

Thèse en Informatique

---

Jean SIMARD

# Interactions haptiques collaboratives pour la manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

Thèse soutenue le 1<sup>er</sup> 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	vii
Liste des tableaux	ix
<b>I Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Le sujet</b>	<b>3</b>
1.1 État de l’art . . . . .	3
1.2 Contexte . . . . .	3
1.2.1 L’amarrage moléculaire . . . . .	3
Bibliographie . . . . .	6
<b>2 SHADDOCK – Système collaboratif de manipulation de molécules</b>	<b>7</b>
2.1 Plates-formes collaboratives existantes . . . . .	7
2.1.1 Architecture du système . . . . .	8
2.1.2 Vue partagée . . . . .	9
2.2 Simulation moléculaire en temps-réel . . . . .	10
2.2.1 Les besoins . . . . .	10
2.2.2 Les outils existants . . . . .	11
2.3 Interaction avec la simulation moléculaire . . . . .	15
2.3.1 Les besoins . . . . .	15

## Table des matières

---

2.3.2	Interaction par interface haptique . . . . .	15
2.4	Nouveaux outils pour l'interaction . . . . .	17
2.4.1	Amélioration de la sélection . . . . .	17
2.4.2	Déformation par groupe d'atomes . . . . .	18
2.4.3	Outil de désignation et attraction . . . . .	19
	Bibliographie . . . . .	21
 <b>II Étude du travail collaboratif</b>		<b>25</b>
 <b>3 Recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire</b>		<b>27</b>
3.1	Introduction . . . . .	28
3.2	Présentation . . . . .	28
3.2.1	Objectifs . . . . .	28
3.2.2	Hypothèses . . . . .	30
3.3	Dispositif expérimental et matériel . . . . .	30
3.3.1	Dispositif technique . . . . .	31
3.3.2	Disposition des éléments . . . . .	31
3.3.3	Visualisation et interactions . . . . .	33
3.4	Méthode . . . . .	33
3.4.1	Sujets . . . . .	33
3.4.2	Variables . . . . .	34
3.4.3	Tâche . . . . .	36
3.4.4	Procédure . . . . .	40
3.5	Résultats . . . . .	40
3.5.1	Amélioration des performances en binôme . . . . .	42
3.5.2	Stratégies de travail . . . . .	45
3.5.3	Résultats qualitatifs . . . . .	52
3.6	Synthèse . . . . .	54
3.6.1	Résumé des résultats . . . . .	54
3.6.2	Perspectives . . . . .	55
	Bibliographie . . . . .	56

<b>4</b>	<b>Déformation collaborative de molécule</b>	<b>59</b>
4.1	Introduction . . . . .	60
4.2	Présentation . . . . .	60
4.2.1	Objectifs . . . . .	60
4.2.2	Hypothèses . . . . .	62
4.3	Dispositif expérimental et matériel . . . . .	62
4.3.1	Dispositif technique . . . . .	63
4.3.2	Disposition des éléments . . . . .	63
4.3.3	Visualisation et interactions . . . . .	63
4.4	Méthode . . . . .	66
4.4.1	Sujets . . . . .	66
4.4.2	Variables . . . . .	66
4.4.3	Tâche . . . . .	67
4.4.4	Procédure . . . . .	71
4.5	Résultats . . . . .	72
4.5.1	Amélioration des performances en binôme . . . . .	73
4.5.2	Gain de performance sur les tâches complexes . . . . .	75
4.5.3	Amélioration de l'apprentissage pour les binômes . . . . .	75
4.6	Synthèse . . . . .	75
	Bibliographie . . . . .	76
<b>5</b>	<b>Les dynamiques de groupe</b>	<b>79</b>
<b>III</b>	<b>Propositions pour le travail collaboratif</b>	<b>81</b>
<b>6</b>	<b>Travail collaboratif assisté par haptique</b>	<b>83</b>
6.1	Présentation . . . . .	83
6.1.1	Objectifs . . . . .	83
6.1.2	Hypothèses . . . . .	84
6.2	Dispositif expérimental et matériel . . . . .	84
6.3	Méthode . . . . .	85

## Table des matières

---

6.3.1	Sujets . . . . .	85
6.3.2	Variables . . . . .	85
6.3.3	Tâche . . . . .	87
6.3.4	Procédure . . . . .	88
	Bibliographie . . . . .	90
<b>IV</b>	<b>Synthèse</b>	<b>91</b>
<b>7</b>	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>93</b>
	<b>Glossaire</b>	<b>95</b>
	<b>Acronymes</b>	<b>97</b>
	<b>Annexes</b>	<b>101</b>
<b>A</b>	<b>Questionnaires</b>	<b>101</b>
A.1	Première expérimentation . . . . .	101
A.2	Seconde expérimentation . . . . .	107
A.2.1	Questionnaire pour les monômes . . . . .	107
A.2.2	Questionnaire pour les binômes . . . . .	107
	Bibliographie . . . . .	109

# Table des figures

1.1	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes . . . . .	5
2.1	Schéma de la plate-forme SHADDOCK . . . . .	8
2.2	Illustration des représentations de molécules sur VMD ( <i>Visual Molecular Dynamics</i> ) . . . . .	12
2.3	Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL . . . . .	16
2.4	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés . .	18
2.5	Les quatre étapes de la désignation . . . . .	19
3.1	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	32
3.2	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	32
3.3	Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu . . . . .	35
3.4	Répartition des résidus sur les molécules . . . . .	39
3.5	Temps de réalisation par résidu . . . . .	42
3.6	Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu	42
3.7	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu . . . .	43
3.8	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus ( $\mathcal{R}_6$ ), ( $\mathcal{R}_9$ ) et ( $\mathcal{R}_{10}$ ) . . . . .	46
3.9	Affinité entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	46
3.10	Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme . . .	46
3.11	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	47
3.12	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection des sujets pour chaque binôme . . . .	47

## Table des figures

---

3.13	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	48
3.14	Couplage physique et structure entre les résidus . . . . .	50
4.1	Illustration des rendus pour l’affichage de la molécule . . . . .	65
4.2	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible . .	69
4.3	Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets . . . . .	73
4.4	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets . . . . .	73
4.5	Nombre de sélection de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets . . . . .	74
6.1	Illustration du dispositif expérimental . . . . .	84



# Liste des tableaux

3.1	Liste des résidus recherchés . . . . .	37
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> . . . . .	38
3.3	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	41
4.1	Paramètres de complexité des tâches . . . . .	71
4.2	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	72
6.1	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	89

## Liste des tableaux

---

# Liste des *À faire*

(Section 6.2.0.0) 3 ou 4 . . . . .	84
(Section 6.2.0.0) Images à compléter . . . . .	84
(Section 6.3.1.0) Nombre de sujets . . . . .	85
(Section 6.3.2.0) Le questionnaire . . . . .	86
(Section 6.3.3.0) Deux configurations possibles . . . . .	87
(Section 6.3.4.0) à déterminer . . . . .	88
(Section 6.3.4.0) Dix minutes . . . . .	88

## Liste des À faire

---

# Première partie

## Introduction



# Chapitre 1

## Le sujet

### Sommaire

---

1.1	État de l’art . . . . .	3
1.2	Contexte . . . . .	3
1.2.1	L’amarrage moléculaire . . . . .	3
	Bibliographie . . . . .	6

---

### 1.1 État de l’art

### 1.2 Contexte

#### 1.2.1 L’amarrage moléculaire

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 :

**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- $\alpha$ , feuillet- $\beta$ , *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 et 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 4).

# Chapitre 2

## SHADDOCK – Système collaboratif de manipulation de molécules

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Plates-formes collaboratives existantes . . . . .</b>	<b>7</b>
2.1.1	Architecture du système . . . . .	8
2.1.2	Vue partagée . . . . .	9
<b>2.2</b>	<b>Simulation moléculaire en temps-réel . . . . .</b>	<b>10</b>
2.2.1	Les besoins . . . . .	10
2.2.2	Les outils existants . . . . .	11
<b>2.3</b>	<b>Interaction avec la simulation moléculaire . . . . .</b>	<b>15</b>
2.3.1	Les besoins . . . . .	15
2.3.2	Interaction par interface haptique . . . . .	15
<b>2.4</b>	<b>Nouveaux outils pour l'interaction . . . . .</b>	<b>17</b>
2.4.1	Amélioration de la sélection . . . . .	17
2.4.2	Déformation par groupe d'atomes . . . . .	18
2.4.3	Outil de désignation et attraction . . . . .	19
	<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>21</b>

---

### 2.1 Plates-formes collaboratives existantes

SHADDOCK est le nom de l'Environnement Virtuel Collaboratif (EVC) développé dans le cadre de cette thèse. Les EVCs existants sont nombreux mais

aucun ne convient à nos besoins. Plusieurs choix d’architectures ont été nécessaires et sont exposés dans cette section. Une vue schématique de la plateforme SHADDOCK est détaillée sur la figure 2.1. Les différents éléments de ce schéma seront expliqués dans les sections qui vont suivre. La section 2.1.1 tranchera sur la question de l’architecture pair-à-pair comparée à l’architecture client/serveur. Ensuite, la gestion d’une vue partagée est abordée dans la section 2.1.2 page suivante.



**Figure 2.1** – Schéma de la plate-forme SHADDOCK

### 2.1.1 Architecture du système

Deux types d’architectures sont possibles pour les EVCS : client/serveur ou pair-à-pair. Parmi les architectures pair-à-pair, IGLESIAS et al. [2008] propose une tâche d’assemblage collaboratif assisté par l’haptique. J. KIM et al. [2004] étudie le déplacement collaboratif d’une boîte également assisté par l’haptique. Aucune des deux plate-formes proposées ne souffre d’instabilités notables dans le rendu haptique. Dans les EVCS, l’architecture pair-à-pair permet un rendu haptique relativement stable puisque chaque nœud du système gère sa propre simulation et n’est pas lié au latence voire au coupure du réseau.

Cependant, des travaux proposent également des architectures client/serveur avec des interactions haptiques. P. HUANG et al. [2010] propose une interaction haptique client/serveur pour la manipulation d’un jeu de construction par blocs. NORMAN et HAMZA-LUP [2010] s’intéresse particulièrement aux

influences du réseau sur les interactions visuo-haptiques. L'avantage d'une architecture client/serveur est la cohérence de la simulation entre les différents nœuds du système. En effet, seul le serveur effectue la simulation et ensuite distribue les données de simulation aux différents nœuds.

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. En effet, l'architecture pair-à-pair permet un lien direct entre tous les nœuds du système. Dans le cas d'une architecture client/serveur, le serveur sert toujours d'intermédiaire ce qui augmente le nombre de rebonds des paquets réseaux.

Cependant, les systèmes pair-à-pair sont adaptés pour les environnements virtuels statiques ou faiblement dynamiques. En effet, des latences ou des coupures du réseau introduisent des erreurs de synchronisation entre les simulations ayant pour conséquence une divergence des résultats de simulation entre les différents nœuds. L'architecture client/serveur, bien que moins performante en terme de latence, permettra de conserver une cohérence de la simulation. La simulation est effectuée sur un serveur et les données de simulation sont transmises à tous les nœuds de l'EVC. Ce type d'architecture est très adapté pour les environnements virtuels dynamiques.

Étant donné les besoins en simulation, la plate-forme SHADDOCK est une architecture client/serveur.

### 2.1.2 Vue partagée

Dans un EVC, un point important est la disponibilité de la vue. Elle peut être soit privée pour chaque utilisateur, soit partagée par tous les utilisateurs.

L'un des premiers travaux sur la collaboration haptique est fourni par BASDOGAN et al. [2000] dans lequel deux utilisateurs placés dans deux pièces différentes doivent effectuer une tâche nécessitant de la synchronisation. OLIVEIRA et al. [2002] propose un EVC intégrant chaque utilisateur comme un avatar dans l'environnement virtuel. Dans les deux cas, chaque utilisateur n'a conscience des autres utilisateurs que par l'intermédiaire de l'EVC. La communication est alors restreinte aux modalités autorisées (strictement haptique et partiellement visuelle dans ces deux cas). L'impossibilité de communiquer oralement peut devenir un frein dans la collaboration.

Être conscient des faits et gestes des autres utilisateurs dans un EVC a prouvé son efficacité. SALLNÄS [2010] a beaucoup travaillé sur l'apport de l'haptique sur la conscience périphérique. Elle montre à plusieurs reprises l'intérêt d'être

conscients des faits et gestes des autres utilisateurs ainsi que de l'état de l'environnement. CASERA et al. [2006] privilégie une vue publique à tous les utilisateurs pour améliorer la conscience périphérique. Enfin, TANG et al. [2006] a exploré la collaboration sur une table tactile : tous les utilisateurs évoluent autour de la même table tactile et possède donc une conscience accrue des faits et gestes de chacun.

SHADDOCK doit permettre la collaboration sur des tâches complexes. L'objectif est d'obtenir une collaboration la plus complète possible afin d'exploiter au maximum le potentiel de chaque utilisateur présent. C'est pourquoi SHADDOCK propose une vue publique permettant à tous les utilisateurs de se trouver au même endroit pour effectuer les tâches demandées. Ils ont ainsi la possibilité de communiquer librement. La vue publique est assurée par un vidéoprojecteur projetant la vue sur un grand écran en face des utilisateurs. Les utilisateurs sont disposés de front face à l'écran.

## 2.2 Simulation moléculaire en temps-réel

La plate-forme SHADDOCK permet de visualiser des simulations moléculaires en temps-réel. Dans cette section, nous commençons par identifier les besoins en terme de simulation dans la section 2.2.1 puis par exposer les solutions logicielles retenues dans la section 2.2.2 page suivante.

### 2.2.1 Les besoins

SHADDOCK permet d'effectuer la visualisation des molécules. La visualisation est un processus complexe qui nécessite des rendus variés et complets. En effet, devant le nombre important d'informations disponibles concernant une molécule, il est primordial d'avoir un rendu graphique de molécules clair et complet sans être surchargé. Cette tâche est effectuée par le logiciel VMD (voir section 2.2.2 page ci-contre).

Ensuite, SHADDOCK simule un environnement moléculaire. Un logiciel de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce logiciel puisse interagir avec VMD. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation (par exemple, fixer certains atomes). NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*) est le parfait candidat (voir section 2.2.2 page 14).

Cependant, NAMD n'est pas conçu pour effectuer des simulations en temps-réel. Pour proposer une interaction aux utilisateurs, il est nécessaire d'avoir accès à une simulation interactive et en temps-réel. La solution à ce problème

vient avec IMD (*Interactive Molecular Dynamics*) développé par l'*Institut für Theoretische und Angewandte Physik* (ITAP) et présenté en section 2.2.2 page 14.

### 2.2.2 Les outils existants

Trois outils permettent de fournir une simulation en temps-réel de molécules : VMD pour la visualisation, NAMD pour la simulation et IMD pour la simulation en temps-réel. Ces trois outils sont présentés dans les sections suivantes.

#### VMD (*Visual Molecular Dynamics*)

Les outils de visualisation moléculaire disponibles sont relativement nombreux. Parmi les plus populaires, on peut citer PyMOL [SCHRÖDINGER 2010], 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 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 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 certaines 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, 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 2.2 page suivante) ont été utilisées sur la plate-forme SHADDOCK :

**CPK** affiche tous les atomes de la molécule sous forme de sphères en les reliant par des cylindres ; c'est un affichage très chargé lorsque le nombre d'atomes est importants mais on peut modifier la taille des sphères et des cylindres (voir figure 2.2a) ;

**Licorice** représente tous les liens entre les atomes par des cylindres, sans représenter les atomes ; la taille des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.2b) ;

**NewRibbon** produit une courbe spline sur les atomes  $C_\alpha$  représentant l'armature principale de la molécule ; la courbe est représentée sous forme de ruban (voir figure 2.2c) ;

**HBonds** affiche les potentielles liaisons hydrogène sous forme de traits en pointillés ; les seuils d'affichage ainsi que les paramètres de la ligne en pointillés (couleur, largeur, etc.) sont modifiables (voir figure 2.2d).



**Figure 2.2** – 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 ». De plus, pour chacune des représentations précédentes, différentes colorations sont possibles :



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

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

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

Par défaut et sans configuration, la souris permet d'orienter la scène sur trois degrés de liberté (DDLs) afin d'observer la molécule sous différents angles.

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 nos expérimentations.

Enfin, des outils spécifiques sont disponibles par l'intermédiaire d'une connexion avec VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) (voir section 2.3.2 page 16). Ces outils sont liés à des périphériques externes (des interfaces PHANTOM Omni® dans notre cas). Les outils disponibles par défaut dans **VMD** ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 27) et sont :

**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).

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 page 17.

**La génération automatique de fichier de simulation** La simulation nécessite de nombreuses informations dont l'ensemble des liaisons entre atomes, des angles simples, des angles diédraux et des angles de torsion. La simple

description des atomes et de leurs positions (fichier PDB) couplée aux résultats de CHARMM [BROOKS et al. 1983] permet de générer les fichiers nécessaires à la 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*.

### NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*)

Les deux logiciels de simulation principaux existants sont NAMD [PHILLIPS et al. 2005] et GROMACS [BERENDSEN et al. 1995]. Bien que GROMACS soit 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. Cependant, NAMD est développé par la même université que VMD et l'interaction entre les deux logiciels est donc extrêmement facilitée. De plus, les petites molécules que nous utiliserons lors de nos simulations ne nécessitent pas des performances exceptionnelles. Enfin, NAMD peut être aisément connecté à VMD dans le cadre d'une simulation interactive (voir section 2.2.2) 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.

### IMD (*Interactive Molecular Dynamics*)

Les logiciels de simulation ne sont pas développés pour des simulations interactives en temps-réel. Cependant, l'ITAP a développé le protocole IMD permettant d'utiliser NAMD couplé à VMD pour des simulations interactives en temps-réel [STADLER et al. 1997]. L'extension IMD *connect* permet de connecter rapidement le logiciel VMD avec la simulation de 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 l'autre logiciel de simulation GROMACS. Il se présente sous la forme d'une interface permettant de choisir le logiciel de simulation ainsi que le logiciel de visualisation. Il permet également de connecter plusieurs logiciels de visualisation à une même simulation. Cependant, cette nouvelle solution n'a pas encore été implémentée dans notre plate-forme mais c'est une amélioration technique qui sera effectuée dans les prochaines versions de la plate-forme.

## 2.3 Interaction avec la simulation moléculaire

La plate-forme SHADDOCK implémente également un moyen d'interagir avec cette simulation en temps-réel. Les besoins particuliers pour la manipulation sont présentés dans la section 2.3.1 puis les solutions logicielles dans la section 2.3.2.

### 2.3.1 Les besoins

Afin de pouvoir modifier la simulation en temps-réel, il faut pouvoir manipuler des éléments de la molécule. Il faut donc être capable de sélectionner les atomes puis de leur appliquer une force. L'environnement virtuel est en 3D et il paraît donc nécessaire d'avoir un périphérique de manipulation en 3D. Cette manipulation sera effectuée par le PHANTOM Omni® (voir section 2.3.2).

De plus, SHADDOCK est un EVC : il doit pouvoir accueillir plusieurs utilisateurs. La connexion de plusieurs périphériques apporte des contraintes matérielles et logicielles. Une architecture sous forme client/serveur sera assurée grâce au logiciel VRPN (voir section 2.3.2 page suivante).

### 2.3.2 Interaction par interface haptique

#### PHANTOM Omni® et OPENHAPTICS™

Une plate-forme de simulation interactive en temps-réel nécessite des outils d'interaction. Parmi les périphériques d'interaction existants, il faut choisir un périphérique permettant au minimum six DDLs en entrée et au minimum trois DDLs en retour haptique. En effet, l'outil *grab* nécessite six DDLs en entrée et l'outil *tug* nécessite trois DDLs en entrée et trois DDLs en retour haptique. L'interface PHANTOM Omni® [MASSIE et SALISBURY 1994] de

l'entreprise SENSABLE répond aux attentes de la plate-forme SHADDOCK (voir figure 2.3).



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

À l'origine, les interfaces haptiques de SENSABLE étaient programmables 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 haptiques sont utilisées sur SHADDOCK.

### **VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*)**

VMD offre un moyen simple et relativement universel de connecter un périphérique. En effet, il gère les connexions de périphériques par l'intermédiaire de VRPN [TAYLOR II et al. 2001]. VRPN fonctionne sous la forme d'une architecture client/serveur où VMD est l'application cliente. L'interface haptique est connectée physiquement à un autre ordinateur (le même ordinateur le cas échéant) et un serveur VRPN communique avec cette interface. C'est seulement par l'intermédiaire de VRPN et à travers le réseau *Ethernet* que VMD va percevoir les mouvements de l'interface haptique et lui envoyer les efforts à fournir. La compilation de VRPN en tant que serveur de PHANTOM Omni® sous le système d'exploitation LINUX (UBUNTU v10.04) a demandé quelques modifications dans le code. Ces modifications ont été soumises au développeur de 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 voulu. Cependant, cela suppose également d'avoir autant d'ordinateurs que de serveurs ce qui complique une

logistique complexe. On pourra noter que la chaleur dégagée par l'ensemble de ces machines additionnée à celle du vidéo-projecteur provoque des conditions d'expérimentation rapidement désagréables. C'est pourquoi aucune des expérimentations proposées ne durait plus de 30 mn ou, le cas échéant, une pause est effectuée au bout de 30 mn afin d'aérer la salle d'expérimentation.

## 2.4 Nouveaux outils pour l'interaction

Durant les différentes études présentées dans la [partie II page 27](#), 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.

### 2.4.1 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.

Cependant, lorsque seul un atome est mis en surbrillance, il peut être difficile de l'apercevoir. En effet, le nombre important d'atomes d'une molécule peut surcharger le rendu graphique. C'est pourquoi, l'ensemble du résidu auquel appartient l'atome pointé est également mis en surbrillance. Seul l'atome pointé est agrandi.

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 2.4 page suivante](#).



**Figure 2.4** – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

### 2.4.2 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.

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 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 un effort à un groupe d'atomes permet de déplacer un bloc d'atomes tout en conservant une certaine stabilité. Les groupes d'atomes dignes d'intérêt sont les résidus (une vingtaine d'atomes), les hélices- $\alpha$  ou feuillets- $\beta$  (une vingtaine de résidus) et les molécules. Cependant, *VMD* n'est pas capable de fournir l'information sémantique regroupant les atomes en hélices- $\alpha$  ou en feuillets- $\beta$ . La fonctionnalité de l'outil *tug* a donc été étendue aux résidus et aux molécules.

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 importantes et produisent des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation. Il est donc nécessaire de diviser l'intensité des forces proportionnellement au nombre d'atomes sélectionnés.

### 2.4.3 Outil de désignation et attraction

Un aspect récurrent constaté durant les expérimentations est la nécessité de désigner un élément de la molécule. Parfois les utilisateurs éprouvent le besoin de désigner mais la plupart du temps, ce sont les enregistrement audio qui ont permis d'identifier ce besoin.

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

- Recherche d'une cible (voir figure 2.5a) ;
- Désignation d'une cible (voir figure 2.5b) ;
- Acceptation d'une cible (voir figure 2.5c) ;
- Sélection d'une cible (voir figure 2.5d).



**Figure 2.5** – Les quatre étapes de la désignation

L'étape a consiste pour un utilisateur  $\mathcal{A}$  à rechercher une cible à désigner. La recherche de cette cible répondra au besoin d'obtenir de l'aide d'un utilisateur  $\mathcal{B}$ .

L'étape b consiste pour l'utilisateur  $\mathcal{A}$  à désigner la cible identifiée. La cible est alors mise en surbrillance de façon à être vue des autres utilisateurs.

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. Tant qu'elle n'est pas acceptée, la résidu reste en 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.

Parallèlement à ces quatre étapes, des aides haptiques ont été ajoutées pour la dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 83). Pour l' étape b page précédente, des vibrations sont générées sur tous les utilisateurs concernés par la désignation. De plus, dès l'instant qu'un utilisateur a accepté la désignation (voir étape c page précédente), il est guidé de façon haptique vers la cible. La vibration chez tous les autres utilisateurs est arrêtée.



## Bibliographie

[BASDOGAN et al. 2000]

BASDOGAN, Cagatay, Chih-Hao HO, Mandayam A. SRINIVASAN et Mel SLATER (déc. 2000). « An experimental study on the role of touch in shared virtual environments ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.4, pages 443–460 (cf. page 9).

[BERENDSEN et al. 1995]

BERENDSEN, Herman J. C., David van der SPOEL et Rudy van DRUNEN (sept. 1995). « GROMACS : a message-passing parallel molecular dynamics implementation ». Anglais. Dans *Computer Physics Communications* 91.1–3, pages 43–56 (cf. page 14).

[BROOKS et al. 1983]

BROOKS, Bernard R., Robert E. BRUCCOLERI, Barry D. OLAFSON, David J. STATES, Sundaramoorthi SWAMINATHAN et Martin KARPLUS (avr. 1983). « CHARMM : a program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 4.2, pages 187–217 (cf. page 14).

[CASERA et al. 2006]

CASERA, Steve, Hans-Heinrich NÄGELI et Peter KROPF (août 2006). « Improving usability of collaborative scientific visualization systems ». Anglais. Dans *Proceedings of Visualization, Imaging, and Image Processing*. Tome 541, pages 180–186 (cf. page 10).

[DELALANDE et al. 2009]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAAEDEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. page 14).

[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, and scalable molecular simulation ». Anglais. Dans *Journal of chemical theory and computation* 4.3, pages 435–447 (cf. page 14).

[P. HUANG et al. 2010]

HUANG, Pingguo, Yutaka ISHIBASHI, Norishige FUKUSHIMA et Shinji SUGAWARA (oct. 2010). « Interactivity improvement of group synchronization 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 8).

[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 11).

[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 (cf. page 8).

[ITKOWITZ et al. 2005]

ITKOWITZ, Brandon, Josh HANDLEY et Weihang ZHU (mar. 2005). « The OpenHaptics<sup>TM</sup> toolkit : a library for adding 3D<sup>TM</sup> navigation and haptics to graphics applications ». Anglais. Dans *Proceedings of the first joint eurohaptics conference and symposium on haptic interfaces for virtual environment and teleoperator systems*. WHC '05. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 590–591 (cf. page 16).

[J. KIM et al. 2004]

KIM, Jung, Hyun KIM, Boon K. TAY, Manivannan MUNIYANDI, Mandayam 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 8).

[MARSH et al. 2006]

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 9).

[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, Cambridge, United States, pages 295–300 (cf. page 15).

[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 8).

[OLIVEIRA et al. 2002]

OLIVEIRA, Jauvane C. de, XiaoJun SHEN et Nicolas D. GEORGANAS (nov. 2002). « Collaborative virtual environment for industrial training and e-commerce ». Anglais. Dans *Virtual reality technologies for future telecommunications systems*. Sous la direction d'Algirdas PAKSTAS et Ryoichi KOMIYA. San Francisco, CA, USA : Willey, pages 79–102 (cf. page 9).

[PETTERSEN et al. 2004]

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 11).

[PHILLIPS et al. 2005]

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 14).

[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).

[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 11).

[SCHRÖDINGER 2010]

SCHRÖDINGER, LLC, éditeur (août 2010). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 03/06/2011) (cf. page 11).

## Bibliographie

---

[SENSABLE 2002]

SENSABLE, Technologies Incorporated® (avr. 2002). *GHOST® software developer's toolkit programmer's guide*. Anglais. 4.0. SensAble Technologies Incorporated® (cf. page 16).

[SOURCEFORGE.NET 2006]

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 11).

[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 14).

[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 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 16).

## Deuxième partie

### Étude du travail collaboratif



# Chapitre 3

## Recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>28</b>
<b>3.2</b>	<b>Présentation</b>	<b>28</b>
3.2.1	Objectifs	28
3.2.2	Hypothèses	30
<b>3.3</b>	<b>Dispositif expérimental et matériel</b>	<b>30</b>
3.3.1	Dispositif technique	31
3.3.2	Disposition des éléments	31
3.3.3	Visualisation et interactions	33
<b>3.4</b>	<b>Méthode</b>	<b>33</b>
3.4.1	Sujets	33
3.4.2	Variabes	34
3.4.3	Tâche	36
3.4.4	Procédure	40
<b>3.5</b>	<b>Résultats</b>	<b>40</b>
3.5.1	Amélioration des performances en binôme	42
3.5.2	Stratégies de travail	45
3.5.3	Résultats qualitatifs	52
<b>3.6</b>	<b>Synthèse</b>	<b>54</b>
3.6.1	Résumé des résultats	54
3.6.2	Perspectives	55

## 3.1 Introduction

La majeure partie de la thèse est l'étude du travail collaboratif en environnement 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 5). Nous nous proposons d'étudier ces quatre tâches élémentaires indépendamment les unes des autres. La première de ces expérimentations s'intéresse particulièrement 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 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. Le dispositif expérimental est présenté dans la section 3.3 page 30. La section 3.4 page 33 expose la tâche réalisée ainsi que les différentes variables de l'expérimentation. Enfin, les résultats sont analysés dans la section 3.5 page 40 puis une synthèse de cette expérimentation est exposée dans la section 3.6 page 54.

## 3.2 Présentation

### 3.2.1 Objectifs

Dans cette première expérimentation, nous proposons d'étudier les deux premières des quatre tâches élémentaires (voir section 1.2.1 page 3) : 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 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 environnement 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.

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 certains 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 environnement virtuel en 3D comme BENFORD et al. [1999] par exemple.

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 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 stratégies 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.

### 3.2.2 Hypothèses

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.

( $\mathcal{H}_1$ ) **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.

( $\mathcal{H}_2$ ) **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.

( $\mathcal{H}_3$ ) **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.

## 3.3 Dispositif expérimental et matériel

Dans cette section est exposé l'ensemble du dispositif expérimental utilisé lors de l'expérience. L'expérience est basée sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 7. Nous commencerons par présenter le matériel nécessaire dans la section 3.3.1 page ci-contre. Ensuite, nous détaillerons la disposition de

chaque élément dans le dispositif expérimental dans la section 3.3.2 page suivante. Enfin, nous terminerons par les visualisations proposées et les interactions possibles des sujets sur le dispositif expérimental dans la section 3.3.3 page 33.

#### 3.3.1 Dispositif technique

La réalisation de cette expérimentation nécessite l'ensemble des matériels suivants :

- 1 ordinateur quatre cœurs Intel® Core™ 2 Q9450 (2,66 GHz) avec 4 Go de RAM ;
- 2 ordinateurs de faible puissance ;
- 3 interfaces haptiques PHANTOM Omni® ;
- 1 vidéoprojecteur CASIO XJ ;
- 1 grand écran de vidéoprojection ;
- 1 écran LCD 17 pouces ;
- 1 microphone de bureau.

#### 3.3.2 Disposition des éléments

Durant la phase expérimentale, les sujets sont placés en face de l'écran de vidéoprojection avec le vidéoprojecteur derrière eux. La visualisation du grand écran est accessible à tous les sujets : c'est une vue *partagée*. Dans le cas d'un binôme, les sujets sont placés à côté l'un de l'autre. Il n'y a aucun obstacle entre eux afin de ne pas gêner les éventuelles communications (verbales ou gestuelles). De plus, les sujets auront face à eux un écran LCD.

Face aux sujets se trouvent trois interfaces haptiques. L'interface du milieu est l'outil de manipulation *grab*. Les deux interfaces sur les côtés sont des outils de déformation *tug* (voir section 2.2.2 page 13).

L'expérimentateur est placé derrière les sujets afin de ne pas gêner le champ visuel. Il dispose d'un écran permettant de lancer et de stopper les scénarios. La surveillance du bon déroulement de l'expérimentation est effectuée depuis ce poste.

Finalement, le microphone est placé sur la table face aux sujets afin d'enregistrer tous les échanges verbaux. Les enregistrements sont effectués à l'aide du logiciel AUDACITY® .

La figure 3.1 page suivante est un schéma récapitulatif de la disposition des tous les éléments dans la salle d'expérimentation. La figure 3.2 page suivante est une photographie de la salle d'expérimentation.



**Figure 3.1** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 3.2** – Photographie du dispositif expérimental

### 3.3.3 Visualisation et interactions

La vue complète de la molécule est projetée sur le grand écran. Les rendus graphiques utilisés sur VMD pour afficher la molécule sont les rendus suivants (voir section 2.2.2 page 11) :

- un rendu CPK avec des atomes de taille assez petite afin de pouvoir apprécier l'ensemble des atomes de la molécule ;
- un second rendu CPK pour agrandir tous les atomes sauf les atomes d'hydrogène qui sont peu informatifs ;
- un rendu *NewRibbon* pour apprécier la structure globale de la molécule.

L'écran LCD est utilisé pour afficher les résidus à chercher dans la molécule (voir section 3.4.3 page 36). Un simple rendu CPK est utilisé comme on peut le voir sur la table 3.1 page 37.

Parmi les trois interfaces haptiques PHANTOM Omni®, l'outil *grab*, placé au centre est accessible depuis chacune des deux chaises à disposition. Dans le cas d'un binôme, un seul des deux sujets utilisera l'outil durant tout la durée de l'expérimentation. Cependant, le choix du sujet qui utilisera cet outil est déterminé par négociation au sein du binôme.

Concernant les deux outils *tug*, ils sont répartis entre les deux sujets dans le cas d'un binôme. Cependant, seulement un outil *tug* est laissé à disposition dans le cas d'un monôme. Les sujets peuvent se placer sur la chaise (droite ou gauche) qu'ils souhaitent et ainsi se mettre dans les meilleures conditions concernant leur main dominante.

## 3.4 Méthode

### 3.4.1 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'Ingénieur (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.

### 3.4.2 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 37). Différents niveaux de complexité caractérisent chaque résidu (voir table 3.2 page 38).

#### Variables dépendantes

( $\mathcal{V}_{d1}$ ) **Le 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.

( $\mathcal{V}_{d3}$ ) **Les 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 3.3.



**Figure 3.3** – Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu

( $\mathcal{V}_{d4}$ ) **L'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 ;
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.

( $\mathcal{V}_{d5}$ ) **La force moyenne appliquée par les sujets** Le force appliquée par chaque sujet sur les atomes durant la simulation est mesurée. Une valeur 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 A.1 page 101.

### 3.4.3 Tâche

La tâche proposée consiste à trouver puis à extraire des résidus d'une molécule. Les résidus sont des groupes d'atomes. Tous les résidus à rechercher sont affichés dans la table 3.1 page suivante. Trois molécules sont proposées dans le cadre de cette expérimentation :

**TRP-ZIPPER** La molécule TRP-ZIPPER [CHRISTEN et al. 2009] a pour identifiant PDB **2KFL** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus. Elle est peu complexe et est seulement être utilisée pour un entraînement et un apprentissage des outils de manipulation.

**TRP-CAGE** La molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] a pour identifiant PDB **1L2Y** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 304 atomes dont 20 résidus. C'est une des deux molécules proposées pour la tâche de recherche et d'extraction de 5 résidus (voir table 3.1a page ci-contre).

**Prion** La molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB **2KFL** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus. C'est une des deux molécules proposées pour la tâche de recherche et d'extraction de 5 résidus (voir table 3.1b page suivante).

La figure 3.4 page 39 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 38, sont les suivants :

**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.

**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 :

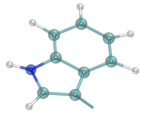

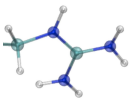
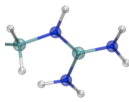
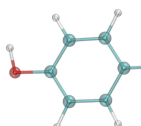
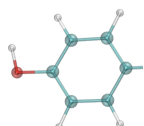
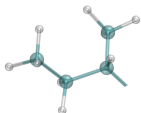
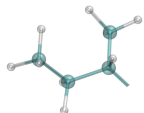
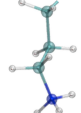
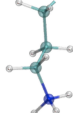
**Chaîne** Une chaîne d'atomes (la plupart du temps carbonés) avec des atomes d'hydrogène de chaque côté.

---

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



**Table 3.1** – Liste des résidus recherchés**(a)** Résidus sur la molécule TRP-CAGE**(b)** Résidus sur la molécule Prion

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

**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).

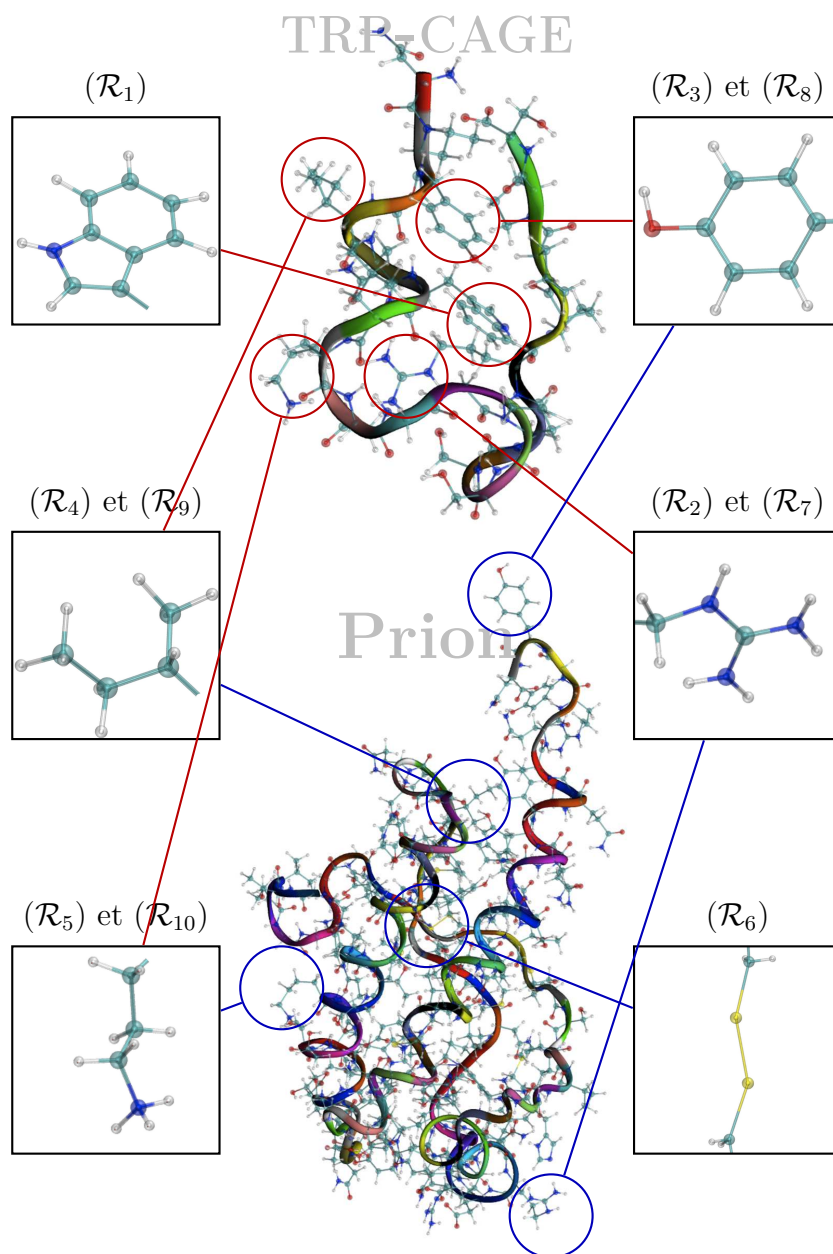
**Couleurs** Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l’oxygène, blanc pour l’hydrogène, *etc.*). Les atomes rares seront donc rapidement identifiés grâce à leur couleur singulière. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbones) seront plus difficiles à filtrer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

**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.

**Table 3.2** – Paramètres de complexité des résidus – Carbone en *cyan*, Azote en *bleu*, Oxygène en *rouge* et 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

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.

**Figure 3.4** – Répartition des résidus sur les molécules

Pour effectuer ces étape de sélection, les sujets disposent de l'outil *tug*. Les outils *grab* et *tug* sont décrits dans la section 2.2.2 page 13.

### 3.4.4 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 questions 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 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 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.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 3.3 page suivante.

## 3.5 Résultats

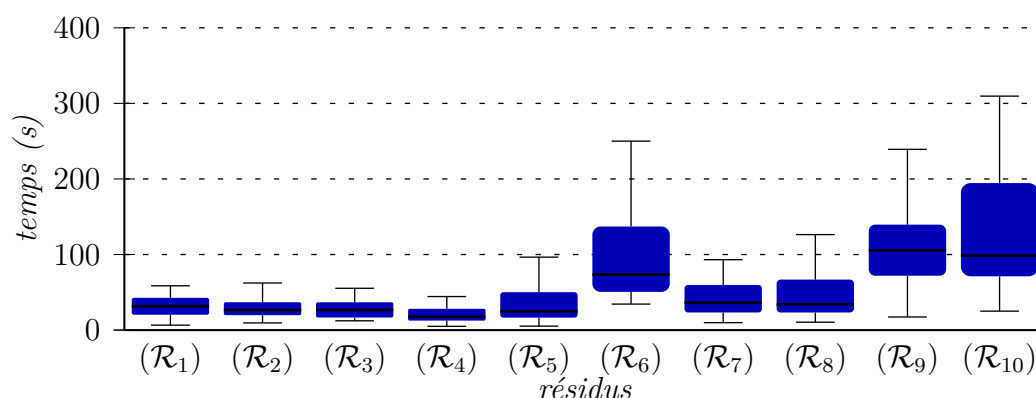
Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette première étude concernant la recherche et la sélection sur une tâche complexe de collaboration. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant,

**Table 3.3** – Synthèse de la procédure expérimentale

<b>Tâche</b>	Recherche et sélection de motifs	
<b>Hypothèses</b>	$(\mathcal{H}_1)$ Amélioration des performances en binôme $(\mathcal{H}_2)$ Stratégies variables en fonction des binômes $(\mathcal{H}_3)$ Les sujets préfèrent le travail en binôme	
<b>Variable in-dépendantes</b>	$(\mathcal{V}_{i1})$ Nombre de sujets $(\mathcal{V}_{i2})$ Résidu à chercher	
<b>Variable dépendantes</b>	$(\mathcal{V}_{d1})$ Temps de réalisation $(\mathcal{V}_{d2})$ Distance entre les espaces de travail $(\mathcal{V}_{d3})$ Communication verbales $(\mathcal{V}_{d4})$ Affinités entre les sujets $(\mathcal{V}_{d5})$ La force moyenne appliquée par le sujet $(\mathcal{V}_{d6})$ Réponses qualitatives	
<b>Condition (<math>\mathcal{C}_1</math>)</b>	<b>Condition (<math>\mathcal{C}_2</math>)</b>	<b>Condition (<math>\mathcal{C}_3</math>)</b>
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

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.

### 3.5.1 Amélioration des performances en binôme

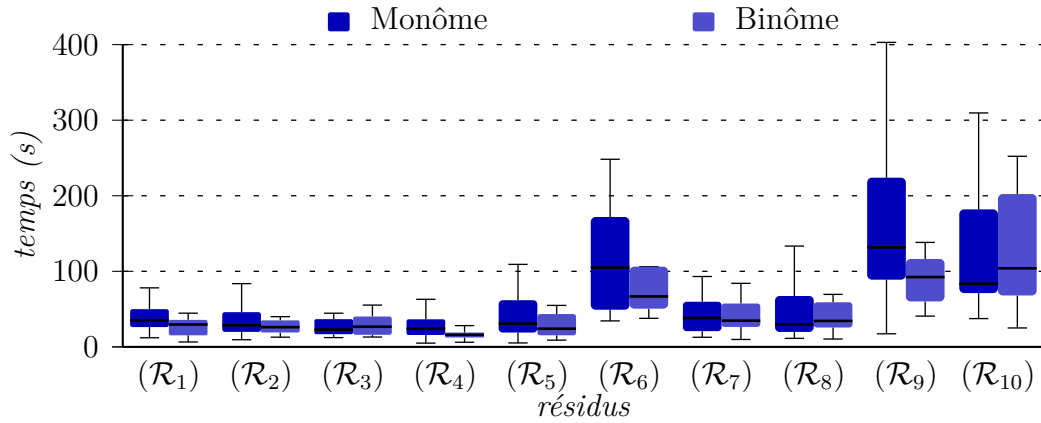


**Figure 3.5** – Temps de réalisation par résidu

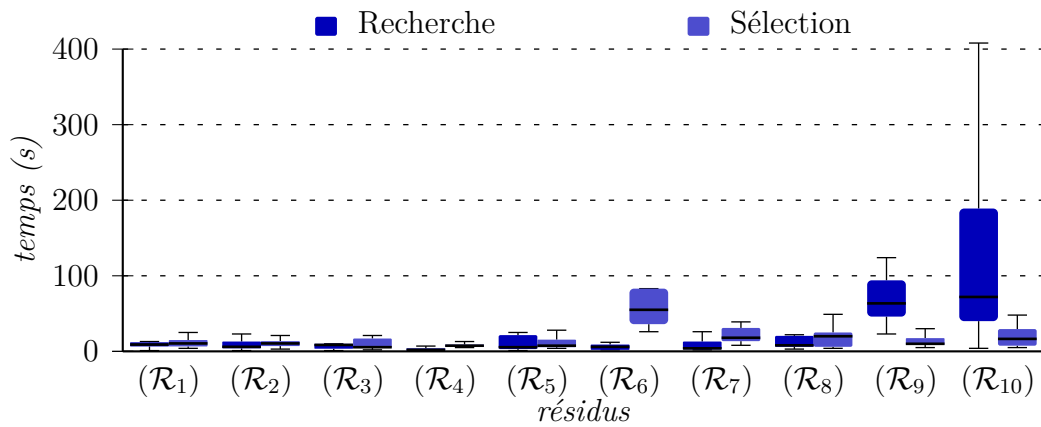
La figure 3.5 présente le temps de réalisation ( $\mathcal{V}_{d1}$ ) pour l'identification et l'extraction de chaque résidu ( $\mathcal{V}_{i2}$ ). L'analyse montre qu'il y a un effet significatif des résidus ( $\mathcal{V}_{i2}$ ) sur le temps de réalisation ( $\mathcal{V}_{d1}$ ) ( $\chi^2 = 163.1$ ,  $df = 9$ ,  $p \ll 0.05$ ). 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 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 du nombre de participants ( $\mathcal{V}_{i1}$ ) sur le temps de réalisation ( $\mathcal{V}_{d1}$ ) ( $\chi^2 = 7.7$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.006$ ).

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



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



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

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 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 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 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 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 ( $\mathcal{R}_6$ ), ( $\mathcal{R}_9$ ) 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 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 la tâche peut être séparé en deux parties : le temps de recherche et le temps de sélection (voir figure 3.3 page 35). 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 38). Ces similarités 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 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.

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

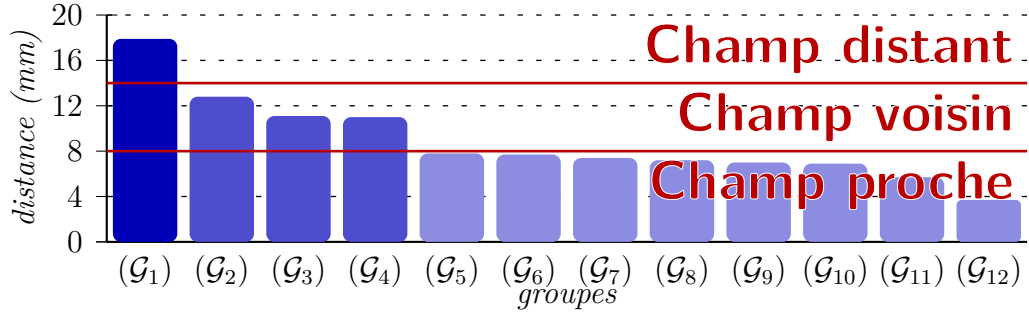
**Temps de recherche et de sélection égaux** Les sujets ont un temps identique alloué à l'étape de recherche et de sélection. Les résidus concernés ne présentent pas de forte complexité (tous les résidus de la molécule TRP-CAGE et les résidus ( $\mathcal{R}_7$ ) et ( $\mathcal{R}_8$ ) de la molécule Prion) et sur 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 (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 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.

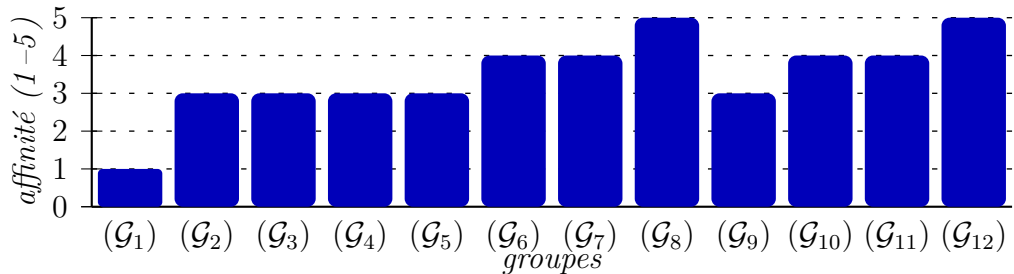
### 3.5.2 Stratégies de travail

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.



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

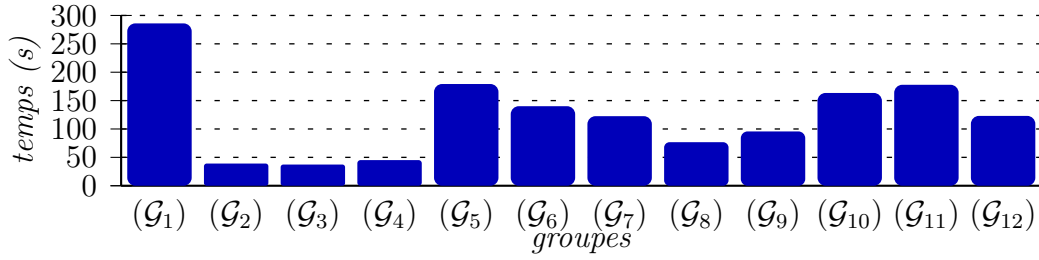
La figure 3.8 page suivante présente la distance moyenne entre les espaces de travail ( $\mathcal{V}_{d2}$ ) de chaque binôme. Les binômes peuvent être classés en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.



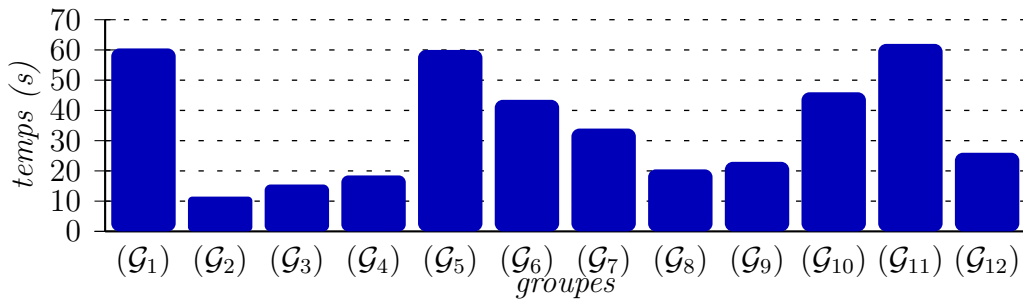
**Figure 3.9** – Affinité entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.9 page suivante 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.



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

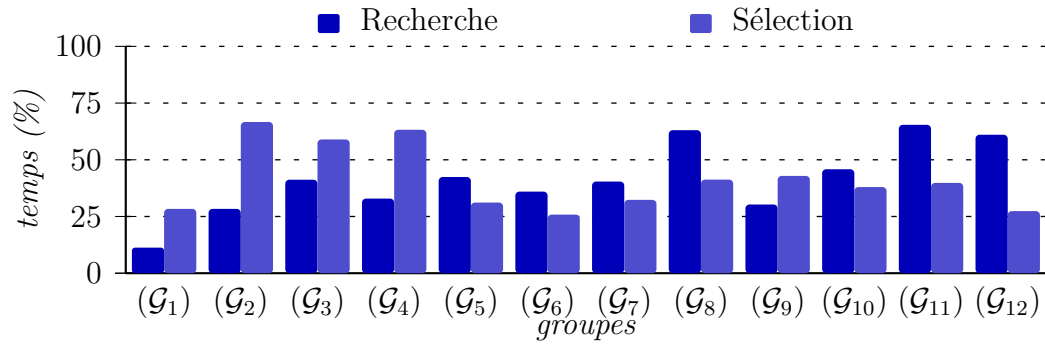


**Figure 3.11** – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

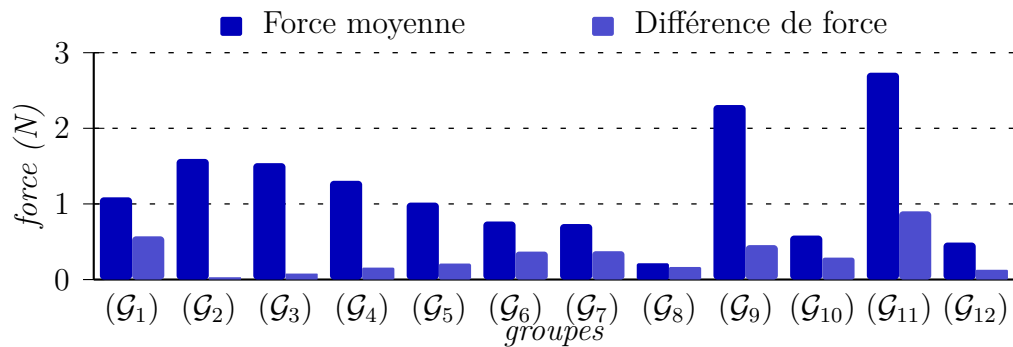
La figure 3.11 présente les temps de communication verbale ( $\mathcal{V}_{d3}$ ) de chaque binôme. ( $\mathcal{G}_2$ ), ( $\mathcal{G}_3$ ) et ( $\mathcal{G}_4$ ) ont des temps de communication verbale inférieurs à 20 s. À l’opposé, ( $\mathcal{G}_1$ ), ( $\mathcal{G}_5$ ) et ( $\mathcal{G}_{11}$ )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

La figure 3.12 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.

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.



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



**Figure 3.13** – Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque 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 résidu<sup>2</sup>. 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 46, 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 46, 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 47.

En observant plus précisément les temps de communication verbale sur la figure 3.12 page 47, 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 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.

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

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 46).

Les binômes ne travaillent pas de façon partagée comme le montre les différences importantes de forces appliquées (voir figure 3.13 page précédente). Un des deux sujets effectue une majorité du travail contrairement à l'autre sujet. De plus, les interactions en champ proche génèrent de nombreux conflits 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 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. Les résidus voisins sont dépendants physiquement ou structurellement comme indiqué sur la figure 3.14. En effet, les résidus interagissent entre eux : plus les distances sont courtes, plus les contraintes physiques sont fortes.

Sur la figure 3.9 page 46, 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 46 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 47. La manipulation en champ voisin permet d'être continuellement conscient



**Figure 3.14** – Couplage physique et structure entre les résidus

des actions du partenaire ce qui évite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des résidus différents ce qui limite les conflits d'interactions qui interviennent en champ proche.

La figure 3.12 page 47 montre un nombre de conflits 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 48 illustre une bonne répartition des efforts entre les deux 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 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.

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 similaires à ceux rencontrés en champs proches soient présents bien que plus limités en nombre.

### Interaction en champ distant

Les interactions en champ voisin, supérieures à 14 nm, 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 ( $\mathcal{G}_1$ )). 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 46) : les membres ne se connaissent presque pas. De plus, le binôme obtient de très mauvaises performances en ce qui concerne le temps de réalisation de la tâche comme le montre la figure 3.10 page 46. La figure 3.11 page 47 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 47). En effet, les membres du binôme travaillent à distance et ont peu d'interactions entre eux. Le peu d'interaction permet de limiter le nombre de conflits ce qui implique le peu de communication verbale comme on peut le voir sur la figure 3.12 page 47. 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 favorisent les conflits.

La figure 3.13 page 48 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.

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 d'interaction ainsi que la communication. Cependant, 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

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.

Cependant, ce sont les interactions en champ voisins qui produisent les meilleures performances. En effet, les conflits 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 des charges de travail tout en limitant les communication verbales. La plupart du temps, les communications verbales sont destinées à la résolution de conflit : 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 (voir chapitre 6 page 83).

### 3.5.3 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 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 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 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 ( $\approx 70\%$ ).

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 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 proportion 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 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 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 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.

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 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.

## 3.6 Synthèse

### 3.6.1 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.

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 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 sont pas des stratégies très performantes. En effet, le nombre de conflits 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 des conflits.

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.

### 3.6.2 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 fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 59) ou par la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 79).

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 fournissant une assistance en champ voisin tout en maintenant une distance minimum afin de limiter les conflits 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 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 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 83).

## 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 ». Dans *ACM Computing Survey* 31.4 (cf. page 29).

[BOWMAN 1999]

BOWMAN, Douglas A. (juin 1999). « Interaction techniques for common tasks in immersive virtual environments : design, evaluation, and application ». Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia Institute of Technology (cf. page 38).

[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 40).

[CHRISTEN et al. 2009]

CHRISTEN, Barbara, Simone HORNEMANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar wallaby (*macropus eugenii*) shows that the  $\beta 2$ - $\alpha 2$  loop is modulated by long-range sequence effects ». Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 36).

[DARKEN 1996]

DARKEN, Rudolph Poul (1996). « Wayfinding in large-scale virtual worlds ». Thèse de doctorat. Washington, DC, USA : The George Washington University, Department of Electrical Engineering et Computer Science (cf. page 29).

[FOLEY 2008]

FOLEY, Colum (juin 2008). « Division of labour and sharing of knowledge for synchronous collaborative information retrieval ». Thèse de doctorat. Dublin City University, School of Computing et Centre for Digital Video Processing (cf. page 29).

[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 40).

[HOLM 1979]

HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 42, 43).

[LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 52).

[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 42, 43).

[MÉNÉLAS 2010]

MÉNÉLAS, Bob Antoine Jerry (sept. 2010). « Rendus sensorimoteurs en environnements virtuels pour l'analyse de données scientifiques complexes ». Thèse de doctorat. Université de Paris Sud (cf. page 29).

[NEIDIGH et al. 2002]

NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 36).

[PICKENS et GOLOVCHINSKY 2007]

PICKENS, Jeremy et Gene GOLOVCHINSKY (oct. 2007). « Collaborative exploratory search ». 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 29).

[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 40).

# Chapitre 4

## Déformation collaborative de molécule

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>60</b>
<b>4.2</b>	<b>Présentation</b>	<b>60</b>
4.2.1	Objectifs	60
4.2.2	Hypothèses	62
<b>4.3</b>	<b>Dispositif expérimental et matériel</b>	<b>62</b>
4.3.1	Dispositif technique	63
4.3.2	Disposition des éléments	63
4.3.3	Visualisation et interactions	63
<b>4.4</b>	<b>Méthode</b>	<b>66</b>
4.4.1	Sujets	66
4.4.2	Variables	66
4.4.3	Tâche	67
4.4.4	Procédure	71
<b>4.5</b>	<b>Résultats</b>	<b>72</b>
4.5.1	Amélioration des performances en binôme	73
4.5.2	Gain de performance sur les tâches complexes	75
4.5.3	Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	75
<b>4.6</b>	<b>Synthèse</b>	<b>75</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>76</b>

---

## 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.

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 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 5) 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*.

Tout d'abord, nous présenterons les objectifs et les hypothèses de cette seconde expérimentation dans la section 4.2. Ensuite, le dispositif expérimental, modifié pour cette nouvelle étude, est présenté dans la section 4.3 page 62. La section 4.4 page 66 expose les différents détails concernant la tâche proposée et les variables étudiées. Les résultats seront analysés dans la section 4.5 page 72. Enfin, la section 4.6 page 75 effectue une synthèse de cette seconde étude et propose des perspectives pour les expérimentations qui vont suivre.

## 4.2 Présentation

### 4.2.1 Objectifs

Après avoir étudié la tâche élémentaire de *recherche* et de *sélection*, cette seconde expérimentation se portera plus en détails sur la tâche élémentaire de *déformation* en collaboration (voir figure 1.1 page 5). Cette tâche nécessite



une grande synchronisation et favorise les collaborations étroites. La précédente expérimentation (voir chapitre 3 page 27) 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 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 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.

### 4.2.2 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.

## 4.3 Dispositif expérimental et matériel

Cette seconde expérimentation se base sur un dispositif expérimental relativement similaire à celui de la première expérimentation. L'expérience est basée sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 7. Dans un premier temps,

une liste du matériel utilisé est présenté dans la section 4.3.1 puis la disposition de chacun de ces éléments dans la section 4.3.2. Puis, dans un second temps, les aspects logiciels seront détaillés dans la section 4.3.3.

### 4.3.1 Dispositif technique

La réalisation de cette expérimentation nécessite l'ensemble des matériels suivants :

- 1 ordinateur quatre cœurs Intel® Core™ 2 Q9450 (2,66 GHz) avec 4 Go de RAM ;
- 2 ordinateurs de faible puissance ;
- 2 interfaces haptiques PHANTOM Omni® ;
- 1 souris 3D SpaceNavigator® ;
- 1 vidéoprojecteur CASIO XJ ;
- 1 grand écran de vidéoprojection.

### 4.3.2 Disposition des éléments

Cette nouvelle étude propose une disposition relativement similaire à la première expérimentation (voir section 3.3.2 page 31). Les sujets sont face à un écran de vidéoprojection, le vidéoprojecteur se trouvant derrière eux. La vue partagée permet à tous les sujets de voir le grand écran et de communiquer librement.

Deux interfaces haptiques se trouvent faces aux sujets : ce sont deux outils de déformation *tug* (voir section 2.2.2 page 13). Le sujet d'un monôme aura accès aux deux interfaces en manipulation bimanuelle. Dans le cas d'un binôme, chaque sujet aura un outil à sa disposition. De plus, le SpaceNavigator® est placé entre les deux interfaces haptiques afin d'être accessibles à tous les sujets.

L'expérimentateur dirige les opérations depuis un poste de travail placé derrière les sujets. C'est lui qui lance et stoppe les différents scénarios proposés.

La ?? page ?? illustre le dispositif expérimental par un schéma. La ?? page ?? est une photographie de la salle d'expérimentation.

### 4.3.3 Visualisation et interactions

Chaque molécule proposée est projetée dans son intégralité sur l'écran de vidéoprojection avec les rendus graphiques suivants (voir section 2.2.2 page 11) :



- un rendu CPK avec des atomes de taille assez petite afin de pouvoir apprécier l'ensemble des atomes de la molécule ;
- un second rendu CPK pour agrandir tous les atomes sauf les atomes d'hydrogène qui sont peu informatifs ;
- un rendu *NewRibbon* pour apprécier la structure globale de la molécule.

De plus, un affichage de l'état stable de la molécule est affiché par un rendu *NewRibbon* transparent. Pour les besoins de la simulation, certains résidus sont fixes et sont alors représentés avec la couleur grise. Enfin, les résidus sélectionnés sont affichés avec un rendu CPK en transparence et de la couleur du curseur concerné. La figure 4.1 illustre l'ensemble des rendus graphiques précédemment décrits.



**Figure 4.1** – Illustration des rendus pour l'affichage de la molécule

Les outils *tug* vont permettre aux sujets de déformer la molécule. Les monômes se placent devant les deux interfaces haptiques de façon à pouvoir manipuler en configuration bimanuelle. Dans le cas d'un binôme, chaque sujet est installé face à un outil. Le SpaceNavigator® est laissé libre d'utilisation pour les sujets quelque soit le nombre de sujets.

## 4.4 Méthode

### 4.4.1 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 25.9$ ,  $\sigma = 4.7$  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 ;
- 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 donnée au commencement de l'expérimentation mais en omettant l'objectif de l'étude.

### 4.4.2 Variables

#### Variables indépendantes

( $\mathcal{V}_{11}$ ) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable inter-sujets. ( $\mathcal{V}_{11}$ ) possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». 12 monômes et 12 binômes sont testés.

( $\mathcal{V}_{12}$ ) **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées sur chacune des deux molécules : une déformation au niveau inter-moléculaire et une déformation au niveau intra-moléculaire.

( $\mathcal{V}_{13}$ ) **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

( $\mathcal{V}_{d1}$ ) **Le 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.

( $\mathcal{V}_{d2}$ ) **Le 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.

( $\mathcal{V}_{d3}$ ) **La 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.

( $\mathcal{V}_{d4}$ ) **La 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.

( $\mathcal{V}_{d5}$ ) **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets (variable en fonction des monômes et des binômes). Il se décline en deux versions destinées soit aux monômes, soit aux binômes. Le questionnaire soumis aux sujets est disponible dans la section A.2 page 107.

### 4.4.3 Tâche

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

#### 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 dé-

former est affiché. Trois molécules sont utilisées dans le cadre de cette expérimentation :

**Prion** La molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB **2KFL** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus. Elle est très complexe et est seulement utilisée pour un entraînement complet et un apprentissage approfondi des outils de manipulation.

**TRP-ZIPPER** La molécule TRP-ZIPPER [CHRISTEN et al. 2009] a pour identifiant PDB **2KFL** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus.

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

Lorsqu'un sujet sélectionne un atome ou un résidu, ce dernier est mis en 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 4.2 page suivante). Le score affiché est le *Root Mean Square Deviation* (RMSD) qui permet de mesurer la différence entre deux déformations 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.

### Description des scénarios

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

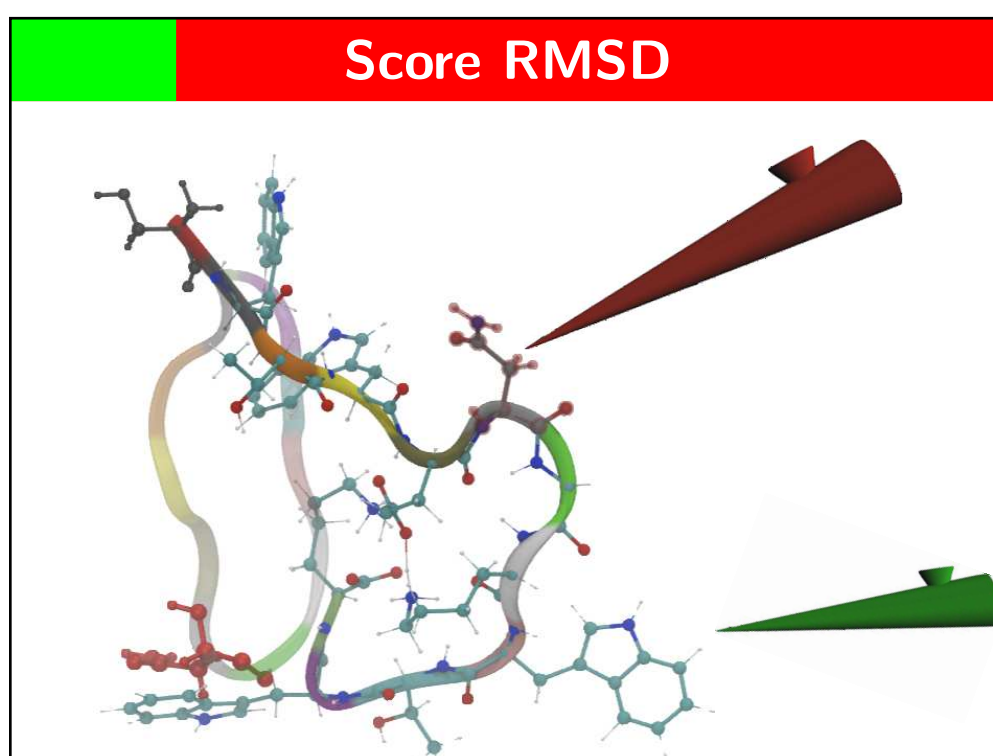
- inter-moléculaire (à l'échelle d'un résidu) ;
- intra-moléculaire (à l'échelle d'un atome).

Les paragraphes suivants décrivent les quatre scénarios :

---

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





**Figure 4.2** – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

**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 suivante 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- $\alpha$  et/ou les feuillets- $\beta$  ;

**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

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 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.

#### 4.4.4 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 confrontés aux scénarios 1A et 1B. Les scénarios sont alternés entre les groupes de sujets 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 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.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 4.2.

**Table 4.2** – Synthèse de la procédure expérimentale

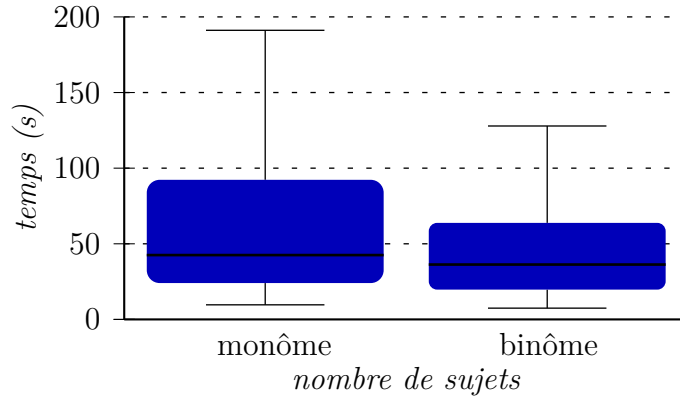
Tâche	Déformation d'une molécule			
<b>Hypothèses</b>	$(\mathcal{H}_1)$ Amélioration des performances en binôme			
	$(\mathcal{H}_2)$ binômes plus performants sur les tâches complexes			
	$(\mathcal{H}_3)$ Apprentissage plus performant en binôme			
<b>Variable indépendante</b>	$(\mathcal{V}_{i1})$ Nombre de sujets			
	$(\mathcal{V}_{i2})$ Complexité de la tâche			
	$(\mathcal{V}_{i3})$ Niveau d'apprentissage			
<b>Variable dépendantes</b>	$(\mathcal{V}_{d1})$ 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			
	$(\mathcal{V}_{d5})$ Réponses qualitatives			
Condition	Condition	Condition	Condition	
$(\mathcal{C}_1)$	$(\mathcal{C}_2)$	$(\mathcal{C}_3)$	$(\mathcal{C}_4)$	
Bimanuel ( $N = 1$ )	Bimanuel ( $N = 1$ )	Collaboratif ( $N = 2$ )	Collaboratif ( $N = 2$ )	
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	

## 4.5 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'homoscedasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée avec différents tests statistiques suivant les cas :

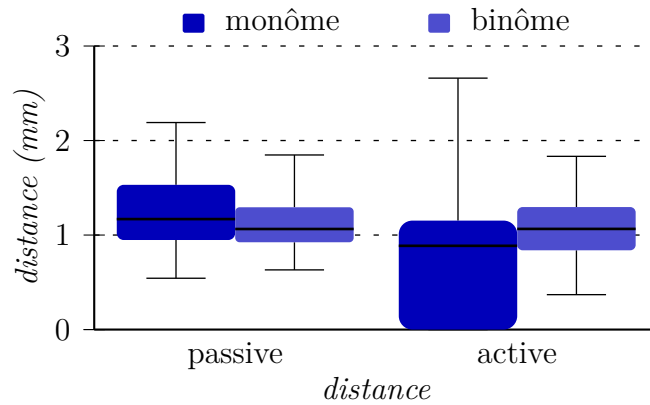
- test de FRIEDMAN [1940] pour les variables intra-sujets non-paramétriques ;
- test de KRUSKAL et WALLIS [1952] pour les variables inter-sujets non-paramétriques.

### 4.5.1 Amélioration des performances en binôme



**Figure 4.3** – Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets

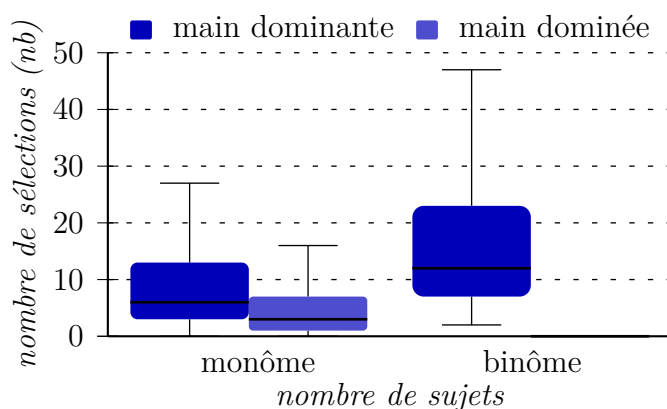
La figure 4.3 présente le temps de réalisation ( $\mathcal{V}_{d1}$ ) en fonction du nombre de sujets ( $\mathcal{V}_{i1}$ ) ayant réalisé l'expérience. L'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets ( $\mathcal{V}_{i1}$ ) sur le temps de réalisation ( $\mathcal{V}_{d1}$ ) ( $\chi^2 = 4.9$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.027$ ).



**Figure 4.4** – Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets

La figure 4.4 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 4.5** – Nombre de sélection de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets

La figure 4.5 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 ( $\mathcal{V}_{d2}$ ) ( $\chi^2 = 0$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.912$ ).

**4.5.2 Gain de performance sur les tâches complexes**

**4.5.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes**

**4.6 Synthèse**

## 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 72).

[CHRISTEN et al. 2009]

CHRISTEN, Barbara, Simone HORNEMANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar wallaby (*macropus eugenii*) shows that the  $\beta 2$ - $\alpha 2$  loop is modulated by long-range sequence effects ». Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 68).

[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 72).

[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 61).

[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 61).

[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 72).

[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 61).



[NEIDIGH et al. 2002]

NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 68).

[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 61).

[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 72).

[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 61).

[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 61).

[SÜMENGİN et al. 2007]

SÜMENGİN, Selçuk, Mustafa Tolga EREN, Serhat YESİLYURT 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 61).

[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*. Waltham, MA, USA, pages 183–186 (cf. page 61).

## Bibliographie

---

# Chapitre 5

## Les dynamiques de groupe



## Troisième partie

### Propositions pour le travail collaboratif



# Chapitre 6

## Travail collaboratif assisté par haptique

### Sommaire

<b>6.1</b>	<b>Présentation</b>	<b>83</b>
6.1.1	Objectifs	83
6.1.2	Hypothèses	84
<b>6.2</b>	<b>Dispositif expérimental et matériel</b>	<b>84</b>
<b>6.3</b>	<b>Méthode</b>	<b>85</b>
6.3.1	Sujets	85
6.3.2	Variables	85
6.3.3	Tâche	87
6.3.4	Procédure	88
	<b>Bibliographie</b>	<b>90</b>

## 6.1 Présentation

### 6.1.1 Objectifs

Cette dernière expérimentation aura pour objectif d'introduire et de valider des outils de communication haptique dans le cadre d'une tâche d'amarage 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.

### 6.1.2 Hypothèses

( $\mathcal{H}_1$ ) **Amélioration des performances avec l'assistance haptique** La première hypothèse est une amélioration des performances liée à l'utilisation des assistances haptiques proposées à travers des outils. Le temps de réalisation de la tâche et la qualité de la solution proposée par les sujets seront les variables dépendantes principales pour observer cette amélioration des performances.

## 6.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 6.1. L'EVC propose une visualisation partagée sur grand écran (vue publique à tous les utilisateurs) à l'aide d'un vidéoprojecteur. Les 3 ou 4 sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

- une interface d'orientation de la scène ;
- une interface haptique de manipulation de la molécule ;
- une interface haptique pour la coordination ;
- deux interfaces haptiques de déformation *tug*.

(a) Schéma du dispositif expérimental      (b) Photographie du dispositif expérimental

**Figure 6.1** – Illustration du dispositif expérimental

Une caméra vidéo de marque SONY® (HDR-SR11E) sera installée afin de filmer l'expérimentation. L'écran de vidéo-projection ainsi que les sujets (de dos) sont dans le plan de la vidéo.

3 ou 4  
Quelle configuration  
choisissons nous ?

Images à compléter  
Il va falloir créer la  
scène Blender corres-  
pondante et faire des  
photos du dispositif ex-  
périmental



Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au chapitre 2 page 7.

## 6.3 Méthode

### 6.3.1 Sujets

000 sujets (000 femmes et 000 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 00.0$  ( $\sigma = 0.00$ ) ont participé à cette expérimentation.

Nombre de sujets  
Remplir toutes les informations statistiques concernant les sujets

Ils ont été recrutés au sein du laboratoire IBPC et sont chercheurs en biologie moléculaire. 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 en omettant l'objectif de l'étude.

### 6.3.2 Variables

#### Variables indépendantes

( $\mathcal{V}_{i1}$ ) **Présence de l'assistance** La première variable indépendante est une variable intra-sujets, c'est-à-dire que tous les sujets sont expérimentés dans toutes les modalités de cette variable. ( $\mathcal{V}_{i1}$ ) possède deux valeurs possibles : « sans assistance » ou « avec assistance ». L'assistance est l'aide haptique ajouté aux différents outils de manipulation, de désignation et de déformation afin d'améliorer l'interaction et la communication entre les sujets pendant la tâche.

( $\mathcal{V}_{i2}$ ) **Complexe de molécules à assembler** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. ( $\mathcal{V}_{i2}$ ) concerne les complexes de molécules à assembler : « NUSE:NUSG ».

#### Variables dépendantes

( $\mathcal{V}_{d1}$ ) **Le temps de réalisation** Ce temps est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre l'objectif fixé. Il n'y a pas de limite de temps pour réaliser la tâche.

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

( $\mathcal{V}_{d3}$ ) **Les communications verbales et gestuelles** L'enregistrement vidéo permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. Elle permet également d'observer les phases de communication gestuelle. Les communications gestuelles sont les mouvements physiques des sujets destinés à donner une information à un ou plusieurs autres sujets.

( $\mathcal{V}_{d4}$ ) **Évaluation qualitative du système** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Il est constitué de plusieurs questions (notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux).

Le questionnaire  
Écrire le questionnaire  
soumis au sujets

Le questionnaire est le suivant (les questions sont posées à chaque sujet dans le cas du binôme) :

1. Quelle note donneriez-vous...
  - (a) au système interactif que vous venez de tester ?
  - (b) aux effets visuels offerts par le système ?
  - (c) aux outils proposés ?
2. Quelle configuration avez-vous préféré : *sans assistance* ou *avec assistance* ?
3. Vous êtes vous senti utile dans le groupe ?
4. Pensez-vous avoir une position de meneur dans la configuration collaborative ?
5. Comment évalueriez-vous votre taux de communication...
  - verbale ?
  - gestuelle ?
  - virtuelle ?

Concernant la 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, la communication virtuelle concerne les informations données au partenaire par l'intermédiaire de l'environnement virtuel (par exemple, une désignation avec le curseur).

### 6.3.3 Tâche

La tâche proposée est la déformation dans un EVC sur des complexes de molécules : c'est une tâche d'amarrage moléculaire simplifié.

#### Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation d'un complexe de molécules afin d'obtenir le meilleur score énergétique possible. L'intégralité des atomes de la molécule à déformer est affiché de façon discrète en transparence. De plus, un *ruban* de cette molécule est affiché.

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 4.4.3 page 67. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par NAMD.

Le premier complexe de molécules proposé, couramment nommé NUSE:NUSG [BURMANN et al. 2010], a pour identifiant PDB 2KVV. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1294 atomes et 929 atomes.

#### Les outils disponibles

**Configuration à trois sujets** Les sujets effectueront l'expérimentation par groupe de trois utilisateurs. Ils ont la possibilité de communiquer entre eux sans restriction. Un des sujets aura le rôle du *coordinateur* avec des outils haptiques différents des deux autres sujets qui auront des rôles d'*opérateurs*.

Le *coordinateur* pourra déplacer et orienter la molécule à l'aide de deux outils :

- un outil haptique attaché virtuellement à la molécule permettant de déplacer la molécule ;

Deux configurations possibles  
Les deux configurations font intervenir trois ou quatre sujets ; il faut enlever un des 2 paragraphes

- un SpaceNavigator® permettant d’orienter la molécule.

De plus, le *coordinateur* aura à sa disposition un outil de désignation complexe permettant de :

- afficher ou masquer les résidus en fonction de leur intérêt pour la tâche en cours de réalisation ;
- désigner un résidu nécessitant une manipulation par les *opérateurs*.

**Configuration à quatre sujets** Les sujets effectueront l’expérimentation par groupe de quatre utilisateurs. Ils ont la possibilité de communiquer entre eux sans restriction.

Un des sujets aura la gestion du déplacement de la molécule et du point de vue de l’application ; il sera le *manipulateur*. Un deuxième sujet aura le rôle du *coordinateur*. Enfin, les deux derniers sujets seront les *opérateurs*.

Le *manipulateur* aura à sa disposition deux outils. Le premier outil est une interface haptique, attachée virtuellement à la molécule permettant de déplacer la molécule. Le second outil est un SpaceNavigator® permettant d’orienter la molécule.

Le *coordinateur* aura à sa disposition un outil de désignation complexe permettant de :

- afficher ou masquer les résidus en fonction de leur intérêt pour la tâche en cours de réalisation ;
- désigner un résidu nécessitant une manipulation par les *opérateurs*.

Les *opérateurs* auront chacun à leur disposition un outil haptique permettant de :

- déplacer les atomes de la molécule afin de la déformer ;
- désigner un résidu nécessitant une manipulation par l’autre *opérateur*.

### 6.3.4 Procédure

Pour débiter cette expérimentation, les sujets sont confrontés à un exemple sur la molécule **à déterminer**. Pendant la phase d’apprentissage, les outils sont introduits et expliqués un par un. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l’expérimentateur.

Dès que la phase d’apprentissage est terminée, l’enregistrement vidéo démarre. Un premier complexe est proposé aux sujets. **Dix minutes** sont laissées pour réaliser la tâche. Si les sujets estiment avoir obtenu le meilleur score possible avant la durée limite, ils peuvent décider d’arrêter la tâche.

à déterminer

Il faudra trouver une molécule d’apprentissage

Dix minutes

C’est une proposition de temps mais il faudra peut-être adapter en fonction des tests alpha

Lorsque toutes les tâches sont réalisées, les sujets sont soumis au questionnaire. Chaque sujet est tenu de répondre au questionnaire seul, sans communiquer avec les autres sujets.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 6.1.

**Table 6.1** – Synthèse de la procédure expérimentale

<b>Tâche</b>	Amarrage d'un complexe de molécule	
<b>Hypothèses</b>	$(\mathcal{H}_1)$ Amélioration de performance par assistance haptique	
<b>Variable indépendantes</b>	$(\mathcal{V}_{i1})$ Présence de l'assistance $(\mathcal{V}_{i2})$ Complexe de molécules à assembler	
<b>Variable dépendantes</b>	$(\mathcal{V}_{d1})$ Temps de réalisation $(\mathcal{V}_{d2})$ Nombre de sélections $(\mathcal{V}_{d3})$ Communications verbales et gestuelles $(\mathcal{V}_{d4})$ Évaluation qualitative du système	
<b>Condition <math>(\mathcal{C}_1)</math></b>		<b>Condition <math>(\mathcal{C}_2)</math></b>
Sans assistance		Avec assistance
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). « A NUSE:NUSG complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 87).

[LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 86).

# Quatrième partie

## Synthèse





## 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, 3, 83, 87, 95

## **bimanuel**

Qui se fait avec les deux mains. 61–63, 65, 71

## **binôme**

Groupe constitué de 2 personnes. iv–vii, 27–31, 33–35, 40, 42–45, 47–52, 54, 59, 61–63, 65–67, 71, 73, 74, 86, 101, 106, 107

## **curseur**

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 95

## **docking moléculaire**

Voir amarrage moléculaire. 3

## **effecteur terminal**

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. viii, 34, 67, 73, 86

## **homoscedasticité**

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 40, 72

## **monomanuel**

Qui se fait avec une main. 61

## **monôme**

*Groupe* constitué d'une unique personne. vi, vii, 29, 30, 33–35, 40, 42–44, 52, 54, 59, 61–63, 65–67, 73, 74, 101, 106, 107

## **résidu**

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. vii–ix, 4, 12, 13, 17–20, 29, 33–37, 40, 42–45, 48–51, 54, 55, 59, 60, 65, 67, 68, 70, 71, 86, 88

**variable dépendante**

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 84, 96

**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. 34, 66, 85, 95

**variable inter-sujets**

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 66, 72

**variable intra-sujets**

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 34, 40, 66, 72, 85

# Acronymes

## API

API vient de l'anglais *Application Programming Interface* et désigne une interface avec un programme informatique. 16

## CAO

La CAO permet de concevoir et de tester virtuellement, à l'aide d'outils informatique, des produits manufacturés. 61

## DDL

Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre. vii, 13, 15, 16

## EVC

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. 7–9, 15, 29, 30, 55, 61, 62, 67, 84, 87

## IBPC

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. 14, 85

## IMD

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]. 7, 10, 11, 14, 97

## ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel IMD. 10, 14

## CNRS–LIMSI

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 33, 66

## Acronymes

---

### **NAMD**

Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS et al. 2005]. 7, 10, 11, 14, 87, 97

### **RMSD**

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. 68, 71, 87

### **VMD**

Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY et al. 1996]. vii, 7, 10–14, 16–18, 31, 97

### **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]. 7, 13, 15, 16

# Annexes





# Annexe A

## Questionnaires

### A.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	

---

## A.1. Première expérimentation

L'interaction concerne la maniabilité des interfaces haptiques<sup>1</sup>, 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

---

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

## Annexe A. 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 A. 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**

## A.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 les réponses sont directement reportées dans un tableau. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

### A.2.1 Questionnaire pour les monômes

Pour les *monômes*, le questionnaire est le suivant :

1. Vous êtes-vous senti efficace ?
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 ?

### A.2.2 Questionnaire pour les binômes

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...
  - 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 ?
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 ?

## Annexe A. Questionnaires

---

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, la communication virtuelle concerne les informations données au partenaire par l'intermédiaire de l'environnement virtuel (par exemple, une désignation avec le curseur).



## Bibliographie

[LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 101, 107).