.

L'observation des temps de réalisation de la tâche (voir figure 4.18 page 74) nous permet de caractériser un apprentissage réel sur l'ensemble des trois réalisation de la tâche. Le détail de l'apprentissage en fonction du nombre de sujets sur la figure 4.19 page 75 apporte cependant un point important : les
15 binômes évoluent plus rapidement que les monômes. En effet, on constate un effet franc de l'apprentissage dès le second essai dans le cas des binômes alors que ce n'est que sur le dernier essai que les monômes montrent une évolution dans les performances de temps.

Avec les différentes variables indépendantes observés, on remarque que les
20 binômes ont une phase d'adaptation à la tâche très courte voire quasi inexistante. Par exemple, le nombre de sélections des binômes par essai décroît. Cependant, si on le met en relation avec l'amélioration de temps de réalisation, on en déduit qu'il est normal que le nombre de sélections décroissent proportionnellement. Pourtant, les monômes qui améliorent également leur
25 temps de réalisation ne diminuent pas le nombre de sélections. En effet, les monômes apprennent à manipuler en configuration bimanuelle. Ils augmentent ainsi leur potentiel de manipulation, augmentant aussi la fréquence des sé-

lections, tout en diminuant le temps de réalisation ce qui a pour effet de faire stagner le nombre total de sélections.

On observe clairement l'intégration progressive du deuxième outil mis à disposition du binômes dans la figure 4.21 page 76. Alors que l'espace de travail des binômes reste relativement constant, celui des monômes augmente au-
5 fur-et-à-mesure des essais jusqu'à atteindre une valeur similaire à celle des binômes. En effet, la manipulation bimanuelle nécessite un apprentissage car il n'est pas intuitif. Avec l'apprentissage, les monômes sont capables de gérer un espace de travail de plus en plus grand. La plupart du temps, ils com-
10 prennent rapidement la difficulté de manipuler à deux endroits différents au même instant. Cependant, le potentiel de ce deuxième outil n'est pas ignoré et il est utilisé (avec la main dominée la plupart du temps) comme un moyen de fixer un résidu pendant que l'autre outil déforme. Ceci permet de déformer une partie de la molécule tout en conservant la stabilité d'une partie
15 déjà déformée.

En ce qui concerne les vitesses moyennes, les monômes comme les binômes augmentent leur rapidité. Cependant, les binômes restent nettement plus rapides que les monômes. Cette amélioration de la vitesse tout au long des essais permet d'expliquer l'amélioration en terme de temps de réalisation : la
20 tâche est réalisée plus rapidement car les sujets manipulent plus rapidement.

Dans cette section, nous avons mis en avant l'avantage de la collaboration dans la phase d'apprentissage. L'apprentissage concerne aussi bien l'apprentissage des outils, de la tâche à réaliser ou encore l'utilisation de la plateforme : les mesures effectuées ne permettent pas de caractériser le type
25 d'apprentissage. En effet, les binômes semblent atteindre des performances optimales assez rapidement. La possibilité de communiquer, d'échanger, de conseiller permet de mutualiser l'apprentissage et de l'accélérer. De plus, le binôme peut bénéficier des connaissances spécifiques ou de l'expérience d'un des membres du binôme. Tout ceci nous permet de montrer que l'apprentis-
30 sage en binôme est plus rapide que l'apprentissage en monôme.

La complexité de la manipulation bimanuelle montre également ses limites. Pour certaines variables indépendantes, les monôme parviennent à obtenir des résultats similaires aux binômes mais seulement au bout du troisième et dernier essai. Cependant, cet apprentissage nécessite un travail cognitif
35 important : il sera probablement difficile pour les monômes d'appréhender de nouveaux outils ou des tâches plus complexes. Le travail en binôme montre ainsi son avantage sur le travail de manipulation bimanuelle en monôme.

4.4.4 Résultats qualitatifs

Ce questionnaire est destiné à évaluer la collaboration du point de vue de l'utilisateur. Les questions sont notées sur une échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux ce qui veut dire que les notes sont comprises entre un et cinq et que la moyenne est à trois.

Tout d'abord, la grande majorité des sujets travaillant en binôme se sont trouvés utiles dans cette tâche de collaboration ($\mu = 4.1$, $\sigma = 0.8$). On constate une note moyenne très élevée (la note maximum étant 5). Cette note permet de vérifier que les sujets ne se sentent pas mis de côté et participent activement à la réalisation de la tâche. Même dans le cas où les résultats objectifs pourrait venir contredire un sujet sur l'aide qu'il a apporté, il est possible qu'il se soit distingué par des conseils ou des remarques pertinentes. Quoiqu'il en soit, il est important que les sujets ne soient pas isolé afin d'éviter les phénomènes de paresse sociale.

Cependant, la sensation d'avoir été le meneur des opérations est partagé ($\mu = 3$, $\sigma = 0.6$). En général, les sujets n'apprécient pas cette dernière question. En effet, ils ne souhaitent pas prétendre avoir été meneur ou chef des opérations par modestie. Paradoxalement, ils ne souhaitent pas non plus avouer avoir été dirigé par quelqu'un d'autre par fierté. D'ailleurs, on observe un écart-type relativement bas concernant cette note ce qui signifie que la majorité des sujets ont répondu de façon neutre.

L'évaluation de la communication confirme ce qui a été trouvé dans la première expérimentation (voir section 3.4.3 page 47). En effet, l'importance de la communication verbale a été mise en avant ($\mu = 3.4$, $\sigma = 1.2$). Par opposition, les sujets ont considéré qu'ils n'utilisaient quasiment pas la communication virtuelle ($\mu = 1.9$, $\sigma = 1$) et encore moins la communication gestuelle ($\mu = 1.3$, $\sigma = 0.6$). La communication verbale étant la plus naturelle, il n'est pas étonnant d'obtenir un tel score. De la même façon, la communication gestuelle est compliquée. En effet, les sujets sont en train de manipuler une interface haptique ce qui limite les gestes possibles. De plus, ils regardent principalement l'écran mais ne regardent pas le partenaire ce qui laisse peu de place à une quelconque communication gestuelle. Cependant, les sujets estiment ne pas utiliser beaucoup les communications virtuelles. Ce canal de communication offre des possibilités intéressantes puisqu'il est intégré dans l'environnement de travail. L'expérimentation ne proposant aucun fonctionnalité particulière permettant d'exploiter ce canal de communication explique probablement ce délaissement. La dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 111) propose des outils de désignation qui vont permettre d'exploiter le potentiel de ce canal de communication.

Pour finir, les sujets ont été interrogés sur leur configuration de manipulation préférée. La configuration monomanuelle en monôme a été relativement peu choisie ($\mu = 1.8$, $\sigma = 1$). Les sujets évalués en monôme sont mitigés sur l'intérêt d'une configuration monomanuelle en binôme ($\mu = 3.2$, $\sigma = 1.2$).
5 De la même façon, les sujets évalués en binôme sont mitigés sur l'intérêt d'une configuration bimanuelle en monôme ($\mu = 2.9$, $\sigma = 1.3$). Cependant, il ne faut pas oublier qu'il est demandé aux sujets d'estimer l'intérêt d'une configuration qu'ils n'ont pas testé. En général, ils sont plus enclins à évaluer la configuration qu'ils ont testé mais préfèrent rester prudent sur une
10 configuration qu'il ne connaissent pas. Quoiqu'il en soit, ils ont été seulement 63.8 % à préférer la configuration bimanuelle en monôme alors qu'ils ont été 36.2 % à opter pour la configuration monomanuelle en binôme. Une majorité des sujets préfère donc le travail en collaboration.

4.5 Synthèse

15 4.5.1 Résumé des résultats

Dans cette seconde expérimentation, nous avons comparé et étudié les performances de monômes et de binômes sur une tâche de déformation. De plus, nous avons cherché à observer l'effet de l'apprentissage sur les performances. L'objectif était de confirmer certains résultats de la première expérimentation dans un contexte différent de manipulation et de déformation.
20 également cherché à déterminer l'effet de la collaboration sur l'apprentissage.

Tout d'abord, le travail collaboratif a de nouveau prouvé son intérêt en terme de performances. En effet, il a été montré qu'avec un nombre de ressources déterminées (un outil de manipulation et deux outils de déformation dans
25 notre cas), il est préférable de les répartir sur plusieurs sujets. Cette répartition permet une séparation de la charge cognitive de travail. Pourtant, un sujet seul ne perd pas de temps avec les problèmes de coordination, ni de communication. Cependant, une charge cognitive trop importante compense largement cet avantage.

30 Deuxièmement, nous avons confirmé l'intérêt du travail collaboratif sur des tâches de nature complexe. Les binômes ont particulièrement montré leur supériorité en terme de performances sur les scénarios complexes. Malgré cela, les binômes obtiennent tout de même des performances au moins aussi bonne que les monômes sur des scénarios simples. Dans tous les cas, il est
35 donc préférable d'avoir recours à une configuration collaborative.

Le troisième résultat important concerne l'apprentissage. Nous avons montré que le travail en collaboration a une influence sur le phénomène d'apprentissage. En effet, l'apprentissage est catalysé par la communication et les échanges entre les sujets. Étant donné la complexité de la tâche ainsi que de la plate-forme, cet apprentissage accéléré par le travail en collaboration est réellement bénéfique.

Les trois points abordés montrent les avantages à mettre en place un environnement de travail collaboratif pour remplacer le travail seul. Le questionnaire appuie ce résultat par des avis relativement portés vers le travail collaboratif.

4.5.2 Perspectives

Cette expérimentation nous a permis de mettre en opposition des monômes avec des binômes. Nous avons vu les avantages d'un travail collaboratif en binôme. L'étape suivante sera l'étude du travail collaboratif avec des groupes de plus de deux sujets. En effet, l'objectif d'une telle étude devrait permettre d'augmenter

Pour mener une telle étude, il va falloir proposer des scénarios plus complexes. Cette deuxième expérimentation a montré une nouvelle fois le rôle prépondérant de la taille de la molécule dans la complexité de la tâche. Nous verrons que les molécules proposées dans la prochaine étude sont significativement plus importante que celle utilisée jusqu'à présent.

L'introduction de deux sujets supplémentaires va probablement générer des dynamiques de groupes qui n'avait pas de raison d'exister au sein d'un binôme. Cette nouvelle étude va permettre d'observer ces dynamiques et de les caractériser. L'objectif sera de détecter les limites et les contraintes afin de pouvoir fournir des outils pour répondre aux problématiques soulevées.

Cette deuxième expérimentation a également permis de remettre en cause la pertinence d'une manipulation en configuration bimanuelle. D'après les analyses, la charge cognitive qu'apporte la gestion d'un deuxième outil de déformation est trop importante. Cependant, l'outil de déformation est relativement complexe à appréhender. Il ne faut donc pas exclure la possibilité de fournir un outil simple et un outil complexe pour une manipulation en configuration bimanuelle. Nous verrons que la configuration de la dernière étude (voir chapitre 6 page 111) propose une configuration bimanuel avec un outil simple et un outil plus complexe.

Le questionnaire nous a également permis de mettre en avant les lacunes en ce qui concerne l'utilisation du canal de communication virtuel. La dernière

expérimentation qui proposera de nouveaux outils d'interaction sera l'occasion d'introduire des outils adaptés pour permettre d'utiliser efficacement ce canal de communication. En l'occurrence, un outil de désignation sera proposé.

Bibliographie

[BROWN et FORSYTHE 1974]

BROWN, Morton B. et Alan B. and FORSYTHE (juin 1974). « Robust tests for equality of variances ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 69.346, pages 364–367 (cf. page 64).

[DOMINJON 2006]

DOMINJON, Lionel (avr. 2006). « Contribution à l'étude des techniques d'interaction 3D pour la manipulation d'objets avec retour haptique en environnement virtuel à échelle humaine ». Thèse de doctorat. Laval, France : École doctorale d'Angers (cf. page 60).

[FRIEDMAN 1940]

FRIEDMAN, Milton (mar. 1940). « A comparison of alternative tests of significance for the problem of m rankings ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 11.1, pages 86–92 (cf. page 64).

15 [GAUTIER et al. 2008]

GAUTIER, Mathieu, Claude ANDRIOT et Pierre EHANNO (juin 2008). « 6DoF haptic cooperative virtual prototyping over high latency networks ». Anglais. Dans *Haptics : Perception, Devices and Scenarios*. Sous la direction de Manuel FERRE. Tome 5024. Lecture Notes in Computer Science. Madrid, Espagne : Springer Berlin / Heidelberg, pages 876–885 (cf. page 55).

[GORLATCH et al. 2009]

GORLATCH, Sergei, Jens MÜLLER-IDEN, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER, Hamido FUJITA et Yutaka FUNYU (avr. 2009). « Clayworks : toward user-oriented software for collaborative modeling and simulation ». Anglais. Dans *Knowledge-Based Systems* 22.3, pages 209–215 (cf. page 55).

[HOLM 1979]

HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 70, 74–77).

[KRUSKAL et WALLIS 1952]

KRUSKAL, William H. et W. Allen WALLIS (déc. 1952). « Use of ranks in one-criterion variance analysis ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 47.260, pages 583–621 (cf. page 64).

35 [LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 79).

[MANN et WHITNEY 1947]

- MANN, Henry Berthold et Donald Ransom WHITNEY (mar. 1947). « On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 70, 74–77).

[MÜLLER et al. 2006]

- MÜLLER, Jens, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER et Sergei GORLATCH (déc. 2006). « Clayworks : a system for collaborative real-time modeling and high-performance simulation ». Anglais. Dans *Second IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing*. e-Science'06, page 104 (cf. page 55).

[PETERLÍK 2009]

- PETERLÍK, Igor (jan. 2009). « Haptic interaction with non-linear deformable objects ». Anglais. Thèse de doctorat. Brno, Czech Republic : The Faculty of Informatics, Masaryk University (cf. page 54).

[SHAPIRO et WILK 1965]

- SHAPIRO, Samuel S. et Martin B. WILK (déc. 1965). « An analysis of variance test for normality (complete samples) ». Anglais. Dans *Biometrika* 52.3/4, pages 591–611 (cf. page 64).

[SHEN et al. 2006]

- SHEN, WeiMing, YongMin ZHONG, Bijan SHIRINZADEH, XiaoBu YUAN, Gursel ALICI et Julian SMITH (2006). « A cellular neural network for deformable object modelling ». Anglais. Dans *Information Technology for Balanced Manufacturing Systems*. Tome 220. IFIP International Federation for Information Processing. Springer Boston, pages 329–336 (cf. page 54).

[SUBASI et BASDOGAN 2006]

- SUBASI, Erk et Cagatay BASDOGAN (juin 2006). « A new approach to molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of Eurohaptics*, pages 141–145 (cf. page 55).

[SÜMENGEN et al. 2007]

- SÜMENGEN, Selçuk, Mustafa Tolga EREN, Serhat YESILYURT et Selim BALCISOY (2007). « Real-time deformable objects for collaborative virtual environments ». Anglais. Dans *International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications*. GRAPP (AS/IE)'07, pages 121–128 (cf. page 55).

[TANG et al. 2010]

TANG, ZiYing, GuoDong RONG, XiaoHu GUO et Balakrishnan PRABHAKARAN (mar. 2010). « Streaming 3D shape deformations in collaborative virtual environment ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference*.

5 Waltham, MA, USA, pages 183–186 (cf. page 55).

Bibliographie

Chapitre 5

Les dynamiques de groupe

Sommaire

5	5.1 Introduction	87
	5.2 Contexte	88
	5.3 Expérimentation sur les dynamiques de groupe	90
	5.3.1 Tâche	90
	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental	91
10	5.4 Résultats	95
	5.4.1 Évolution des performances	95
	5.4.2 Avantage du remue-méninges pour les quadrinômes	99
	5.4.3 Définition d'un meneur	103
	5.5 Synthèse	106
15	5.5.1 Résumé des résultats	106
	5.5.2 Perspectives	107
	Bibliographie	109

5.1 Introduction

Les deux expérimentations précédentes ont permis d'étudier les différentes tâches élémentaires que sont la recherche, la sélection, la manipulation et l'évaluation. Tout d'abord, les tâches élémentaires de recherche et de sélection ont été abordées dans la première expérimentation. Dans un second temps, ce sont les tâches élémentaires de manipulation et d'évaluation qui ont été expérimentées. Cependant, dans un cas comme dans l'autre, la collaboration s'est limitée à des groupes de deux utilisateurs, des binômes.

Cette précédente expérimentation concernant principalement la manipulation a permis de mettre en évidence des problématiques de coordination et de communication. L'analyse de ces problématiques est primordiale afin de pouvoir proposer des outils adaptés. La prochaine étude devra stimuler les interactions afin de pouvoir étudier avec précision la coordination et la communication entre les sujets.

De plus, une étude faisant intervenir plus de deux personnes est nécessaire. Jusqu'à présent, afin de simplifier l'environnement d'étude, la collaboration a été limitée à deux utilisateurs. Pour étudier pleinement le travail collaboratif, il est nécessaire d'envisager une étude avec des groupes de plus de deux utilisateurs.

La tâche élémentaire de manipulation semble fournir un environnement d'expérimentation favorable. En effet, cette tâche permet de stimuler les collaborations étroitement couplées. Ce sont ces collaborations étroitement couplées qui provoquent les conflits de coordination.

Les objectifs de cette nouvelle expérimentation sont exposés dans la section 5.2 accompagnés par les hypothèses. La tâche et les modifications apportées à la plate-forme correspondantes sont détaillées dans la section 5.3 page 90. Enfin, les résultats seront analysés dans la section 5.4 page 95 puis une synthèse est proposée dans la section 5.5 page 106.

5.2 Contexte

Nous avons déjà effectué deux études sur le travail collaboratif mettant en avant les avantages d'un travail en binôme par rapport au travail en monôme. Cependant, le travail de groupe ne se limitant pas aux binômes, nous nous intéresserons au quadrinômes dans cette étude. Nous souhaitons observer le travail en quadrinôme afin de confirmer nos précédentes conclusions.

Le travail de groupe a été très largement étudié à la fin du XVIII^e siècle et au début du XIX^e siècle dans le domaine de la psychologie sociale. L'ouvrage de MUGNY et al. [1995] aborde les problématiques de la psychologie sociale dans le cadre général mais s'intéresse plus précisément aux dynamiques de groupe dans les chapitres premier et premier bis. Il aborde en particulier les travaux de Elton MAYO au sein de l'entreprise *Hawthorne Works* qui constitue la plus importante étude sur les dynamiques de groupe. Cette étude effectuée entre les années 1927 et 1932 a été publiée par ROETHLISBERGER et al. [1939]. Le travail de groupe permet d'obtenir une meilleure productivité

grâce au phénomène de motivation sociale. La motivation sociale stimule chaque ouvrier par la présence d'autres ouvriers.

Cependant, ces études diffèrent de notre cas en un point important. Les études précédentes ne concernent pas des tâches de collaboration étroitement couplée. Que ce soit pour l'assemblage d'automobile dans le cas du taylorisme ou l'assemblage d'appareils de radio dans le cas de l'entreprise *Hawthorne Works*, les études sur le travail collaboratif proposées placent chaque ouvrier sur un poste de travail indépendant : la collaboration est très faible. En effet, il n'est pas nécessaire pour les ouvriers d'interagir pendant la réalisation de la tâche. Notre plate-forme fournit un outil de travail où la collaboration est étroite.

Les études mettant en scène des tâches de collaboration étroite en groupe supérieur à deux utilisateurs sont peu nombreuses. On peut noter l'étude de CHAN et al. [2008] qui propose un système de prise de contrôle collaboratif à tour de rôle. Cette étude montre l'utilité de l'outil haptique dans la réalisation d'une tâche collaborative mais ne caractérise ni les stratégies adoptées, ni la structure du groupe. C'est à ces questions que nous nous intéressons dans cette troisième expérimentation.

L'objectif de notre troisième étude est de confirmer les conclusions obtenues dans le cadre du travail de Elton MAYO. En effet, cette étude a montré que le travail en groupe permet d'augmenter la productivité. De plus, il a montré que les groupes qualifiés de structures informelles, finissent toujours par se structurer. Les structures informelles sont des groupes qui ne possèdent pas de chef et où chaque participant a le même statut à priori. Ce type de structure permet de faire émerger naturellement, et par acceptation mutuelle, un meneur et des suiveurs.

Étant donné le peu de temps alloué à notre tâche¹, l'émergence d'un meneur est incertaine. C'est pourquoi nous testons une période de réflexion préalable au début de la tâche. Cette période devrait permettre l'émergence des meneurs et des suiveurs. Elle devrait également permettre une communication entre les utilisateurs pour la mise en place d'une stratégie.

1. Notre tâche dure quelques dizaines de minutes par rapport aux cinq années de l'étude de Elton MAYO

5.3 Expérimentation sur les dynamiques de groupe

5.3.1 Tâche

Description de la tâche

- 5 La tâche proposée est la déformation de molécules complexes dans un `EVC`. L'objectif est de la rendre conforme à une molécule modèle. La molécule à déformer est affichée dans son intégralité (atomes et structures principales) mais seule la structure principale est visible sur la molécule modèle. Dans cette expérimentation, la molécule TRP-CAGE est utilisée pour la phase d'en-
- 10 traînement. Des molécules plus complexes (Prion et Ubiquitin) sont utilisées pour la tâche de déformation collaborative. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 134.

Le mécanisme de sélection et d'affichage est strictement identique à la seconde expérimentation. De la même façon, le système d'évaluation de la solution à

15 l'aide du score `RMSD` est identique. On pourra trouver la description de ces éléments dans la section 4.3.1 page 56.

Description des scénarios

Deux scénarios sont proposés : un sur la molécule Prion et un sur la molécule Ubiquitin. Les paragraphes suivants décrivent les deux scénarios :

- 20 **Scénario 1** Cette tâche concerne la déformation de la molécule Prion. La déformation de cette molécule nécessite de replacer correctement une chaîne de 16 résidus. Cette chaîne se trouve en périphérie de la molécule et n'est donc pas soumise à de fortes contraintes physiques. Cette tâche est aisément divisible en sous-tâches ; dans ce cas, les sujets peuvent
- 25 sélectionner la chaîne de résidus à intervalle réguliers de manière à la séparer en parties égales : c'est une collaboration faiblement couplée.

- Scénario 2** Cette tâche concerne la déformation de la molécule Ubiquitin. La déformation de cette molécule nécessite de replacer correctement une chaîne de 19 résidus. Cette chaîne se trouve au sein de la molécule où elle
- 30 est soumise à de fortes contraintes physiques, notamment le milieu de la chaîne : il très difficile d'avoir un contrôle précis sur la déformation du milieu de la chaîne. Cette tâche doit être réalisée avec une coordination de l'ensemble des sujets : c'est une collaboration étroite.

Les outils disponibles

Des outils de déformation au niveau atomique, identiques à la seconde expérimentation (voir section 4.3.1 page 59), sont proposés pour la réalisation de la tâche. Il est à noter que les sujets n'ont pas la possibilité de modifier le point de vue de la molécule. Bien que l'intégralité des scénarios soient réalisables sans modifier le point de vue, cette contrainte peut s'avérer être un handicap dans certains cas. Cependant, nous avons fait le choix d'enlever cet outil de manipulation afin d'éviter les conflits de coordination, notamment au sein des quadrinômes.

5.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Le dispositif expérimental utilisé, basé sur celui présenté dans le chapitre A page 133, a été adapté pour les besoins de l'expérimentation. Les modifications sont présentées dans les sections qui vont suivre. Le protocole expérimental est détaillé dans la section B.3 page 146 et résumé dans la table 5.1 page 94.

Matériel

La troisième expérimentation se focalise sur le travail de groupe et en particulier, sur des quadrinômes. Ce sont donc deux outils de déformation supplémentaires qui sont ajoutés à la plate-forme de base (voir section A.1 page 133). Deux PHANTOM Omni® supplémentaires sont ajoutés sur la table devant les sujets de manière à ce que chaque sujet puisse avoir accès à une interface haptique. Pour chaque nouvel PHANTOM Omni® est associé un nouveau serveur VRPN exécuté par des machines de faible puissance, suffisante pour ce propos.

Chaque sujet d'un quadrinôme possède un outil de déformation à sa disposition. En ce qui concerne les binômes, chaque sujet peut utiliser deux outils dans une configuration bimanuelle.

Cette expérimentation sur le travail collaboratif de groupe (supérieur à deux sujets) est l'occasion de focaliser sur les communications qui seront certainement plus nombreuses. Afin d'analyser ces communications, une caméra vidéo SONY® (PJ50V HD) a été placée en hauteur derrière les sujets afin de filmer les sujets de dos et l'écran de vidéoprojection dans un même plan. Cette caméra permet d'enregistrer la vidéo et le son. Ces vidéos sont exportées et séquencées *a fortiori* à l'aide du logiciel iMOVIE.

La figure 5.1 illustre le dispositif expérimental par un schéma. La figure 5.2 est une photographie de la salle d'expérimentation.

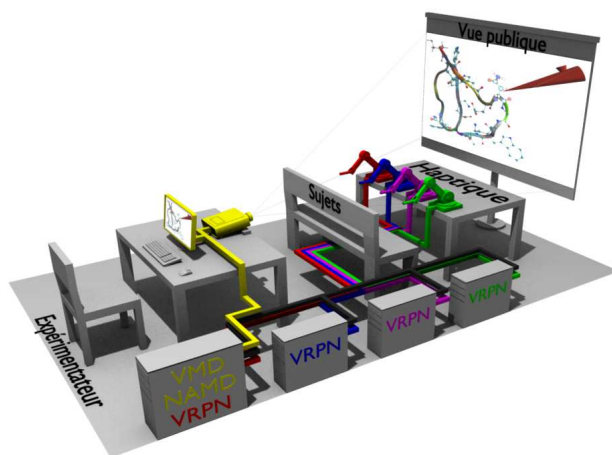


Figure 5.1 – Schéma du dispositif expérimental



Figure 5.2 – Photographie du dispositif expérimental

Visualisation

La troisième expérimentation propose une tâche relativement similaire à la
5 seconde expérimentation. La principale différence concerne la taille des molécules puisque les molécules contiennent une centaine de résidus contrairement à la précédente expérimentation qui concernait des molécules d'une quinzaine

de résidus. La molécule Prion est utilisée pour le scénario 1 sur la figure 5.3 et la molécule Ubiquitin est utilisée pour le scénario 2 sur la figure 5.4.

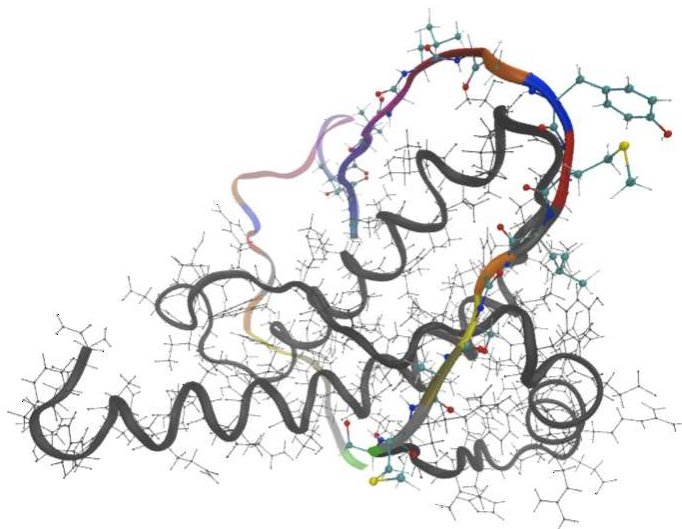


Figure 5.3 – Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1

Outils de manipulation

Cette expérimentation fait intervenir quatre sujets. Cependant, c'est la première expérimentation pour laquelle aucun outil d'orientation de la molécule n'est fourni aux sujets. En effet, étant donné les observations des précédentes expérimentations, nous avons jugé que la présence de cet outil est générateur de conflits de coordination. Durant les précédentes expérimentations, les conflits de coordination était relativement limité car ne concernait que des binômes. Dans le cadre d'un quadrinôme, un tel outil pourrait produire beaucoup plus de chaos ce que nous ne souhaitons pas.

En ce qui concerne les outils de déformation, ce sont exactement les mêmes que dans la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 62). Chaque résidu qu'un sujet sélectionne est mis en surbrillance à la fois sur la molécule déformable et sur la molécule dans son état stable.

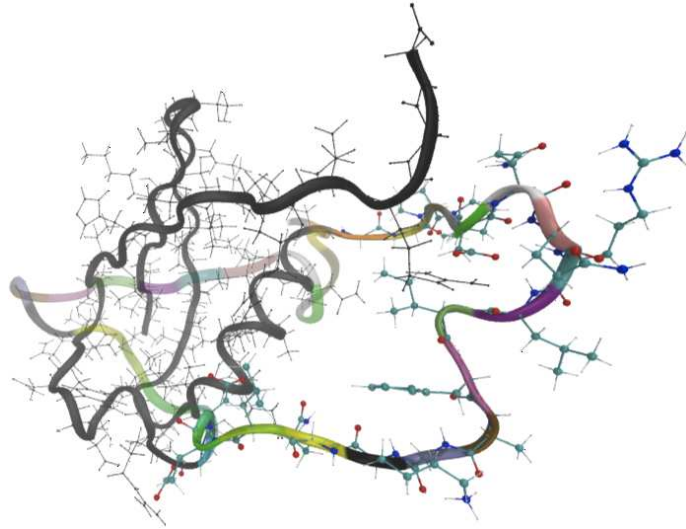


Figure 5.4 – Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2

Table 5.1 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation d'une molécule en groupe			
Hypothèses	(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en quadrinôme (\mathcal{H}_2) Le remue-ménings structure le quadrinôme			
Variable in-dépendantes	(\mathcal{V}_{i1}) Nombre de sujets (\mathcal{V}_{i2}) Complexité de la tâche (\mathcal{V}_{i3}) Temps alloué pour le remue-ménings			
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Temps de réalisation (\mathcal{V}_{d2}) Fréquence des sélections (\mathcal{V}_{d3}) Vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d4}) Force moyenne appliquée par les sujets (\mathcal{V}_{d5}) Communications verbales			
Condition (\mathcal{C}_1)	Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)	Condition (\mathcal{C}_4)	
2 sujets Bimanuel	2 sujets Bimanuel	4 sujets Monomanuel	4 sujets Monomanuel	
Pas de remue-ménings	1 mn de remue-ménings	Pas de remue-ménings	1 mn de remue-ménings	
Scénario 1	Scénario 1	Scénario 1	Scénario 1	
Scénario 2	Scénario 2	Scénario 2	Scénario 2	

5.4 Résultats

5.4.1 Évolution des performances

Données et tests statistiques

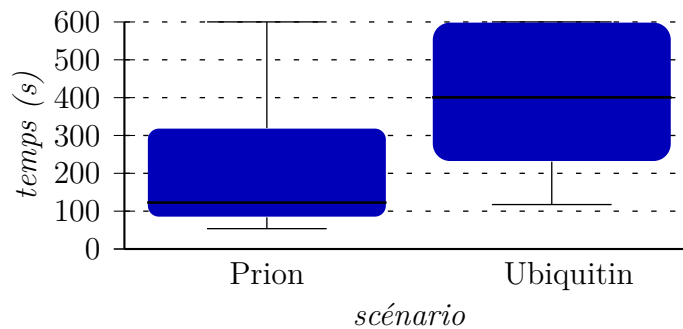


Figure 5.5 – Temps de réalisation des scénarios

La figure 5.5 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de chaque scénario (\mathcal{V}_{i2}).

- 5 L'analyse montre un effet significatif des scénarios (\mathcal{V}_{i2}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 33.3$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

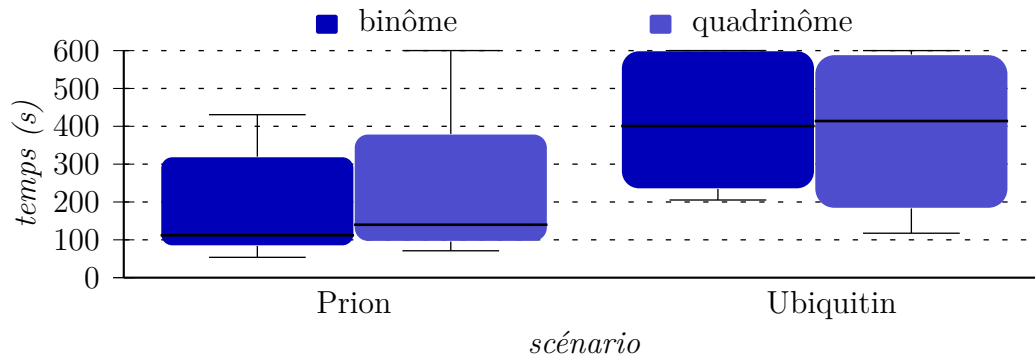


Figure 5.6 – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.6 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de chaque scénario (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de la molécule Prion ($\chi^2 = 0$, $df = 1$, $p = 1$). De la même façon, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 2$, $df = 1$, $p = 0.157$).

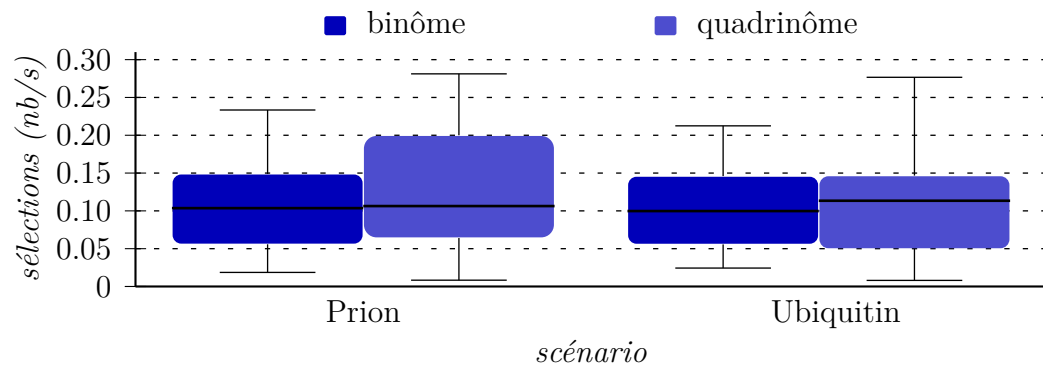


Figure 5.7 – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.7 présente la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) de chaque scénario (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) de la molécule Prion ($\chi^2 = 1.6$, $df = 1$, $p = 0.209$). De la même façon, l'analyse

5 montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.724$).

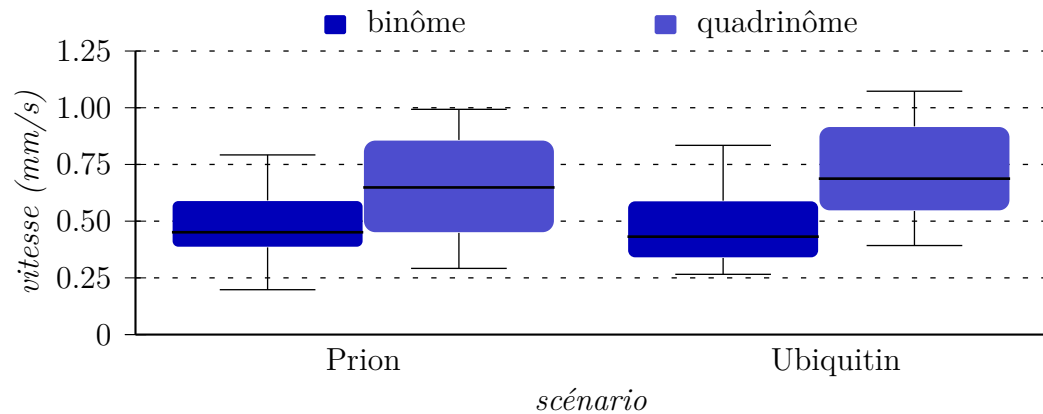


Figure 5.8 – Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.8 présente la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) de chaque scénario (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre un effet significatif du

10 nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) de la molécule Prion ($\chi^2 = 4.5$, $df = 1$, $p = 0.034$). De la même façon, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 8$, $df = 1$, $p = 0.005$).

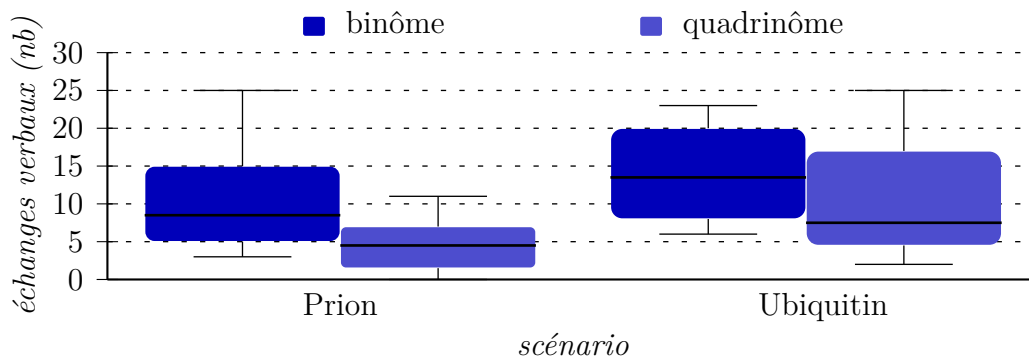


Figure 5.9 – Nombre d’échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.9 présente le nombre d’échanges verbaux (\mathcal{V}_{d5}) de chaque scénario (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L’analyse montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre d’échanges verbaux (\mathcal{V}_{d5}) de la molécule Prion ($\chi^2 = 11.8$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). De la même façon, l’analyse

5 montre un effet significatif du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}) sur le nombre d’échanges verbaux (\mathcal{V}_{d5}) de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 4.3$, $df = 1$, $p = 0.039$).

Analyse et discussion

Les deux tâches proposées sont de natures très différentes. La figure 5.5 page 95 montre que la molécule Ubiquitin a été plus complexe à déformer

10 pour les groupes de sujets que la molécule Prion. Il faut noter que les molécules n’ont pas été alternées lors de la procédure expérimentale (voir section B.3.4 page 148) : c’est toujours la molécule Prion qui a été présentée en premier aux sujets. Pourtant, la réalisation de la déformation de la molécule Ubiquitin a été plus longue, malgré l’apprentissage qui a eu lieu entre les

15 deux scénarios.. D’ailleurs, on peut observer que de nombreux groupes de sujets ont atteint la limite de 10mn lors de la déformation de la molécule Ubiquitin ce qui prouve la réelle complexité de la tâche.

L’étude précédente présentée dans le chapitre 3 page 25 a montré que le travail en configuration bimanuelle permet de moins bonnes performances qu’un

20 travail collaboratif en configuration monomanuelle. Cependant, cette nouvelle étude compare une configuration monomanuelle et bimanuelle à chaque fois dans un cadre de collaboration. On constate d’après la figure 5.6 page 95 que les quadrinômes obtiennent des performances identiques aux binômes, quel que soit le scénario. D’ailleurs, les binômes et les quadrinômes ont également effectué des fréquences de sélections similaires ce qui confirme les

25

performances identiques (voir figure 5.7 page 96).

Pourtant, la figure 5.8 page 96 montre des différences significatives entre les binômes et les quadrinômes concernant la vitesse moyenne des effecteurs terminaux. L'étude exposée par ROETHLISBERGER et al. [1939] a mis en 5 évidence le phénomène de motivation sociale. Son étude appliquée à des groupes² a montré une importante stimulation de la motivation liée au travail à plusieurs. Cette motivation sociale nous permet d'expliquer cette vitesse moyenne plus importante chez les quadrinômes que chez les binômes.

Dans l'étude précédente, nous avons également mis en évidence la présence 10 de conflits de coordination chez les binômes. Ces conflits de coordination entravent la progression de la tâche. Cependant, les sujets parviennent à résoudre ces conflits grâce à la communication. Dans cette troisième expérimentation, la figure 5.9 page précédente montre que le nombre d'échanges verbaux en quadrinôme est inférieur à celui en binôme.

15 Les quadrinômes ont potentiellement plus de conflits de coordination que les binômes (le nombre de combinaisons deux à deux est plus important). Pourtant, leur communication est moins abondante. Il est plus difficile pour les sujets de prendre la parole au sein d'un groupe de quatre utilisateurs, notamment pour les suiveurs. En effet, il est plus difficile de se faire entendre, 20 notamment lorsque deux conflits de coordination interviennent en même temps : qui est prioritaire et qui doit parler le premier ? Dans le cas des binômes, la conversation entre deux utilisateurs ne soulève pas ce genre de problématiques. Ce manque de communication chez les quadrinômes provoque une baisse de performances. Cependant, la motivation sociale stimule 25 les sujets en quadrinômes pour manipuler plus rapidement ce qui compense cette baisse de performances.

Cette section nous a permis de confirmer certaines conclusions présentées par ROETHLISBERGER et al. [1939] concernant la motivation sociale. En effet, ce phénomène de groupe semble s'appliquer également dans le cas d'une 30 collaboration étroite ce qui permet d'améliorer les performances des quadrinômes. Cependant, la communication au sein d'un quadrinômes est plus complexe étant donné un nombre d'interactions possibles beaucoup plus important. Ces deux phénomènes s'équilibrent pour donner des performances similaires entre les binômes et les quadrinômes. Afin d'améliorer les performances d'un quadrinôme, il faudrait faciliter ces résolutions verbales de 35 conflits de coordination.

2. Un groupe est constitué d'au moins trois sujets selon lui

5.4.2 Avantage du remue-ménages pour les quadrinômes

Données et tests statistiques

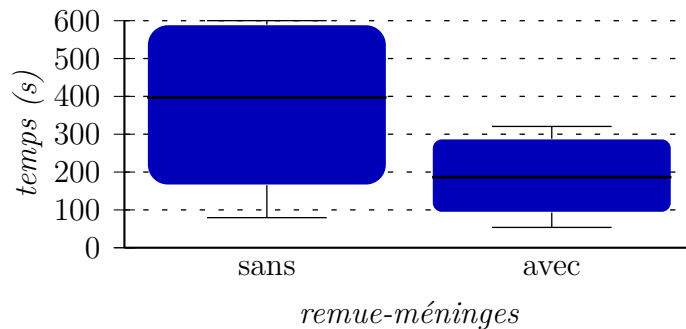


Figure 5.10 – Temps de réalisation avec ou sans remue-ménages

La figure 5.10 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}). L'analyse montre un effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 11.2$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

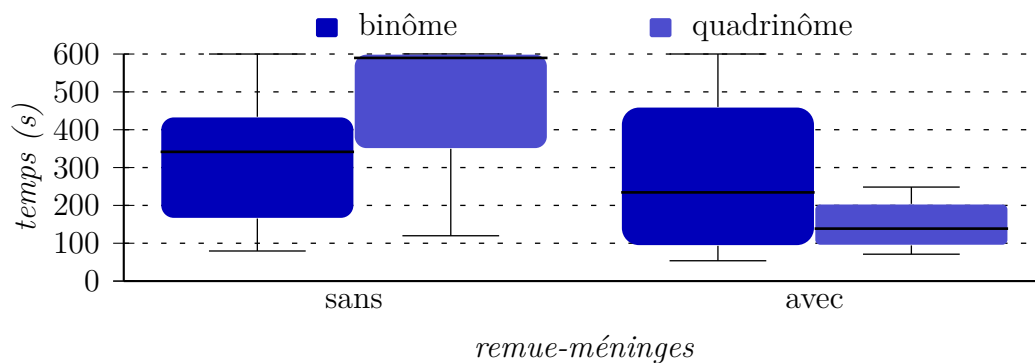


Figure 5.11 – Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages

La figure 5.11 présente le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) pour les groupes avec ou sans remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des binômes ($\chi^2 = 0.9$, $df = 1$, $p = 0.333$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur le temps de réalisation (\mathcal{V}_{d1}) des quadrinômes ($\chi^2 = 13.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

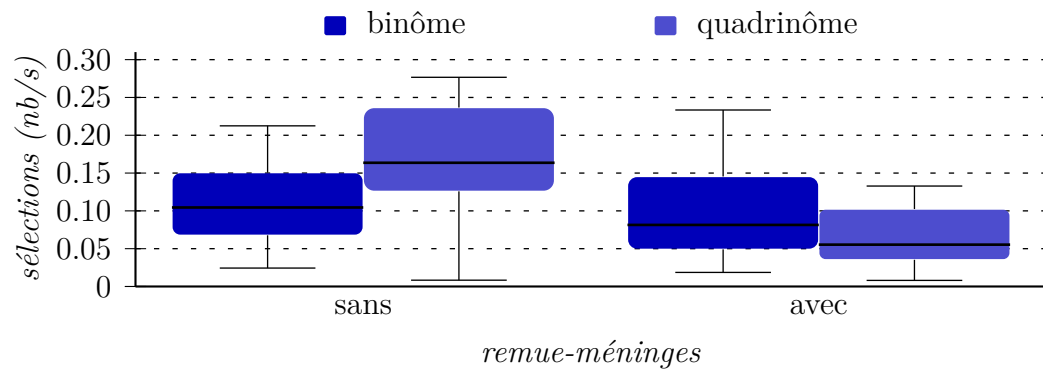


Figure 5.12 – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages

La figure 5.12 présente la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) pour les groupes avec ou sans remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) des binômes ($\chi^2 = 1.2$, $df = 1$, $p = 0.265$).
 5 Cependant, l'analyse montre un effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur la fréquence de sélection (\mathcal{V}_{d2}) des quadrinômes ($\chi^2 = 11$, $df = 1$, $p \ll 0.05$).

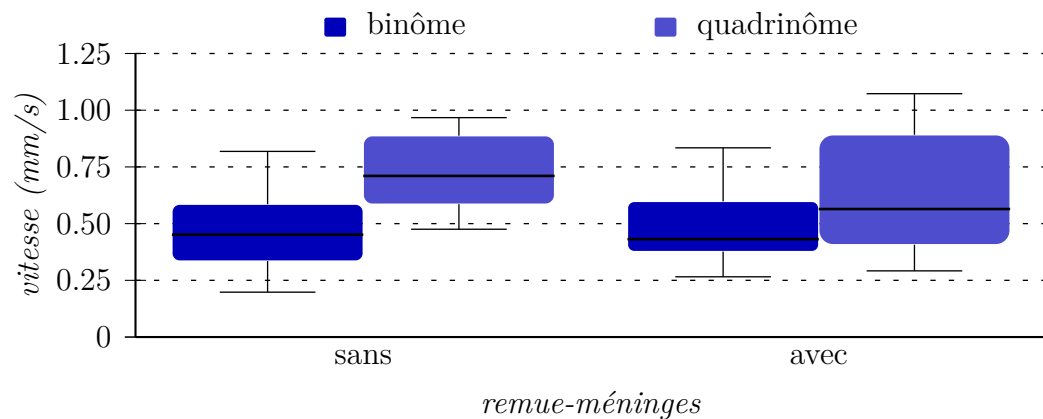


Figure 5.13 – Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages

La figure 5.13 présente la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) pour les groupes avec ou sans remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) des binômes ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.727$). De la même façon, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur la vitesse moyenne (\mathcal{V}_{d3}) des quadrinômes ($\chi^2 = 1.5$, $df = 1$, $p = 0.228$).
 10

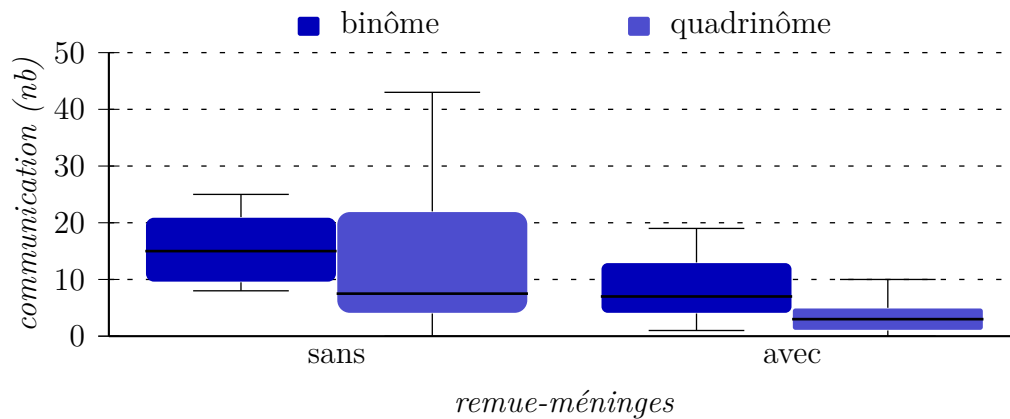


Figure 5.14 – Nombre d’ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans remue-ménages

La figure 5.14 présente le nombre d’ordres verbaux (\mathcal{V}_{d5}) pour les groupes avec ou sans remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) en fonction du nombre de sujets (\mathcal{V}_{i1}). L’analyse montre un effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur le nombre d’ordres verbaux (\mathcal{V}_{d5}) des binômes ($\chi^2 = 12.9$, $df = 1$, $p \ll 0.05$). De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du remue-ménages (\mathcal{V}_{i3}) sur le nombre d’ordres verbaux (\mathcal{V}_{d5}) des quadrinômes ($\chi^2 = 4.1$, $df = 1$, $p = 0.042$).

Analyse et discussion

La figure 5.14 nous permet de constater une baisse significative du nombre d’échanges verbaux lorsque les sujets dispose d’une période de remue-ménages. Le remue-ménages permet une réflexion préalable sur la tâche afin d’aboutir à une stratégie. Cette stratégie va organiser et diviser le travail entre les différents sujets : un rôle bien défini est donné à chaque sujet. Cette définition des rôles devrait permettre d’éviter la paresse sociale mis en évidence par RINGELMANN [1913] puis confirmé et expliqué par LATANÉ et al. [1979].

Le phénomène de paresse sociale se produit lorsque les sujets ont tendance à abandonner la réalisation de la tâche aux autres sujets lors d’une tâche collaborative. Ce phénomène a pour conséquences des pertes de productivité. Cependant, une solution pour remédier à ce problème est de fournir un rôle distinct à chaque sujet. Ainsi, chaque sujet ne peut abandonner son objectif à un autre puisqu’il est le seul à devoir le réaliser : c’est l’évaluation des autres qui va le motiver.

Cependant, la figure 5.11 page 99 et la figure 5.12 page précédente montrent

que seuls les quadrinômes bénéficient de ce remue-ménages. En effet, les binômes n'obtiennent aucune amélioration significative des performances. De même, on constate sur la figure 5.13 page 100 que la vitesse moyenne de l'effecteur terminal des binômes n'évolue pas.

- 5 Les binômes ont diminué le nombre de conflits de coordination mais n'améliorent pas les performances. La communication à deux étant relativement naturelle, la résolution des conflits de coordination s'effectue de façon optimale. La présence d'une période de remue-ménages n'améliore pas la résolution des conflits de coordination.
- 10 Cependant, la figure 5.11 page 99 et la figure 5.12 page 100 mettent en évidence l'amélioration des performances pour les quadrinômes. Nous avons vu dans la section 5.4.1 page 95 que les quadrinômes éprouvent des difficultés dans la résolution des conflits de coordination. D'après les figures observées, le remue-ménages permet l'élaboration d'une stratégie et la définition des rôles
- 15 de chacun des sujets. L'élaboration d'une stratégie réduit de façon importante le nombre de conflits de coordination durant la réalisation de la tâche et ainsi améliore les performances. De plus, une définition précise des rôles de chacun avant le début de la tâche permet de partitionner la tâche ou de l'organiser le cas échéant et ainsi d'éviter le phénomène de paresse sociale.
- 20 Dans le cas de la molécule Prion, la tâche peut aisément être divisée en quatre sous-tâches élémentaires ce qui facilite l'identification des rôles. La molécule Ubiquitin nécessite plus de coordination mais peut être divisée en deux sous-tâches élémentaires. Dans ce cas, le remue-ménages aboutit à une répartition des tâches en deux binômes. Ceci permet d'avoir des gestions de conflits de
- 25 coordination locaux et ainsi restreindre son effet au binôme concerné.

De plus, l'élaboration d'une stratégie avant le début de la tâche permet aux sujets d'être plus attentifs pendant la manipulation. En effet, les groupes n'ayant pas de période de remue-ménages ((\mathcal{C}_1) et (\mathcal{C}_3)) tentent tout de même d'élaborer une stratégie pendant la manipulation. Cependant, la ma-

30 nipulation crée une charge de travail cognitive importante. Les capacités cognitives des sujets sont en partie réservées pour la manipulation et limitent les capacités d'élaboration d'une stratégie. La réflexion alors menée ne permet pas d'aboutir au meilleur choix de stratégie.

Cependant, on constate sur la figure 5.13 page 100 qu'il n'y a pas d'évolution

35 de la vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour les quadrinômes. Les quadrinômes sont déjà stimulés par le phénomène de motivation sociale décrit dans la section 5.4.1 page 95. Le remue-ménages ne leur permet d'effectuer les gestes plus rapidement mais ils utilisent maintenant cette vitesse avec des stratégies optimisées.

Cette section nous a permis de tester et de confirmer l'intérêt d'une période de remue-ménages pour structurer les groupes : cette période est bénéfique pour les quadrinômes. Elle permet d'éviter les problèmes de paresse sociale évoqués par LATANÉ et al. [1979]. La période de remue-ménages permet
 5 de faire émerger rapidement les rôles de meneur et suiveur. C'est le meneur qui va répartir les différents rôles dans la réalisation de la tâche. La section suivante va définir ce rôle de meneur.

5.4.3 Définition d'un meneur

Cette section va définir les caractéristiques d'un meneur. Nous utiliserons les
 10 données d'un groupe représentatif pour alimenter notre propos. Cependant, étant donné le peu de données d'un seul groupe, aucune analyse de la variance ne sera présentée.

Données et statistiques

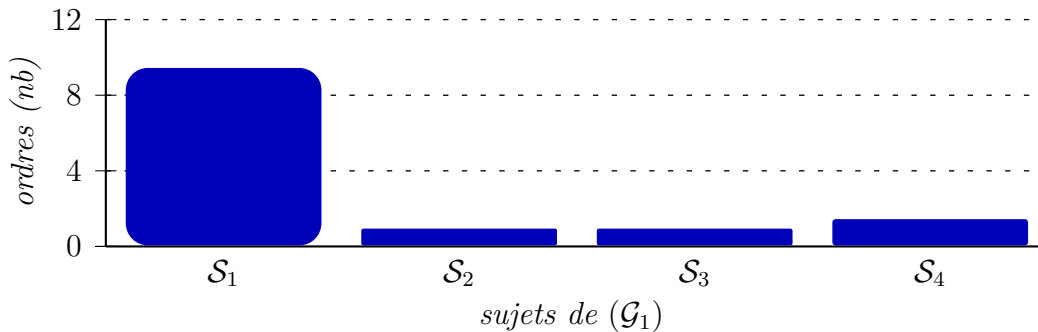


Figure 5.15 – Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de (\mathcal{G}_1)

La figure 5.15 présente le nombre d'ordres donnés (\mathcal{V}_{d5}) en fonction des sujets
 15 du groupe (\mathcal{G}_1) . On observe que le sujet S_1 donne beaucoup plus d'ordres que la moyenne (65.8% de plus que la moyenne).

La figure 5.16 page suivante présente la vitesse moyenne des effecteurs terminaux (\mathcal{V}_{d3}) en fonction des sujets du groupe (\mathcal{G}_1) . On observe que le sujet S_1 donne plus d'ordres que la moyenne (16.2% de plus que la moyenne).

20 La figure 5.17 page 105 présente les profils de force (\mathcal{V}_{d4}) des sujets S_1 et S_2 du groupe (\mathcal{G}_1) . Chaque période où la force est maintenue représente une sélection (voir figure 5.17b page 105). On constate un profil très chaotique pour le sujet S_1 avec un grand nombre de sélections (11 sélections). Par

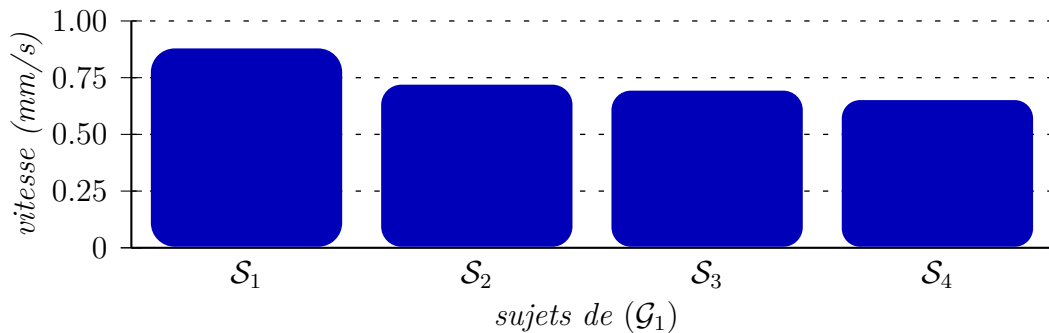


Figure 5.16 – Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de (\mathcal{G}_1)

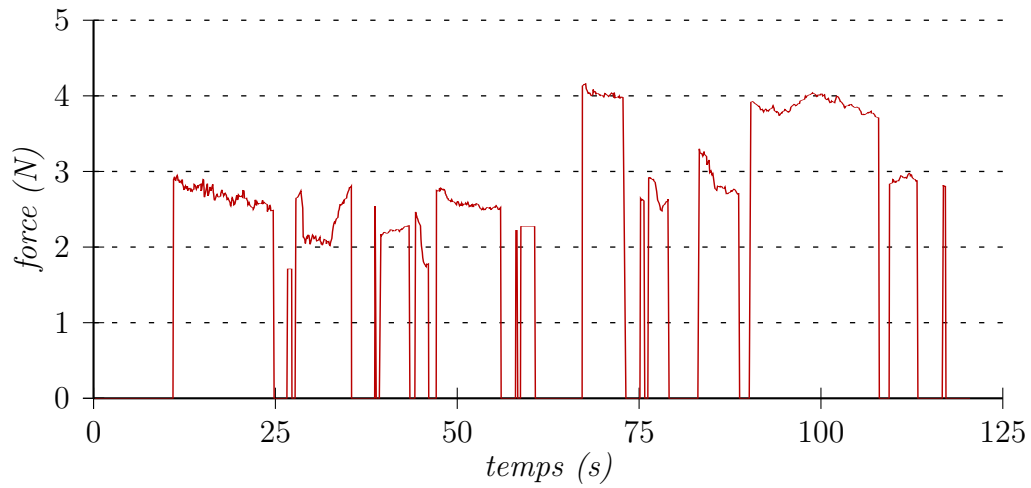
opposition, le profil du sujet \mathcal{S}_2 est très peu chaotique avec un petit nombre de sélections (4 sélections > 10 s). De plus, les efforts maximaux produits par le sujet \mathcal{S}_2 sont plus importants que ceux du \mathcal{S}_1 (5 N pour \mathcal{S}_2 contre 4 N pour \mathcal{S}_1).

5 Analyse et discussion

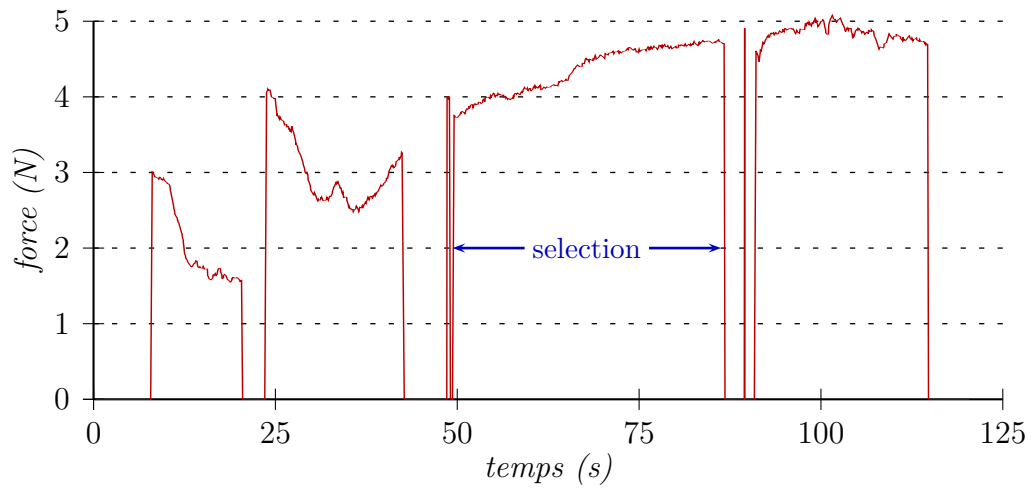
Le meneur est celui qui va diriger les opérations. Cependant, les groupes de notre expérimentation ne sont pas des groupes hiérarchisés : aucune hiérarchie n'a été imposée, contrairement à l'organisation d'une entreprise par exemple. En effet, nos groupes sont des structures informelles dans lesquelles aucun rôle n'est prédéfini. Le meneur est donc un rôle qui émerge du groupe de manière naturelle : il est choisi et accepté par les autres sujets. Cette hiérarchie acceptée permet une meilleure collaboration des sujets entraînant une motivation sociale très productive.

La figure 5.16 et la figure 5.17a page suivante nous permet de déterminer la stratégie de travail du meneur. En effet, on constate un grand nombre de sélections ainsi qu'une vitesse élevée. Le meneur explore l'environnement pour prendre des décisions. Il a besoin d'explorer à de nombreux endroits et rapidement mais n'effectue pas forcément de déformation. Il proposera à un autre sujet d'effectuer à sa place, les déformations qu'il aura jugé nécessaire.

Par opposition, les suiveurs n'explorent pas l'environnement. En effet, la figure 5.17b page ci-contre nous montre un nombre de sélections peu élevées mais des sélections tenues sur une longue période de temps. Le suiveur accepte un ordre du meneur et effectue la déformation jusqu'à atteindre l'objectif fixé. La déformation demande de la précision dans le mouvement ce qui explique une vitesse moyenne moins élevée de l'effecteur terminal. De plus,



(a) Profil de force de S_1



(b) Profil de force de S_2

Figure 5.17 – Profil de force du groupe (\mathcal{G}_1) sur la molécule Prion

étant donné que les *suiveurs* porte toute leur attention sur la déformation, l'effort déployé est plus important. Le *meneur* étant plutôt à la recherche de tâches à effectuer mais n'effectuant pas totalement les déformations, il ne déploie pas autant d'effort.

- 5 Pour conclure cette section, le *meneur* a un rôle crucial dans la dynamique du groupe. C'est lui qui va définir et répartir les tâches : il élabore la stratégie du groupe. Cette répartition permet à chaque sujet de se faire attribuer une tâche bien identifiée. L'identification des rôles est nécessaire pour obtenir de bonnes performances et éviter le phénomène de *paresse sociale* (voir section 5.4.2
- 10 page 99). Cependant, le *meneur* doit pouvoir se faire accepter des autres membres du groupes pour garder une bonne cohésion.

5.5 Synthèse

5.5.1 Résumé des résultats

Cette troisième expérimentation a mis en opposition des *binômes* en configuration

15 bimanuelle avec des *quadrinômes* en configuration monomanuelle. L'objectif était d'observer les avantages et les inconvénients du travail en groupe de plus de deux personnes. Les performances d'un *quadrinôme* ont été comparées aux performances d'un *binôme*.

Une première analyse nous a montré qu'il n'y avait aucun avantage à aug-

20 menter le nombre d'utilisateurs pour augmenter les performances du groupe. En effet, nous avons vu que les *quadrinômes*, bien que plus rapides dans leurs mouvements grâce au phénomène de *motivation sociale*, obtiennent des performances identiques aux *binômes*. Les *conflits de coordination* étant plus nombreux dans un *quadrinôme*, les utilisateurs utilisent plus de temps dans

25 la résolution de ces conflits.

Cependant, une analyse basée sur la présence ou non d'une période de *remue-ménages* nous a permis d'approfondir cette conclusion. Ce *remue-ménages* permet une organisation préalable du groupe afin de produire de meilleures performances en réduisant le nombre de *conflits de coordination*. Ce sont sur-

30 tout les *quadrinômes* qui bénéficient de cette réflexion. En effet, les *quadrinômes* perdent plus de temps que les *binômes* dans la résolution des conflits : c'est donc eux qui gagnent le plus de temps à en réduire le nombre.

De plus, ce *remue-ménages* permet de faire émerger les rôles rapidement au sein de cette *structure informelle*. L'émergence d'un *meneur* est nécessaire

35 pour organiser le groupe, diviser le travail et répartir les tâches. D'un autre

côté, les `suiveurs` acceptent la présence de ce `meneur` et l'assistent dans la réalisation de la tâche. Le `meneur` va se distinguer par une exploration plus large et plus rapide de l'environnement afin d'avoir une vision globale de la tâche à réaliser. Les `suiveurs` effectuent plutôt des déformations longues et

5 locales.

Cette expérimentation montre que l'augmentation du nombre d'utilisateurs est bénéfique sous réserve d'une certaine organisation. Une période de remue-ménages préalable à la réalisation de la tâche permet de structurer un groupe. De plus, cette structure est obtenue avec l'accord de tous les participants ce qui rend légitime le `meneur`. Dans le cas contraire, les `suiveurs` pourraient ne pas vouloir suivre les indications du `meneur` ce qui serait contre-productif.

5.5.2 Perspectives

Nous venons de montrer l'intérêt d'avoir un groupe structuré lorsque le

15 nombre de participants excède deux. Notre prochaine et dernière expérimentation aura pour objectif de tester la plate-forme avec des experts de la déformation moléculaire. Pour cela, nous allons leur fournir des outils haptiques permettant de faciliter le travail collaboratif.

Pour commencer, nous avons mis en avant la nécessité de faire émerger rapidement le `meneur` et les `suiveurs`. Ceci permet de coordonner le groupe derrière un seul utilisateur et éviter les conflits de coordination.

Cependant, la manière de travailler du `meneur` est très différente de celle d'un `suiveur`. Des outils haptiques adaptés aux besoins de chacun seront donc proposés afin d'améliorer leurs possibilités d'interactions. En l'occurrence, le

25 `meneur` n'effectue pas réellement de déformation, il semble donc peu nécessaire de lui donner la possibilité de le faire. Ainsi, on le libère d'une partie de sa charge cognitive pour le focaliser sur son rôle de `meneur`.

En ce qui concerne le `suiveur`, il est affecté à la déformation. Il est particulièrement occupé à effectuer des déformations de façon locale. Il faut donc lui

30 laisser la possibilité d'effectuer des déformations locales et précises. Cependant, il faut également lui faciliter la communication avec le `meneur` et lui rendant accessible les consignes rapidement. Le `meneur` ayant une vision plus globale de la tâche à réaliser, il peut être justifié de donner ponctuellement des outils de déformation plus grossier.

35 La majorité de ces outils seront implémentés dans la dernière version de la plate-forme afin d'effectuer une expérimentation avec des experts de la déformation moléculaire. Ces outils seront évalués à la fois en terme d'amélioration

sur les performances mais également en terme d'utilisabilité. Le chapitre 6 page 111 décrit ces nouveaux outils et l'ensemble de l'expérimentation.

Bibliographie

[CHAN et al. 2008]

- CHAN, Andrew, Karon MACLEAN et Joanna MCGRENERE (mai 2008).
« Designing haptic icons to support collaborative turn-taking ». Anglais.
5 Dans *International Journal Human-Computer Studies* 66, pages 333–355
(cf. page 89).

[LATANÉ et al. 1979]

- LATANÉ, Bibb, Kipling WILLIAMS et Stephen HARKINS (juin 1979).
« Many hands make light the work : the causes and consequences of social
10 loafing ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology*
37.6, pages 822–832. DOI : [10.1037/0022-3514.37.6.822](https://doi.org/10.1037/0022-3514.37.6.822). URL :
<http://content.apa.org/journals/psp/37/6/822> (cf. pages 101,
103).

[MUGNY et al. 1995]

- 15 MUGNY, Gabriel, Jean-Léon BEAUVOIS et Dominique OBERLÉ (1995).
Relations humaines, groupes et influence sociale. La psychologie sociale.
Presses universitaires de Grenoble (cf. page 88).

[RINGELMANN 1913]

- RINGELMANN, Maximilien (1913). « Recherches sur les moteurs animés :
20 Travail de l'homme ». Dans *Annales de l'Institut National Argonomique*.
Sous la direction de Jean-Baptiste BAILLIÈRE. Tome 12. 2. Librairie
Agricole De La Maison Rustique, pages 1–40 (cf. page 101).

[ROETHLISBERGER et al. 1939]

- 25 ROETHLISBERGER, Fritz J., William J. DICKSON et Harold A. WRIGHT
(nov. 1939). *Management and the worker*. Anglais. Cambridge, Mass :
Harvard University Press (cf. pages 88, 98).

Bibliographie

Chapitre 6

Travail collaboratif assisté par haptique

Sommaire

5	6.1 Introduction	111
	6.2 Contexte	112
	6.3 Expérimentation avec assistance haptique	112
	6.3.1 Tâche	112
10	6.3.2 Spécificités du protocole expérimental	115
	Bibliographie	121

6.1 Introduction

Cette dernière expérimentation aura pour objectif d'introduire et de valider des outils de communication haptique dans le cadre d'une tâche d'amarrage moléculaire. Sur la base des précédentes expérimentations, des outils haptiques censés améliorer les interactions et les communications entre les manipulateurs sont proposés. L'expérimentation testera l'intérêt et l'apport de ces outils sur la collaboration de groupe.

Le principal facteur observé sera les performances du groupe. Les performances regardées seront le temps mis pour achever la tâche mais également la qualité de la solution trouvée. En effet, la qualité de la solution est une variable non-négligeable dans le cadre d'une tâche d'amarrage moléculaire.

Le second facteur concernera l'évaluation qualitative du système par les utilisateurs. Il est primordial de recueillir l'avis des utilisateurs en ce qui concerne

une plate-forme de travail. Des outils haptiques inconfortables, des détails visuels incohérents, des interactions peu intuitives sont autant de paramètres qui peuvent rendre un système inefficace.

6.2 Contexte

5 6.3 Expérimentation avec assistance haptique

6.3.1 Tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules et de complexes de molécules dans un EVC. L'objectif est de la rendre le plus conforme possible au modèle. Cinq molécules sont utilisés dans le cadre de cette expérimentation
10 dont trois exclusivement réservées pour l'entraînement :

TRP-CAGE La molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] a pour identifiant PDB **1L2Y** sur la *Protein DataBase*¹. Cette molécule contient 304 atomes dont 20 résidus.

15 **Prion** La molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB **2KFL** sur la *Protein DataBase*¹. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus.

Ubiquitin La molécule nommée Ubiquitin [VIJAY-KUMAR et al. 1987] avec l'identifiant PDB **1UBQ** sur la *Protein DataBase*¹. Cette molécule contient 1 231 atomes dont 76 résidus.

20 **TRP-ZIPPER** La molécule TRP-ZIPPER [COCHRAN et al. 2001] a pour identifiant PDB **1LE1** sur la *Protein DataBase*¹. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus.

25 **NUSE:NUSG** Le complexe de molécules NUSE:NUSG [BURMANN et al. 2010] a pour identifiant PDB **2KVQ** sur la *Protein DataBase*¹. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1 294 atomes pour 80 résidus et 929 atomes pour 59 résidus.

30 La tâche est proposée à des groupes de trois sujets : les trinômes. Dans ces trinômes, un « coordinateur » et deux « opérateurs » ont à leur disposition différents outils. Ils ont la possibilité de communiquer sans restriction de façon orale, gestuelle ou même virtuelle.

1. <http://www.pdb.org/>

Description des outils

Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation par molécule que nous nommerons outil de manipulation ²

Outil de désignation Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur désigne une cible. Le coordinateur est renseigné sur l'acceptation de cette désignation par l'arrêt de cette vibration. De plus, tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

Outil de déformation Un outil de déformation au niveau atomique est fourni aux deux opérateurs présents lors de l'expérimentation. Nous souhaitons donné la possibilité au coordinateur d'indiqué rapidement qu'une désignation a été effectuée. Lorsque le coordinateur désigne une cible, tous les outils des opérateurs sont soumis à une vibration. Il est à noter que si les opérateurs sont en train de déformer la molécule, ils ne ressentent pas la vibration mais dès qu'ils relâchent leur sélection, leur outil leur indique qu'une désignation est en cours. Les opérateurs ont la possibilité d'accepter ou non la désignation. À l'instant où un des deux opérateur accepte la désignation, les vibrations s'arrêtent. L'opérateur qui a accepté la désignation est attiré vers la cible à déformer. De plus, il se voit offrir le pouvoir de déformer non plus au niveau atomique mais au niveau résiduel ce qui lui donne une capacité étendue. L'objectif de cette étendue des capacités est de stimuler l'envie d'interagir avec le coordinateur.

Outil de manipulation Un dernier outil, détenu par le coordinateur, permet la manipulation de la molécule (outil de déformation au niveau moléculaire). Cet outil va permettre au coordinateur de déplacer la molécule comme un bloc pour la rapprocher de sa cible finale. Afin d'aider le coordinateur

2. L'outil de déformation par molécule applique une force à l'ensemble des atomes de la molécule et produit ainsi un déplacement complet de la molécule ; cette opération s'apparente plus à une manipulation qu'à une déformation.

dans cette tâche, nous avons souhaiter prendre en compte les actions des opérateurs pour assister la manipulation de la molécule. Ainsi, lorsque les opérateurs effectuent une déformation, une infime partie de l'effort déployé est reporté sur l'ensemble de la molécule afin de la déplacer dans cette même intention. Les efforts reportés sont relativement faibles pour ne pas perturber la manipulation du coordinateur mais devrait sensiblement modifier le déplacement la molécule vers une position optimale.

Parmi les outils présentés précédemment, les interfaces haptiques sont répartis de la façon suivante :

- 1 PHANTOM Omni® est l'outil de désignation destiné au coordinateur ;
 - 2 PHANTOM Omni® sont les outils de déformation destinés aux opérateurs ;
 - 1 PHANTOM Desktop® est l'outil de manipulation destiné au coordinateur.
- Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. La souris est donc le troisième périphérique destiné au coordinateur. Ce choix est désiré afin de limiter au maximum les manipulations à la souris. En effet, la manipulation à la souris perturbe complètement l'environnement virtuel et modifie la position des curseurs par rapport à la molécule. Il est donc inutile de déformer la molécule lorsque l'orientation de la scène est modifié. Cependant, bien que dans la plupart des cas, les sujets n'éprouvent pas le besoin de modifier l'orientation de la scène, certains groupes en ont fait la demande explicite. En plaçant la souris comme troisième outil, l'objectif est qu'elle soit utilisée seulement lorsque c'est réellement nécessaire.

Description de la tâche

Le visuel est identique à la tâche présentée pour la troisième expérimentation (voir section 5.3.2 page 92). En effet, la molécule est représentée en CPK et *NewRibbon*. La molécule cible est représentée en *NewRibbon* transparent.

Scénario 1 La première tâche à réaliser est la déformation de la molécule Ubiquitin. La déformation proposée est identique à la déformation proposée dans la troisième expérimentation. En effet, cette tâche s'est révélée très intéressante pour stimuler une collaboration étroite durant la précédente expérimentation. Dans cette tâche, seuls les outils de désignation et de déformation sont proposés ; la molécule Ubiquitin possède des atomes fixes afin de ne pas dériver.

Scénario 2 La seconde tâche consiste à reconstituer le complexe de molécules NUSE:NUSG. En effet, la molécule NUSG est laissé complètement libre et doit être amarrer à la molécule NUSE : c'est une tâche d'amarage moléculaire simplifié. On distingue deux phases dans cette tâche ;

il faut approcher la molécule NUSG puis il faut affiner l'amarrage par une déformation interne de NUSG. Tous les outils (désignation, déformation et manipulation) sont proposés dans ce scénario ; la molécule NUSG est attaché à l'outil de manipulation et l'ensembl des atomes de la chaîne carbonée principale de la molécule NUSE sont fixes afin d'éviter que la molécule ne dérive.

Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisés pour l'entraînement des outils de désignation et de déformation. Pour ce propos, la tâche proposée dans la seconde expérimentation pour TRP-CAGE et la tâche proposée dans la troisième expérimentation pour Prion sont reprises.

La molécule TRP-ZIPPER est utilisée pour l'entraînement de l'outil de manipulation. Pour ce propos, la molécule TRP-ZIPPER a été rendue complètement libre (aucun atome n'est fixé) et elle est attaché à l'outil de manipulation.

Afin de réaliser la tâche, différentes mesures sont disponibles en temps-réel pour les sujets. La première de ces mesures est le score `RMSD` qui est décrit dans la section 4.3.1 page 56. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par `NAMD` et représentant une synthèse des énergies électriques et des énergies de `VAN DER WAALS`.

6.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Les sections suivantes décrivent l'ensemble des modification apportées à la plate-forme de base (voir chapitre A page 133) et principalement aux outils. La méthode expérimentale est exposée dans la section B.4 page 149. Un résumé de cette méthode se trouve dans la table 6.1 page 120.

Matériel

Dans cet quatrième et dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils destinés à améliorer les interactions entre les membres d'un trinôme. Deux sujets auront toujours à leur disposition deux outils de déformation adaptés pour le processus de désignation (voir section 6.3.2 page 117). Le troisième sujet aura à sa disposition trois outils dont deux basés sur une interface haptique. Les deux interfaces haptiques utilisées sont un `PHANTOM Omni®` et un `PHANTOM Desktop®`, tous deux associés à une machine de faible puissance pour le serveur `VRPN`. De plus, ce troisième sujet aura accès à un outil de manipulation. En effet, bien que les outils d'orientation soient générateurs de conflits de coordination, il s'est avéré au cours de la troisième expérimentation que certaines situations requièrent un tel outil. Durant la

première expérimentation, une interface haptique avait été utilisé mais n'était pas vraiment adaptée pour cette fonctionnalité. Au cours de la seconde expérimentation, c'est une souris 3D qui a remplacé l'interface haptique. Bien que cet outil soit très adapté pour cette fonctionnalité, il est relativement
5 complexe à prendre en main et nécessite un apprentissage. Cet apprentissage n'est pas acceptable durant un processus expérimental d'environ une heure. C'est donc une simple souris USB qui a été choisi comme outil de manipulation : il est un peu moins adapté pour l'orientation d'une molécule qu'une
10 souris 3D mais est nettement plus intuitif pour la plupart des sujets qui sont habitués à manipuler ce type de périphérique.

De la même manière que dans la troisième expérimentation, une caméra vidéo SONY® (HDR-CX550) a été installée derrière les sujets afin de filmer à la fois les sujets et l'écran de vidéoprojection. Le son est également capté par la caméra. Là encore, les vidéos sont exportées et séquencées *a fortiori* à l'aide
15 du logiciel iMOVIE.

La figure 6.1 illustre le dispositif expérimental par un schéma. La figure 6.2 est une photographie de la salle d'expérimentation.

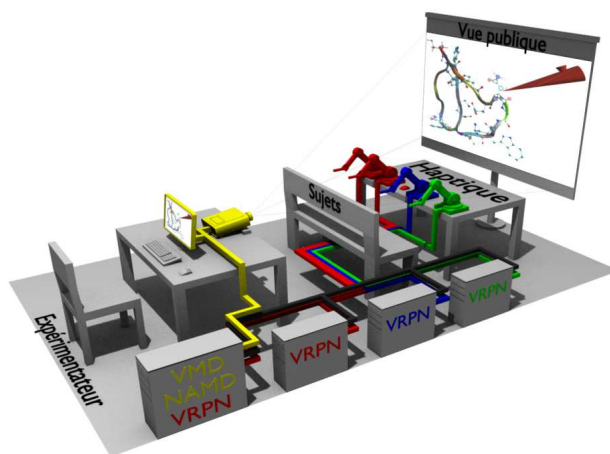


Figure 6.1 – Schéma du dispositif expérimental

Images à compléter
Il va falloir faire des
photos du dispositif ex-
périmental

Figure 6.2 – Photographie du dispositif expérimental

Visualisation

Dans cette quatrième et dernière expérimentation, les molécules étant très importantes, surtout pour le complexe de molécules NUSE:NUSG, nous avons décidé de donner un rendu secondaire aux atomes. En effet, ils sont à présents
5 rendus de manière transparente. Cependant, nous verrons dans la section suivante que le coordinateur aura la possibilité de colorer les résidus au besoin. Pour le reste, le rendu visuel est similaire à celui des expérimentations trois et quatre. La figure 6.3 représente la molécule Ubiquitin et la figure 6.4 page suivante représente le complexe de molécules NUSE:NUSG.

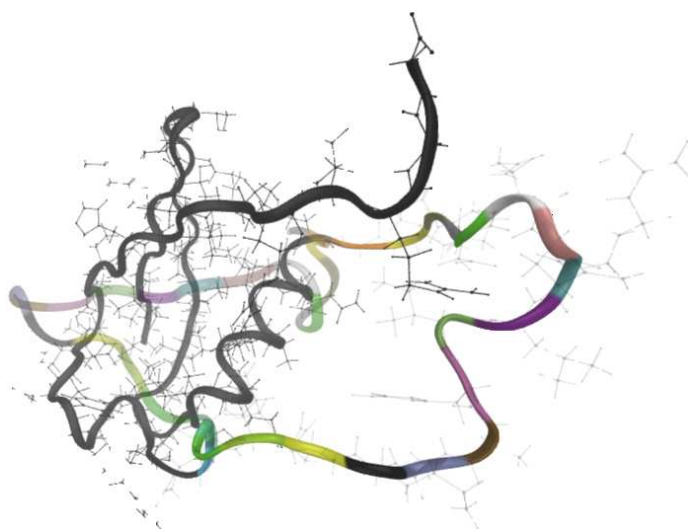


Figure 6.3 – Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1

10 Outils de manipulation

Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation
15 tion par molécule que nous nommerons outil de manipulation³. Ces outils sont décrits dans la section 2.4.2 page 17.

3. L'outil de déformation par molécule applique une force à l'ensemble des atomes de la molécule et produit ainsi un déplacement de la molécule en bloc ; cette opération s'apparente plus à une translation de la molécule qu'à une déformation.

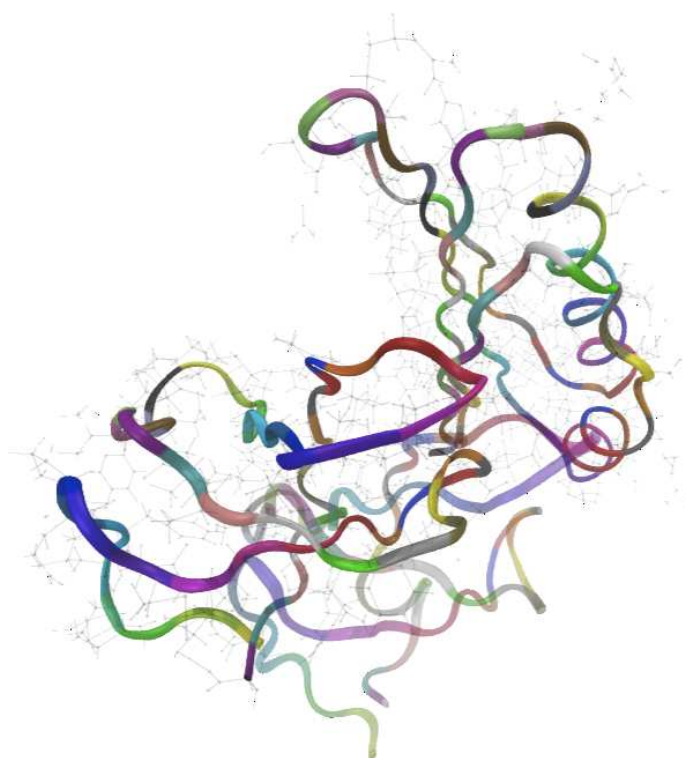


Figure 6.4 – Représentation de la molécule NusE:NusG pour le scénario 2

Outil de désignation Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur désigne une cible. Le coordinateur est renseigné sur l'acceptation de cette désignation par l'arrêt de cette vibration. De plus, tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

Outil de déformation Un outil de déformation au niveau atomique est fourni aux deux opérateurs présents lors de l'expérimentation. Nous souhaitons donner la possibilité au coordinateur d'indiquer rapidement qu'une désignation a été effectuée. Lorsque le coordinateur désigne une cible, tous les outils des opérateurs sont soumis à une vibration. Il est à noter que si les opérateurs sont en train de déformer la molécule, ils ne ressentent pas la vibration mais dès qu'ils relâchent leur sélection, la vibration leur indique qu'une désignation est en cours. Les opérateurs ont la possibilité d'accepter ou non la désignation. À l'instant où un des deux opérateur accepte la désignation, les vibrations s'arrêtent pour tous les opérateurs. L'opérateur qui a accepté la désignation est alors attiré vers la cible à déformer. De plus, il se voit offrir le pouvoir de déformer non plus au niveau atomique mais au niveau résiduel ce qui lui donne une capacité étendue. L'objectif de cette augmentation des capacités est de stimuler l'envie d'interagir avec le coordinateur.

Outil de manipulation Un dernier outil, détenu par le coordinateur, permet le déplacement de la molécule (outil de déformation au niveau moléculaire). Cet outil va permettre au coordinateur de déplacer la molécule comme un bloc pour la rapprocher de sa cible finale. Afin d'aider le coordinateur dans cette tâche, nous avons souhaiter prendre en compte les actions des opérateurs pour assister le déplacement de la molécule. Ainsi, lorsque les opérateurs effectuent une déformation, une infime partie de l'effort déployé est reporté sur l'ensemble de la molécule afin de la déplacer avec cette même intention. Les efforts reportés sont relativement faibles pour ne pas perturber la manipulation du coordinateur mais modifient sensiblement le déplacement de la molécule.

Outil d'orientation Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. La souris est donc le troisième

périphérique destiné au coordinateur. Le choix de surcharger le coordinateur est délibéré afin de limiter au maximum les manipulations à la souris. En effet, la modification de l'orientation de la molécule ne modifie pas la position des curseurs qui se trouvent dans un référentiel différent. En d'autres termes, la rotation de la molécule va perturber les opérateurs qui sont en train d'effectuer des déformations en modifiant la position des atomes. En mettant à disposition la souris comme troisième outil pour le coordinateur, l'objectif est qu'elle soit peu utilisée, seulement lorsque c'est réellement nécessaire.

Table 6.1 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation d'une molécule ou d'un complexe de molécule		
Hypothèses	(\mathcal{H}_1) Performances améliorées par l'assistance haptique (\mathcal{H}_2) L'assistance haptique améliore la communication (\mathcal{H}_3) La plate-forme est appréciée des experts		
Variable indépendante	(\mathcal{V}_{i1}) Présence de l'assistance (\mathcal{V}_{i2}) Molécules à déformer		
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Score de ressemblance minimum (\mathcal{V}_{d2}) Temps du score RMSD (\mathcal{V}_{d3}) Nombre de sélections (\mathcal{V}_{d4}) Communication verbales et gestuelles (\mathcal{V}_{d5}) Test d'utilisabilité de la plate-forme		
Condition (\mathcal{C}_1)	Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)	Condition (\mathcal{C}_4)
Sans assistance	Avec assistance	Sans assistance	Avec assistance
Ubiquitin	Ubiquitin	NuSE:NuSG	NuSE:NuSG

Bibliographie

[BURMANN et al. 2010]

BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010).
5 « A NUSE complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 112).

[CHRISTEN et al. 2009]

CHRISTEN, Barbara, Simone HORNEMANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar
10 wallaby (*macropus eugenii*) shows that the β 2- α 2 loop is modulated by long-range sequence effects ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 112).

[COCHRAN et al. 2001]

COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVAS-
15 NIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric β -hairpins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. page 112).

[NEIDIGH et al. 2002]

NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN
20 (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 112).

[VIJAY-KUMAR et al. 1987]

VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987).
25 « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. page 112).

Bibliographie

Chapitre 7

Conclusion et perspectives

Glossaire

amarrage moléculaire

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe stable. iii, 1, 109, 112, 123

bimanuel

Qui se fait avec les deux mains. 55, 60, 64, 68, 69, 73, 74, 77–79, 81, 89, 91, 95, 104, 139

binôme

Groupe constitué de 2 personnes. iv, vi–viii, 25–27, 34, 36, 38–40, 42–46, 48, 53, 55, 60, 64, 67–71, 73–81, 85, 86, 89, 91, 93–100, 104, 135–143, 145, 151, 157, 158

conflit de coordination

Conflit entre deux sujets qui peut survenir lorsque les deux sujets tente d'accéder ou de déformer un objet au même instant. 43–46, 49, 86, 89, 91, 96, 100, 104, 105, 113

curseur

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 123

docking moléculaire

Voir amarrage moléculaire. 1

effecteur terminal

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. viii, ix, 64, 68, 69, 71, 76, 96, 99–102, 137, 141, 144, 147

homoscedasticité

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 34, 64

meneur

En anglais *leader*, personne qui dirige un groupe afin d'atteindre des

objectifs communs à ce groupe ; c'est celui qui prend les décisions (voir aussi suiveur). v, 47, 79, 85, 87, 101, 102, 104, 105, 124, 158

monomanuel

Qui se fait avec une main. 55, 69, 79, 91, 95, 104

5 **monôme**

Groupe constitué d'une unique personne. vi, vii, 27, 34, 36, 38, 47, 48, 53, 55, 60, 64, 67–71, 73–81, 86, 135, 136, 138–141, 151, 157, 158

motivation sociale

10 En anglais *social facilitation* [TRIPLETT 1900], phénomène de groupe où les personnes fournissent plus d'efforts grâce à la présence de partenaires. 86, 96, 100, 102, 104

paresse sociale

15 En anglais *social loafing* [RINGELMANN 1913], phénomène de groupe où les personnes fournissent moins d'effort pour la réalisation d'une tâche que s'ils effectuaient la tâche seuls. 47, 79, 99–101, 104

quadrinôme

Groupe constitué de 4 personnes. v, 85, 86, 89, 91, 93–101, 104, 142, 143, 145

résidu

20 Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. vii, viii, x, xi, 2, 14, 17–20, 27, 29, 32, 34, 36–39, 43–45, 49, 50, 53, 54, 56, 58, 59, 62, 64, 73, 78, 88, 90, 91, 110, 114, 130, 137–139, 141

structure informelle

Groupe de personnes sans structures ni hiérarchie. 87, 102, 104

25 **suiveur**

En anglais *follower*, personne qui se laisse diriger dans un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est une personne qui ne prend pas de décision (voir aussi meneur). 47, 87, 96, 101, 102, 104, 105, 123

30 **trinôme**

Groupe constitué de 3 personnes. 110, 113

variable dépendante

35 Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 124

variable indépendante

Facteur pouvant varier et être manipuler sur une expérimentation (nombre de participants, tâche, *etc.*) ; ces variables vont avoir une incidence sur les variables dépendantes. 136, 137, 140, 141, 143, 144, 146

variable inter-sujets

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 64, 140, 144

variable intra-sujets

⁵ Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 34, 64, 136, 137, 140, 141, 143, 146

Acronymes

API

API vient de l'anglais *Application Programming Interface* et désigne une interface avec un programme informatique. 8

5 CAO

La CAO permet de concevoir et de tester virtuellement, à l'aide d'outils informatique, des produits manufacturés. 55

CUDA

10 Technologie permettant d'utiliser l'unité graphique d'un ordinateur pour effectuer des calculs à hautes performances. 6

DDL

Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre. vii, 6, 8, 16, 62

EVC

15 Ensemble logiciel et matériel permettant de faire interagir plusieurs utilisateurs au sein d'un même environnement ; ils jouent un rôle important dans le développement de nouvelles méthodes de travail collaboratives. 10, 27, 50, 55, 56, 88, 110, 129

IBPC

20 Institut de recherche, géré par la fédération de recherche FRC 550, étudiant les bases structurales, génétiques et physico-chimiques à leur différents niveaux d'intégration. 16

IMD

25 Programme permettant de connecter le logiciel de visualisation moléculaire VMD avec le logiciel de simulation NAMD pour une simulation interactive en temps-réel [STADLER et al. 1997]. 6, 16, 125

ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel IMD. 16

CNRS–LIMSI

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 136, 140, 143

NAMD

5 Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS et al. 2005]. 6, 15, 16, 18, 113, 125, 129

RMSD

10 Appelé Écart Quadratique Moyen en français, il permet – dans le cadre de la biologie moléculaire – de mesurer la différence entre deux déformations d’une même molécule. 56, 88, 113, 117, 142, 145–148

SUS

Échelle de notation entre 0 et 100 proposée par BROOKE [1996] permettant d’évaluer l’utilisabilité d’un système. vi, 147, 159, 160

UML

15 C’est un langage graphique de modélisation utilisé principalement en génie logiciel. vii, 6

VMD

Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY et al. 1996]. vii, 6, 12–18, 34, 125, 129, 131

20 **VRPN**

Logiciel permettant de connecter différents périphériques de réalité virtuelle à une même application sous forme d’une architecture client/serveur [TAYLOR II et al. 2001]. 6, 11, 12, 16, 32, 89, 113, 129

Annexes

Annexe A

Dispositif expérimental

A.1 Matériel expérimental

Les expérimentations se basent sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 5.

5 Dans cette section, nous allons présenter le matériel utilisé et sa disposition.

Tout d'abord, voici le matériel de base utilisé pour les différentes expérimentations :

- 2 ordinateur quatre cœurs Intel® Core™ 2 Q9450 (2.66 GHz) avec 4 Go de RAM ;
- 10 – 2 interfaces haptiques PHANTOM Omni® ;
- 1 vidéoprojecteur ACER (P5 series)¹ ;
- 1 grand écran de vidéoprojection.

Un premier ordinateur \mathcal{A} est celui d'où l'expérimentateur va commander l'ensemble de l'expérimentation. Cet ordinateur est destiné à l'application cliente VMD : c'est donc cette machine qui s'occupe du calcul pour les rendus
15 visuels. La seconde machine \mathcal{B} est dédiée au moteur de simulation NAMD : elle communique avec la machine \mathcal{A} par une connexion TCP/IP.

L'affichage de l'environnement virtuel est assuré par un vidéoprojecteur connecté à l'ordinateur \mathcal{A} . Le vidéo projecteur est placé derrière les sujets et projette
20 la scène virtuelle sur un grand écran de 2.2 m par 2 m. L'écran est placé face aux sujets et tous les sujets perçoivent la même scène virtuelle. Afin que la communication entre les sujets soit optimales, aucune contrainte de communication ne leur est donnée et ils sont libres d'utiliser tous les moyens de communication possibles (verbaux, gestuels, virtuel*etc.*).

1. Durant la première expérimentation, c'est un vidéoprojecteur CASIO XJ qui a été utilisé.

Les ordinateurs \mathcal{A} et \mathcal{B} sont également utilisés en tant que serveur VRPN. Un PHANTOM Omni® est connecté sur chacune des deux machines. Ces interfaces haptiques sont placées sur une table devant les sujets. Les sujets ont la possibilité de déplacer les interfaces haptiques (avec l'aide de l'expérimentateur) afin de s'installer confortablement et d'utiliser la main qu'ils désirent pour la manipulation du périphérique.

Ce qui vient d'être décrit est la plate-forme de base qui est utilisée au cours des différentes expérimentations. Cependant, des spécificités liées aux tâches proposées durant les différentes expérimentations sont détaillées au-fur-et-à-mesure.

A.2 Présentation des molécules

Durant les différentes expérimentations, plusieurs molécules ou complexe de molécules ont été utilisées. À partir de ces molécules, différents scénarios ont été conçus et les difficultés sont décrites au-fur-et-à-mesure de la présentation des différentes expérimentation. Tout d'abord, nous présenterons la liste des molécules utilisées. Puis nous expliquerons le rendu visuel utilisé dans tous les expérimentations.

A.2.1 Liste des molécules

Chaque molécule utilisée est référencée sur la *Protein DataBase*² par un identifiant PDB. Voici la liste des molécules utilisées :

TRP-ZIPPER La molécule TRP-ZIPPER [COCHRAN et al. 2001] a pour identifiant PDB **1LE1**. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus.

TRP-CAGE La molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] a pour identifiant PDB **1L2Y**. Cette molécule contient 304 atomes dont 20 résidus.

Prion La molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB **2KFL**. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus.

Ubiquitin La molécule nommée Ubiquitin [VIJAY-KUMAR et al. 1987] avec l'identifiant PDB **1UBQ**. Cette molécule contient 1 231 atomes dont 76 résidus.

2. <http://www.pdb.org/>

NusE:NusG Le complexe de molécules NusE:NusG [BURMANN et al. 2010] a pour identifiant PDB 2KvQ. Il est constitué de deux molécules NusE et NusG possédant respectivement 1 294 atomes pour 80 résidus et 929 atomes pour 59 résidus.

- 5 On notera la présence de molécule de taille relativement petite comme TRP-ZIPPER et TRP-CAGE. On trouve également des molécules de taille assez importante comme Prion et Ubiquitin. Enfin, pour la dernière expérimentation, un complexe de molécules a été utilisé avec NusE:NusG.

A.2.2 Représentation des molécules

- 10 La représentation des molécules est un domaine de recherche à part entière. En effet, la complexité et l'abondance d'informations à visualiser nécessite des rendus graphiques avancés et complémentaires. De plus, la quantité importante d'informations à représenter peut nécessiter une machine puissante afin de générer un rendu en temps-réel. Heureusement, VMD possède un mo-
15 teur de rendu graphique avancé (voir section 2.3.1 page 13), aussi bien en terme de choix de rendu qu'en terme d'accélération graphique.

Afin d'obtenir un rendu de molécule pertinent, nous avons bénéficié des conseils d'un biologiste. Ensuite, nous avons pu adapter les rendus de molécules en fonction de nos besoins pour les différents scénarios proposés. Ce-
20 pendant, une base commune a été utilisée.

Tout d'abord, les atomes étant l'élément constituant de la molécule, il est nécessaire de les représenter en intégralité. Cependant, ils sont très nombreux et produisent rapidement une surcharge de la scène donc le choix de leur taille est primordial. Une première solution est de s'affranchir, partiellement, des
25 atomes d'hydrogène. En effet, ces derniers ne constituent pas une information importante et peuvent être déduits à partir du reste de la structure de la molécule. Les atomes d'hydrogènes peuvent donc être représentés avec une taille réduite par rapport aux autres atomes. Le rendu CPK est utilisé pour effectuer un rendu des atomes (voir figure A.1 page suivante).

- 30 Cependant, la représentation de la molécule exclusivement avec les atomes et les liaisons entre les atomes ne permet pas d'appréhender la structure globale. En effet, on peut voir une molécule comme un long brin qui se replie sur lui-même avec des feuilles tout le long du brin. Il est donc pertinent de représenter cette structure principale. C'est la représentation *NewRibbon* qui
35 tient ce rôle (voir figure A.2 page suivante).

Pour finir, pour des raisons physiques d'interaction, certains atomes sont fixés

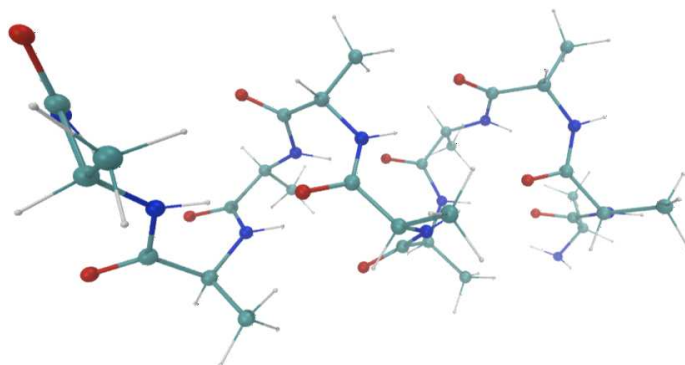


Figure A.1 – Représentation des atomes avec CPK

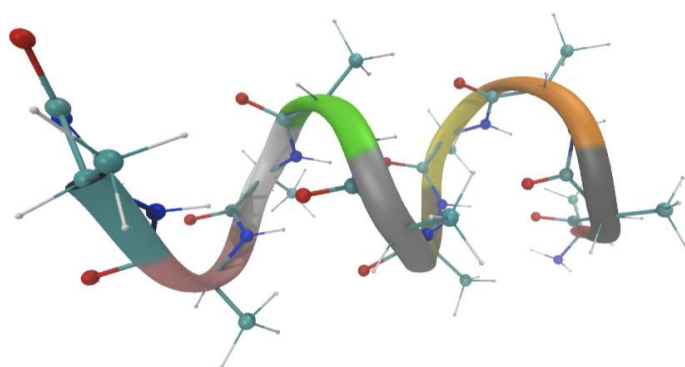


Figure A.2 – Représentation de la structure principale de la molécule avec *NewRibbon*

au niveau de la simulation afin d'éviter des dérives de la molécule. Ces atomes sont signalés visuellement par une représentation en gris (voir figure A.3).

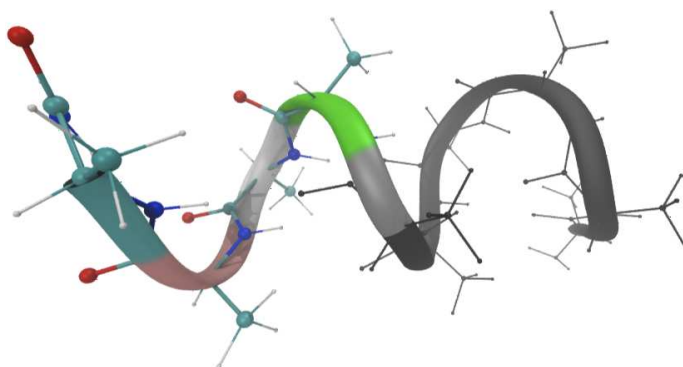


Figure A.3 – Représentation des atomes fixés en gris

A.3 Outils de manipulation

La plate-forme de base propose deux interfaces haptiques. Ces deux interfaces
5 haptiques sont utilisées comme interfaces de déformation de la molécule :
des outils *tug*. Pour comprendre ce que sont des outils de déformation, on
peut se reporter à la section 2.4.1 page 16. Au cours des trois premières
expérimentations, seules quelques modifications du rendu visuel associés à
ces outils sont effectués. Cependant, la quatrième expérimentation apporte
10 des modifications plus lourdes de cet outil que ce soit au niveau visuel ou au
niveau haptique. On pourra se reporter aux chapitres respectifs pour plus de
détails.

De plus, un outil de manipulation et d'orientation de la molécule sera proposé
sous différentes formes au cours des différentes expérimentations. Ce sera par
15 l'intermédiaire d'un outil *grab* dans la première expérimentation (voir sec-
tion 3.3.2 page 32), par une souris 3D dans la seconde (voir section 4.3.2
page 59) puis par une simple souris USB dans la dernière expérimentation
(voir section 6.3.2 page 115).

Bibliographie

- [BURMANN et al. 2010]
BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010).
5 « A NUSE complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 135).
- [CHRISTEN et al. 2009]
CHRISTEN, Barbara, Simone HORNE MANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar
10 wallaby (*macropus eugenii*) shows that the β 2- α 2 loop is modulated by long-range sequence effects ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 134).
- [COCHRAN et al. 2001]
COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVAS-
15 NIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric β -hairpins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. page 134).
- [NEIDIGH et al. 2002]
NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN
20 (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 134).
- [VIJAY-KUMAR et al. 1987]
VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987).
25 « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. page 134).

Annexe B

Méthode expérimentale

B.1 Première expérimentation

B.1.1 Hypothèses

- 5 Nous émettons plusieurs hypothèses concernant cette première expérimentation. Les hypothèses concernent les performances des binômes ainsi que leurs stratégies de travail. Deuxièmement, une évaluation de la plate-forme est nécessaire. Des hypothèses sont formulées pour noter l'utilisabilité de la plate-forme ainsi que la sensation de collaboration des utilisateurs.
- 10 (\mathcal{H}_1) **Amélioration des performances en binôme** Nous émettons l'hypothèse que les performances des binômes seront meilleures que les performances des monômes. Les performances seront évaluées en terme de temps de réalisation de la tâche mais aussi en terme de ressources utilisées comme le nombre de sélections.
- 15 (\mathcal{H}_2) **Stratégies variables en fonction des binômes** Nous émettons l'hypothèse que les binômes adopteront des stratégies de collaboration différentes en fonction des affinités des sujets et de leurs espaces de travail respectifs. L'identification des différentes stratégies permettra de les évaluer et de trouver la plus performante.
- 20 (\mathcal{H}_3) **Les sujets préfèrent le travail en binôme** Notre troisième hypothèse est de nature qualitative et suppose que les utilisateurs auront une

préférence pour le travail en binôme comparé au travail en monôme. Le travail en binôme crée une collaboration sociale qui est préférée en général.

(\mathcal{H}_4) **La plate-forme est appréciée des utilisateurs** Notre dernière hypothèse concerne la validation de notre plate-forme en terme d'utilisabilité (intuitivité, ergonomie, *etc.*). Elle est nécessaire pour la poursuite des études de cette thèse.

B.1.2 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une distribution d'âge de $\mu = 27.8$, $\sigma = 7.2$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'In-

- génieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs, assistants de recherche, étudiants en thèse ou stagiaires dans les domaines suivants :
- linguistique et traitement automatique de la parole ;
- réalité virtuelle et système immersifs ;
- audio-acoustique.

Tous les sujets sont francophones. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant), de déficience audio ou de déficience moteur du haut du corps. Les sujets ne sont pas rémunérés pour l'expérimentation.

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation. Cependant, l'objectif de l'expérimentation n'est pas révélé.

B.1.3 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-sujets. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « un sujet » (*c.f. monôme*) ou « deux sujets » (*c.f. binôme*). 24 monômes et 12 binômes ont été testés ce qui fait deux fois plus de monômes que de binômes.

(\mathcal{V}_{i2}) **Résidu recherché** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. (\mathcal{V}_{i2}) concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans deux molécules (voir table 3.1 page 28). Différents niveaux de complexité caractérisent chaque résidu (voir table 3.2 page 30).

Variables dépendantes

(\mathcal{V}_{d1}) **Temps de réalisation** Ce temps est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire trouver le résidu et l'extraire de la molécule. Il n'y a pas de limite de temps pour réaliser la tâche. Ce temps est divisé en deux phases bien distinctes :

La recherche C'est la phase pendant laquelle les sujets cherchent le résidu. Cette recherche peut être visuelle en orientant et en déplaçant la molécule. Elle peut aussi amener les sujets à déformer la molécule afin d'explorer les résidu inaccessibles du centre de la molécule.

La sélection La phase de sélection débute dès l'instant où un des deux sujets a identifié visuellement le résidu. Elle est constituée d'une phase de sélection puis d'une phase d'extraction hors de la molécule.

(\mathcal{V}_{d2}) **La distance entre les espaces de travail** Cette mesure est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux correspondant aux outils *tug*. Elle est mesurée dans le monde réel mais peut être convertie dans l'environnement virtuel (à l'échelle de la molécule). L'ordre de grandeur de cette mesure est le centimètre.

(\mathcal{V}_{d3}) **Communications verbales** L'enregistrement des communications verbales permet de mesurer la quantité de temps de parole de chaque sujets pour chaque étape de l'expérimentation. Ces mesures différencie la phase de recherche et la phase de sélection (voir (\mathcal{V}_{d1})) comme indiqué plus précisément sur la figure B.1.

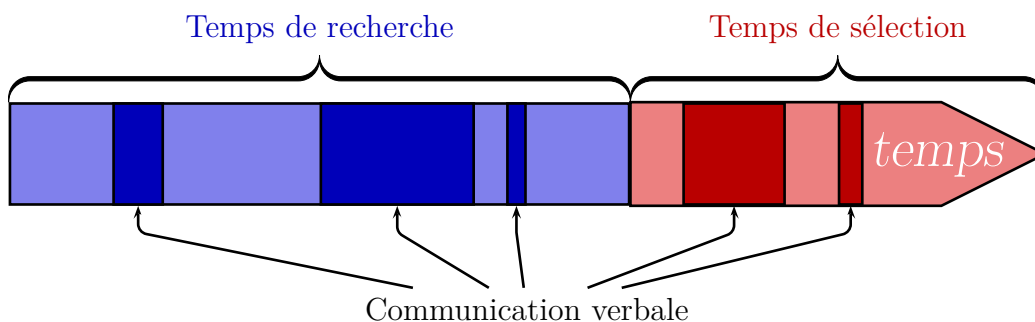


Figure B.1 – Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu

(\mathcal{V}_{d4}) **Affinité entre les sujets** Le degré d'affinité – concernant uniquement les binômes – est compris entre 1 et 5 selon les critères suivants :

1. Les sujets ne se connaissent pas ;
2. Les sujets travaillent dans la même entreprise, le même laboratoire ;
- 5 3. Les sujets travaillent dans la même équipe, sur les mêmes projets ;
4. Les sujets travaillent ensemble, sont dans le même bureau ;
5. Les sujets sont amis proches.

(\mathcal{V}_{d5}) **Force moyenne appliquée par les sujets** Le force appliquée par chaque sujet sur les atomes durant la simulation est mesurée. Une valeur
10 moyenne de cette force est calculée pour être analysée.

(\mathcal{V}_{d6}) **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Il est constitué de trois ou quatre parties respectivement destinés aux monômes et binômes. Le questionnaire fourni aux sujets est disponible dans la section C.1 page 155.

15 B.1.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'apprentissage avec la molécule TRP-ZIPPER. L'apprentissage est destiné à familiariser les sujets avec la plate-forme, les outils de manipulation et la tâche à réaliser. Cette phase dure maximum 5 mn. L'expérimentateur est disponible pour répondre aux ques-
20 tions des sujets.

Lorsque l'étape d'apprentissage est terminée, les sujets sont soumis successivement au 10 résidus. Lorsqu'un résidu est trouvé, sélectionné puis extrait, l'application est arrêtée. Un second résidu est affiché, l'application est de nouveau démarrée et ainsi de suite pour les résidus à chercher. L'enregistrement
25 audio est démarré à la fin de l'étape d'apprentissage.

L'ensemble des résidus est proposé dans un ordre aléatoire afin d'éviter un biais lié à l'apprentissage de la plate-forme et de la tâche. Les sujets doivent trouver et extraire dix résidus en monôme et dix résidu en binôme. Toujours pour éviter un biais lié à l'apprentissage, les sujets sont soumis aux tâches
30 en monôme et en binôme de façon alternée selon les trois combinaisons suivantes :

1. Le monôme \mathcal{A} , puis le monôme \mathcal{B} , puis le binôme \mathcal{AB} ;
2. Le monôme \mathcal{A} , puis le binôme \mathcal{AB} , puis le monôme \mathcal{B} ;

3. Le binôme \mathcal{AB} , puis le monôme \mathcal{A} , puis le monôme \mathcal{B} .

Lorsque les sujets ont réalisé toutes les tâches dans les deux configurations possibles (monôme et binôme), ils sont soumis au remplissage du questionnaire. Chaque sujet répond au questionnaire seul, sans communiquer avec son partenaire.

B.2 Seconde expérimentation

B.2.1 Hypothèses

Les hypothèses de cette nouvelle étude sont en grande partie basées sur l'étude précédente. Nous souhaitons confirmer l'intérêt du travail collaboratif dans la tâche élémentaire de *manipulation*, notamment sur les tâches de complexité importante. De plus, cette expérimentation propose d'étudier l'apprentissage de la tâche et d'en observer l'évolution dans le cadre du travail collaboratif.

(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme Nous émettons l'hypothèse que les performances des binômes seront meilleures que les performances des monômes. Cette hypothèse a pour objectif de confirmer les conclusions obtenues dans la première étude dans un contexte de *manipulation*. La première hypothèse est une amélioration des performances pour les binômes en collaboratif comparés aux monômes en bimanuel.

(\mathcal{H}_2) Meilleur gain de performances sur les tâches complexes Nous émettons l'hypothèse que plus la tâche est complexe et plus une configuration de travail collaboratif produira un gain significatif de performances comparé à un monôme.

(\mathcal{H}_3) L'apprentissage est plus performant pour les binômes Nous émettons l'hypothèse que le travail en collaboration augmente la vitesse d'apprentissage de la tâche. En effet, nous supposons que l'interaction entre les partenaires va stimuler l'apprentissage et permettre l'échange des connaissances.

(\mathcal{H}_4) Les sujets préfèrent le travail en collaboration Nous souhaitons évaluer auprès des utilisateurs l'intérêt vis-à-vis du travail collaboratif. Notre hypothèse est que les utilisateurs préfèrent le travail collaboratif. En effet,

le contact social et la possibilité de communiquer sont des apports appréciés dans le milieu du travail.

B.2.2 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 25.9$,
5 $\sigma = 4.7$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

- linguistique et traitement automatique de la parole ;
- réalité virtuelle et système immersifs ;
- 10 – audio-acoustique.

Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni de déficience audio.

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est
15 donnée au commencement de l'expérimentation mais en omettant l'objectif de l'étude.

B.2.3 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable inter-sujets. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». 12 monômes et 12 binômes sont
20 testés.

(\mathcal{V}_{i2}) **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées sur chacune
25 des deux molécules : une déformation au niveau inter-moléculaire et une déformation au niveau intra-moléculaire.

(\mathcal{V}_{i3}) **Le niveau d'apprentissage** La troisième variable indépendante est une variable intra-sujets. Tous les sujets seront confrontés trois fois à la même tâche afin de voir l'effet de l'apprentissage en monôme et en binôme.

Variables dépendantes

(\mathcal{V}_{d1}) **Temps de réalisation** C'est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre l'objectif fixé. Le temps est limité à 10 mn.

5 (\mathcal{V}_{d2}) **Nombre de sélections** (\mathcal{V}_{d2}) représente le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche à réaliser. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome ou un résidu est sélectionné par un des deux effecteur terminal. Un compteur est affecté pour chacun des effecteurs terminaux qui lui-même est associé à un sujet.

10 (\mathcal{V}_{d3}) **Distance passive entre les espaces de travail** Cette distance est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux présents durant l'ensemble de l'expérimentation. Cette distance représente donc une distance physique du monde réel, pas une distance virtuelle. Elle est de l'ordre du centimètre.

15 (\mathcal{V}_{d4}) **Distance active entre les espaces de travail** Cette distance est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux présents seulement lorsque ces deux effecteurs terminaux sont en cours de manipulation (un atome ou un résidu est sélectionné). C'est une distance physique du monde réel de l'ordre du centimètre.

20 (\mathcal{V}_{d5}) **Vitesse moyenne** Cette variable est une mesure de la vitesse moyenne de chaque effecteur terminal. Elle est calculée par intégration numérique des positions successives en fonction du temps.

(\mathcal{V}_{d6}) **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets (variable en fonction des monômes et des binômes). Il se décline en deux
25 versions destinées soit aux monômes, soit aux binômes. Le questionnaire soumis aux sujets est disponible dans la section C.2 page 161.

B.2.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule Prion. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un.

Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontées aux scénarios 1A et 1B. Les scénarios sont alternés entre les groupes de sujets
5 afin d'éviter les biais d'apprentissage. L'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil `RMSD` désiré est atteint.

Dès que les scénarios 1A et 1B ont été terminés par les sujets, les sujets sont confrontés aux scénarios 2A et 2B également de façon alternée. De la même façon, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil `RMSD` désiré est
10 atteint.

Tous les sujets sont confrontés aux quatre scénarios trois fois avec un jour d'intervalle entre chaque confrontation. L'objectif de cette multiple confrontation est l'étude de l'apprentissage.

B.3 Troisième expérimentation

15 B.3.1 Hypothèses

Lors de cette nouvelle étude, nous souhaitons observer les dynamiques de groupe. Nos hypothèses concerneront principalement l'évolution des groupes durant la réalisation de la tâche.

(\mathcal{H}_1) **Amélioration des performances en quadrinôme** Nous émettons
20 l'hypothèse que les performances des `quadrinômes` seront meilleures que les performances des `binômes`. Cette hypothèse a pour objectif de confirmer les conclusions obtenues dans l'étude sur l'entreprise *Hawthorne Works*. Cependant, nous nous plaçons dans un contexte de collaboration étroite.

(\mathcal{H}_2) **Le remue-méninges structure le quadrinôme** Dans cette nouvelle expérimentation, nous allons étudier la mise en place d'une période
25 de réflexion, également appelée *remue-méninges*, avant le début de la tâche. Nous émettons l'hypothèse que cette période de réflexion sera principalement utile pour les `quadrinômes`.

B.3.2 Sujets

30 16 sujets (4 femmes et 12 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 26.1$,

$\sigma = 5.3$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont étudiants, chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

- linguistique et traitement automatique de la parole ;
- 5 – réalité virtuelle et système immersifs ;
- audio-acoustique.

Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni de déficience audio. Tous les participants de cette expérimentation ont été choisis car ils ont déjà une
 10 expérience sur la plate-forme : les participants connaissent déjà les outils de déformation et l'environnement virtuel. Ceci doit permettre d'observer les évolutions de la dynamique de groupe tout en limitant les effets de l'apprentissage.

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expé-
 15 rimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation mais en omettant l'objectif de l'étude.

B.3.3 Variables

Variables indépendantes

20 (\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-sujets. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « deux sujet (*c.f. binôme*) » ou « quatre sujets (*c.f. quadrinôme*) ». 8 binômes et 4 quadrinômes sont testés.

(\mathcal{V}_{i2}) **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une
 25 variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées et décrites dans la section 5.3.1 page 90.

(\mathcal{V}_{i3}) **Temps alloué pour le remue-méninges** La troisième variable in-
 dépendante est une variable inter-sujets. (\mathcal{V}_{i3}) possède deux valeurs possibles :
 30 « pas de remue-méninges » ou « 1 mn de remue-méninges ». Cette période de remue-méninges est allouée avant le début de chaque tâche et permet une réflexion préalable sur la tâche.

Variables dépendantes

(\mathcal{V}_{d1}) **Temps de réalisation** C'est le temps total que les sujets ont mis pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre l'objectif fixé. Le temps est limité à 10 mn.

5 (\mathcal{V}_{d2}) **Fréquence des sélections** (\mathcal{V}_{d2}) représente la fréquence des sélections réalisées durant chaque tâche à réaliser. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome est sélectionné par un des effecteur terminal. Un compteur est affecté pour chacun des effecteurs terminaux qui lui-même est associé à un sujet. C'est l'information de fréquence qui est conservée puisqu'elle ne
10 dépend pas du temps total de réalisation de la tâche.

(\mathcal{V}_{d3}) **Vitesse moyenne** Cette variable est une mesure de la vitesse moyenne de chaque effecteur terminal. Elle est calculée par intégration numérique des positions successives en fonction du temps.

(\mathcal{V}_{d4}) **Force moyenne appliquée par les sujets** La force appliquée sur les
15 atomes durant la simulation est mesurée pour chaque sujet. Elle ne concerne que la force appliquée lors d'une sélection. C'est la valeur moyenne sur l'ensemble d'une tâche qui est conservée.

(\mathcal{V}_{d5}) **Communications verbales** L'enregistrement des communications permet de mesurer le nombre d'interventions verbales de chacun des sujets.
20 Deux catégories d'interventions sont classifiées :

Les observations destinées à renseigner les autres sujets d'un état actuel de l'environnement, d'une information nécessaire ou bien d'une intention concernant une action ;

Les ordres sont donnés aux autres sujets afin qu'ils réalisent une action
25 déterminée.

B.3.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule TRP-CAGE. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Les sujets ayant déjà eu une expérience sur la plate-forme, cette
30 phase est effectuée pour se remémorer l'environnement et les outils. Cette

phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontées au scénario 1. Puis dans un second temps, le scénario 2 leur est proposé. Pour
 5 chaque scénario, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil $RMSD$ désiré est atteint. L'ordre de ces deux scénarios n'est pas contre-balancé sur les différents groupes de sujets.

Tous les sujets sont confrontés aux deux scénarios deux fois. Une première fois en binôme et une seconde fois en quadrinôme. L'ordre de passage en
 10 binôme et en quadrinôme est alterné selon les groupes afin d'éviter les biais d'apprentissage.

L'enregistrement vidéo est démarré au début de la phase d'apprentissage pour chaque groupe. Il est arrêté à la fin du second scénario. La phase d'apprentissage est filmée pour des questions de simplicité logistique mais n'est
 15 pas utilisée dans les analyses.

B.4 Quatrième expérimentation

B.4.1 Hypothèses

(\mathcal{H}_1) **Performances améliorées par l'assistance haptique** Nous émettons l'hypothèse que les performances de groupe seront meilleures lorsque
 20 l'assistance haptique sera mise à disposition des utilisateurs. Les performances principalement basées sur la qualité de la solution. En effet, dans un cadre de déformation moléculaire avec des experts, le résultat final prend une place plus importante que le temps mis pour l'atteindre.

(\mathcal{H}_2) **L'assistance haptique améliore la communication** Dans cette
 25 dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils pour aider la communication entre les utilisateurs en utilisant la modalité haptique. Nous émettons l'hypothèse que la communication sera améliorée grâce à ces outils.

(\mathcal{H}_3) **La plate-forme est appréciée des experts** Lors de cette expérimentation, nous effectuons une analyse de l'utilisabilité du système. Nous
 30 émettons l'hypothèse que cette plate-forme répondra à des critères minimum d'utilisabilité. Le test d'utilisabilité est basé sur l'échelle de notation proposée par BROOKE [1996].

B.4.2 Sujets

Nombre de sujets

Remplir toutes les informations statistiques concernant les sujets

<000 sujets (000 femmes et 000 hommes)> avec une moyenne d'âge de $\langle \mu = 00.0 (\sigma = 0.00) \rangle$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont été recrutés au sein <laboratoire> et sont <statuts, métier>. Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni de déficience audio.

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation mais l'objectif de l'étude n'est pas révélé.

B.4.3 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Présence de l'assistance** La première variable indépendante est une variable intra-sujets. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « sans assistance » ou « avec assistance ». L'assistance haptique est ajoutée aux différents outils de manipulation, de désignation et de déformation afin d'améliorer l'interaction et la communication entre les sujets pendant la tâche.

(\mathcal{V}_{i2}) **Molécules à déformer** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. (\mathcal{V}_{i2}) concerne les cinq molécules ou complexes de molécules à assembler : « TRP-CAGE », « Prion », « Ubiquitin », « TRP-ZIPPER » et « NUSE:NUSG ». Parmi ces molécules, seules Ubiquitin et NUSE:NUSG sont utilisées pour les tâches expérimentales. Les autres molécules sont simplement utilisés au cours de l'entraînement sur la plate-forme.

Variables dépendantes

(\mathcal{V}_{d1}) **Score de ressemblance minimum** Un score RMSD est calculé en temps-réel de la même façon que dans la seconde et la troisième expérimentation. Le score minimum atteint est enregistré : il représente la meilleure solution trouvée au cours de la manipulation.

(\mathcal{V}_{d2}) **Temps du score RMSD minimum** Les sujets ont 8 mn pour réaliser le meilleur score RMSD possible. Cependant, c'est le temps mis pour atteindre ce score minimum qui est enregistré.

(\mathcal{V}_{d3}) **Nombre de sélections** (\mathcal{V}_{d2}) représente le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche à réaliser. Une sélection est comptabilisée lorsque un atome est sélectionné par un des deux effecteur terminal. Un compteur est affecté pour chacun des effecteurs terminaux.

- 5 (\mathcal{V}_{d4}) **Communications verbales et gestuelles** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. De plus, la vidéo permet de mettre en relation les différentes phases de l'expérimentation (déformation, désignation, modification du point de vue de la scène, *etc.*) avec la quantité de temps de parole.
- 10 (\mathcal{V}_{d5}) **Test d'utilisabilité de la plate-forme** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Ce questionnaire est une traduction en français du questionnaire SUS (*System Usability Scale*) proposé par BROOKE [1996]. La traduction soumise aux sujets est disponible dans la section C.3 page 162. Il nous permet d'obtenir un score d'utilisabilité de la plate-forme compris entre
- 15 0 et 100.

B.4.4 Procédure

La procédure expérimentale se déroule en sept phases bien distinctes.

- Phase 1 : répartition des rôles** Pour commencer, avant de pénétrer dans la salle d'expérimentation, il va être demandé aux sujets de choisir leurs rôles.
- 20 Nous nous plaçons dans le cadre d'une structure informelle dans laquelle un des sujets sera le coordinateur et les deux autres seront les opérateurs. Chaque rôle est important et il est nécessaire de l'expliquer aux sujets pour qu'aucun des rôles ne soit choisi par dépit. Durant cette première phase, l'expérimentateur explique de façon claire et concise les deux rôles possibles. Puis les
- 25 sujets sont amenés à se répartir les rôles entre eux. Une fois cette phase terminée, les sujets sont invités à pénétrer dans la salle d'expérimentation et à s'installer : le coordinateur se trouve au milieu et les opérateurs se trouvent de part et d'autre du coordinateur.

- Phase 2 : présentation des outils** La seconde phase est une phase d'entraînement sur la molécule TRP-CAGE. Elle a pour objectif premier de présenter les outils de désignation et de déformation. De plus, les sujets sont amenés à se familiariser avec l'interface, la tâche à effectuer, les différentes
- 30

informations disponibles ainsi que le moyen d'évaluation. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire pour un apprentissage correct des outils de désignation et de déformation. L'enregistrement vidéo est mis en marche au début de cette phase.

5 **Phase 3 : introduction de l'haptique** Cette troisième phase est également une phase d'entraînement sur la molécule Prion. L'entraînement porte sur l'introduction des assistances haptiques (présentées dans la section 6.3.1 page 113) sur les outils de désignation et de déformation. De plus, cette
10 seconde molécule d'entraînement permet de familiariser les sujets avec une molécule de taille importante. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire pour une bonne compréhension des assistances haptiques proposées.

Phase 4 : scénario 1 La quatrième phase est la première tâche à réaliser (scénario 1) sur la molécule Ubiquitin. Seuls les outils de désignation et de
15 déformation sont présents à ce stade de l'expérimentation. Une période de 1 mn de remue-ménages est laissée aux sujets pendant laquelle ils peuvent visualiser et manipuler la molécule non soumise à la simulation. L'objectif est d'atteindre le score `RMSD` le plus petit possible dans un temps limité à 8 mn. Les sujets peuvent décider de s'arrêter avant les 8 mn s'ils estiment ne
20 pas pouvoir obtenir un meilleur score. Les groupes de sujets sont testés avec et sans haptique de manière contrebalancée entre les groupes. Une pause est proposée aux sujets avant de poursuivre les phases suivantes.

Phase 5 : outil de manipulation Cette nouvelle phase d'entraînement sur la molécule TRP-ZIPPER est destinée à introduire l'outil de manipulation.
25 La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire afin que le coordinateur assimile correctement ce nouvel outil.

phase 6 : scénario 2 La sixième phase est la seconde tâche à réaliser (scénario 2) sur le complexe de molécules NUSG:NUSG. C'est le dernier stade de l'expérimentation et tous les outils (désignation, déformation et manipu-
30 lation) sont présents. Une période de 1 mn de remue-ménages est laissée aux sujets pendant laquelle ils peuvent visualiser et manipuler la molécule non soumise à la simulation. L'objectif est d'atteindre le score `RMSD` le plus petit possible dans un temps limité à 8 mn. Les sujets peuvent décider de s'arrêter avant les 8 mn s'ils estiment ne pas pouvoir obtenir un meilleur score. Les

groupes de sujets sont testés avec et sans haptique de manière contrebalancée entre les groupes. L'enregistrement vidéo est arrêté à la fin de cette phase.

phase 7 : le questionnaire La dernière phase est destinée au remplissage du questionnaire (voir section C.3 page 162). Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux. L'expérimentateur est présent pour les éventuelles questions qui ne seraient pas comprises ou mal comprises.

Bibliographie

[BROOKE 1996]

- 5 BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall McCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. pages 149, 151).

Annexe C

Questionnaires

C.1 Première expérimentation

Le questionnaire proposé durant cette expérimentation est constitué de deux parties. La deuxième partie est exclusivement réservée aux binômes et n'était pas proposée au monômes. Ce questionnaire contient 5 pages (3 pages pour les monômes). Les questions sont évaluées selon une échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.



Ne pas remplir ↑

Merci d'avoir participé à cette expérimentation. Je vous invite maintenant à répondre à un questionnaire afin de connaître vos impressions.

Les questions se présentent sous la forme d'une note à 5 niveaux. Distinguez bien les questions qui vous concernent et les questions qui concernent votre collaborateur. Ne répondez pas aux questions en essayant de savoir ce que votre collaborateur aurait pu répondre ou ce qu'il aurait voulu que vous répondiez. Ne répondez que ce que vous pensez.

Si vous avez des interrogations par rapport au questionnaire, n'hésitez surtout pas et posez la question.

Et bien sûr, tous les commentaires sont les bienvenus.

1 Vous et votre manipulation

Date du jour – jj / mm / aaaa hh : mm

Nom –

Prénom –

Sexe – F M

Âge –

Main dominante – Gauche Droite

Langue maternelle –

1.1 Prise en main

Cette partie concerne la prise en main de l'ensemble de la plate-forme, que ce soit le logiciel, les interfaces, la tâche à réaliser. Cochez le niveau qui décrit le mieux ces 3 points.

Le visuel concerne tous ce qui est affiché à l'écran, les molécules, les curseurs, les atomes, les flèches indiquant l'effort appliqué...

		Visuel						
		1	2	3	4	5		
Incompréhensible							Intuitif	
Inconfortable							Confortable	
Fatigant							Relaxant	

C.1. Première expérimentation

L'interaction concerne la maniabilité des interfaces haptiques¹, le confort des vibrations, le côté intuitif de la manipulation...

	Interaction					
	1	2	3	4	5	
Incompréhensible	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Intuitif
Inconfortable	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Confortable
Fatigant	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Relaxant

La tâche concerne la nature de la tâche qui vous a été demandée. Vous semblait-elle complexe a priori ? Était-elle difficile à réaliser ?

	Tâche					
	1	2	3	4	5	
Complexe	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Simple
Difficile	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Facile

Commentaires

1.2 Évaluation

Avez-vous été efficace pour exécuter les tâches demandées, pensez-vous avoir été rapide ?

	1	2	3	4	5	
Inefficace	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Efficace

Est-ce que les éléments extérieurs (murs, personnes...) vous ont perturbés ou vous êtes vous senti immergé dans cet environnement virtuel ?

	1	2	3	4	5	
Pas immergé	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Immergé

¹Les interfaces haptiques sont les bras articulés qui vous servent à manipuler votre curseur à l'écran.

Annexe C. Questionnaires

Vous êtes-vous senti seul pour exécuter la tâche ou avez-vous senti la présence de votre collaborateur ?

	1	2	3	4	5	
Seul	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Groupe

Avez-vous perturbé votre collaborateur ou pensez-vous plutôt l'avoir aidé durant l'exécution de la tâche ?

	1	2	3	4	5	
Perturbation	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Aide

Avez-vous donné des informations pour votre collaborateur afin de l'aider à accomplir la tâche avec vous ?

	1	2	3	4	5	
Pas d'aide	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Informations

Vous êtes-vous senti dominé pendant la durée de la manipulation ou avez-vous plutôt eu l'impression d'être le meneur ?

	1	2	3	4	5	
Dominé	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Meneur

Quel ont été vos moyens pour communiquer avec votre collaborateur ?

Oral effectué avec la voix, des phrases, des mots, des interjections ;

Gestuel effectué avec vos mains, vos bras, votre corps dans son ensemble ;

Virtuel effectué avec votre curseur ou en manipulant les objets virtuels.

	1	2	3	4	5	
Pas du tout	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Beaucoup
Oral	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	
Gestuel	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	
Virtuel	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	

Commentaires

2 Votre collaborateur et sa manipulation

Cette partie du questionnaire va vous demander votre impression en ce qui concerne le travail, la manipulation de votre collaborateur.

Nom –

Prénom –

2.1 Affinité

Cochez la case qui correspond à ce qui vous lie, vous et votre collaborateur.

Même bureau	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Même équipe	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Même groupe	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Autre (précisez)		

2.2 Évaluation

Cette partie concerne ce que vous avez pensé de l'efficacité de votre collaborateur. Cochez le niveau qui qualifie le mieux l'action de votre collaborateur.

A-t-il été efficace pour exécuter les tâches, pensez-vous qu'il a été rapide ?

	1	2	3	4	5	
Inefficace	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Efficace

Votre collaborateur vous a-t-il perturbé ou vous a-t-il plutôt aidé ?

	1	2	3	4	5	
Perturbation	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Aide

Votre collaborateur vous a-t-il donné des informations afin d'accomplir la tâche avec vous ?

	1	2	3	4	5	
Pas d'aide	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Informations

A-t-il été dominé pendant la durée de la manipulation ou a-t-il plutôt été le meneur ?

	1	2	3	4	5	
Dominé	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Meneur

Annexe C. Questionnaires

Pensez-vous qu'il n'a pas senti votre présence pendant l'expérimentation ou qu'il a vraiment eu l'impression d'un travail de groupe?

	1	2	3	4	5	
Seul	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	Groupe

Quels ont été les moyens que votre collaborateur a utilisés pour communiquer avec vous?

Oral effectué avec sa voix, des phrases, des mots, des interjections ;

Gestuel effectué avec ses mains, ses bras, son corps dans son ensemble ;

Virtuel effectué avec son curseur ou en manipulant les objets virtuels.

	1	2	3	4	5	
Pas du tout						Beaucoup
Oral	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	
Gestuel	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	
Virtuel	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>	

Commentaires

Commentaires généraux

C.2 Seconde expérimentation

Le questionnaire proposé durant la seconde expérimentation est décliné en deux versions : une version pour les monômes et une version pour les binômes. Le questionnaire est soumis aux sujets oralement par l'expérimentateur et
5 les réponses sont directement reportées dans une tableau. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

C.2.1 Questionnaire pour les monômes

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

1. Vous êtes-vous senti efficace ?
- 10 2. Pensez-vous que vous auriez été plus à l'aise seul avec un seul outil de déformation ?
3. Pensez-vous que vous auriez été plus à l'aise avec un partenaire ?
4. Quelle solution choisiriez-vous entre les trois configurations ?

C.2.2 Questionnaire pour les binômes

15 Chaque sujet dans un binôme est interrogé séparément pour éviter que les réponses de l'un influence les réponses de l'autre. Pour les binômes, le questionnaire est le suivant :

1. Vous êtes-vous senti efficace ?
2. Comment évalueriez-vous votre taux de communication...
20 – verbale ?
– gestuelle ?
– virtuelle ?
3. Vous sentez-vous utile dans le groupe (par opposition à pénalisant) ?
4. Pensez-vous avoir une position de meneur dans le groupe ?
- 25 5. Pensez-vous que vous auriez été plus à l'aise seul avec votre outil de déformation ?
6. Pensez-vous que vous auriez été plus à l'aise seul avec deux outils de déformation ?
7. Quelle solution choisiriez-vous entre les trois configurations ?

Concernant les taux de communication, les communications verbales concernent tous les échanges, dialogues exposés par la voix. La communication gestuelle représente les gestes que les sujets peuvent effectuer dans le monde réel pour expliquer, désigner ou pour tout autre explication à son partenaire. Enfin,
5 la communication virtuelle concerne les informations données au partenaire par l'intermédiaire de l'environnement virtuel (par exemple, une désignation avec le curseur).

C.3 Quatrième expérimentation

Le questionnaire proposé durant la quatrième et dernière expérimentation est
10 une traduction en français du questionnaire SUS proposé par BROOKE [1996]. Il est soumis sous un format papier et chaque utilisateur est invité à y répondre seul, sans l'aide de ces partenaires. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

C.3.1 Le questionnaire SUS

15 Le questionnaire SUS est constitué de 10 questions. Chaque question donne lieu à une réponse sur une échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux allant de « Fortement en désaccord (score de 1) » à « Fortement en accord (score de 5) ». Les questions sont les suivantes :

- Q1. Je pense que j'utiliserai ce système fréquemment
- 20 Q2. J'ai trouvé ce système inutilement complexe
- Q3. J'ai pensé que ce système était facile à utiliser
- Q4. Je pense qu'il me faudrait l'aide d'un technicien pour être capable d'utiliser ce système
- Q5. J'ai trouvé que les différentes fonctions de la plate-forme étaient bien
25 intégrées
- Q6. J'ai trouvé qu'il y avait trop d'incohérences dans cette plate-forme
- Q7. Je pense que la plupart des gens apprendraient rapidement à utiliser cette plate-forme
- Q8. J'ai trouvé le système très lourd à utiliser
- 30 Q9. Je me sentais très confiant en utilisant cette plate-forme
- Q10. J'aurai besoin d'apprendre beaucoup de choses avant de pouvoir utiliser cette plate-forme

C.3.2 Évaluation du score SUS

Pour évaluer le score SUS à partir du questionnaire, il faut des score entre 0 et 4 pour chacune des questions. Concernant les questions 1, 3, 5, 7 et 9, on prend le score compris en 1 et 5 auquel on enlève 1. Concernant les questions
5 2, 4, 6, 8 et 10, on soustrait de 5 le score compris en 1 et 5. Pour terminer, on multiplie par 2.5 la somme de l'ensemble des scores. Le score final obtenu est une note comprise entre 0 et 100.

Exemple de score SUS

Imaginons un questionnaire rempli de la façon suivante :

- 10 Q1. réponse 5 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$
- Q2. réponse 4 \Rightarrow score $5 - 4 = 1$
- Q3. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$
- Q4. réponse 1 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$
- Q5. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$
- 15 Q6. réponse 3 \Rightarrow score $5 - 3 = 2$
- Q7. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$
- Q8. réponse 4 \Rightarrow score $5 - 4 = 1$
- Q9. réponse 5 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$
- Q10. réponse 2 \Rightarrow score $5 - 2 = 3$

20 Le score total peut maintenant être calculé.

$$(4 + 1 + 1 + 4 + 1 + 2 + 1 + 1 + 4 + 3) \times 2.5 = 22 \times 2.5 = 55$$

Bibliographie

[BROOKE 1996]

- BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall McCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. page 162).

[LIKERT 1932]

- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 155, 161, 162).