

5 Collaboration haptique étroitement couplée  
pour la déformation moléculaire interactive

École Doctorale d'Informatique de PARIS-Sud

Thèse soutenue le *<à définir>* en présence de

Professeur	Indira THOUVENIN	(rapporteur)
	Université de technologie de COMPIÈGNE – Heuristique et Diagnostic des Systèmes Complexes (Heudiasyc)	
Directeur de recherche	Jean-Marie BURKHARDT	(rapporteur)
	Institut Français des Sciences et Technologies des Transports, de l'Aménagement et des Réseaux (IFSTTAR)	
Professeur	Abdulmotaleb EL SADDIK	(examinateur)
	Université d'OTTAWA – Multimedia Communications Research Laboratory (MCRLab)	
Chargé de recherche	Marc BAADEN	(examinateur)
	Laboratoire de Biochimie Théorique (LBT)	
Professeur	Philippe TARROUX	(directeur)
	École Normale Supérieure d'ULM – Laboratoire d'Informatique, de Mécanique et de Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI)	
Maître de Conférence	Mehdi AMMI	(encadrant)
	Université de PARIS-Sud – Laboratoire d'Informatique, de Mécanique et de Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI)	



# Table des matières

	Table des matières	iii
	Table des figures	ix
	Liste des tableaux	xv
5	Résumé	xv
	Abstract	xvii
	Introduction	1
	<b>1 Étude bibliographique</b>	<b>3</b>
	1.1 Introduction . . . . .	4
10	1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire . . . . .	4
	1.2.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	4
	1.2.2 Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire . . . . .	6
	1.2.3 Le <i>docking</i> moléculaire en environnement virtuel . . . . .	9
	1.3 Le travail collaboratif . . . . .	13
15	1.3.1 Travail collaboratif ou travail coopératif? . . . . .	13
	1.3.2 La distribution cognitive des charges de travail . . . . .	15
	1.3.3 La facilitation sociale . . . . .	17
	1.3.4 La paresse sociale . . . . .	19
	1.4 Collaboration en environnement virtuel . . . . .	22
20	1.4.1 Communication en environnement virtuel . . . . .	22

	1.4.2	La communication implicite et explicite . . . . .	27
	1.4.3	Plate-forme de collaboration virtuelle . . . . .	31
	1.5	Conclusion . . . . .	31
	<b>2</b>	<b>Shaddock – Plate-forme de manipulation collaborative de</b>	
5		<b>molécules</b>	<b>33</b>
	2.1	Introduction . . . . .	34
	2.2	Architecture matérielle et logicielle . . . . .	34
	2.2.1	Travail collaboratif synchrone et colocalisé . . . . .	34
	2.2.2	Architecture logicielle adoptée . . . . .	37
10	2.3	Plate-forme de simulation et de visualisation . . . . .	39
	2.3.1	Module de visualisation moléculaire . . . . .	40
	2.3.2	Module de simulation moléculaire . . . . .	42
	2.4	Les outils d'interaction . . . . .	44
	2.4.1	Outil d'interaction utilisé . . . . .	44
15	2.4.2	Outils existants . . . . .	45
	2.4.3	Outils de manipulation avancés . . . . .	45
	<b>3</b>	<b>Recherche collaborative de résidu sur une molécule</b>	<b>49</b>
	3.1	Introduction . . . . .	50
	3.2	Recherche et sélection collaborative . . . . .	50
20	3.2.1	Travaux existants . . . . .	50
	3.2.2	Objectifs . . . . .	52
	3.3	Présentation de l'expérimentation . . . . .	53
	3.3.1	Description de la tâche . . . . .	53
	3.3.2	Spécificités du protocole expérimental . . . . .	57
25	3.4	Résultats . . . . .	60
	3.4.1	Amélioration des performances en binôme . . . . .	61
	3.4.2	Stratégies de travail . . . . .	65
	3.4.3	Résultats qualitatifs . . . . .	72
	3.5	Synthèse . . . . .	74
30	3.5.1	Résumé des résultats . . . . .	74
	3.5.2	Conclusion . . . . .	74

	<b>4 Déformation collaborative de molécule</b>	<b>77</b>
	4.1 Introduction . . . . .	78
	4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel . . . . .	78
	4.2.1 Travaux existants . . . . .	78
5	4.2.2 Objectifs . . . . .	79
	4.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	80
	4.3.1 Description de la tâche . . . . .	80
	4.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	83
	4.4 Résultats . . . . .	88
10	4.4.1 Amélioration des performances en binôme . . . . .	90
	4.4.2 Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche . . . . .	95
	4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes . . .	100
	4.4.4 Résultats qualitatifs . . . . .	104
15	4.5 Synthèse . . . . .	106
	4.5.1 Résumé des résultats . . . . .	106
	4.5.2 Conclusion . . . . .	106
	<b>5 La dynamique de groupe</b>	<b>109</b>
	5.1 Introduction . . . . .	110
20	5.2 Collaboration de groupe . . . . .	110
	5.2.1 Travaux existants . . . . .	110
	5.2.2 Objectifs . . . . .	112
	5.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	113
	5.3.1 Description de la tâche . . . . .	113
25	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	114
	5.4 Résultats . . . . .	118
	5.4.1 Amélioration des performances . . . . .	118
	5.4.2 Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration . . . . .	122
	5.4.3 Définition d'un meneur . . . . .	126
30	5.5 Synthèse . . . . .	129

	5.5.1	Résumé des résultats . . . . .	129
	5.5.2	Conclusion . . . . .	130
	<b>6</b>	<b>Travail collaboratif assisté par haptique</b>	<b>131</b>
	6.1	Introduction . . . . .	132
5	6.2	Assistance haptique pour la communication . . . . .	132
	6.3	Présentation de l'expérimentation . . . . .	132
	6.3.1	Description de la tâche . . . . .	132
	6.3.2	Spécificités du protocole expérimental . . . . .	135
	6.4	Résultats . . . . .	140
10	6.4.1	Amélioration des performances . . . . .	140
	6.4.2	Amélioration de la communication . . . . .	143
	6.5	Synthèse . . . . .	145
	6.5.1	Résumé des résultats . . . . .	145
	6.5.2	Conclusion . . . . .	145
15		<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>145</b>
		<b>Bibliographie</b>	<b>149</b>
		<b>Glossaire</b>	<b>179</b>
		<b>Acronymes</b>	<b>183</b>
		<b>Annexes</b>	<b>187</b>
20	<b>A</b>	<b>Dispositif expérimental</b>	<b>187</b>
	A.1	Matériel expérimental . . . . .	188
	A.2	Présentation des molécules . . . . .	189
	A.2.1	Liste des molécules . . . . .	189
	A.2.2	Représentation des molécules . . . . .	189
25	A.3	Outils de manipulation . . . . .	192

	<b>B Méthode expérimentale</b>	<b>193</b>
	B.1 Première expérimentation . . . . .	194
	B.1.1 Hypothèses . . . . .	194
	B.1.2 Sujets . . . . .	194
5	B.1.3 Variables . . . . .	195
	B.1.4 Procédure . . . . .	197
	B.2 Seconde expérimentation . . . . .	198
	B.2.1 Hypothèses . . . . .	198
	B.2.2 Sujets . . . . .	198
10	B.2.3 Variables . . . . .	199
	B.2.4 Procédure . . . . .	200
	B.3 Troisième expérimentation . . . . .	201
	B.3.1 Hypothèses . . . . .	201
	B.3.2 Sujets . . . . .	202
15	B.3.3 Variables . . . . .	202
	B.3.4 Procédure . . . . .	203
	B.4 Quatrième expérimentation . . . . .	204
	B.4.1 Hypothèses . . . . .	204
	B.4.2 Sujets . . . . .	205
20	B.4.3 Variables . . . . .	205
	B.4.4 Procédure . . . . .	206
	<b>C Questionnaires</b>	<b>209</b>
	C.1 Première expérimentation . . . . .	210
	C.2 Seconde expérimentation . . . . .	216
25	C.2.1 Questionnaire pour les monômes . . . . .	216
	C.2.2 Questionnaire pour les binômes . . . . .	216
	C.3 Quatrième expérimentation . . . . .	217
	C.3.1 Le questionnaire SUS . . . . .	223





# Table des figures

	1.1	Complexe de molécules assemblé à partir de deux molécules . . . . .	5
	1.2	Mesures pour l'évaluation du <i>docking</i> moléculaire . . . . .	6
	1.3	Illustration d'une molécule avec ces hélices- $\alpha$ et ces feuillets- $\beta$ . . . . .	8
5	1.4	Représentation avancée proposée par BERGMAN <i>et al.</i> [1993] . . . . .	10
	1.5	Visualisation multimodale proposée par DAVIES <i>et al.</i> [2005] . . . . .	11
	1.6	Potentiel de LENNARD-JONES [1924a] . . . . .	12
	1.7	<i>Docking</i> moléculaire rigide à l'aide d'une interface à cinq De- grés De Liberté (DDLs) [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006] . . . . .	13
10	1.8	<i>Docking</i> moléculaire rigide avec le Virtuose <sup>TM</sup> 6D35-45 [Dau- nay et Régnier 2009] . . . . .	14
	1.9	Représentation d'un système cognitivement distribué . . . . .	16
	1.10	Résultats obtenus par TRIPLETT [1898] avec des cyclistes . . . . .	18
15	1.11	Loi de YERKES et DODSON [1908] sur le lien entre la stimula- tion des individus et les performances . . . . .	19
	1.12	Résultats obtenus par RINGELMANN [1913] et présentés par KRAVITZ et B. MARTIN [1986] . . . . .	20
	1.13	Synthèse des effets de la collaboration selon SULEIMAN et WATSON [2008] . . . . .	21
20	1.14	Collaboration à plusieurs utilisateurs . . . . .	24
	1.15	Collaboration à plusieurs experts . . . . .	25
	1.16	Collaboration par manipulateur et observateur . . . . .	26
	1.17	Inter-référencement visuel proposé par CHASTINE <i>et al.</i> [2007] à l'aide de techniques de réalité augmentée . . . . .	29
25	1.18	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes . . . . .	32

	2.1	Diagramme de déploiement UML de la plate-forme Shaddock . . .	35
	2.2	Diagramme de composant UML du nœud VMD . . . . .	36
	2.3	Classification des tâches collaboratives selon ELLIS <i>et al.</i> [1991]	36
5	2.4	Illustration des rendus graphiques de molécules sur VMD ( <i>Visual Molecular Dynamics</i> ) . . . . .	42
	2.5	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés . .	46
	2.6	Les quatre étapes de la désignation . . . . .	48
	3.1	Répartition des résidus sur les molécules . . . . .	56
	3.2	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	58
10	3.3	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	58
	3.4	Représentation de la molécule Prion pour l'expérimentation . .	59
	3.5	Temps de réalisation par résidu . . . . .	61
	3.6	Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu	62
	3.7	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu . . . .	62
15	3.8	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus $\mathcal{R}_6$ , $\mathcal{R}_9$ et $\mathcal{R}_{10}$ . . . . .	65
	3.9	Affinité entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	66
	3.10	Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme . . .	66
20	3.11	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	66
	3.12	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection entre les sujets pour chaque binôme .	67
	3.13	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	67
25	3.14	Couplage physique et structure entre les résidus . . . . .	70
	4.1	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible . .	81
	4.2	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	85
	4.3	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	85
	4.4	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A	86
30	4.5	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B	87
	4.6	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A	87

	4.7	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B	88
	4.8	Illustration des rendus pour l’affichage de la molécule . . . . .	90
	4.9	Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets . . . . .	91
5	4.10	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets . . . . .	91
	4.11	Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonction du nombre de sujets . . . . .	92
	4.12	Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets . . . . .	93
10	4.13	Temps de réalisation des scénarios . . . . .	95
	4.14	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets . . . . .	96
	4.15	Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	96
15	4.16	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	97
	4.17	Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	98
	4.18	Temps de réalisation de chaque essai . . . . .	100
20	4.19	Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	100
	4.20	Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	101
25	4.21	Distance active entre les effecteurs terminaux pour chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	102
	4.22	Vitesse moyenne pour chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	102
	5.1	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	115
	5.2	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	115
30	5.3	Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1 . . . . .	116
	5.4	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2 . . . . .	117
	5.5	Temps de réalisation des scénarios . . . . .	118

	5.6	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	118
	5.7	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	119
5	5.8	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	119
	5.9	Nombre d'échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	120
	5.10	Temps de réalisation avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	122
10	5.11	Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	122
	5.12	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	123
15	5.13	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	123
	5.14	Nombre d'ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	124
	5.15	Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de $\mathcal{G}_1$ . . . . .	126
20	5.16	Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de $\mathcal{G}_1$ . . . . .	127
	5.17	Profil de force du groupe $\mathcal{G}_1$ sur la molécule Prion . . . . .	128
	6.1	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	137
	6.2	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	137
	6.3	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1 . . .	138
25	6.4	Représentation de la molécule NUSE :NUSG pour le scénario 2	138
	6.5	Score <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) minimum atteint avec et sans haptique . . . . .	141
	6.6	Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique . . . . .	141
30	6.7	Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario . . . . .	142
	6.8	Nombre de sélections par les opérateurs avec et sans haptique	142

	6.9	Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique . . . . .	144
	6.10	Nombre de sélection au cours du processus de désignation avec et sans haptique . . . . .	144
5	A.1	Représentation des atomes avec CPK . . . . .	190
	A.2	Représentation de la structure principale de la molécule avec <i>NewRibbon</i> . . . . .	191
	A.3	Représentation des atomes fixés en gris . . . . .	191
10	B.1	Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu . . . . .	196



# Liste des tableaux

	1.1	Liste non-exhaustive de solutions logicielles de <i>docking</i> moléculaire . . . . .	9
	3.1	Liste des résidus recherchés . . . . .	54
5	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> . . . . .	55
	3.3	Synthèse de la méthode expérimentale . . . . .	60
	4.1	Paramètres de complexité des tâches . . . . .	83
	4.2	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	89
10	5.1	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	117
	6.1	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	140





# Résumé

*<Background>*

*<Ma thèse>*

*<Développement de la plate-forme>*

5 *<Études de cas>*

*<Proposition de solution>*

*<Synthèse et perspectives>*



# Abstract



# Introduction



# Étude bibliographique

## Sommaire

5	<b>1.1 Introduction . . . . .</b>	<b>4</b>
	<b>1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire</b>	<b>4</b>
	1.2.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	4
	1.2.2 Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire . . .	6
	1.2.3 Le <i>docking</i> moléculaire en environnement virtuel .	9
10	<b>1.3 Le travail collaboratif . . . . .</b>	<b>13</b>
	1.3.1 Travail collaboratif ou travail coopératif? . . . . .	13
	1.3.2 La distribution cognitive des charges de travail . .	15
	1.3.3 La facilitation sociale . . . . .	17
	1.3.4 La paresse sociale . . . . .	19
15	<b>1.4 Collaboration en environnement virtuel . . . . .</b>	<b>22</b>
	1.4.1 Communication en environnement virtuel . . . . .	22
	1.4.2 La communication implicite et explicite . . . . .	27
	1.4.3 Plate-forme de collaboration virtuelle . . . . .	31
20	<b>1.5 Conclusion . . . . .</b>	<b>31</b>

## 1.1 Introduction

## 1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous allons nous intéresser à la modélisation moléculaire et plus précisément au *docking* moléculaire<sup>1</sup> qui fournit un environnement de travail complexe. Cette section présente le *docking* moléculaire puis expose les différentes solutions existantes pour traiter ce problème complexe.

### 1.2.1 Le *docking* moléculaire

Dans le domaine de la modélisation moléculaire, le *docking* moléculaire consiste à prédire la conformation optimale entre deux molécules afin de créer un complexe de molécules stable (voir figure 1.1 page ci-contre). FISCHER et BEENSCH [1894] illustrent le *docking* moléculaire avec le modèle « clef-serrure » décrit de la façon suivante.

*Um ein Bild zu gebrauchen, will ich sagen, daß Enzym und Glycosid wie Schloß und Schlüssel zueinander passen müssen, um eine chemische Wirkung aufeinander ausüben zu können.*

On trouve une traduction en français de cette citation dans [HASENKNOPF 2005].

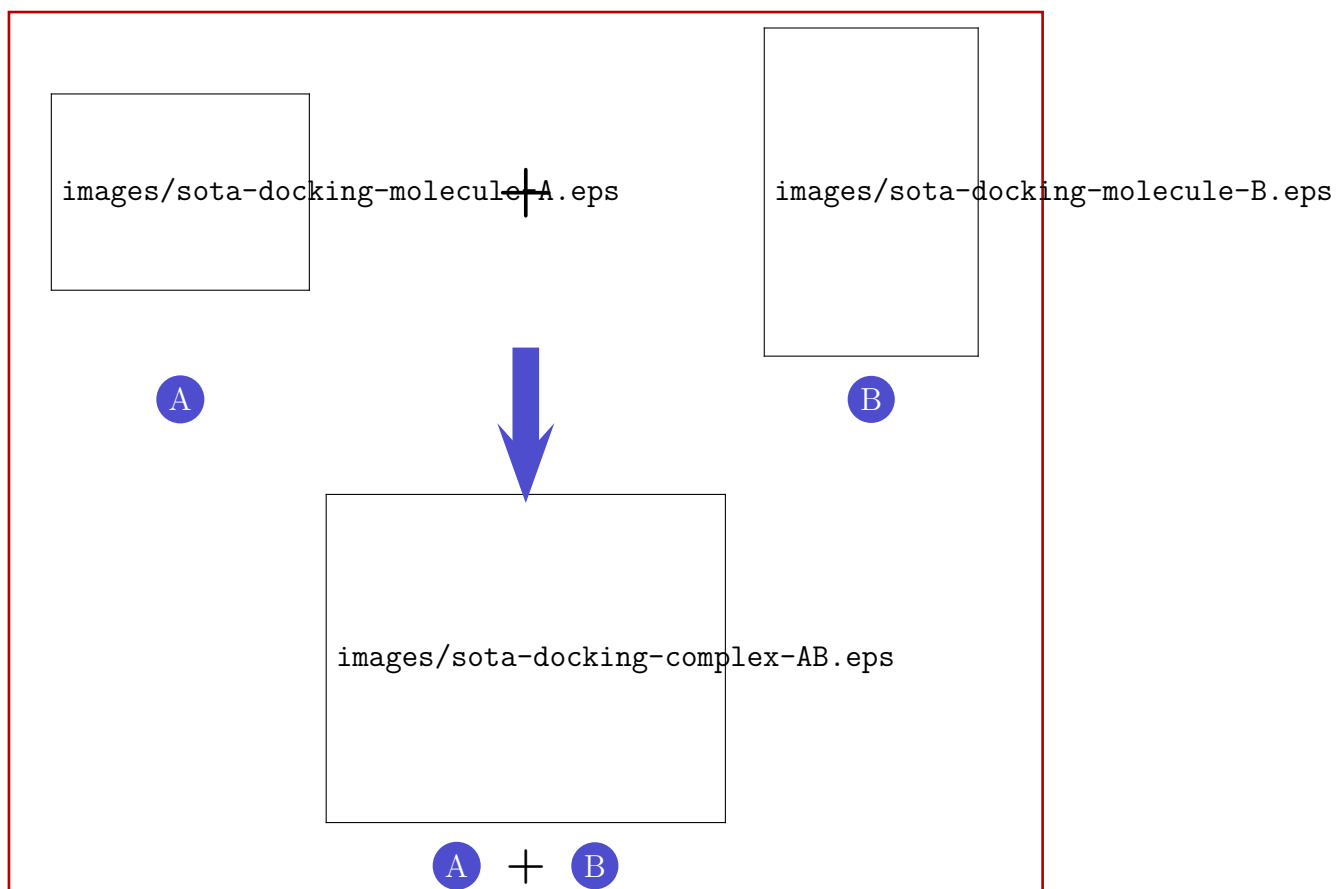
Pour utiliser une image, je dirais que l'enzyme et le glucoside doivent être ajustés comme la serrure et la clef, pour exercer une action chimique l'un sur l'autre.

La métaphore s'arrête ici. En effet, s'il suffit simplement de vérifier que la clef ouvre la serrure pour confirmer la correspondance entre les deux objets, l'évaluation d'un complexe de molécules est moins évidente. La stabilité d'un complexe de molécules est évaluée sur deux mesures : la complémentarité géométrique et la complémentarité chimique (voir figure 1.2 page 6). La complémentarité géométrique, parfois nommée complémentarité structurale [CHURCH *et al.* 1977], consiste à trouver la partie des profils de la molécule qui vont s'imbriquer, comme un puzzle en 3D. La figure 1.2a page 6 illustre

---

1. Pour la suite des développements, l'expression « *docking* moléculaire » sera utilisée plutôt que l'expression « amarrage moléculaire » [NURISSO 2010] qui est peu utilisée dans la littérature française.

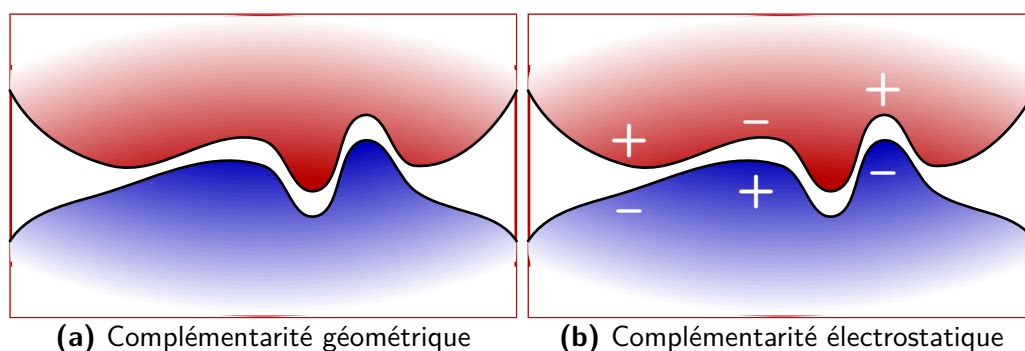




**Figure 1.1** – Complexe de molécules assemblé à partir de deux molécules

la complémentarité géométrique dans une représentation simplifiée en 2D. JIANG *et al.* [2003] consacre une publication à montrer l'importance de la complémentarité géométrique dans le *docking* moléculaire.

Cependant, l'évaluation de la stabilité d'un complexe de molécule s'accompagne également d'une évaluation de la complémentarité chimique comme décrit par KESSLER *et al.* [1999]. Cette complémentarité s'intéresse aux interactions chimiques entre les molécules comme les charges électrostatiques [McCOY *et al.* 1997], les ponts hydrogènes [ARUNAN *et al.* 2011] ou encore les régions hydrophiles et hydrophobes [BLALOCK et SMITH 1984]. Par exemple, la figure 1.2b illustre la complémentarité électrostatique.



**Figure 1.2** – Mesures pour l'évaluation du *docking* moléculaire

Le nombre de combinaisons géométriques et le nombre de contraintes chimiques font du *docking* moléculaire une tâche de recherche très complexe. Une exploration exhaustive n'est pas envisageable. La section suivante présente les différentes solutions logicielles existantes pour réaliser un *docking* moléculaire.

### 1.2.2 Recherche de solutions de *docking* moléculaire

La recherche de solutions de *docking* moléculaire consiste à trouver les sites de liaisons entre les molécules. Les algorithmes de recherche se basent principalement sur deux principes de base. Tout d'abord, l'algorithme doit être capable d'évaluer une conformation par un score de confiance. Puis, une heuristique est nécessaire afin de converger le plus efficacement possible vers des solutions valides.

SCHULZ-GASCH et STAHL [2004] ou encore LEACH *et al.* [2006] proposent un état de l'art sur les moyens d'évaluer un *docking* moléculaire. En général, les algorithmes de recherche commencent par identifier les différents sites de

liaisons potentiels seulement par complémentarité géométrique. Cette première évaluation permet un filtre important de l'espace des solutions. Puis une évaluation chimique partielle ou complète est éventuellement effectuée par l'algorithme de recherche. Afin de trouver ces sites de liaison, différents types d'algorithmes ont été proposés.

Parmi les algorithmes les plus utilisés, on peut citer les algorithmes génétiques, les ICMS (*Iterated Conditional Modes*), la méthode de MONTE-CARLO ou encore la reconstruction incrémentale autour d'une base protéinique. À chaque algorithme est associé une ou plusieurs solutions logicielles dont les plus référencées selon GROSDIDIER [2007] sont AutoDock (27 %), GOLD (15 %), FlexX (11 %), DOCK (6 %) ou encore ICMDocking (6 %). La table 1.1 page 9 propose une liste non-exhaustive de solutions logicielles de *docking* moléculaire.

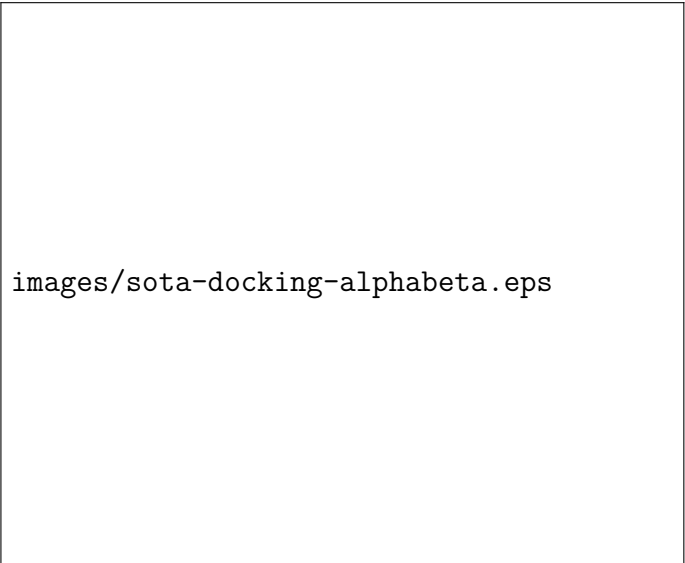
Les solutions sont nombreuses mais devant la complexité du problème, aucune de ces solutions logicielles ne semble fournir la solution ultime. De plus, les solutions présentées ci-dessus se basent seulement sur une approximation de l'environnement moléculaire : les molécules sont considérées comme des corps rigides. En effet, une molécule est constituée d'un ensemble d'atomes possédant chacun une mobilité par rapport à ces voisins : une molécule s'apparente plutôt à un corps flexible. La flexibilité d'une molécule peut être vue à différents niveaux de granularité, de l'atome (granularité la plus fine) aux molécules en passant par les hélices- $\alpha$  et feuillets- $\beta$  (granularité intermédiaire). On peut distinguer trois niveaux de flexibilité différentes :

**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 molécules 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 deux molécules (ou plus) introduit de nombreux sites de liaison qui doivent être optimisées en fonction de critères variés (la complémentarité géométrique, les forces électrostatiques, les forces de VAN DER WAALS [P. MÜLLER 1994], *etc.*). La flexibilité s'organise alors autour de macro-structures telles que les hélices- $\alpha$  ou les feuillets- $\beta$  (voir figure 1.3 page suivante).

**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.*).

La complexité induite par la flexibilité rend impossible une exploration totale



images/sota-docking-alphabeta.eps

**Figure 1.3** – Illustration d’une molécule avec ces hélices- $\alpha$  et ces feuillets- $\beta$

de l’espace de recherche. Afin de répondre à cette problématique supplémentaire de flexibilité, différentes approches ont été proposées :

- Une partie du complexe de molécules étudié est rendue rigide ;
- Utiliser différentes conformations d’une molécule sur des solutions de *docking* moléculaire rigide [MEAGHER et CARLSON 2004] ;
- Découper l’espace de recherche de manière grossière pour améliorer les performances d’évaluation [ÖSTERBERG *et al.* 2002].

La flexibilité introduit une complexité importante dans l’évaluation et la recherche de solution en *docking* moléculaire. Par exemple, la complémentarité géométrique fait en partie appel aux algorithmes de détection de collision, problématiques à part entière en interaction temps-réel avec les environnements virtuels. Si on ajoute les informations chimiques, électrostatiques et la flexibilité, le nombre de dimensions du problème est nettement trop important pour pouvoir être traité en temps raisonnable par un ordinateur de manière exhaustive. Cependant, nous allons voir dans la section suivante qu’une approche utilisant les capacités combinées de l’humain et de la machine est possible.

D’ailleurs, c’est durant la rédaction de cette thèse qu’un résultat important concernant cette approche a été dévoilé. À l’aide de Fold It!, un logiciel de *docking* moléculaire vulgarisé et distribué sous forme de jeu vidéo, la solution d’un problème de *docking* moléculaire qui pourrait faire avancer la recherche sur le SIDA a été découverte [KHATIB *et al.* 2011]. Ce logiciel utilise en particulier la capacité d’un humain à sortir de minima locaux rapidement

là où un ordinateur serait inefficace.

Logiciel	Algorithme	Références
AutoDock	Algorithme génétique	[MORRIS <i>et al.</i> 1998][ÖSTERBERG <i>et al.</i> 2002]
DOCK	Reconstruction incrémentale	[EWING <i>et al.</i> 2001]
ICMDocking	Méthode ICM	[ABAGYAN et TOTROV 1994][ABAGYAN <i>et al.</i> 1994]
GOLD	Algorithme génétique	[JONES <i>et al.</i> 1997]
FlexX	Reconstruction incrémentale	[RAREY <i>et al.</i> 1997][RAREY <i>et al.</i> 1999]
Glide	Méthode de MONTE-CARLO	[FRIESNER <i>et al.</i> 2004][HALGREN <i>et al.</i> 2004]
BoxSearch	Méthode de MONTE-CARLO	[HART et READ 1992][CUMMINGS <i>et al.</i> 1995]

**Table 1.1** – Liste non-exhaustive de solutions logicielles de *docking* moléculaire

### 1.2.3 Le *docking* moléculaire en environnement virtuel

Malgré une communauté scientifique très active pour améliorer les solutions de *docking* moléculaire existantes et se rapprocher toujours plus près de condi-  
5 tions biologiques réalistes, la complexité du problème rend la découverte de solutions difficile. Devant cette complexité, une approche alternative basée sur l'introduction de l'humain et de ses capacités de décisions au sein du processus de recherche d'une solution par un ordinateur. En effet, bien que  
10 moins rapide pour traiter rapidement un grand nombre de données, un expert est capable de classer plus intelligemment les solutions pertinentes et d'en rejeter d'autres qui sont aberrantes.

L'idée d'immerger un humain au sein du processus de *docking* moléculaire date de 1967 avec le projet GROPE comme l'explique GRÜNWALD [2008]. L'intervention d'un expert durant le processus de recherche est effectuée  
15 par l'immersion à l'aide d'environnements de réalité virtuelle. BATTER et BROOKS JR. [1972] proposent les premières solutions d'immersion grâce à ce projet.

L'immersion dans un environnement virtuel avec des molécules pose tout de suite le problème de la représentation des molécules. BERGMAN *et al.* [1993] proposent la plate-forme VIEW avec différents rendus graphiques pour représenter les molécules (voir figure 1.4). Quelques années plus tard, les premiers  
5 logiciels sont développés et distribués à large échelle comme VMD [HUMPHREY *et al.* 1996] ou PYMOL [DELANO 2002].



**Figure 1.4** – Représentation avancée proposée par BERGMAN *et al.* [1993]

Cependant, les visualisations statiques ne suffisent pas à comprendre les interactions chimiques en action au sein d'une molécule. HUITEMA et LIERE [2000] fournissent une possibilité de visualiser des trajectoires d'atomes à propos de  
10 la dynamique de protéines. Puis KLOSOWSKI *et al.* [2002] franchissent une étape supplémentaire en proposant une visualisation temps-réel à l'aide du moteur de simulation Gromacs [BERENDSEN *et al.* 1995; HESS *et al.* 2008]. Enfin, afin d'améliorer l'exploration, KŘENEK *et al.* [1999] puis DAVIES *et al.* [2005] proposent une visualisation multimodale en ajoutant un modèle  
15 de force haptique calqué sur les champs de forces électriques d'une molécule (voir figure 1.5 page suivante).

D'ailleurs, les retours haptiques sont également utilisés pour la manipulation de molécules. Le projet GROPEHaptic qui se place dans la continuité du projet GROPE propose une manipulation moléculaire interactive [BROOKS JR. *et al.*  
20 1990; OUH-YOUNG *et al.* 1988]. Puis, la modélisation moléculaire assistée par ordinateur est proposée sur la plate-forme HIMM (*Highly Immersive Molecular Modeling*) [DREES *et al.* 1996; DREES *et al.* 1998]. Afin de manipuler plus



**Figure 1.5** – Visualisation multimodale proposée par DAVIES *et al.* [2005]

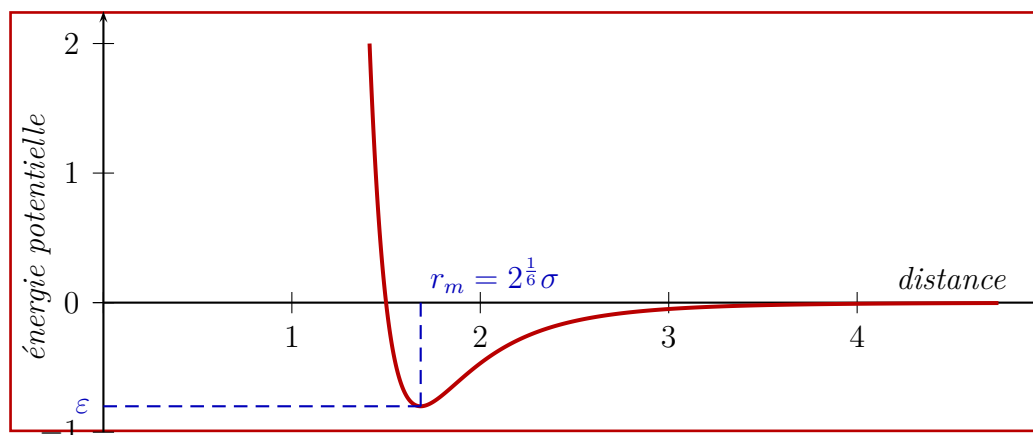
intuitivement les molécules, WEGHORST [2003] propose l'utilisation d'une interface tangible censée représenter la molécule manipulée.

Cependant, les biologistes cherchent à interagir virtuellement avec la dynamique des molécules afin de pouvoir s'affranchir de la difficulté de cette manipulation dans le monde réel. Les interactions proposées se font alors par traction des atomes [HAAN *et al.* 2002; KOUTEK *et al.* 2002]. Y.-G. LEE et LYONS [2004] calquent les interactions haptiques sur l'approximation du champ de force décrit dans [LENNARD-JONES 1924a,b] (voir équation 1.1), largement adopté par la communauté (voir figure 1.6 page suivante).

$$V_{LJ} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_m} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_m} \right)^6 \right] \quad (1.1)$$

Enfin, la manipulation interactive avec des structures moléculaires flexibles devient possible avec la plate-forme proposée par DELALANDE *et al.* [2009] à laquelle on peut ajouter la possibilité d'interagir avec une interface haptique [DELALANDE *et al.* 2010].

Ces solutions pour interagir avec les molécules sont en partie utilisées pour l'apprentissage de la dynamique moléculaire. Par exemple, SANKARANA-



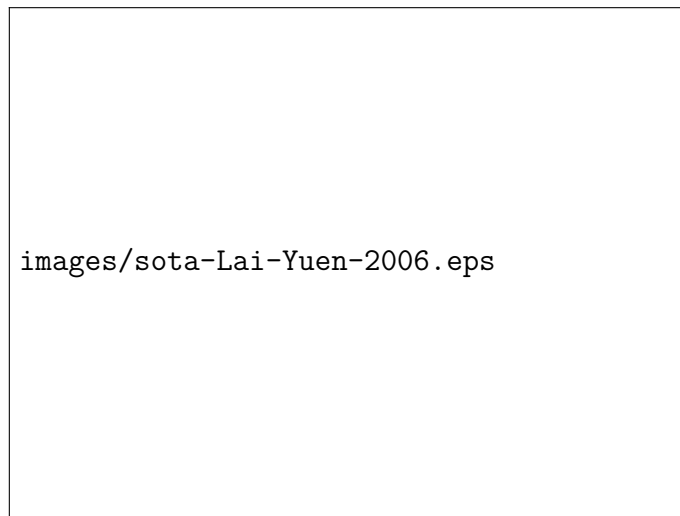
**Figure 1.6** – Potentiel de LENNARD-JONES [1924a]

RAYANAN *et al.* [2003] proposent une plate-forme interactive avec des interfaces haptiques pour enseigner différents aspects qui constituent la structure moléculaire. Puis WOLLACOTT et MERZ JR. [2007] s'intéressent à la compréhension des interactions chimiques en combinant une interface haptique et l'interface tangible proposée par WEGHORST [2003]. C'est avec le système *Chemical Force Feedback* (retour haptique des forces chimiques) que l'apprentissage du *docking* moléculaire par l'intermédiaire de la réalité virtuelle est abordée [BIVALL PERSSON 2008 ; BIVALL PERSSON *et al.* 2007].

Après les projets comme GROPE, d'autres projets de *docking* moléculaire comme STALK [LEVINE *et al.* 1997] voient le jour. La communauté haptique commence également à s'intéresser à cette problématique [SUBAŞI 2006 ; SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006, 2008]. Par exemple, LAI-YUEN et Y.-S. LEE [2005] proposent une interface haptique avec cinq DDLs afin d'effectuer du *docking* moléculaire rigide [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006] (voir figure 1.7 page ci-contre). Puis, à l'aide d'interfaces haptiques plus largement répandue comme le Virtuoso<sup>TM</sup> 6D35-45 (six DDLs), la manipulation moléculaire [DAUNAY *et al.* 2007] puis le *docking* moléculaire [DAUNAY et RÉGNIER 2009] accompagné d'une évaluation temps-réel de l'énergie du système devient possible. Le *docking* moléculaire faisant intervenir des champs de force spécifiques, HOU et SOURINA [2010] proposent des modèles de forces haptiques adaptés.

Les différentes briques permettant d'effectuer du *docking* moléculaire flexible interactif sont présentes. DELALANDE *et al.* [2010] nous offre la possibilité de manipuler des simulations réalistes en temps-réel. Puis DAUNAY et RÉGNIER [2009] offrent la possibilité d'évaluer en temps-réel ces simulations. STONE *et al.* [2010] fournissent les interfaces nécessaires sur le logiciel VMD pour accéder à des solutions de réalité virtuelle. Des modèles de forces hap-





**Figure 1.7** – *Docking* moléculaire rigide à l'aide d'une interface à cinq DDLs [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006]

tiques spécifiques au *docking* moléculaire sont développés [HOU et SOURINA 2010]. Pourtant, tous ces outils et solutions associés à la complexité que représente la réalisation d'une tâche de *docking* moléculaire semble difficilement accessible à un manipulateur seul.

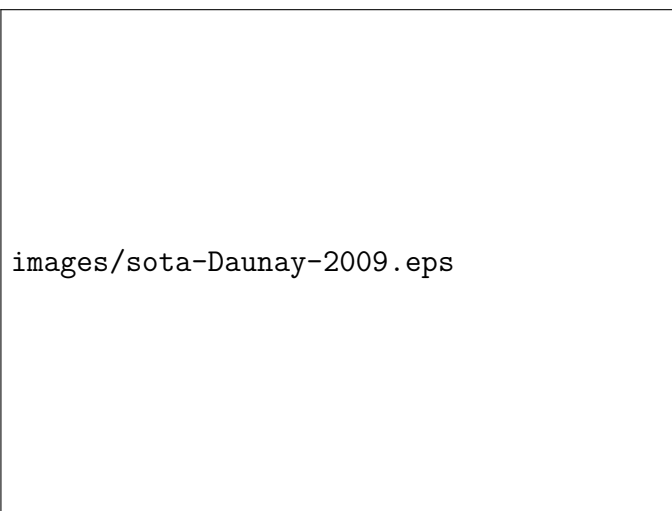
## 5 1.3 Le travail collaboratif

La difficulté de la tâche présentée précédemment nous amène à nous poser la question : quelle solution pouvons-nous proposer afin d'être capable d'appréhender une tâche d'une telle complexité ? Nous allons découvrir dans cette section qu'un certain nombre de chercheurs en psychologie sociale se sont  
10 intéressés au travail collaboratif sous la forme d'une distribution cognitive des charges de travail afin de répondre à des problèmes complexes.

### 1.3.1 Travail collaboratif ou travail coopératif ?

Tout d'abord, il est nécessaire de faire la distinction entre travail coopératif et travail collaboratif. ROSCHELLE et TEASLEY [1995] expliquent très bien  
15 cette différence.

*Cooperative work is accomplished by the division of labour among participants, as an activity where each person is responsible for a*



**Figure 1.8** – *Docking* moléculaire rigide avec le Virtuose™ 6D35–45 [DAUNAY et RÉGNIER 2009]

*portion of the problem solving. We focus on collaboration as the mutual engagement of participants in a coordinated effort to solve the problem together.*

dont on trouve une traduction en français dans les travaux de KNAUF [2010]

5

Le travail coopératif implique une division du travail entre les participants, chaque participant étant responsable d'une partie du problème à résoudre. Dans la collaboration, les participants s'engagent tous dans les mêmes tâches, en se coordonnant, afin

10

de résoudre le problème ensemble.

Le travail collaboratif s'est développé rapidement avec l'informatique. On peut citer les outils de gestion de versions tels que GIT [2011], MERCURIAL [2011] ou encore SUBVERSION [2011] qui permettent la collaboration de plusieurs développeurs pour la création ou la modification de programmes informatiques. Puis Internet a donné naissance à des outils de collaboration tels que les *Wikis* [LEUF et CUNNINGHAM 2001 ; WAGNER 2004] avec le succès de Wikipedia que l'on connaît. Cependant, ces deux exemples proposent une collaboration asynchrone où chaque acteur intervient à la suite de son prédécesseur pour ajouter, améliorer ou corriger une partie du travail.

15

20 Aujourd'hui, les outils permettant la collaboration synchrone se limitent à quelques domaines restreints (systèmes de vidéoconférences, jeux vidéos en ligne).

### 1.3.2 La distribution cognitive des charges de travail

BANDURA [1986] puis FOUSHEE et HELMREICH [1987] sont parmi les premiers à avoir l'intuition que le travail collaboratif apporte plus qu'une simple multiplication des ressources. Par exemple, WEGNER [1987] s'intéresse à la distribution de la mémoire dans un groupe ce qui permet à chaque individu de se libérer d'une charge cognitive. GEORGE [1990] souligne également les effets de l'état émotionnel de chacun sur l'état émotionnel du groupe<sup>2</sup>.

C'est HUTCHINS [1995] qui concrétise la notion de distribution cognitive avec une étude des interactions qui ont lieu dans un cockpit d'avion. L'année suivante, il cristallise ses conclusions autour de ces observations en psychologie sociale et de ses connaissances en anthropologie [HUTCHINS 1996] : il fait une distinction entre les propriétés cognitives d'un individu et les propriétés cognitives d'un groupe. Deux communautés se créent ; ceux qui considèrent que le travail cognitif d'un groupe d'individus est une somme des propriétés cognitives de chaque individu ; et ceux qui considèrent que certains aspects cognitifs d'un groupe d'individus sont propres à la collaboration.

Pour justifier le rejet de l'approche internaliste et individualiste, A. CLARK [1998] explique que lorsque notre cognition s'appuie sur une aide externe, elle devient interactive et relationnelle, c'est-à-dire non détachable d'un composant externe présent dans l'environnement. De plus, A. CLARK [2001] parle du lien étroit entre la notion d'extension cognitive et les processus cognitifs complexes : les problèmes de nature complexe stimule cette extension cognitive.

HOLLAN *et al.* [2000] proposent de définir la distribution cognitive de la façon suivante

*Unlike traditional theories, however, [the theory of distributed cognition] extends the reach of what is considered cognitive beyond the individual to encompass interactions between people and with resources and materials in the environment.*

pour laquelle CONEIN [2004] propose une traduction

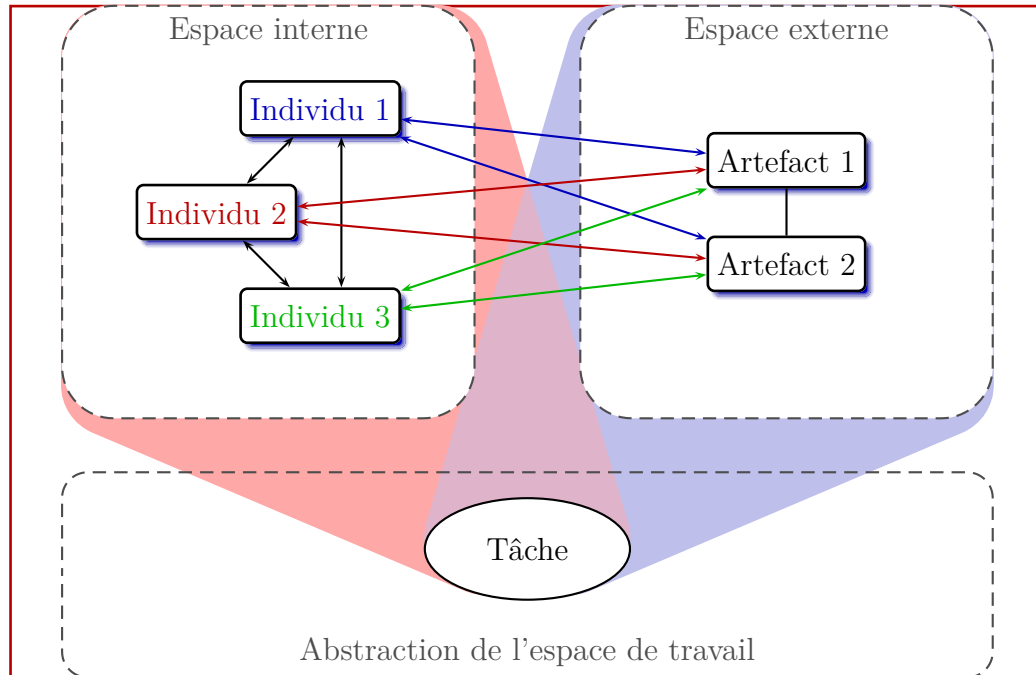
On peut déplacer la frontière de l'unité cognitive d'analyse au-delà de l'enveloppe corporelle de l'individu de façon à inclure le matériel et l'environnement social comme composant d'un système cognitif plus étendu.

Plus récemment, ZHANG et PATEL [2006] synthétisent la distribution cognitive en décrivant les groupes d'individus comme des systèmes ayant des

---

2. YAMMARINO et MARKHAM [1992] ont remis en cause les conclusions obtenues mais le travail de GEORGE [1990] a de nouveau été confirmé par GEORGE et L. R. JAMES [1993].

interactions externes (avec des matériels) [ZHANG et D. A. NORMAN 1994] et des interactions internes (avec des partenaires). En effet, les éléments externes sont également inclus dans le processus de distribution cognitive pour soulager les individus. La figure 1.9 illustre un tel système de distribution cognitive.



**Figure 1.9 – Représentation d'un système cognitivement distribué**

ZHANG [1997] dresse une liste des propriétés cognitives auxquelles peuvent répondre ces éléments externes :

- fournir une aide mémorielle à court ou long terme afin de réduire la charge cognitive ;
- 10 – améliorer et simplifier la perception de l'information pour la rendre rapidement accessible et appréhendable ;
- fournir des connaissances et des compétences qui ne sont pas disponibles en interne ;
- aider la perception des opérateurs pour qu'ils identifient facilement les caractéristiques et puisse effectuer des déductions ;
- 15 – structurer et fixer les comportements cognitifs de manière inconsciente ;
- changer la nature de la tâche en générant des séquences d'actions plus efficaces ;
- possibilité d'arrêter le temps ou de permettre des répétitions afin de rendre
- 20 visible et durables des informations qui ne le sont pas ;

- permet de limiter l’abstraction ;
- maximiser la précision et minimiser l’effort dans la prise de décisions pour déterminer une stratégie.

Les éléments externes de la distribution cognitive, que D. A. NORMAN [1991] et KIRSH [1999] appellent artefact, répondent au besoin d’affordance. Le concept d’affordance a été identifié par GIBSON [1977]. L’affordance est l’ensemble des possibilités d’actions sur et avec un artefact [GIBSON 1979] mais cette définition s’est par la suite réduite aux seules possibilités dont l’acteur est conscient. C’est D. A. NORMAN [1988] qui utilise ce terme pour la première fois dans le contexte de la distribution cognitive. Il en fait une description plus précise lorsqu’il se rend compte que ce terme est mal utilisé par la communauté [D. A. NORMAN 1999]. Le terme est ensuite utilisé par les fondateurs de la psychologie cognitive sociale [PATEL *et al.* 2000].

Cependant, FOUSHEE et HELMREICH [1987] montrent qu’une configuration de travail collaboratif peut amener un gain en efficacité mais peut également amener une perte d’efficacité. Par exemple, PATEL *et al.* [1999] montrent une perte d’efficacité sur une application permettant la collaboration distante. ZHANG [1998] esquisse une explication dépendant de la répartition des connaissances dans un groupe : si les connaissances sont complémentaires, il y a un gain en efficacité. Nous allons voir dans les sections suivantes que différents phénomènes influent sur les performances d’un groupe.

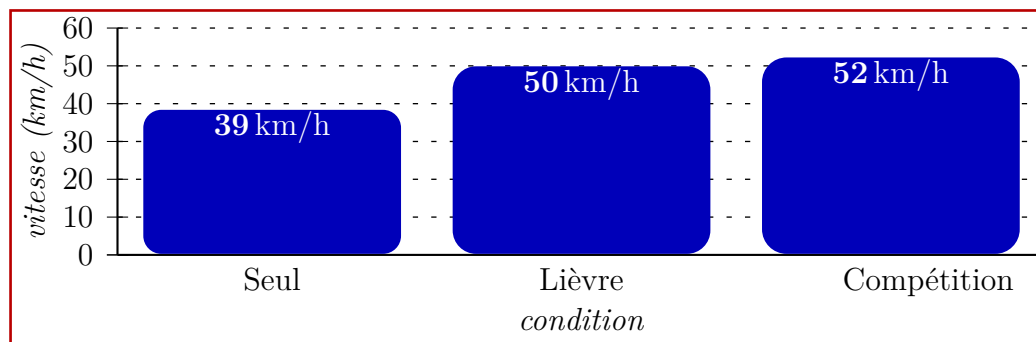
### 1.3.3 La facilitation sociale

La facilitation sociale est un phénomène qui a été mis en évidence par TRIPLETT [1898]. Il s’est intéressé aux résultats de coureurs cyclistes ayant couru dans trois conditions différentes :

1. Course seul ;
2. Course avec un meneur (également appelé *lièvre* dans le jargon) ;
3. Course dans des conditions de compétition.

Les résultats (voir figure 1.10 page suivante) montrent que les coureurs en présence d’autres individus sont plus rapides que les coureurs effectuant l’épreuve seuls.

Ce phénomène mis en évidence par TRIPLETT [1898] a été plus largement discuté par SEASHORE [1899]. Des expérimentations sur des étudiants ont ensuite été menées par MAYER [1903] puis par MEUMANN [1904]. MAYER [1903] confirme l’amélioration des performances en confrontant les sujets à des spectateurs pendant toute la durée de la réalisation de la tâche (rédaction de dictée ou résolution de problème arithmétique). MEUMANN [1904] ajoute une



**Figure 1.10** – Résultats obtenus par TRIPLETT [1898] avec des cyclistes

pierre à l'édifice en confirmant avec des tests plus poussés (tests de mémoire, ergographe et dynamomètre) que les étudiants sont toujours moins performants lorsqu'ils sont seuls.

D'après STRAUSS [2002] qui propose un état de l'art sur le sujet, le terme  
 5 facilitation sociale est utilisé pour la première fois par ALLPORT [1924]. Il en donne la définition suivante.

*The action prepared or in progress is some response participated in by all, and the social stimuli releasing or augmenting such response are the sight and sound of others doing the same thing.*

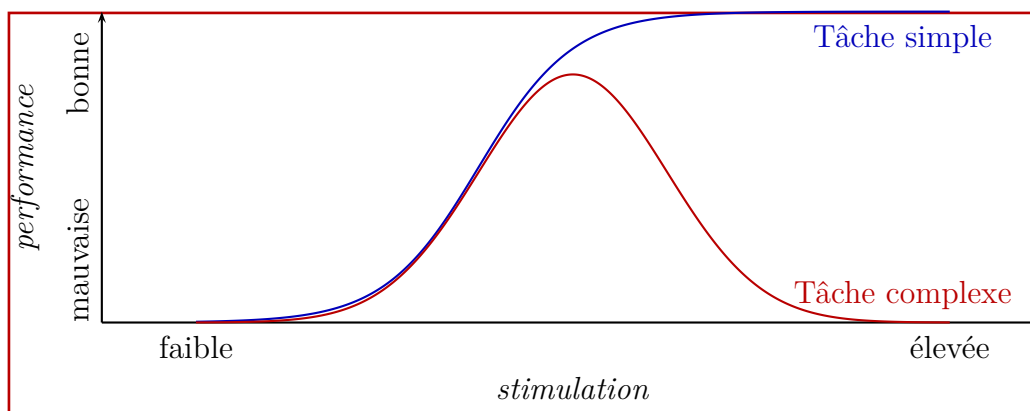
10 qui peut-être traduite par

Une action collaborative préparée ou en progression possède une réponse et la stimulation sociale provoque une augmentation de cette réponse uniquement à la vue et au son provoqué par d'autres effectuant les mêmes mouvements.

15 ALLPORT [1924] aborde ce phénomène par une collaboration où chaque individu effectue la même tâche. Dans ce même contexte, ROETHLISBERGER *et al.* [1939], qui a étudié les travaux de Elton MAYO au sein de l'entreprise *Hawthorne Works*, constate également que le travail en groupe génère une stimulation qui augmente les performances du groupe : les performances  
 20 du groupe sont meilleures que la somme des performances de chacun des membres individuellement. La facilitation sociale a même été observée sur des animaux comme les cafards [ZAJONC 1969] ou les singes [DINDO *et al.* 2009].

Cependant, des nuances de ce phénomène commencent à être observées. Par  
 25 exemple, des différences de performances sont observées en fonction de la nature de la tâche. Déjà, YERKES et DODSON [1908] avait constaté, dans un contexte non-collaboratif, que les performances d'un individu pouvait dépendre de la complexité de la tâche et du niveau de stimulation. Une trop

forte motivation a des effets néfastes sur les performances de l'individu lors de la réalisation d'une tâche complexe (voir figure 1.11). ZAJONC [1965] a fait le lien entre la loi de YERKES et DODSON [1908] et la facilitation sociale. En effet, la présence de partenaires dans la réalisation d'une tâche permet une stimulation globale du groupe. Dans le cadre d'une tâche simple, chacun des membres est confiant dans ses propres capacités à réaliser la tâche et la présence d'observateurs va stimuler son besoin de bien réussir la tâche. Cependant, la réalisation d'une tâche complexe va être entravée par l'évaluation des membres les uns entre les autres : la tâche n'étant ni habituelle, ni facile, les membres du groupes perdent leur confiance.



**Figure 1.11** – Loi de YERKES et DODSON [1908] sur le lien entre la stimulation des individus et les performances

Malgré cela, CASTRO [1994] montre que la stimulation sociale est meilleure lorsque les participants se connaissent entre eux. En effet, les participants qui se connaissent vont s'affranchir de la peur d'être évalué.

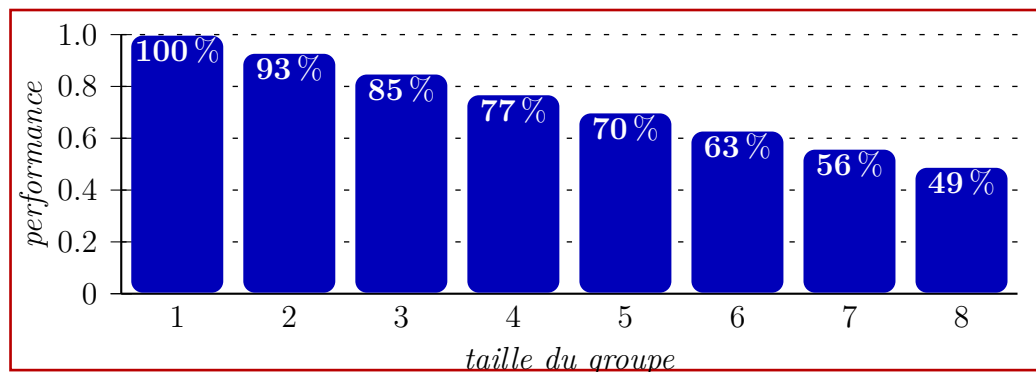
Dans cette section, nous avons présenté la facilitation sociale. Ce phénomène permet, par la simple présence ou la participation de plusieurs partenaires, de stimuler un groupe et d'en augmenter les performances. Cependant, nous allons voir dans la section suivante qu'une autre théorie concernant la psychologie sociale s'oppose à celle de la facilitation sociale : la paresse sociale.

### 1.3.4 La paresse sociale

RINGELMANN [1913] est le premier à constater le phénomène de paresse sociale<sup>3</sup> dans un rapport technique qui sera signalé quelques années plus tard

3. Ce phénomène de paresse sociale est d'ailleurs parfois nommé « effet de RINGELMANN [1913] ».

par MOEDE [1927] puis repris dans la littérature scientifique par KRAVITZ et B. MARTIN [1986]. Il propose une expérience de traction de corde à plusieurs individus et observe la traction totale exercée par le groupe en faisant varier la taille des groupes. La traction totale observée pour un groupe est inférieure à la somme des efforts individuels (voir figure 1.12). Cependant, les résultats de RINGELMANN [1913] ne permettent pas de déterminer si la perte d'efficacité est liée à un effort individuel moindre ou à un manque de coordination entre les membres du groupe [STEINER 1972].



**Figure 1.12** – Résultats obtenus par RINGELMANN [1913] et présentés par KRAVITZ et B. MARTIN [1986]

Entre temps, LATANÉ *et al.* [1979] ont recréé l'expérience proposée par RINGELMANN [1913] en modifiant le protocole expérimental afin de limiter les erreurs de mesure liées aux conflits de coordination. Bien que les résultats varient légèrement, les conclusions sont les mêmes que celles avancées précédemment. Les travaux de KERR et BRUUN [1981] permettent d'apporter des précisions pour définir les raisons de la paresse sociale. Elle est liée à l'anonymité relative des membres du groupes vis-à-vis de la tâche : tous les membres sont égaux face à la tâche et ne sont pas distinguables. La conséquence est la faible participation de certains membres qui se fient aux autres collaborateurs pour accomplir la tâche.

Une définition de la paresse sociale est donnée par SCHERMERHORN *et al.* [2009]

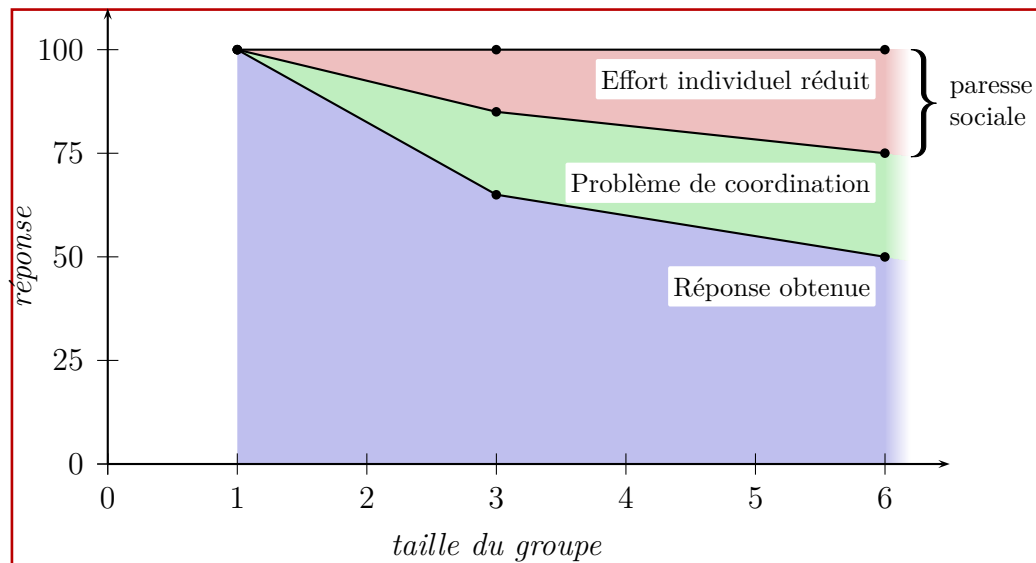
*The tendency of group members to do less that they are capable of as individuals.*

qui peut être traduite par

Tendance à fournir un effort moindre lorsqu'une tâche est effectuée en groupe plutôt qu'individuellement.



Par la suite, les travaux se sont intéressés à l'évolution de la paresse sociale en fonction du nombre de participants. INGHAM *et al.* [1974] puis KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] montrent que l'ajout d'un premier puis d'un deuxième collaborateur a des conséquences importantes sur la paresse sociale mais que l'ajout de collaborateurs supplémentaires provoque une baisse plus modérée. [SULEIMAN et WATSON 2008] proposent une synthèse de la collaboration, illustrée sur la figure 1.13.



**Figure 1.13** – Synthèse des effets de la collaboration selon SULEIMAN et WATSON [2008]

Cependant, différentes études proposent des solutions et deux ressortent particulièrement : l'identification et l'auto-évaluation. Selon KERR et BRUUN [1981], l'identification est censée éviter l'anonymat relatif qui peut se mettre en place entre les membres du groupe vis-à-vis de la tâche. LATANÉ *et al.* [1979] en avaient déjà eu l'intuition puisqu'ils proposent une telle solution dans leurs perspectives. KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] repris par KRAUT [2003] mettent en avant cette idée d'identification à la suite d'expérimentations.

D'ailleurs, KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] proposent également le principe d'auto-évaluation pour contrer les effets nocifs de la paresse sociale. De cette manière, les utilisateurs peuvent s'auto-évaluer et évaluer leurs collaborateurs ce qui crée une pression qui va permettre la facilitation sociale [S. G. HARKINS et SZYMANSKI 1988; SZYMANSKI et S. G. HARKINS 1987]. Dans une étude dans laquelle il compare entre autre une configuration de travail collaboratif distribuée avec une configuration colocalisée, CHIDAMBARAM et TUNG [2005] montrent qu'un travail colocalisé permet de faciliter

l'auto-évaluation et augmente cette pression sociale. En effet, le travail colocalisé permet d'avoir une meilleure perception des actions de chacun des membres et ainsi d'évaluer de façon plus précise le travail du collaborateur. Cependant, CHIDAMBARAM et TUNG [2005] constatent un effet pervers :  
5 certains membres du groupes tente simplement de donner l'impression qu'ils travaillent sans être particulièrement effectif. On trouve également les récents travaux de BUISINE *et al.* [2011] qui montrent que l'occupation spatiale de l'environnement est importante : un accès limité à l'espace de travail mène à de la paresse sociale. En effet, si l'environnement de travail est un tableau  
10 par exemple, dès qu'un des membres du groupes utilise le tableau, les autres n'y ont pas un accès physique. L'idéal est d'avoir un accès équilibré à l'espace de travail pour tout les membres du groupe (une table ronde par exemple).

La paresse sociale est un phénomène qui peut mettre à néant les avantages du travail de groupe. Cependant, fournir une identification des rôles de chacun  
15 est une première réponse à ce problème, l'auto-évaluation étant la seconde et c'est par l'intermédiaire d'un travail colocalisé que ce deuxième point peut être en partie pris en charge.

## 1.4 Collaboration en environnement virtuel

Dans la section précédente, nous avons identifié deux types d'éléments qui  
20 vont interagir au sein d'un système collaboratif :

**Les participants** qui sont les individus qui vont contribuer directement ou indirectement à la réalisation d'une tâche en collaboration ;

**Les artefacts** qui sont les différents composants ou matériels avec lesquels ou sur lesquels la collaboration peut s'appuyer.

25 Dans cette section, nous allons décrire les interactions qui ont lieu entre les différents acteurs d'un système collaboratif.

### 1.4.1 Communication en environnement virtuel

DIX [1997] a proposé de classifier différentes catégories de communication :

**Communication directe** C'est le moyen de communication le plus naturel.  
30 La communication se fait de manière orale ou gestuelle principalement. Elle est conscient la plupart du temps mais peut contenir une part de communication inconsciente d'après GUTWIN et GREENBERG [2000].

**Contrôle et retour sensoriel** C'est l'interaction entre un participant et un artefact. Cette interaction est bidirectionnelle car le participant agit sur l'artefact qui produit un retour sur un ou plusieurs des modalités du participants (vue, ouïe, toucher, *etc.*).

5 ***Feedthrough*** C'est un canal de communication indirect où les participants communiquent entre eux par l'intermédiaire des artefacts [DIX *et al.* 2003]. Les actions effectuées par un participant à l'aide et sur l'artefact modifient l'environnement ce qui donne des informations sur les ac-  
10 tions et les intentions au collaborateur. JUNUZOVIC et DEWAN [2009] utilisent même le terme *feedthrough* pour une communication indirecte avec un participant en intermédiaire.

**Compréhension partagée** Les participants doivent posséder au moins un niveau de compréhension commun (même langue parlée, même base culturelle, même jargon, *etc.*) afin de se comprendre [DIX *et al.* 2003].  
15 Cette aspect de la communication est inconscient mais est nécessaire pour la collaboration.

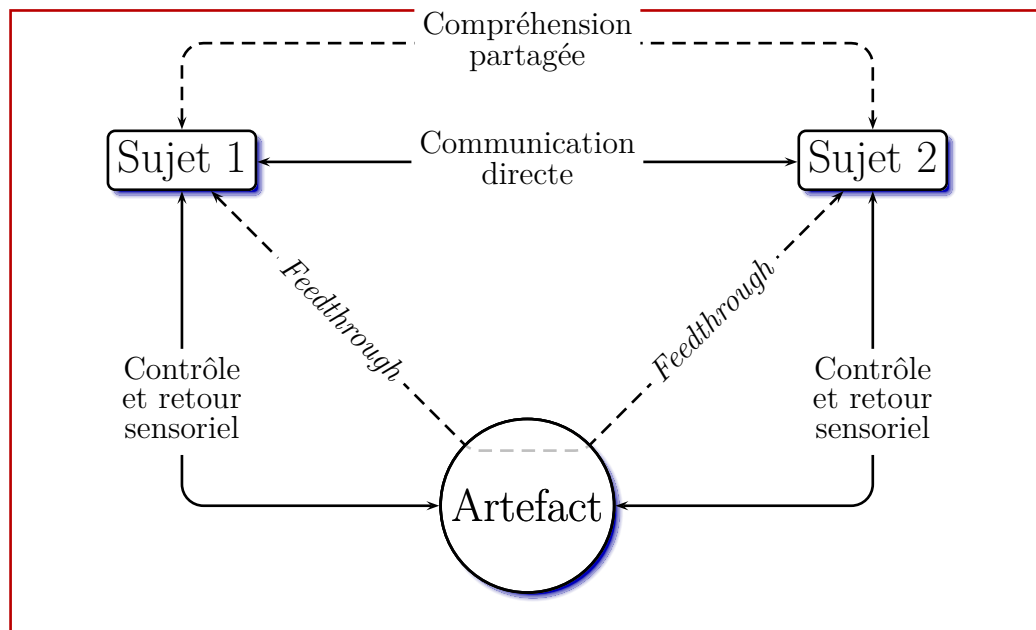
Avec ces différents canaux de communication, conscient pour certains (communication directe, contrôle et retour sensoriel) et inconscients pour d'autres (*feedthrough* et compréhension partagée), il est possible de définir trois scénarios de collaboration différents basé sur les travaux de DIX *et al.* [2003] et  
20 de GRASSET [2004].

## Collaboration à plusieurs utilisateurs

Illustré sur la (voir figure 1.14 page suivante), c'est l'aspect le plus naturel de la distribution cognitive des charges que nous avons déjà découvert  
25 dans la section 1.3.2 page 15 : on souhaite diviser la tâche à réaliser entre plusieurs utilisateurs car elle trop complexe ou trop fastidieuse. Chaque participant possède un accès libre aux artefacts et à la possibilité d'analyser l'environnement par l'observation ou par les retours sensoriels des artefacts sur les participants.

30 Ce scénario permet une collaboration d'égal à égal entre les collaborateurs ce qui peut faciliter la communication. Cependant, nous avons vu dans la section 1.3.4 page 19 sur la paresse sociale qu'une identification des rôles était préférable. Ce type de scénarios aura tendance à favoriser la paresse sociale en proposant des rôles strictement identiques aux utilisateurs.

35 De plus, on notera que tous les participants accèdent aux mêmes artefacts. Si deux collaborateurs accèdent, modifient ou manipulent en même temps un



**Figure 1.14** – Collaboration à plusieurs utilisateurs

même artefact, cela peut poser des problèmes de cohérence de l'environnement virtuel ou de sécurité de l'information comme l'explique DEWAN et H. SHEN [1998]. DEWAN et H. SHEN [1998] énoncent une liste de conditions à respecter pour limiter les problèmes de concurrences d'accès aux codes sources

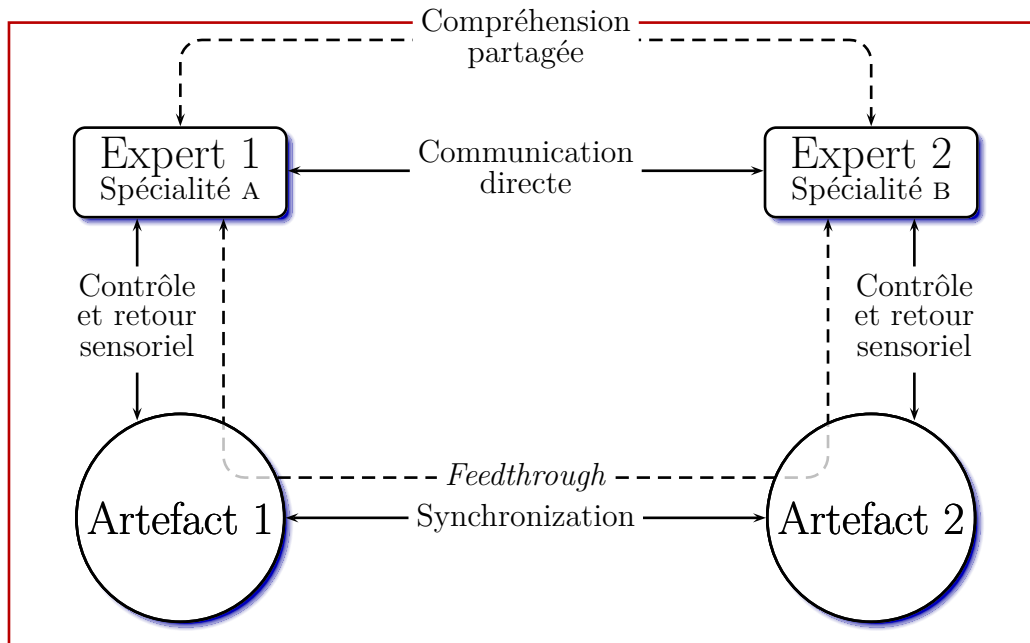
5 pour le développement de programmes informatiques. Quelques années plus tard, c'est le projet SUBVERSION [2011] qui voit le jour pour effectuer du développement informatique en collaboration. GRASSET et GASCUEL [2002] sont également confrontés à ce problème d'accès aux ressources sur sa plateforme multi-utilisateurs MARE et propose un système de contrôle d'accès aux

10 informations. Toutefois, BUISINE *et al.* [2011] soulignent qu'une possibilité d'accès aux artefacts également distribuée entre les utilisateurs permet de réduire la paresse sociale. En effet, si un utilisateur ne parvient pas à accéder aux artefacts, il va s'isoler.

### Collaboration à plusieurs experts

15 Le scénario à plusieurs experts se distingue du scénario à plusieurs utilisateurs par la compétence des membres du groupe : les experts proviennent de spécialités différentes. La médecine est un domaine qui s'adapte très bien à ce type de scénario étant donné le nombre important de spécialités différentes [ALTHOFF *et al.* 2007a ; ALTHOFF *et al.* 2007b]. Les experts possédant

des connaissances différentes, il est nécessaire pour eux d’avoir des artefacts adaptés à leur besoins (voir figure 1.15). Si on prend l’exemple du *docking* moléculaire, un biologiste n’aura pas les mêmes besoins en information qu’un chimiste et leurs actions sur la tâche à réaliser seront également de natures différentes. Les artefacts se synchronisent entre eux afin de conserver un environnement virtuel cohérent pour l’ensemble des experts.



**Figure 1.15** – Collaboration à plusieurs experts

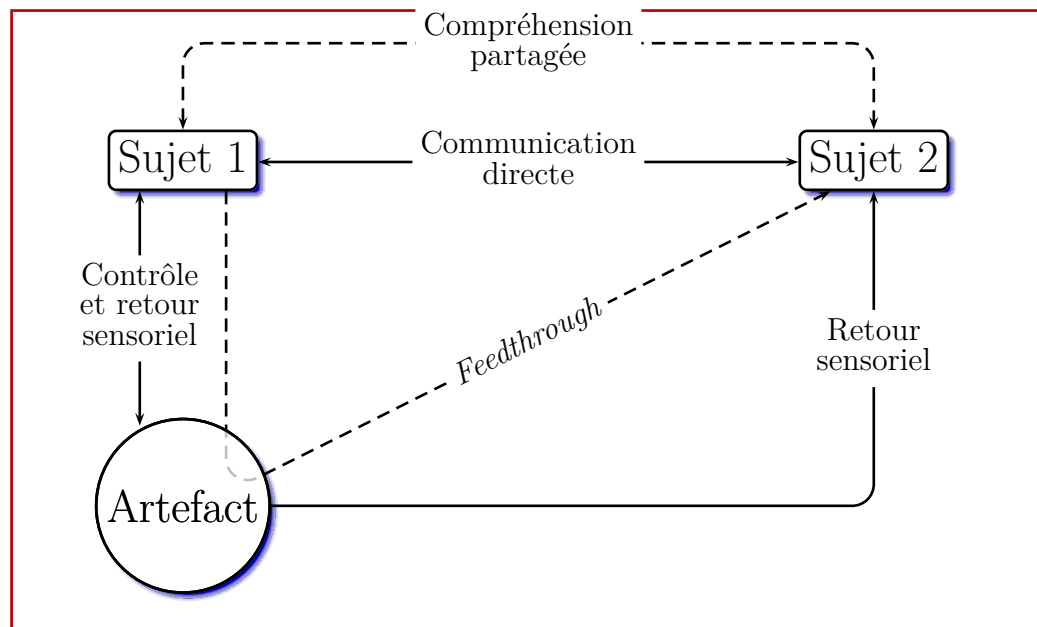
Certaines tâches sont très adaptées à ce type de collaboration. Elle permet une identification des rôles de chacun et limite ainsi toute paresse sociale : chaque utilisateur doit se fier à lui-même pour réaliser la tâche. De plus, l’accès aux artefacts devient simplifié puisqu’il n’y a plus d’accès concurrent à un même artefact par deux utilisateurs. Cependant, une synchronisation entre les artefacts est nécessaire afin de conserver une cohérence de l’environnement virtuel pour l’ensemble des utilisateurs ce qui peut poser quelques difficultés techniques. BARBIČ et D. L. JAMES [2007] ainsi que GAUTIER *et al.* [2008] abordent ces problèmes de synchronisation sur des simulations de déformation d’objets déformables.

Dans les scénarios à plusieurs experts, la compréhension partagée est difficile car les bases de connaissances des experts peuvent être très différentes. Il est nécessaire de se construire une base de connaissance commune selon BACH *et al.* [2010], notion déjà identifiée comme le *grounding* par Herbert H. CLARK et BRENNAN [1991] (voir section 1.4.2 page 27). Par exemple, le jargon utilisé

entre deux experts de spécialités différentes peut être une entrave importante à la communication directe.

### Collaboration par manipulateur et observateur

Dans les deux scénarios précédent, il est difficile de synchroniser les actions des différents utilisateurs. Dans le scénario à plusieurs utilisateurs, c'est l'accès concurrent aux artefacts qui pose problème ; dans le scénario à plusieurs experts, c'est la synchronisation entre les artefacts. Afin de passer outre ces contraintes, le scénario par manipulateur et observateur offre un accès exclusif à un seul utilisateur du groupe, les autres n'ayant que la possibilité d'interagir directement avec cet utilisateur (voir figure 1.16). L'observateur agit alors sur les artefacts par l'intermédiaire du manipulateur.



**Figure 1.16** – Collaboration par manipulateur et observateur

Ce scénario permet de s'affranchir des contraintes d'accès concurrent aux artefacts ou de synchronisation entre les artefacts. Les observateurs possèdent également une charge de travail cognitive beaucoup plus faible et peuvent se consacrer de manière plus importante à l'analyse des données disponibles et à la proposition de solutions pertinentes.

Cependant, l'activité de l'observateur le mène à indiquer, désigner des objectifs au manipulateur ce qui augmente le besoin de communication. CHASTINE [2007] aborde cette problématique dans ces travaux de thèse : il nomme

ce concept inter-référencement (voir section 1.4.2 page suivante). De plus, un travail récent cherchant à caractériser « l'intelligence d'un groupe » a conclu que l'un des facteurs d'intelligence d'un groupe était une répartition équitable des charges de travaux entre les membres du groupe [WOOLLEY *et al.* 2010]. Dans ce scénario, l'asymétrie des différents rôles (manipulateur et observateur) semble favoriser un déséquilibre important des charges de travail.

## 1.4.2 La communication implicite et explicite

À travers tous ces scénarios, certains aspects de la communication sont relativement implicites et difficilement observables. D'autres sont plus concrets mais apportent également leurs contraintes et leurs limites. Cette section s'attarde sur trois notions particulièrement importante dans le travail collaboratif : le *grounding*, la présence et l'inter-référencement.

### Le *grounding*

Cette notion, mise en évidence par Herbert H. CLARK et SCHAEFER [1989], est nécessaire à la collaboration. Herbert H. CLARK et BRENNAN [1991] expliquent ce besoin de *grounding* par la phrase suivante.

*[A group] cannot even begin to coordinate on content without assuming a vast amount of shared information or common ground – that is, mutual knowledge, mutual beliefs, and mutual assumptions.*

qu'on pourrait traduire par

Un groupe ne peut pas commencer à se coordonner sur une tâche sans supposer une quantité importante d'informations partagées ou d'une base commune – c'est-à-dire des connaissances mutuelles, des convictions communes et des hypothèses communes.

Le *grounding* est nécessaire à la transmission d'information. En effet, toute information transmise suppose déjà de nombreuses informations implicites que l'interlocuteur doit connaître. DILLENBOURG *et al.* [1996] étudient ce partage d'informations sur une tâche d'enquête fictive sur un meurtre. Il constate que chaque membre du groupe se construit sa propre représentation de l'environnement dans lequel il se trouve et évolue en fonction des informations que chacun trouve et de sa culture existante [BAKER *et al.* 1999].

Lors d'un travail de collaboration, chaque membre possède déjà sa propre base de connaissances qui peut partiellement recouvrir celle des autres membres

mais également être complémentaire. Cependant, durant la réalisation de la tâche, une base de connaissance commune va se créer. HERTZUM [2008] lie les processus de recherche d'informations et de *grounding*. En effet, la recherche d'informations mène les membres du groupes à découvrir l'environnement dans lequel ils évoluent pour étoffer leur base de connaissance commune. Cependant, HERTZUM [2010] met en pratique cette constatation en observant le travail d'un hôpital où plusieurs médecins sont à la recherches de symptômes pour définir un diagnostic et fournir un traitement. Il s'est rendu compte que chaque médecin est capable individuellement de découvrir des symptômes mais que le manque d'échanges entre les différents médecins ne permettait pas toujours d'établir le bon diagnostic.

Afin de constituer correctement une base de connaissance commune, les membres du groupe doivent communiquer. En particulier, ils doivent continuellement être sûr que les éléments dont ils parlent sont bien les mêmes afin de transmettre l'information. La désignation de ces éléments n'est pas toujours simple et c'est le sujet de la prochaine section.

## L'inter-référencement

La notion d'inter-référencement est très récente et c'est CHASTINE [2007] qui l'a mise en évidence à travers sa plate-forme AMMP-Vis [CHASTINE *et al.* 2006 ; CHASTINE *et al.* 2005]. L'inter-référencement est défini par CHASTINE [2007] comme

*The ability for one participant to refer to a set of artifacts in the environment, and for that reference to be correctly interpreted by others.*

qu'on traduira par

La capacité pour un des participants de désigner un ensemble d'artefacts dans l'environnement et que cette désignation soit correctement comprise par les autres collaborateurs.

Au travers de ces travaux de thèse, il s'attarde un peu plus sur cette définition en considérant les différents acteurs de l'inter-référencement. Un utilisateur initie une désignation vers un élément de l'environnement. Un (ou plusieurs) autre utilisateur reçoit cette désignation. Cette désignation est caractérisée par plusieurs paramètres :

- une technique de sélection ;
- un groupe d'éléments sélectionnés ;
- une technique de représentation ;
- une relation entre l'initiateur et l'élément sélectionné ;



- une relation entre le (ou les) receveur et l'élément sélectionné ;
- un contexte entre l'initiateur et le (ou les) receveur ;
- un moyen d'accuser réception du référencement (optionnel).

Afin de résoudre cette problématique, CHASTINE *et al.* [2007] se proposent, dans un contexte de collaboration distante, d'utiliser des techniques de réalité augmentée pour désigner les éléments inter-référencés (voir figure 1.17). Dans une étude l'année suivante, CHASTINE *et al.* [2008] montrent que les techniques qu'ils proposent pour améliorer l'inter-référencement permettent de limiter les ambiguïtés et d'améliorer les performances globales du groupe.



**Figure 1.17** – Inter-référencement visuel proposé par CHASTINE *et al.* [2007] à l'aide de techniques de réalité augmentée

- Afin d'effectuer des inter-référencements à un collaborateur, il est nécessaire de savoir si le collaborateur est attentif. Il est nécessaire d'adapter la manière de procéder en fonction des connaissances de ce collaborateur. Cet ensemble de connaissances concernant l'état actuel de chacun des collaborateurs constitue la conscience de groupe et sera définie dans la section suivante.

## La conscience de groupe

La présence de groupe, également appelée *awareness*, a été définie par DOURISH et BELLOTTI [1992].

*Awareness is an understanding of the activities of others, which provides a context for your own activity.*

- traduit en français par BETBEDER et TCHOUNIKINE [2004]

[La conscience de groupe est la] compréhension des activités des autres, qui permet de donner un contexte à sa propre activité.

La conscience des autres partenaires peut concerner aussi bien l'action réalisée, la position actuelle ou encore des informations durables sur un collaborateur (âge, sexe, spécialité, culture, *etc.*) [COCKBURN et WEIR 1999]. Cette conscience est bien souvent implicite et de nombreux événements peuvent survenir autour d'un participant sans qu'il n'y prête attention. Parfois, ce manque d'attention est un gain de temps pour la réalisation de la tâche (par exemple, le collaborateur éternel). Cependant, savoir que le collaborateur est parti aux toilettes est plus pertinent car il n'est alors plus question de compter sur son aide pendant quelques minutes.

CAHOUR et PENTIMALLI [2005] identifient trois avantages d'avoir une bonne conscience de groupe en étudiant la coopération entre serveurs et cuisiniers d'un café-restaurant :

- l'économie collective de déplacements et actions, grâce à une vision périphérique des mouvements des collègues ;
- le besoin de communications rapides et non intrusives en écoutant sur un mode périphérique les messages oraux adressés dans le brouhaha du café ;
- le besoin d'éviter des collisions dans un petit espace partagé grâce à des modalités visuelles et kinesthésiques.

Cependant, la conscience de groupe est constituée de plusieurs aspects que les sociologues ont cherché à segmenter. GUTWIN *et al.* [1996] propose les quatre catégories de conscience suivantes<sup>4</sup> :

**Conscience informelle** Ce sont les informations générales sur les collègues, le genre d'informations que les gens connaissent lorsqu'ils travaillent dans le même bureau ;

**Conscience sociale** Ce sont les informations que chacun établit dans n'importe quelle relation sociale comme l'état émotionnel de l'interlocuteur, son niveau d'attention ou encore son niveau d'intérêt ;

**Conscience de la structure du groupe** C'est la connaissance de la hiérarchie du groupe, les rôles et responsabilités de chacun, leurs assignations sur une tâche ou leur statut ;

**Conscience de l'espace de travail** C'est la conscience des actions et interactions des autres membres du groupe sur et avec l'espace de travail et les artefacts.

Attention cependant, il ne faut pas confondre conscience et présence qui sont mélangés parfois dans la littérature. D'après SALLNÄS [2004], la conscience

---

4. Les catégories en anglais sont les suivantes : *informal awareness*, *social awareness*, *group-structural awareness* et *workspace awareness*.

est une donnée objective (l'individu sait que son collègue est présent, qu'il s'appelle Luke et que c'est son père) alors que la présence est plutôt une donnée subjective. La présence sociale concerne plutôt le sentiment d'être au sein d'un travail de groupe. Ce sentiment a surtout été mis en avant au sein des plateformes de collaboration distante où il n'y avait pas de présence physique des collaborateurs.

### 1.4.3 Plate-forme de collaboration virtuelle

## 1.5 Conclusion

Le contexte de l'expérimentation est le *docking* 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 DER WAALS [P. 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 hydrophylliques, les ponts salins, *etc.*).

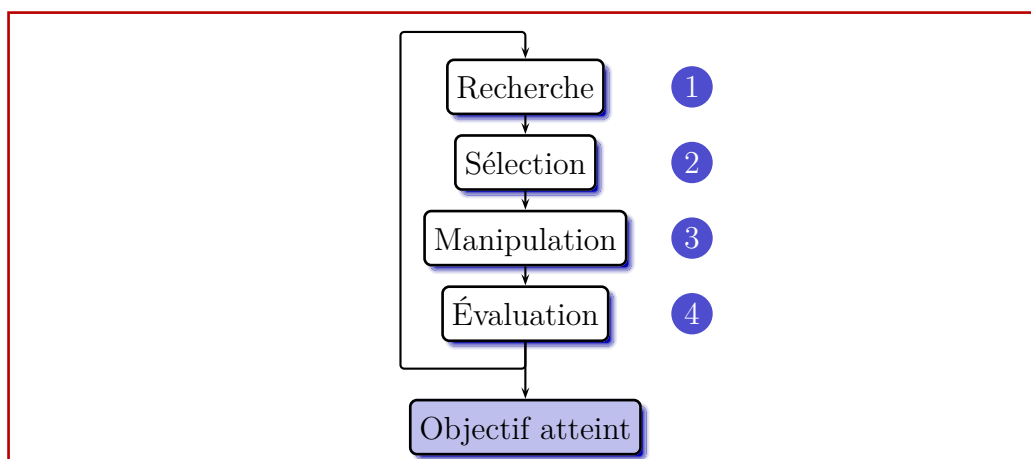
Pour chacun de ces différents niveaux, le processus de manipulation est similaire et peut être séparé en tâches élémentaires (voir figure 1.18 page suivante) :

**Recherche** Cette tâche concerne l'identification et la recherche d'une cible (atome, résidu, hélices- $\alpha$ , feuillets- $\beta$ , *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.*).

5 **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).

10 **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 1.18** – Processus de déformation moléculaire en quatre étapes

# Shaddock – Plate-forme de manipulation collaborative de molécules

## Sommaire

<b>2.1</b>	<b>Introduction . . . . .</b>	<b>34</b>
<b>2.2</b>	<b>Architecture matérielle et logicielle . . . . .</b>	<b>34</b>
2.2.1	Travail collaboratif synchrone et colocalisé . . . . .	34
2.2.2	Architecture logicielle adoptée . . . . .	37
<b>2.3</b>	<b>Plate-forme de simulation et de visualisation . .</b>	<b>39</b>
2.3.1	Module de visualisation moléculaire . . . . .	40
2.3.2	Module de simulation moléculaire . . . . .	42
<b>2.4</b>	<b>Les outils d'interaction . . . . .</b>	<b>44</b>
2.4.1	Outil d'interaction utilisé . . . . .	44
2.4.2	Outils existants . . . . .	45
2.4.3	Outils de manipulation avancés . . . . .	45

## 2.1 Introduction

Le chapitre 1 page 3 nous a permis d'identifier des problématiques de recherche : nombre important d'atomes, multiple connaissances nécessaires, flexibilité des molécules, *etc.* C'est autour de ces problématiques que la plate-  
5 forme Shaddock a été élaborée.

Nous commencerons par présenter les choix de matériels et d'architecture logicielle (voir section 2.2). L'ensemble des éléments de la plate-forme sont organisés selon une architecture client/serveur ; les raisons de ce choix sont expliquées dans la section 2.2.2 page 37.

10 Ensuite, la plate-forme de simulation moléculaire en temps-réel est présentée (voir section 2.3 page 39). Tout d'abord, un module de visualisation est nécessaire pour obtenir des visualisations détaillées et complètes de molécules ; le module est présenté dans la section 2.3.1 page 40. Puis un module de simulation moléculaire est ajouté au module visualisation ; plusieurs solutions  
15 sont possible et le module retenu est présenté dans la section 2.3.2 page 42. Cependant, afin d'obtenir une simulation moléculaire interactive temps-réel, un module spécifique doit être ajouté ; il sera présenté dans la section 2.3.2 page 43.

Le module de visualisation moléculaire utilisé propose déjà des outils permettant d'interagir avec les molécules. Ces outils sont présentés dans la section 2.4.2 page 45. Cependant, notre étude du travail collaboratif nous a amené à proposer des outils de manipulation avancés qui seront présentés dans la section 2.4.3 page 45.

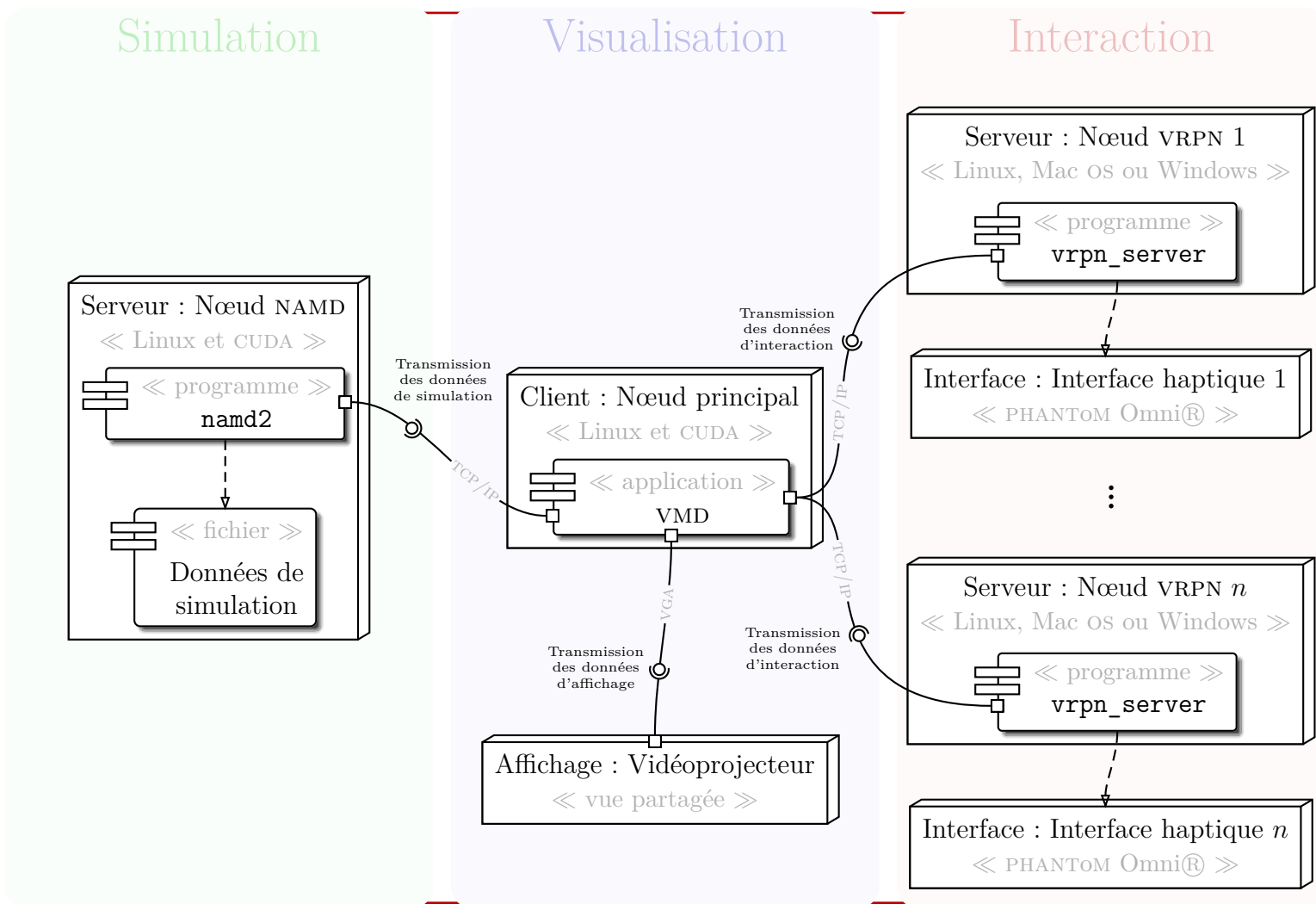
Les différents éléments de cette plate-forme sont résumés dans deux diagrammes UML (*Unified Modeling Language*). Un diagramme de déploiement  
25 UML de la plate-forme Shaddock est présenté sur la figure 2.1 page ci-contre. L'application VMD est détaillée dans un diagramme de composant UML sur la figure 2.2 page 36.

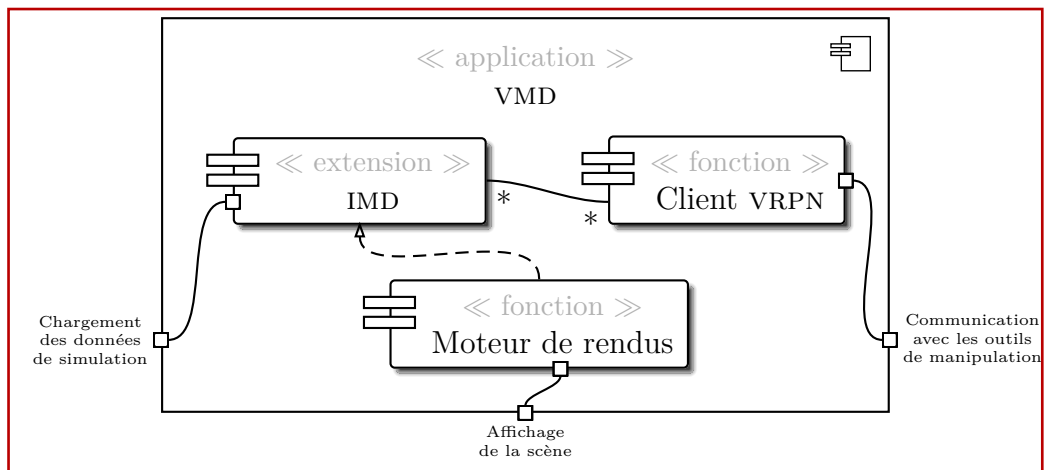
## 2.2 Architecture matérielle et logicielle

### 30 2.2.1 Travail collaboratif synchrone et colocalisé

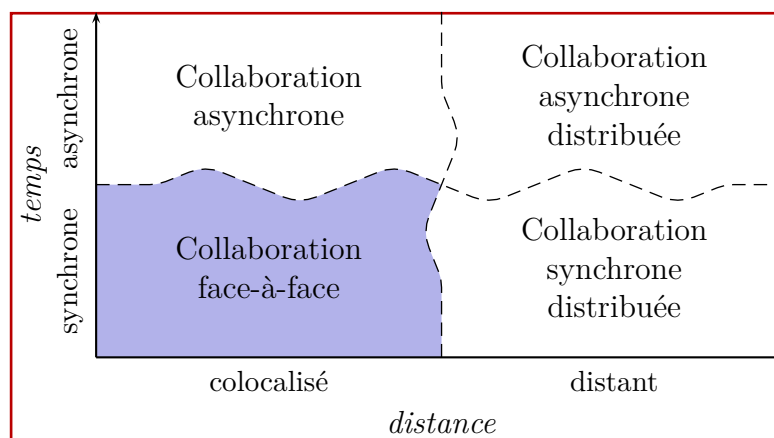
ELLIS *et al.* [1991] a proposé une classification des différentes configurations de travail collaboratif dans le temps et dans l'espace. Il distingue quatre classes principales qu'on peut représenter sur un graphique (voir figure 2.3 page 36).

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





**Figure 2.2** – Diagramme de composant UML du nœud VMD



**Figure 2.3** – Classification des tâches collaboratives selon ELLIS *et al.* [1991]



Nous avons choisi de nous placer dans une configuration de collaboration synchrone et colocalisée, ou collaboration face-à-face. En effet, afin de pouvoir faire interagir en temps-réel les utilisateurs les uns avec les autres, la synchronisation dans le temps est nécessaire. En ce qui concerne la collaboration dans l'espace, une collaboration pourrait être envisageable. Cependant, cette solution de collaboration distante n'a pas été retenue pour différentes raisons.

Tout d'abord, la section 1.4.2 page 29 évoque les problématiques liées à la conscience périphérique des partenaires dans la réalisation d'une tâche collaborative. Étant donné que plusieurs études ont montré que les performances collaboratives sont meilleures lorsque la conscience périphérique est bonne, il nous paraît nécessaire de se placer dans des conditions optimales pour augmenter cette conscience périphérique. La présence physique au même endroit de tous les collaborateurs est la façon la plus naturelle de créer cette conscience de manière optimale. Dans une solution de collaboration distante, de nombreuses informations doivent être enregistrées puis transmises numériquement avec les problématiques de représentations de l'information qui peut se poser.

De plus, la collaboration distante introduit des problématiques techniques. Par exemple, la latence d'un réseau peut poser problème pour la synchronisation de la simulation entre les différents postes de travail.

Pour finir, la configuration de collaboration colocalisée permet d'avoir un environnement virtuel commun par l'intermédiaire d'un affichage partagé. L'affichage est effectué par l'intermédiaire d'un vidéo projecteur et projeté sur un grand écran.

## 2.2.2 Architecture logicielle adoptée

Deux types d'architectures ont été explorés pour les Environnements Virtuels Collaboratifs (EVC) : client/serveur ou pair-à-pair<sup>1</sup>.

### Architecture pair-à-pair

L'architecture pair-à-pair consiste à faire communiquer chaque nœud du réseau avec chacun des autres nœuds : le réseau forme un graphe complet. L'avantage d'une telle architecture et la rapidité de transfert de l'information puisqu'il n'y a pas d'intermédiaire. Cependant, plus le réseau est grand et plus ce type de solutions est difficile à mettre en place.

---

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

Actuellement, les travaux concernant l'utilisation de ce type d'architecture pour la synchronisation d'une manipulation virtuelle à l'aide de l'haptique sont peu nombreux. Par exemple, J. KIM *et al.* [2004] constatent que la latence des réseaux est une problématique importante pour les retours haptiques générés. En effet, la fréquence de traitement nécessaire pour l'haptique est nettement plus élevée que pour le retour visuel ( $\approx 1\,000$  Hz contre  $\approx 60$  Hz). C'est pourquoi il utilise une architecture pair-à-pair. En effet, en dehors d'être une communication directe entre les nœuds, c'est surtout une architecture qui nécessite d'avoir une instance du programme exécutée sur chaque nœud : ainsi, il n'est pas nécessaire d'avoir un réseau pour supporter une fréquence de 1 000 Hz, il suffit d'avoir des nœuds qui le supportent.

Cependant, IGLESIAS *et al.* [2008] explique, à travers une tâche d'assemblage collaboratif, qu'il est nécessaire que les simulations entre les nœuds du réseau se synchronisent pour rester cohérentes entre elles. C'est l'inconvénient majeur de l'architecture pair-à-pair : les environnements virtuels présentés aux différents collaborateurs peuvent diverger et ne pas être cohérents les uns avec les autres.

### Architecture client/serveur

Pour contrer les incohérences de simulation, l'architecture client/serveur est nettement plus adaptée. La simulation principale n'est exécutée qu'une seule fois sur un nœud du réseau appelé serveur. Les collaborateurs utilisent des nœuds clients qui communiquent avec le serveur pour récupérer les informations.

Bien évidemment, dans ce cas, la latence du réseau a beaucoup plus d'influence sur la qualité des retours haptiques. Cependant, nous nous plaçons dans un contexte de collaboration colocalisée ce qui veut dire que des réseaux internes peuvent être utilisés ce qui devrait limiter grandement les problèmes de latence.

P. HUANG *et al.* [2010] montrent la faisabilité d'une telle configuration en proposant la manipulation d'un jeu de construction par blocs. La simulation est centralisée sur un serveur et les interactions haptiques sont produites par l'intermédiaire de clients. Il ne souligne aucune instabilité dans les interactions haptiques. MARSH *et al.* [2006] ou encore J. NORMAN et HAMZA-LUP [2010] s'intéressent particulièrement aux influences du réseau sur les interactions visuo-haptiques. D'après eux, l'architecture client/serveur est la plus adaptée pour la gestion de simulation. Cependant, il conclue sur la nécessité d'avoir

une information qui transite rapidement afin d’obtenir un rendu haptique le plus fidèle possible.

Étant donné que nous nous plaçons dans un contexte de simulation moléculaire, il nous est nécessaire de maintenir un environnement virtuel cohérent tout au long de la simulation. La plate-forme Shaddock est pourvue d’une architecture client/serveur comme on peut le voir sur la figure 2.1 page 35.

### Serveur de périphériques

Afin de gérer les connexions client/serveur pour les interfaces haptiques, nous utilisons le logiciel VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) développé par TAYLOR II *et al.* [2001]. La connexion avec le moteur de simulation est gérée par un autre module qui sera détaillé plus tard dans la section 2.3.2 page 43.

VRPN offre un moyen simple et relativement universel de connecter des périphériques principalement utilisés en réalité virtuelle. En effet, il fournit un serveur pour chaque périphérique. Ensuite, l’application cliente peut envoyer et recevoir les informations nécessaires à la communication avec chacun des périphériques.

Dans notre cas, l’interface haptique est connectée physiquement à un ordinateur<sup>2</sup> et un serveur VRPN commande cette interface haptique. C’est seulement par l’intermédiaire de ce serveur VRPN et à travers le réseau que le client (VMD dans notre cas) va interagir avec l’interface haptique.

La compilation de VRPN en tant que serveur de PHANTOM Omni® sous le système d’exploitation Linux (Ubuntu v10.04) a nécessité quelques modifications dans le code source qui n’avait pas été prévu pour ce cas d’utilisation. Ces modifications ont été soumises aux développeurs de VRPN qui les ont intégrées dans les versions les plus récentes.

## 2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation

Shaddock permet d’effectuer la visualisation de l’environnement moléculaire manipulé. La visualisation est un processus complexe qui nécessite des rendus détaillés et complets des éléments virtuels de l’environnement. En effet, devant le nombre important d’informations que possède une molécule (atomes,

---

2. Cela suppose d’avoir un ordinateur par interface haptique ce qui peut considérablement complexifier la logistique avec un grand nombre de participants.

flexibilité, chimie, champs de forces, *etc.*), il est primordial d’avoir des rendus graphiques permettant d’afficher un maximum d’informations pour un minimum de charge visuelle. Cette tâche est effectuée par un module de visualisation présenté dans la section 2.3.1.

- 5 Ensuite, Shaddock simule une dynamique moléculaire. Un module de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce module puisse interagir avec le module de visualisation. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation. Le module de simulation choisi est présenté dans la section 2.3.2 page 42.
- 10 Cependant, les moteurs de simulation ne sont pas conçus pour effectuer des simulations en temps-réel, et encore moins des simulations *interactives* en temps-réel. Pourtant, afin de proposer une dynamique moléculaire interactive et temps-réel aux utilisateurs, un module présenté dans la section 2.3.2 page 43 permet de faire communiquer le module de visualisation avec le mo-
- 15 dule de simulation.

### 2.3.1 Module de visualisation moléculaire

Les outils de visualisation moléculaire disponibles sont relativement nombreux. Parmi les plus populaires, on peut citer PyMOL [PYMOL 2011], VMD [HUMPHREY *et al.* 1996], Chimera [PETTERSEN *et al.* 2004], RasMol [SAYLE  
20 et MILNER-WHITE 1995] sans compter les nombreux dérivés permettant un affichage en ligne tel que Jmol [Jmol 2011] 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  
25 experts du domaine car c’est le plus abouti en ce qui concerne les performances d’affichage. Cependant, PyMOL ne permet pas l’affichage de simulations temps-réel<sup>3</sup>, ni la manipulation interactive de molécules.

VMD possède également une large gamme de rendus graphiques. De plus, depuis maintenant quelques mois, VMD utilise également des optimisations GPU  
30 pour l’affichage à l’aide de la bibliothèque CUDA. Contrairement à PyMOL, VMD permet le rendu graphique en temps-réel de données de simulation.

La possibilité d’avoir accès à des rendus graphiques détaillés et complets de la molécule est primordiale pour la visualisation. La complexité des molécules,

---

3. Les travaux récents de BAUGH *et al.* [2011] semblent proposer la visualisation en temps-réel d’une simulation moléculaire avec PyMOL.

le nombre important d'atomes, les nombreuses meta-informations, les structures particulières nécessitent d'avoir à sa disposition des rendus graphiques spécifiques.

Le rendu graphique CPK a été retenu pour un affichage complet de la molécule avec tous ces atomes et ces liaisons covalentes. Cependant, dans certains cas, l'affichage explicite des atomes (une sphère) surcharge l'environnement visuel. C'est pourquoi, le rendu complémentaire *Licorice* a également été retenu pour un simple affichage des liaisons covalentes. On notera toutefois que les couleurs informent tout de même sur la nature des atomes. Ensuite, la chaîne carbonée principale de la molécule est une structure tout à fait particulière mais primordiale dans la compréhension des déformations et de la dynamique de la molécule. C'est le rendu *NewRibbon* qui permet de représenter cette chaîne carbonée. Enfin, les liaisons hydrogènes ajoutent des informations supplémentaires pertinentes sur la dynamique des atomes et sont représentés par le rendu *HBonds*.

Les quatre représentations différentes (voir figure 2.4 page suivante) sélectionnées sur la plate-forme Shaddock sont présentées ici :

**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 important mais la taille des sphères et des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.4a page suivante) ;

***Licorice*** représente tous les liens entre les atomes par des cylindres, sans représenter les atomes ; la taille des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.4b page suivante) ;

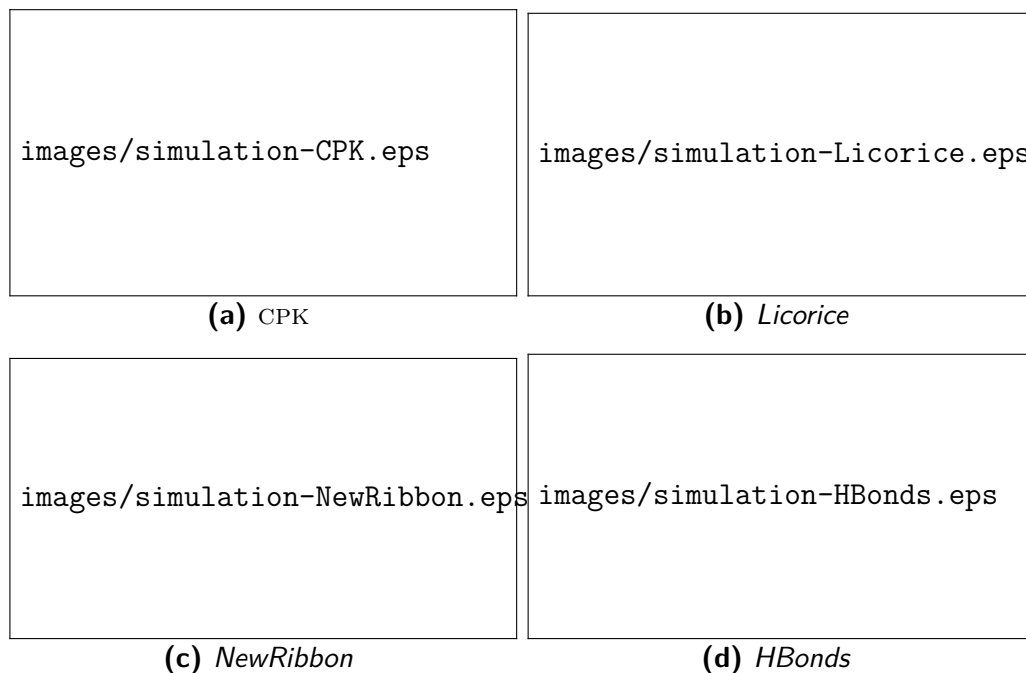
***NewRibbon*** produit une courbe spline sur les atomes  $C_\alpha$  représentant l'armature principale de la molécule ; la courbe est représentée sous forme de ruban (voir figure 2.4c page suivante) ;

***HBonds*** affiche les potentielles liaisons hydrogène sous forme de traits en pointillés ; les seuils physiques ainsi que les paramètres d'affichage de la ligne (couleur, largeur, *etc.*) sont modifiables (voir figure 2.4d page suivante).

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 permettant de mettre en évidence ou au contraire de rendre discrètes certaines parties de la molécule :

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



**Figure 2.4** – Illustration des rendus graphiques de molécules sur VMD

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

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

**Transparence** rend transparent les objets tout en conservant la teinte ;

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

### 2.3.2 Module de simulation moléculaire

Les trois principaux modules de simulation moléculaire existants sont Gromacs [BERENDSEN *et al.* 1995], NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*) [PHILIPS *et al.* 2005] et AMBER [CASE *et al.* 2005]. HESS *et al.* [2008] montre que Gromacs est plus performant que NAMD. Un rapport technique de LOEFFLER et WINN [2009a] a également permis de montrer que Gromacs domine en terme de performances de calculs. Une comparaison plus détaillée montre que chaque moteur de simulation offre de bons résultats en fonction des problèmes auquel il est confronté et du matériel utilisé [LOEFFLER et WINN 2009b].

Cependant, NAMD est développé par la même université que VMD ce qui fait que la connexion entre les deux logiciels est facilitée. Enfin, l'interaction en temps-réel avec le moteur de simulation est possible avec NAMD mais pas avec Gromacs. C'est pourquoi le moteur de simulation moléculaire NAMD a  
5 été retenu pour notre plate-forme.

Une des fonctionnalités de NAMD utilisée est la possibilité de « fixer » des atomes. En effet, la restriction de la simulation moléculaire à certaines régions de la molécule permet d'exclure certains atomes de la déformation. Ces atomes interviennent dans le calcul des forces de la simulation mais  
10 eux-mêmes ne sont pas soumis aux forces de l'environnement. Cette fonctionnalité nous permet de créer un point d'ancrage pour la molécule avant d'éviter toute dérive.

## Simulation moléculaire interactive et temps-réel

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

Cependant, le protocole IMD a récemment été porté par l'Institut de Biologie Physico-Chimie (IBPC) pour une utilisation avec Gromacs. En effet, MDDriver [DELALANDE *et al.* 2009] est une interface permettant d'utiliser le protocole IMD avec d'autre module de simulation comme Gromacs. Cette  
25 nouvelle solution pourrait permettre d'améliorer les capacités de simulation de notre plate-forme mais elle n'a pas encore été implémentée.

## La génération automatique de fichier de simulation

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

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

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

## 2.4 Les outils d'interaction

### 2.4.1 Outil d'interaction utilisé

Pour cette plate-forme de manipulation de molécules interactive et temps-réel, l'outil d'interaction doit répondre à plusieurs contraintes.

10 Tout d'abord, la manipulation de molécules intervient dans un environnement virtuel en 3D. Bien que la simple souris soit déjà utilisée dans de nombreuses applications pour interagir avec des environnement virtuels en 3D (modélisation, jeux vidéos, CAO, *etc.*), ce n'est pas l'outil le plus adapté, notamment pour la sélection en profondeur. L'outil doit permettre la manipulation et la  
15 sélection dans cet environnement virtuel 3D avec six DDLs.

Nous souhaitons proposer une plate-forme pouvant être facilement déployée. En effet, les biologistes, public potentiel de ce type de plate-forme, sont plus habitués à travailler sur des ordinateurs de bureau que dans les environnements immersifs utilisés en réalité virtuelle. C'est pourquoi nous orientons  
20 notre choix de matériel sur des outils de bureau. Cependant, SALLNÄS *et al.* [2000] a montré l'intérêt d'un retour haptique pour l'amélioration des performances dans les configurations de travail collaboratif; c'est donc naturellement que nous nous sommes orientées vers des interfaces haptiques de bureau.

25 Parmi les interfaces haptiques disponibles sur le marché, le PHANTOM Omni® répond à l'ensemble de ces contraintes avec un rapport qualité/prix correct. Le PHANTOM Desktop®, qui répond également aux contraintes, aurait permis des retours haptiques plus fidèles mais son prix élevé ne convient à notre plate-forme collaborative où il faudra en déployer plusieurs. De plus, sa  
30 connectique (port parallèle) quasiment obsolète, est de plus en plus difficile à trouver sur les ordinateurs récents<sup>4</sup>.

---

4. Un convertisseur vers une connectique FireWire vendu par SensAble existe mais nécessite une dépense supplémentaire significative.



## 2.4.2 Outils existants

VMD dispose de différents outils permettant d'effectuer diverses manipulations sur les molécules (sélection, orientation, déplacement, *etc.*).

Une des fonctions élémentaires proposée par VMD est la possibilité d'orienter la scène sur trois DDLs afin d'observer la molécule sous différents angles. C'est la souris qui tient ce rôle et elle peut également être configurée pour translater la molécule ou obtenir diverses informations sur la molécule et sur les atomes. Il est également possible d'utiliser une souris 3D permettant de regrouper les fonctions de translation et d'orientation de la scène. La souris 3D SpaceNavigator® est utilisée dans le cadre de notre seconde expérimentation (voir chapitre 4 page 77).

Ces fonctionnalités de navigation sont complétées par des fonctionnalités de manipulations élémentaires. Il est possible de déplacer des atomes ou des groupes d'atomes à l'aide des périphériques précédemment cités. Cependant, la fonctionnalité qui nous intéresse est la possibilité d'effectuer ces manipulations à l'aide d'interfaces haptiques par l'intermédiaire d'une connexion VRPN (voir section 2.2.2 page 39).

La connexion à de telles interfaces permet à VMD de proposer deux outils : un outil de navigation et un outil de manipulation. Ils sont les suivants :

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

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

Ces outils ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 49). 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 2.4.3.

## 2.4.3 Outils de manipulation avancés

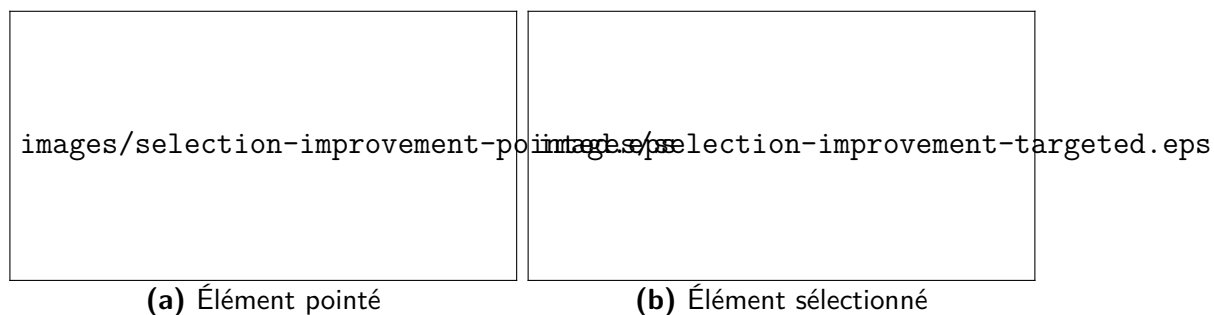
Durant les différentes études menées dans la suite de ce document, les analyses et les remarques d'utilisateurs ont permis de mettre en évidence les limites et les contraintes des outils existants. De nouveaux outils ont été développés pour répondre à ces besoins, notamment en terme de collaboration. Le développement de ces nouveaux outils a nécessité la modification de VMD par extension des outils déjà existants. Les fonctionnalités ajoutées sont présentées dans les sections suivantes.

## Outil de sélection collaboratif

Afin d'effectuer correctement une sélection, il est préférable de connaître *a priori* quel cible sera sélectionnée en fonction de la position actuelle du curseur. C'est pourquoi, cet outil de sélection amélioré met continuellement en  
5 surbrillance la cible la plus proche du curseur. Afin de distinguer une cible sélectionnée d'une cible par encore sélectionnée, les cibles non-sélectionnées sont simplement surligné de manière transparente alors que les cibles sélectionnées sont de couleurs opaques (voir figure 2.5).

Cependant, dans un contexte de travail collaboratif, il doit être possible  
10 pour chacun des collaborateurs de distinguer sa sélection de la sélection des autres. Les curseurs de chacun des participants étant de couleur différente, le surlignage est effectué en utilisant cette couleur.

Il est également possible de sélectionner des groupes d'atomes (dispositif mis en place sur certaines des expérimentations). Cependant, plutôt que de  
15 considérer un centre virtuel de ce groupe d'atomes (barycentre par exemple) qui ne serait pas affiché, les interactions haptiques sont effectuées par rapport à un atome. Pour que les utilisateurs aient une indication précise concernant les interactions haptiques, cet atome est agrandi par rapport aux reste du groupe d'atome (voir figure 2.5).



**Figure 2.5** – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

## 20 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 :

- la déformation d'une molécule atome par atome est un processus très fastidieux ; il serait plus efficace de déplacer un groupe d'atomes d'un bloc.
- 25

- la molécule se trouve la plupart du temps dans un état relativement stable et le déplacement d'un atome perturbe cet état de stabilité par un étirement des structures ; le déplacement d'un groupe d'atomes en un bloc permettrait d'éviter cet étirement et de conserver une meilleure stabilité.
- 5 C'est pourquoi nous proposons un outil appliquant une force à un groupe d'atomes pour le déplacer tout en conservant la stabilité intrinsèque de ce groupe. Les groupes d'atomes dignes d'intérêt sont les résidus (quelques dizaines d'atomes), les hélices- $\alpha$  ou feuillets- $\beta$  (quelques dizaines de résidus) et les molécules (enchaînement de hélices- $\alpha$  et de feuillets- $\beta$ ). L'outil de dé-
- 10 formation a été généralisé aux résidus et aux molécules. Cependant, la généralisation aux hélices- $\alpha$  et aux feuillets- $\beta$  a été laissée de côté pour deux raisons :
  - la forme allongée de ces structures nécessite de repenser partiellement voire complètement l'outil de déformation car la translation seule ne peut plus
  - 15 être utilisée ;
  - les informations concernant ces structures ne sont pas toujours bien renseignées dans les bases de données de molécules.

Cependant, appliquer le même effort à l'ensemble des atomes d'un résidu ou d'une molécule produit un effort total très important. Si l'effort total est

20 trop élevé, les perturbations envoyées à la simulation sont trop importantes et peuvent produire des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation<sup>5</sup>. Afin de conserver un effort total de déformation constant quelque soit le nombre d'atomes sélectionnés, la force appliquée à chaque atome est divisée par le nombre totale d'atomes sélectionnés.

## 25 Outil de désignation

L'outil de désignation a été créé pour répondre au besoin d'indiquer des régions d'intérêt aux partenaires. Il se découpe en quatre étapes élémentaires :

**Recherche d'une cible** Cette étape consiste pour un utilisateur  $\mathcal{A}$  à identifier une cible à désigner digne d'intérêt ; cette cible est choisie en

30 fonction des objectifs de la tâche à réaliser (voir figure 2.6a page suivante).

**Désignation d'une cible** Une fois la cible trouvée, l'utilisateur  $\mathcal{A}$  la désigne à son partenaire  $\mathcal{B}$  ; la cible est alors mise en surbrillance de façon à être vue des autres utilisateurs (voir figure 2.6b page suivante).

---

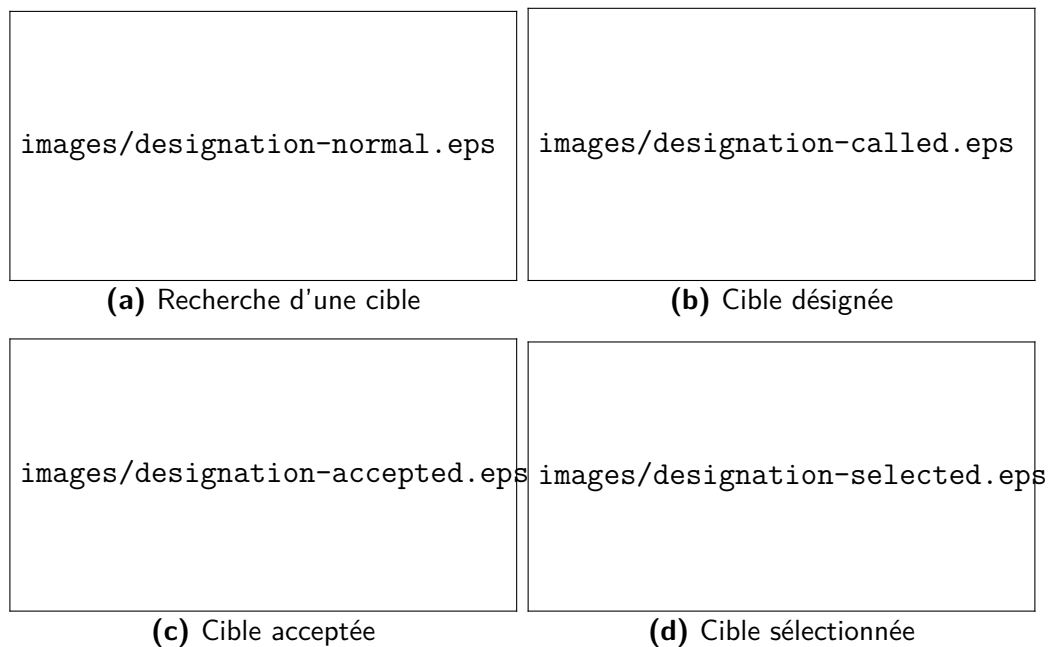
5. NAMD s'arrête automatiquement lorsqu'il estime que les perturbations produisent trop d'incohérences.

**Acceptation d'une cible** L'utilisateur  $\mathcal{B}$  peut alors accepter ou non cette désignation ; s'il accepte la désignation, la cible est alors colorée de la couleur du curseur de l'utilisateur  $\mathcal{B}$  qui a accepté (voir figure 2.6c) ; tant qu'elle n'est pas acceptée, la résidu reste en surbrillance jusqu'à

5 ce que la requête soit acceptée ou modifiée par l'utilisateur  $\mathcal{A}$ .

**Sélection d'une cible** 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 ;

10 lorsque la cible est sélectionnée, le processus de manipulation reprend normalement (voir figure 2.6d).



**Figure 2.6** – Les quatre étapes de la désignation

# Recherche collaborative de résidu sur une molécule

## Sommaire

5	<b>3.1 Introduction . . . . .</b>	<b>50</b>
	<b>3.2 Recherche et sélection collaborative . . . . .</b>	<b>50</b>
	3.2.1 Travaux existants . . . . .	50
	3.2.2 Objectifs . . . . .	52
10	<b>3.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .</b>	<b>53</b>
	3.3.1 Description de la tâche . . . . .	53
	3.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	57
	<b>3.4 Résultats . . . . .</b>	<b>60</b>
	3.4.1 Amélioration des performances en binôme . . . . .	61
15	3.4.2 Stratégies de travail . . . . .	65
	3.4.3 Résultats qualitatifs . . . . .	72
	<b>3.5 Synthèse . . . . .</b>	<b>74</b>
	3.5.1 Résumé des résultats . . . . .	74
20	3.5.2 Conclusion . . . . .	74

## 3.1 Introduction

L'état de l'art du premier chapitre nous a permis d'identifier les principales tâches élémentaires concernant l'interaction en environnement virtuel, décrites par BOWMAN [1999] : les Primitives Comportementales Virtuelles (PCVs) [FUCHS *et al.* 2006]. Chaque primitive nécessite que la précédente ait été réalisée avec succès ; on ne peut pas manipuler tant qu'une sélection n'a pas été effectuée ; on ne peut pas sélectionner sans avoir naviguer, explorer et identifier les cibles à sélectionner. Le processus d'exploration et de sélection sont les étapes primordiales à toute manipulation ultérieure. Cependant, la sélection au sein d'une simulation moléculaire est une problématique complexe à part entière [DELALANDE *et al.* 2010]. En effet, les molécules possèdent un nombre importants d'atomes sous la forme d'une longue chaîne carbonée repliée sur elle-même ce qui rend la recherche d'une cible complexe. L'appréhension d'un tel environnement virtuel peut être effectuée par des améliorations visuelles [CHAVENT *et al.* 2011] ou des interfaces d'interactions adaptées [DELALANDE *et al.* 2010] par exemple. Cependant, nous choisissons d'explorer une troisième solution : la distribution des charges cognitives de travail par l'intermédiaire d'une collaboration synchrone colocalisée.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux deux premières étapes du processus de déformation : la *recherche* et la *sélection* (voir figure 1.18 page 32). Nous étudions tout particulièrement l'influence du travail collaboratif sur ces étapes. Le prétexte de cette étude est la recherche de résidus. L'étude proposée montre l'intérêt du travail collaboratif sur des tâches de nature complexe. Cependant, nous verrons que les binômes adoptent des stratégies différentes, menant à des performances hétérogènes. Nous identifions ainsi les avantages de la collaboration mais également les contraintes d'une telle configuration de travail.

## 3.2 Recherche et sélection collaborative

### 3.2.1 Travaux existants

La sélection en environnement virtuel est une tâche élémentaire relativement peu explorée pour la biologie moléculaire en environnement virtuel. Pourtant, elle est déjà relativement développée pour les microscopes à force atomique (AFM pour *Atomic Force Microscope*) mais les contraintes techniques de cette technologie sont très différentes de nos contraintes en environnement virtuel ; nous ne nous étendrons pas sur ce sujet.

La taille et la complexité des molécules nécessite des solutions de sélection adaptées. Les logiciels les plus utilisés tel que PyMOL ou VMD proposent des moteurs de sélection à base de chaîne de caractères. Par exemple, pour sélectionner tous les atomes de type C, O, N ou CA, on utilisera les commandes

suivantes dans PyMOL

ou dans VMD

Cette méthode de sélection est seulement efficace dans le cas où la cible à sélectionner est connue à l'avance. Dans le cadre de l'exploration virtuelle d'une molécule en 3D, VMD propose également une sélection par *picking*<sup>1</sup> à l'aide de la souris. Cependant, ce type de méthode atteint ses limites en terme de précision dès que la molécule est de taille trop importante : la perception de la profondeur n'est pas permise avec cette méthode de sélection.

Depuis déjà plusieurs années, la communauté de la réalité virtuelle s'est intéressé à cette problématique en proposant des périphériques d'interaction pour les environnements virtuels en 3D. PAVLOVIĆ *et al.* [1996] ont développé une plate-forme permettant d'interagir avec les molécules en utilisant la voix et les gestes. Cependant, les techniques de segmentations pour la reconnaissance des gestes sont encore difficiles à mettre en place, même si l'arrivée récente de la Kinect de Microsoft® a amélioré cette démocratisation. On trouve également les travaux de POLYS *et al.* [2004] qui proposent une interaction avec une *wand*<sup>2</sup> ou encore les travaux de OBEYSEKARE *et al.* [1996] permettant l'interaction gestuelle avec un gant sur un *workbench*<sup>3</sup>. Tous ces dispositifs sont relativement lourds à déployer et ne sont pas adaptés pour une utilisation sur un ordinateur de bureau.

Tous les dispositifs présentés dans le paragraphe précédent sont testés sur des molécules ne contenant que quelques atomes et ayant peu d'intérêt pour les biologistes. Cependant, la sélection sur des tâches pertinentes pour les biologistes est un sujet encore peu exploré. LEVINE *et al.* [1997] proposent une plate-forme d'interaction avec un environnement moléculaire virtuel afin d'explorer un complexe ligand-protéine pour réaliser un amarrage de molécules. Cependant, l'amarrage de molécule s'effectue ici sur des corps rigides ce qui simplifie grandement la complexité de l'exploration. On trouve également

1. Méthode qui consiste à trouver l'élément pointé par la souris (2D) dans l'environnement virtuel (3D).

2. Dispositif d'interaction en réalité virtuelle permettant la manipulation sur 6 DDLs et disposant de boutons comme une souris.

3. Dispositif d'affichage permettant l'affichage en 3D stéréoscopique sur deux écrans.

les travaux de FERREY *et al.* [2008] mais là encore, il s'agit de corps rigides. Cependant, les travaux ont évolué vers des corps flexibles avec DELALANDE *et al.* [2010] qui utilisent les périphériques haptiques pour aider à la localisation de ponts ioniques au sein d'une simulation moléculaire en temps-réel.

5 L'interface haptique utilisée permet de ressentir les forces en action dans la simulation et ainsi améliorer le processus d'exploration et de sélection.

### 3.2.2 Objectifs

Dans ce chapitre, nous abordons les tâches de recherche et de sélection dans un EVC. La recherche au sein d'une simulation moléculaire est une tâche très

10 complexe en raison du grand nombre d'atomes et de la mobilité des atomes. Nous proposons d'étudier l'apport de la distribution des charges de travail par une configuration de travail collaboratif pour la réalisation de cette tâche.

Les objectifs de cette première partie sont multiples. Tout d'abord, nous souhaitons observer les performances comparées d'un travail autonome face à

15 une configuration de travail collaborative. Notre hypothèse va dans le sens d'une amélioration des performances pour les configurations de travail collaboratives sur des tâches de nature complexe.

De plus, nous souhaitons observer les stratégies de travail en collaboration. Nous supposons que les stratégies vont varier d'un groupe à l'autre en fonction des affinités et des connaissances intrinsèques du groupe. Nous verrons

20 qu'une configuration collaborative permet de mettre en avant des stratégies de travail distinctes en fonction de la communication entre les utilisateurs, des espaces de travail des manipulateurs, de la répartition des tâches, *etc.*

Ensuite, nous nous intéressons plus précisément aux avis des utilisateurs.

25 Nous supposons que la configuration collaborative est plus appréciée des utilisateurs grâce à l'émulsion sociale qui naît des interactions et de la communication entre les manipulateurs.

Enfin, nous souhaitons valider la plate-forme de manipulation proposée. Pour cela, l'évaluation sera confiée aux sujets. En effet, il est nécessaire de prendre

30 en compte l'expérience de l'utilisateur afin d'améliorer l'ergonomie des outils proposés. L'objectif est de vérifier l'utilisabilité de la plate-forme afin d'identifier les points faibles et les contraintes.



## 3.3 Présentation de l'expérimentation

Afin de répondre à nos hypothèses de travail, résumées dans la section B.1.1 page 194, nous mettons en place une expérimentation pour la recherche de résidu au sein d'une molécule à travers une simulation en temps-réel. Cette section est destinée à décrire la tâche proposée puis les spécificités du protocole expérimental.

### 3.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée consiste à trouver des résidus au sein d'une molécule puis à les extraire hors de la molécule. Les résidus sont des groupes d'atomes s'associant les uns aux autres le long d'une chaîne carbonée pour former une molécule. Trois molécules sont proposées dans le cadre de cette expérimentation. La molécule TRP-ZIPPER sera utilisée pour la procédure d'apprentissage de la plate-forme. Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisées pour la tâche de recherche et d'extraction de résidus : chaque molécule possède 5 résidus à extraire. Tous les résidus à rechercher sont affichés dans la table 3.1 page suivante. Pour une description plus précises des molécules, se reporter à la section A.2 page 189.

La figure 3.1 page 56 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 55, 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.

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

**Table 3.1** – Liste des résidus recherchés

**(a)** Residus sur la molécule TRP-CAGE                      **(b)** Residus sur la molécule Prion

Résidu	Image	Résidu	Image
$\mathcal{R}_1$	<div>images/exp1-pattern1.eps</div>	$\mathcal{R}_6$	<div>images/exp1-pattern6.eps</div>
$\mathcal{R}_2$	<div>images/exp1-pattern2.eps</div>	$\mathcal{R}_7$	<div>images/exp1-pattern7.eps</div>
$\mathcal{R}_3$	<div>images/exp1-pattern3.eps</div>	$\mathcal{R}_8$	<div>images/exp1-pattern8.eps</div>
$\mathcal{R}_4$	<div>images/exp1-pattern4.eps</div>	$\mathcal{R}_9$	<div>images/exp1-pattern9.eps</div>
$\mathcal{R}_5$	<div>images/exp1-pattern5.eps</div>	$\mathcal{R}_{10}$	<div>images/exp1-pattern10.eps</div>

**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 élevée.

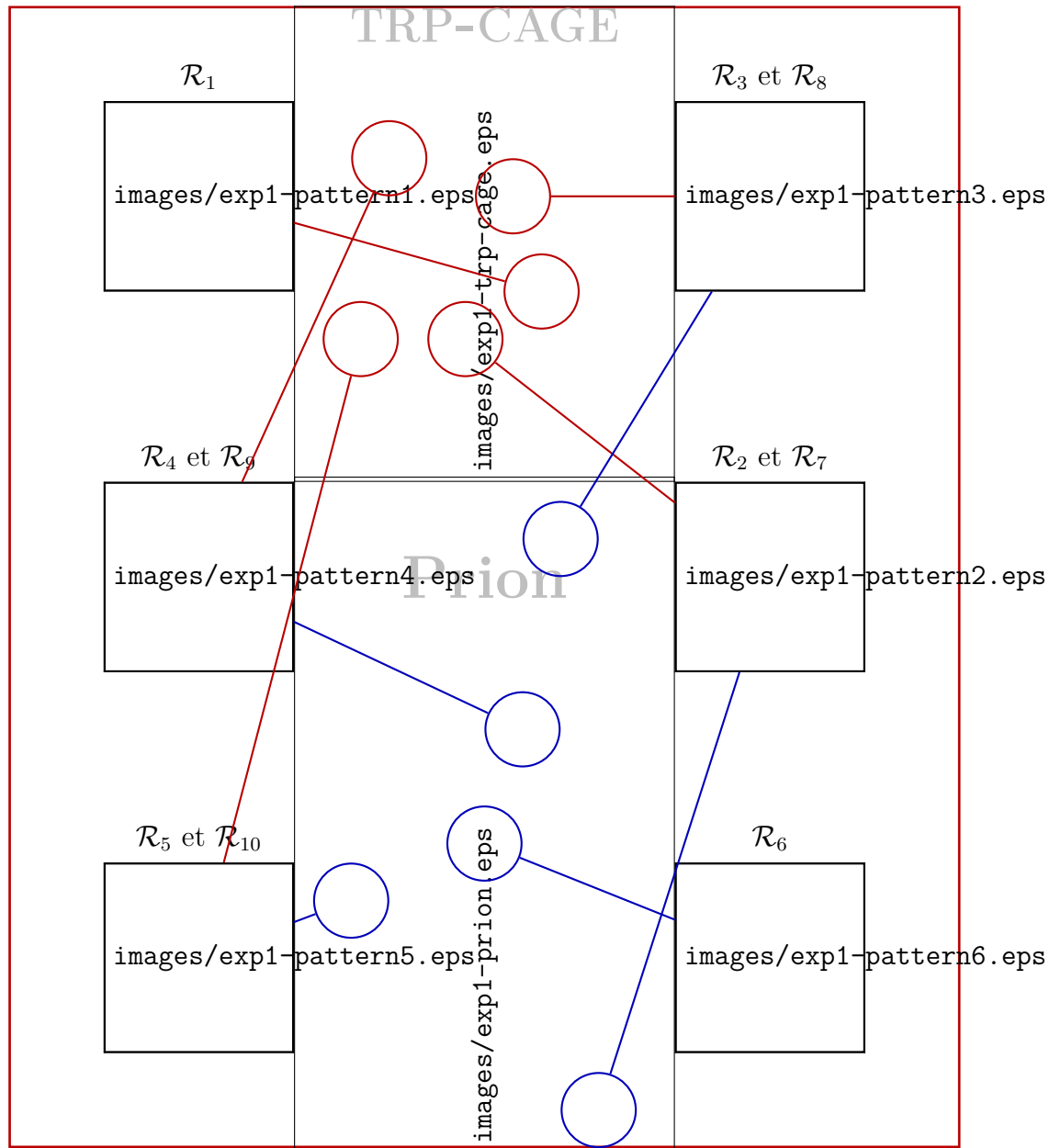
**Similarité** Certains résidus à chercher sont très similaires à d’autres résidus également présents sur la molécule. Les résidus similaires possèdent un atome de moins ou de plus par rapport au résidu recherché. À cause de cette similarité, les sujets vont mobiliser une partie du temps à identifier 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 la cible. Pour explorer la molécule afin d’identifier cette cible, les sujets disposent de l’outil *grab*. Lorsque la cible recherchée est identifiée, les sujets entrent dans la seconde étape : la sélection. Pour effectuer cette étape de sélection, les sujets disposent de l’outil *tug*. Les outils *grab* et *tug* sont décrits dans la section 2.4.2 page 45.

**Figure 3.1** – Répartition des résidus sur les molécules



### 3.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation est basée sur le dispositif expérimental décrit dans le chapitre A page 187. Cependant, certains choix expérimentaux concernant cette expérimentation sont détaillés dans les sections suivantes. Les détails à propos de la méthode expérimentale, présents dans la section B.1 page 194, sont résumés dans la table 3.3 page 60.

#### Matériel

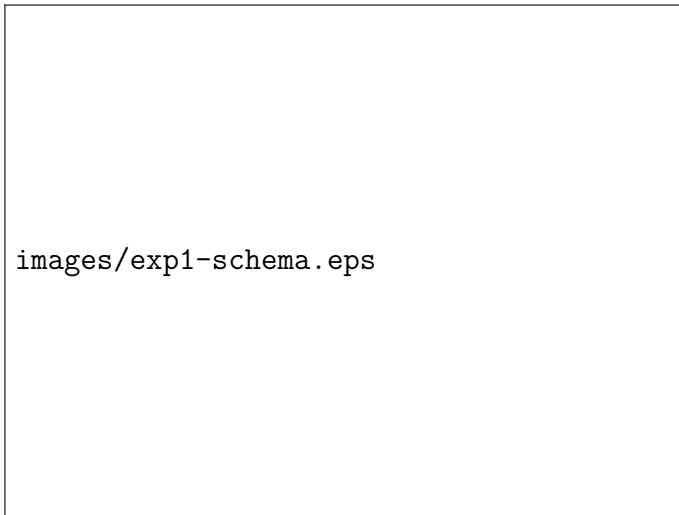
Cette première expérimentation propose aux sujets d'effectuer une recherche de résidus au sein d'une molécule de taille importante. Les sujets disposent déjà de deux outils de déformation *tug*. Cependant, un outil d'orientation de la molécule est mis à disposition pour des raisons détaillées dans la section 3.3.2 page 59. Ce nouvel outil nécessite l'ajout de quelques matériels.

L'outil d'orientation de la molécule est assuré par un PHANTOM Omni® associé à l'outil *grab* (voir section 2.4.2 page 45). L'ajout d'un outil nécessite également l'ajout d'un ordinateur pour faire office de serveur VRPN. Dans ce cas, une machine de faible puissance est suffisante en tant que serveur. L'interface est placée devant le sujet en charge de cet outil.

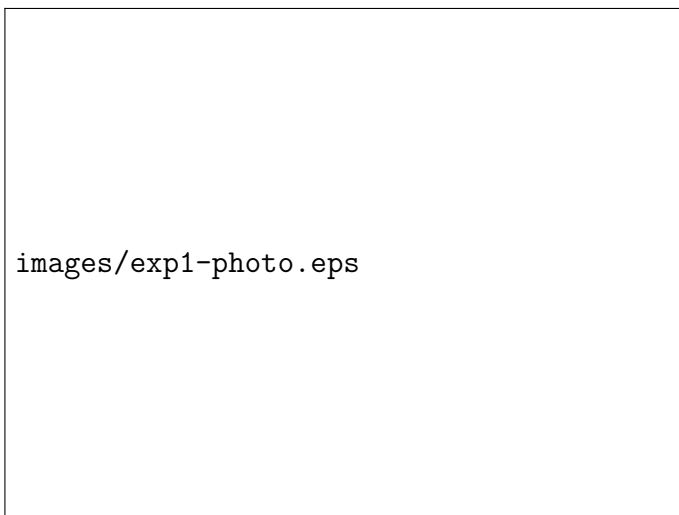
Durant l'expérimentation, il est demandé aux sujets de chercher des résidus sur la molécule. Le résidu à rechercher est affiché aux sujets pendant toute la durée de la tâche. Afin de ne pas perturber la scène virtuelle, le résidu n'est pas affiché sur l'écran de vidéoprojection. Un écran LCD 17 pouces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

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

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



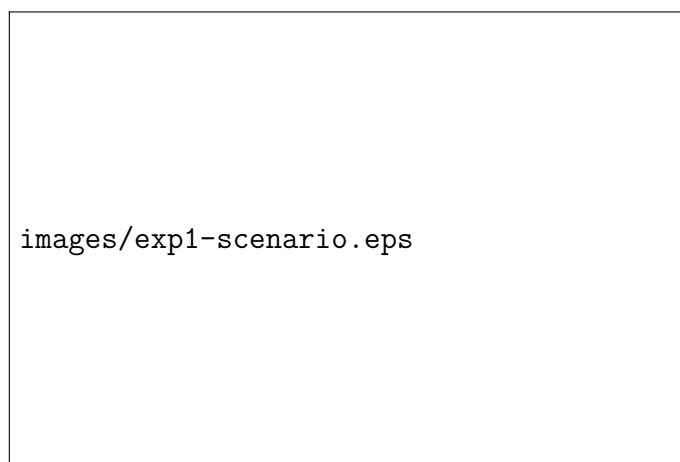
**Figure 3.2** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 3.3** – Photographie du dispositif expérimental

## Visualisation

Dans cette première expérimentation, c'est la molécule Prion qui a été utilisée. Cette molécule est suffisamment volumineuse pour ne pas nécessiter d'atome fixes au niveau de la simulation. La molécule est donc laissée libre  
5 de tout mouvement. La figure 3.4 est une représentation de cette molécule durant la tâche.



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

## Outils de manipulation

Durant cette tâche de recherche, nous donnons aux utilisateurs la possibilité de déformer la molécule à l'aide de l'outil *tug*. Cependant, afin de fournir un  
10 moyen d'explorer la molécule sous tous ses angles, il est nécessaire d'avoir également à sa disposition un moyen d'orienter la scène. Le cas échéant, tout résidu qui se trouverait derrière la molécule ne pourrait être trouvé qu'après une longue et fastidieuse déformation. C'est pourquoi, nous mettons un outil d'orientation de la molécule à disposition des sujets.

15 Cet outil, concrétisé par une interface haptique associé à l'outil *grab*, permet de sélectionner la molécule puis de la déplacer et de l'orienter. Aucune modification par rapport à l'outil déjà proposé par VMD n'a été ajoutée. Cependant, l'outil n'est pas partagé entre les utilisateurs. En effet, dès le début de l'expérimentation, il est demandé aux sujets de choisir celui qui sera en  
20 charge de cet outil de manipulation et ceci, tout au long de l'expérimentation. Ce choix a été fait pour limiter les conflits entre les deux utilisateurs pendant la phase de recherche et de sélection. Il est à noter que pour les monômes, le

sujet n'a accès qu'à un seul outil de déformation et un outil de manipulation.

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

<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	
	$\mathcal{H}_4$	La plate-forme est appréciée des utilisateurs	
<b>Variables indépendantes</b>	$\mathcal{V}_{i1}$	Nombre de sujets	
	$\mathcal{V}_{i2}$	Résidu à chercher	
<b>Variables 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	
	$\mathcal{V}_{d5}$	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

### 3.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de  
5 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 à l'aide d'un test de FRIED-  
10 MAN [1940] adapté pour les variables intra-sujets non-paramétriques.

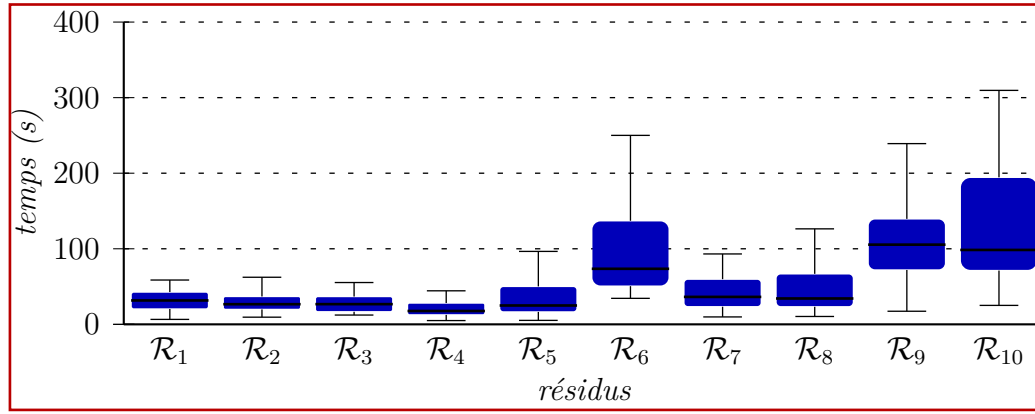


Il est à noter que les données comparées entre les monômes et les binômes ne sont pas du même ordre de grandeur (24 monômes face à 12 binômes). Afin de pouvoir effectuer une comparaison du même ordre de grandeur, les données des sujets ayant fait partie d'un même binôme ont été moyennées.

5 Ainsi, pour chaque variable correspond une donnée en monôme et une donnée en binôme.

### 3.4.1 Amélioration des performances en binôme

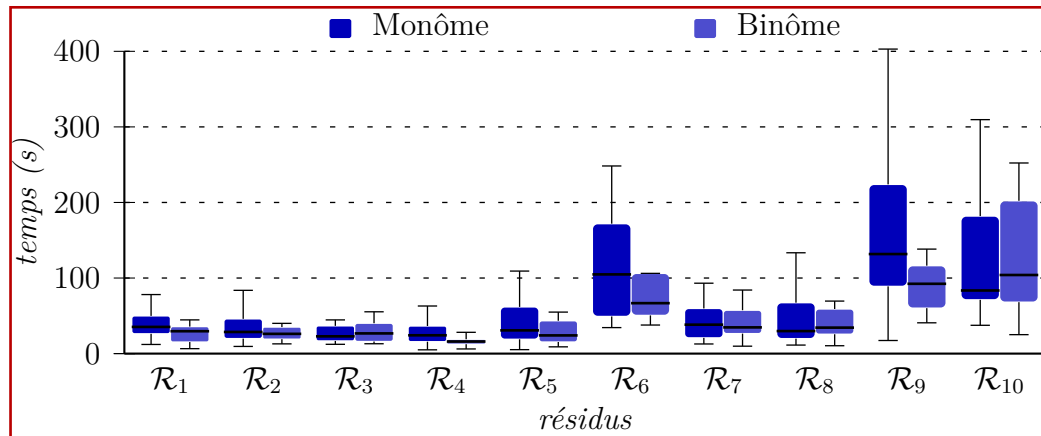
#### Données et statistiques



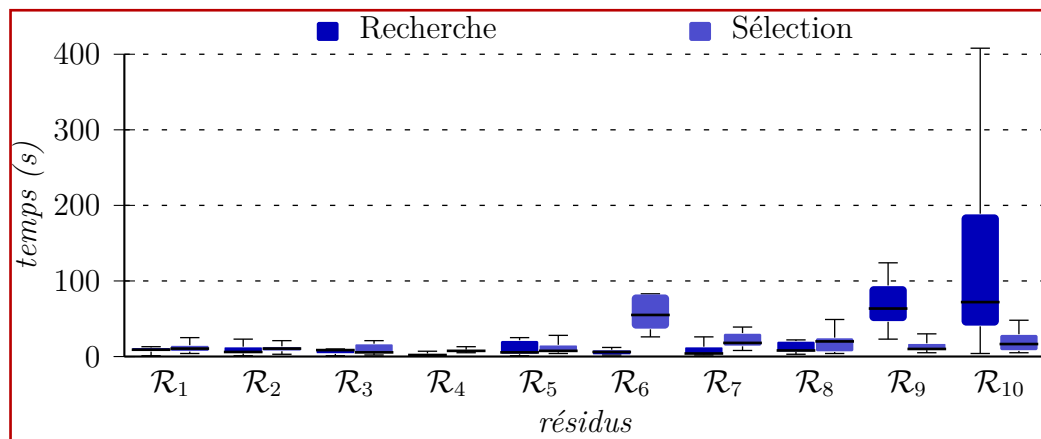
**Figure 3.5** – Temps de réalisation par résidu

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

La figure 3.6 page suivante présente les temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque résidu  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse ne montre pas d'effet significatif du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.082$ ). Cependant, en se limitant au groupe des trois résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  identifiés précédemment comme significativement plus longs à trouver et extraire, l'analyse montre un effet significatif du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 7.7$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.006$ ).



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



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

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

## Analyse et discussion

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). Durant la phase d'exploration, 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 rendent facile à déformer et permet un accès rapide aux structures internes. Cela facilite la recherche des résidus qui sont dans une position interne à la molécule et qui nécessitent une déformation plus importante afin de pouvoir l'extraire. 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, aussi bien pour les monômes que pour les binômes.

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 B.1 page 196). 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 55). 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 similaire alloué à l'étape de recherche et de sélection. Les résidus concernés ne présentent pas de forte complexité (tous les résidus de la molécule TRP-CAGE et les résidus  $\mathcal{R}_7$  et  $\mathcal{R}_8$  de la molécule Prion) et sur 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*).

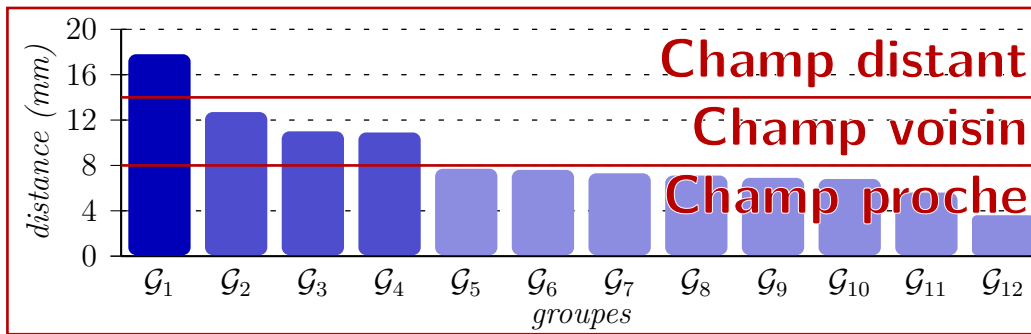
**Temps de sélection prédominant** Les sujets ont un temps important alloué à la sélection et à l'extraction du résidu recherché. Le résidu est

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 bénéficie d'une action coordonnée entre les sujets : l'effort déployé est alors plus important et le contrôle sur la déformation meilleur ce qui permet une réalisation de la tâche plus rapide.

### 3.4.2 Stratégies de travail

#### Données et analyses

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.

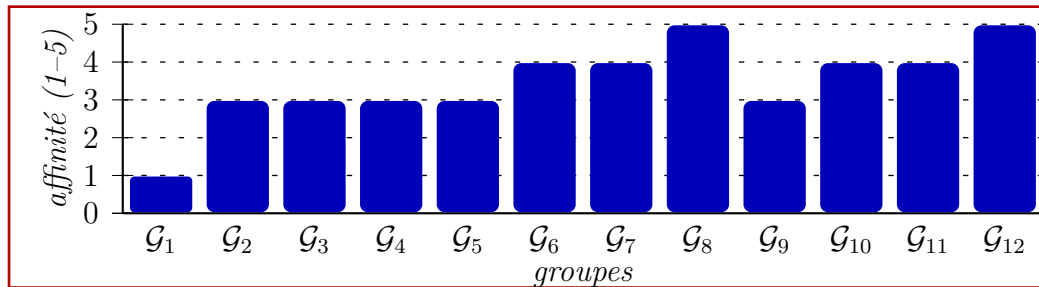


**Figure 3.8** – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$

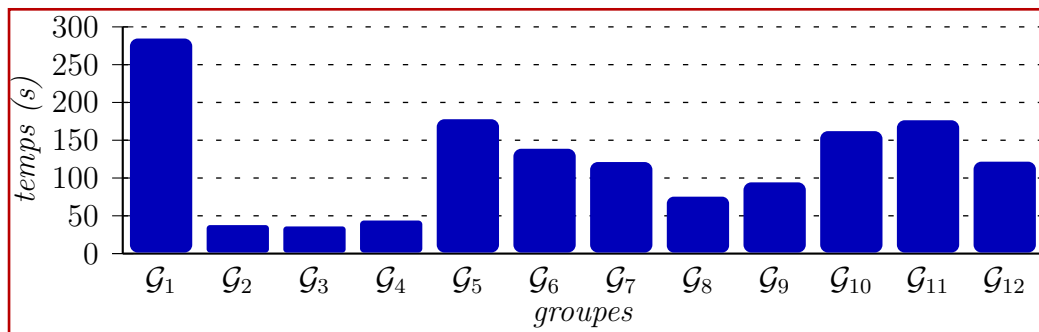
La figure 3.8 présente la distance moyenne entre les espaces de travail  $\mathcal{V}_{d2}$  de chaque binôme. Les binômes peuvent être classés en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.

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.

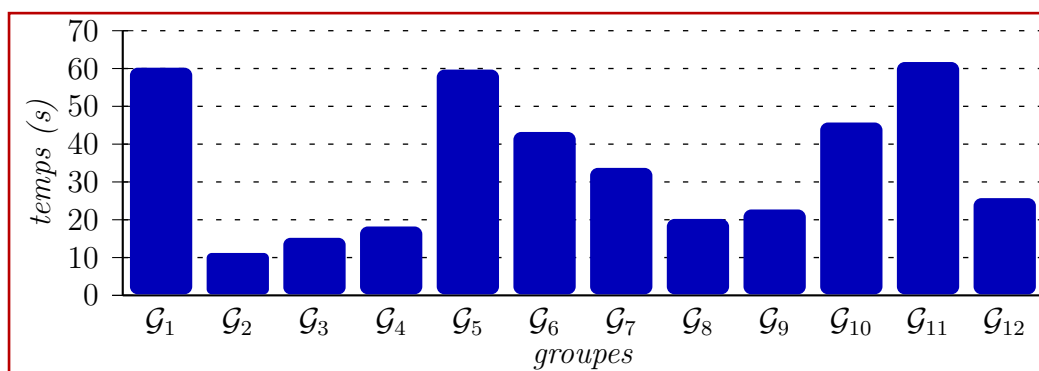
La figure 3.10 page suivante présente les temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque binôme. Le temps de réalisation de  $\mathcal{G}_1$  est particulièrement important (plus d'une fois et demi les autres groupes les plus longs). À l'opposé, on note que  $\mathcal{G}_2$ ,  $\mathcal{G}_3$  et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



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

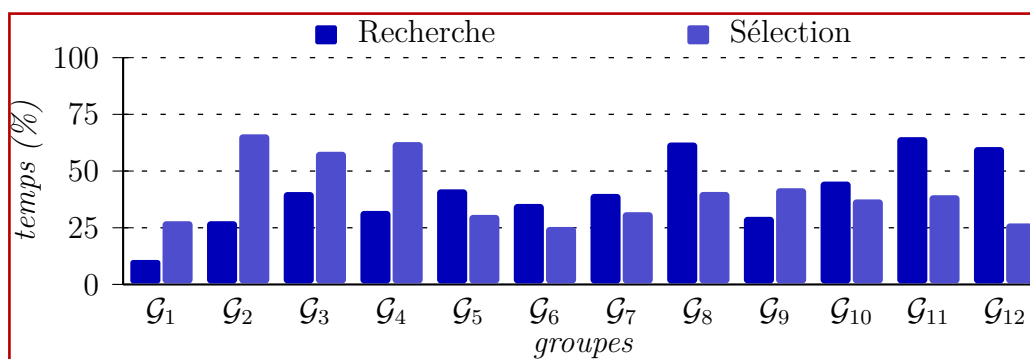


**Figure 3.10** – Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme



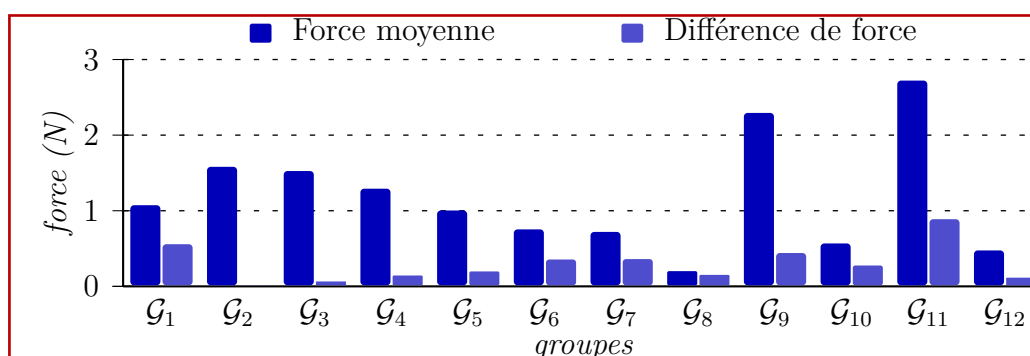
**Figure 3.11** – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

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



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

- 5 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
- 10 la phase de recherche ou de sélection. Les binômes  $\mathcal{G}_1$  à  $\mathcal{G}_4$  ainsi que  $\mathcal{G}_9$  communiquent plus durant la phase de sélection. Les binômes  $\mathcal{G}_5$  à  $\mathcal{G}_8$  et  $\mathcal{G}_{10}$  à  $\mathcal{G}_{12}$  communiquent plus durant la phase de recherche. Notons également que  $\mathcal{G}_1$  communique assez peu par rapport aux autres binômes.



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

La figure 3.13 représente la force moyenne appliquée par les sujets  $\mathcal{V}_{d5}$  et

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

L'ensemble des résultats et analyses précédentes permet de différencier les binômes ce qui confirme notre hypothèse  $\mathcal{H}_2$ . Les binômes se différencient pas des stratégies de travail variables. Les sections suivantes caractérisent les différentes stratégies de travail en fonction de plusieurs paramètres (distance  
10 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.

**Collaboration en champ proche** pour les distances inférieures à 8 mm ;

**Collaboration en champ voisin** pour les distances comprises entre 8 mm  
15 et 14 mm ;

**Collaboration en champ distant** pour les distances supérieures à 14 mm.

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

## Collaboration en champ proche

**Caractéristiques** La collaboration en champ proche, inférieures à 8 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des distances inférieures à 10 Å  
20 ce qui est environ l'envergure d'un résidu<sup>4</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  $\mathcal{G}_{12}$ ). Étant donné la distance inférieure à 10 Å, les binômes concernés manipulent en collaboration étroite sur les mêmes résidus. Ces binômes se caractérisent par une  
25 forte affinité ( $\mu = 4$ ) : ce sont des collègues ou des amis (voir figure 3.9 page 66). D'après la figure 3.10 page 66, ces binômes obtiennent des temps de réalisation de la tâche moyens.

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page précédente montre de fortes disparités entre les binômes concernant la force moyenne appliquée pendant la  
30 manipulation. Des observations pendant l'expérimentation ont permis 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. Le partage

---

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



des tâches est donc très différent selon les initiatives de chacun des sujets. Cependant, les binômes se distribuent mal la charge de travail comme le montre les différences importantes entre les forces appliquées par les deux sujets (voir figure 3.13 page 67). En effet, seul un des deux sujets réalise une

5 grande partie de la tâche à réaliser. Le second sujet joue plutôt le rôle du suiveur.

**Communication** Les temps de communication verbale sur la figure 3.12 page 67 montrent une disparité entre les sujets. Les binômes de ce groupe passent plus de temps à communiquer pendant la phase de recherche que

10 pendant la phase de sélection (excepté pour  $\mathcal{G}_9$ ) ce qui met en évidence les difficultés du travail en champ proche liées aux nombreux conflits de coordination pendant la phase de recherche. En effet, les binômes doivent coordonner leurs mouvements de manipulation pour déplacer un résidu et cette coordination nécessite une communication verbale importante. La collabo-

15 ration est alors étroitement couplée mais il en résulte une perte de temps à cause du temps alloué à la communication. D'ailleurs, l'analyse des communications verbales a permis de mettre en évidence 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

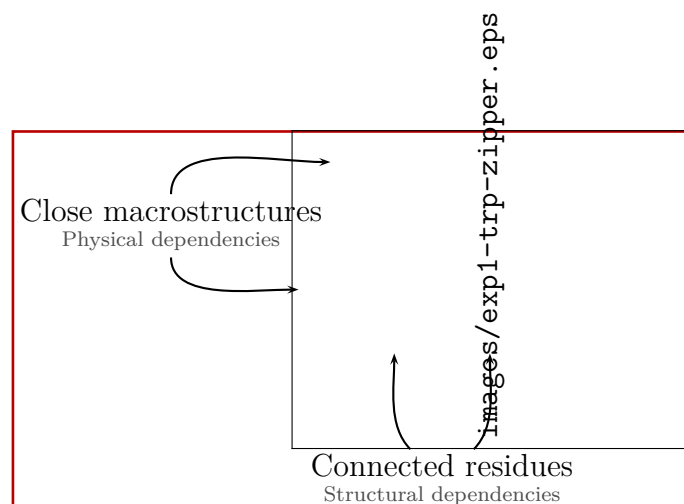
20 des tâches ainsi qu'une conscience incomplète de l'environnement et de l'état de son partenaire provoque des inter-référencements imprécis entraînant une mauvaise coordination. Ces conflits de coordination et ces incompréhensions diminuent les performances globales du binôme.

## Collaboration en champ voisin

25 **Caractéristiques** La collaboration en champ voisin, comprises entre 8 mm et 14 mm, correspond, 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. La figure 3.14 page suivante

30 montre la dépendance physique ou structurelle entre les résidus voisins. En effet, les résidus interagissent entre eux à travers diverses forces physiques : plus les distances sont courtes, plus les contraintes physiques sont fortes. La figure 3.9 page 66 montre que les binômes concernés ont des affinités moyennes ( $\mu = 3$ ) : ce sont des collègues de bureau ou d'équipe ne travaillant

35 pas forcément sur les mêmes projets. Ces binômes obtiennent de très bonnes performances sur les temps de réalisation de la tâche figure 3.10 page 66.



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

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page 67 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 5 moins élevée). La différence des forces moyennes quasi-nulle entre les deux sujets confirme ce résultat. Ceci s'explique par une bonne coordination entre les sujets 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 10 sujets sont attentifs aux actions de leur partenaire afin d'avoir un meilleur contrôle du processus de déformation par une coordination améliorée.

**Communication** La communication verbale est faible comme le montre la figure 3.11 page 66. La manipulation en champ voisin permet d'être continuellement conscient des actions du partenaire (grâce à la vision périphé- 15 rique) ce qui limite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des résidus différents restreignant ainsi les conflits de coordination par rapport à la collaboration en champ proche. De plus, la figure 3.12 page 67 montre un nombre de conflits de coordination plus faible pendant la phase de recherche. En effet, la communication verbale est nettement moins im- 20 portante pendant la phase de recherche que pendant la phase de sélection. L'analyse des communication verbales met en évidence des phases de communication de coordination (« Maintenant, prends ça », « peux-tu m'aider ici ? », « Bien ! », *etc.*). Les performances des binômes travaillant en champ voisin sont relativement élevées bien que quelques conflits de coordination 25 similaires à ceux rencontrés dans une collaboration en champ proche soient présents. Cependant, le nombre de conflits de coordination est plus limité.

## Collaboration en champ distant

**Caractéristiques** La collaboration en champ voisin, supérieures à 14 mm, correspond, 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 66) : les membres ne se connaissent presque pas. 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 66.

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page 67 montre un effort moyen appliqué par les binômes peu élevé (comparé aux stratégies de collaboration 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.

**Communication** La figure 3.11 page 66 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 67). 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 de coordination ce qui implique le peu de communication verbale comme on peut le voir sur la figure 3.12 page 67. 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 de coordination. Cependant, les phases de recherche permettent aux sujets de manipuler de manière distante. Ainsi, ils se définissent leur propre espace de travail mais également leur propre stratégie en fonction des événements locaux à leur espace de travail. Pourtant, la phase de sélection nécessite une collaboration étroite et si les stratégies sont différentes, il en résulte de mauvaises performances dû au temps important pour se coordonner à nouveau.

## 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 de coordination.

Cependant, ce sont les interactions en champ voisins qui produisent les meilleures performances. En effet, les conflits de coordination sont plus limités que pour des interactions en champ proche mais la collaboration est tout de même couplée. Les résultats montrent à la fois de bonnes performances en terme de temps de réalisation mais aussi en terme de répartition des charges de travail tout en limitant les communication verbales. La plupart du temps, les communications verbales sont destinées à la résolution de conflits de coordination : elles sont très chronophages et peuvent être évitées. C'est pour cette raison que nous proposerons des outils haptiques pour améliorer cette gestion des conflits de coordination (voir chapitre 6 page 131).

### 3.4.3 Résultats qualitatifs

Les résultats qualitatifs sont constitués de deux parties. La première permet de déterminer les impressions des sujets concernant la collaboration, les rôles et efficacité de chacun pendant la tâche. La seconde partie a pour but d'évaluer la plate-forme<sup>5</sup>.

#### 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 ( $\mu = 3.6$ ,  $\sigma = 0.5$ ). 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.

Durant les tâches collaboratives, les sujets considèrent qu'ils ont effectivement contribué à la réalisation de la tâche ( $\mu = 3.1$ ,  $\sigma = 0.9$ ). Cependant, les sujets considèrent qu'ils ne se sont imposés ni en meneur ou ni en suiveur ( $\mu = 2$ ,  $\sigma = 0.5$ ). En effet, des questions supplémentaires ont permis de mettre en

---

5. L'échelle de notation comprise entre 1 à 5 mais les moyennes ont été normalisées entre 0 et 4.

évidence que chaque sujet a tendance à surestimer le rôle du partenaire ( $\approx 70\%$ ).

Concernant la communication, les participants estiment qu'ils exploitent principalement la communication verbale ( $\mu = 3.5$ ,  $\sigma = 0.6$ ) et, dans une proportion plus faible mais tout de même importante, virtuelle ( $\mu = 2.5$ ,  $\sigma = 0.8$ ). En ce qui concerne la communication gestuelle, ils la considèrent quasiment inexistante ( $\mu = 0.5$ ,  $\sigma = 1$ ).

La communication gestuelle n'est pas ou peu utilisée. La principale raison est la difficulté de communiquer avec des gestes lorsque les mains sont occupées par la manipulation. Les sujets ont rapidement adopté la désignation virtuelle qui est plus précise et plus adaptée dans les phases de désignation qui constituent la plupart des besoins de communication. La communication verbale reste le principal moyen de communication : c'est la manière la plus naturelle de communiquer. Cependant, il vient aussi en soutien de la désignation virtuelle. En effet, aucun outil visuel ou haptique n'a été fourni pour effectuer des désignations et le curseur ne suffit pas toujours à remplir cette mission.

## Évaluation du système

L'évaluation du système en terme d'utilisabilité est relativement satisfaisante.

En effet, en ce qui concerne les graphismes et les effets visuels, les participants les ont trouvés accessibles ( $\mu = 2.8$ ,  $\sigma = 0.8$ ). De la même façon, l'utilisabilité des moyens d'interaction avec le système sont bien notés ( $\mu = 2.9$ ,  $\sigma = 0.8$ ). En terme de confort d'utilisation, les effets visuels ( $\mu = 2.7$ ,  $\sigma = 0.7$ ) et les interactions ( $\mu = 2.7$ ,  $\sigma = 0.8$ ) sont bien évalués également.

Là encore, les résultats permettent de valider 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 pendant cette expérimentation sont relativement simples et peu envahissants. Des outils plus complexes, plus informatifs seraient peut-être moins intuitifs au premier abord et pourrait mener à un inconfort.

## 3.5 Synthèse

### 3.5.1 Résumé des résultats

Dans ce chapitre, nous avons observé et comparé les performances de monômes et de binômes pendant une tâche de recherche et de sélection sur une simulation moléculaire en temps-réel. L'objectif était de montrer l'intérêt des approches collaboratives pour l'amélioration des performances et d'identifier les différentes stratégies de travail. De plus, il fallait valider la pertinence de la plate-forme mise en place.

Les approches collaboratives ont prouvé leur intérêt, notamment sur les tâches les plus complexes. Cependant, la complexité d'une tâche est relativement difficile à établir. Au-delà des facteurs de position, de couleur ou de forme, le nombre d'atomes de la molécule (et donc le nombre de résidus) semble jouer un rôle important dans cette complexité. Un grand nombre d'atomes surcharge l'environnement virtuel qui est 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 d'en déformer les résidus. L'ensemble de ces contraintes rend pertinent une approche collaborative pour la réalisation d'une tâche de nature complexe.

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 de coordination durant les interactions en champ proche est très important alors que le potentiel de la collaboration est perdu dans des interactions en champ distant. Ce sont les interactions en champ voisin qui offrent les meilleures performances, générant un bon compromis en termes de communication et de gestion des conflits de coordination.

Enfin, il paraît nécessaire d'avoir de bonnes relations sociales avec ces partenaires. Les résultats montrent de façon évidente que tout déséquilibre dans le groupe mène à des performances dégradées.

### 3.5.2 Conclusion

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 que le travail collaboratif apporte une amélioration des performances. Ceci se traduit soit par

des tâches à fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 77) ou par la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 109).

Les différentes stratégies observées ont permis de mettre en évidence l'intérêt de la collaboration en champ voisin. Il semble nécessaire de favoriser ce type  
5 de collaboration par des tâches stimulantes et des outils d'interaction adaptés.

L'évaluation qualitative par questionnaire apporte également de nombreuses réponses intéressantes. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant la communication virtuelle dans l'EVC au détriment de la communication gestuelle. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant un élément primordial de la communi-  
10 cation : la modalité virtuelle est importante (désignation par exemple). Des observations durant les phases expérimentales nous ont permis de constater que ce moyen de communication est principalement utilisé pour des actions de désignation. Fournir des outils adaptés aux contraintes de la désignation en environnement complexe devient une nécessité.

15 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.





# Déformation collaborative de molécule

## Sommaire

5	<b>4.1 Introduction</b>	<b>78</b>
	<b>4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel</b>	<b>78</b>
	4.2.1 Travaux existants	78
10	4.2.2 Objectifs	79
	<b>4.3 Présentation de l'expérimentation</b>	<b>80</b>
	4.3.1 Description de la tâche	80
	4.3.2 Spécificités du protocole expérimental	83
	<b>4.4 Résultats</b>	<b>88</b>
15	4.4.1 Amélioration des performances en binôme	90
	4.4.2 Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche	95
	4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	100
	4.4.4 Résultats qualitatifs	104
20	<b>4.5 Synthèse</b>	<b>106</b>
	4.5.1 Résumé des résultats	106
	4.5.2 Conclusion	106

## 4.1 Introduction

La précédente expérimentation nous a permis d'étudier les premières PCVs que sont la *recherche* et la *sélection*. Afin de compléter notre étude, nous souhaitons à présent nous intéresser à la *déformation*. En effet, on trouve  
5 déjà des environnements virtuels permettant de manipuler des molécules rigides pour effectuer un *docking* moléculaire comme les travaux de LEVINE *et al.* [1997] ou encore de FERREY *et al.* [2008]. Cependant, un *docking* moléculaire nécessite de pouvoir déformer les molécules. Ceci est rendu possible par l'avènement des simulations moléculaires interactives en temps-réel, notamment avec IMD développé par STADLER *et al.* [1997]. Plus récemment,  
10 DELALANDE *et al.* [2009] ont également amené une pierre à l'édifice avec MDDriver pour permettre une simulation moléculaire en temps-réel basée sur différents moteurs de simulation (NAMD ou Gromacs). Puis, DELALANDE *et al.* [2010] améliorent la manipulation et la déformation interactive par l'utilisation d'une interface haptique.  
15

Dans ce chapitre, nous souhaitons étudier la pertinence d'une configuration collaborative pour appréhender la déformation d'une molécule. De plus, nous aborderons la question de l'apprentissage au sein d'un groupe. En effet, certains éléments de la première expérimentation semble indiquer qu'une configuration collaborative stimule l'apprentissage concernant l'utilisation des outils, de la plate-forme ou encore de la tâche à réaliser.  
20

## 4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel

### 4.2.1 Travaux existants

25 L'utilisation de retours haptiques pour la déformation d'objets flexibles n'est pas une idée nouvelle. W. SHEN *et al.* [2006] proposent déjà une solution pour déformer des objets non-rigides à l'aide de retour haptique. Les objets concernés sont de faible complexité, comme des sphères par exemple. Puis, PETERLÍK [2009] effectue une thèse sur les déformations de tissus cellulaires.  
30 Là encore, les éléments déformables sont de faible complexité et n'ont quasiment pas d'application utile et concrète dans le monde réel.

Cependant, afin d'effectuer des déformations plus complexes, certains se sont intéressés aux processus de déformation collaboratifs dans les EVCs. SÜMENG *et al.* [2007] proposent une plate-forme permettant la déformation de

maillages destinés à des simulations d'objets déformables (tissus, organes, *etc.*) dans un EVC. Pour cela, il propose une architecture de type pair-à-pair basée sur le protocole UDP (*User Datagram Protocol* pour protocole de datagramme utilisateur). De son côté, TANG *et al.* [2010] proposent une plate-  
5 forme client/serveur de déformation collaborative de maillages. Ces deux plate-formes proposent chacun une plate-forme de déformation collaborative mais se focalisent principalement sur les contraintes techniques d'une telle plate-forme. J. MÜLLER *et al.* [2006] développent le logiciel Clayworks, complété plus tard par GORLATCH *et al.* [2009], permettant la sculpture virtuelle  
10 sur glaise. Dans cette étude, les problématiques d'accès exclusif à certains objets ou à certaines parties d'un objet sont brièvement évoquées afin de faciliter la coordination des différents acteurs.

Tous les travaux présentés ci-dessus proposent une déformation collaborative distante où chaque utilisateur effectue une déformation localement. Les  
15 contraintes liées à la collaboration entre les acteurs n'est pas présentée. En effet, tous les EVCs proposés sont consacrés aux problématiques techniques de la collaboration distante.

## 4.2.2 Objectifs

Ce chapitre sera l'occasion d'aborder les problématiques de la déformation  
20 lors d'une configuration collaborative. La déformation est une tâche nécessitant plus de précision que la recherche car les cibles doivent être déplacées à un endroit défini. Nous souhaitons ainsi comparer les performances sur une tâche complexe nécessitant de la coordination.

L'étude met en jeu un nombre de ressources fixe pour la déformation et  
25 compare une distribution des ressources (configuration collaborative) à une mutualisation des ressources (configuration individuelle). En effet, la première étude nous a montré les contraintes d'une configuration collaborative en terme de temps de communication. Paradoxalement, les utilisateurs qui manipulent seuls sont confrontés à une charge cognitive de travail impor-  
30 tante. En fournissant les mêmes ressources (deux outils de déformation), nous souhaitons comparer la capacité de coordination d'un binôme aux capacités cognitives de traitement d'un monôme face à une importante charge de travail. Nous supposons que les binômes en configuration monomanuelle sont plus performants que les monômes en configuration bimanuelle.

35 Dans un second temps, nous souhaitons définir un lien entre la complexité de la tâche et le nombre de sujets impliqués. En effet, les tâches complexes fournissent une charge cognitive de travail très importante ; plus cette charge

de travail est importante et plus les monômes devraient éprouver des difficultés à traiter l'ensemble des informations. Nous émettons l'hypothèse que les tâches les plus complexes seront plus difficiles à réaliser par les monômes que par les binômes.

- 5 Enfin, cette seconde étude est l'occasion d'observer l'effet du travail collaboratif sur l'apprentissage. Nous comparons les performances des monômes et des binômes concernant la réalisation d'une même tâche répétée plusieurs fois. Nous supposons que la facilitation et l'échange qui a lieu lors d'un travail collaboratif va permettre aux binômes d'appréhender plus rapidement la  
10 plate-forme, les outils ou encore la tâche.

## 4.3 Présentation de l'expérimentation

### 4.3.1 Description de la tâche

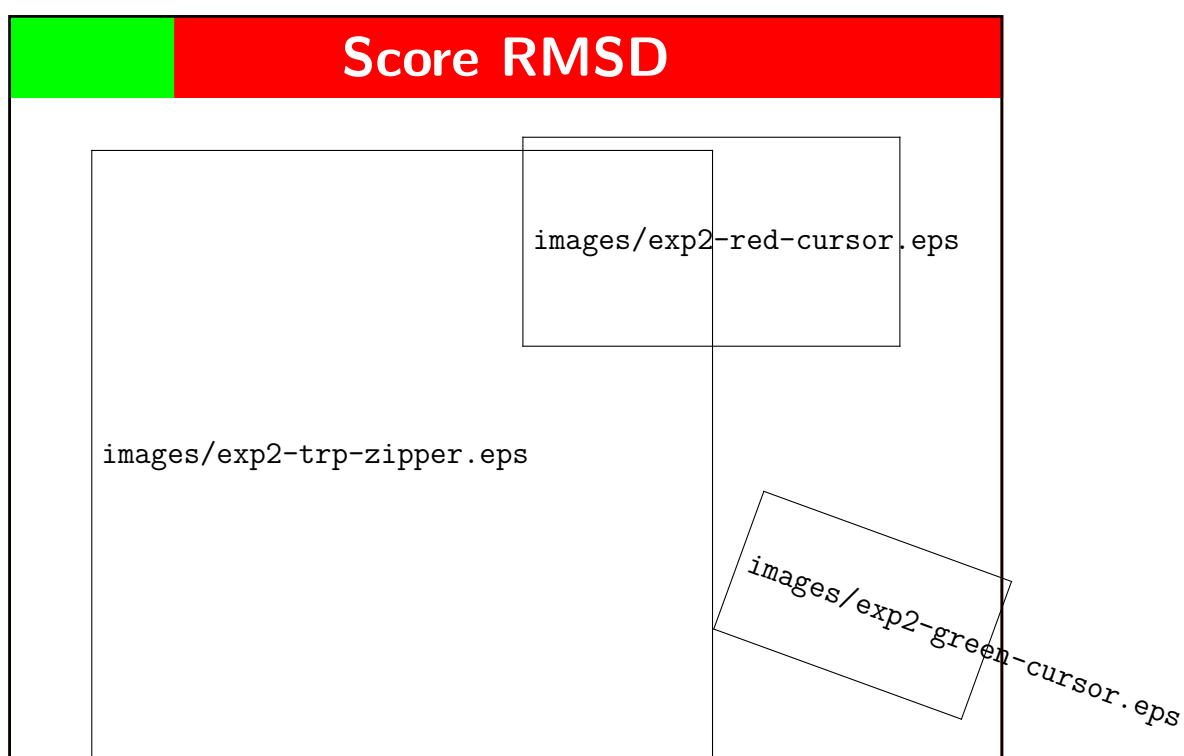
La tâche proposée est la déformation dans un EVC sur des molécules complexes. L'objectif est de modifier la conformation initiale d'une molécule pour  
15 atteindre une conformation finale. En effet, la recherche d'un état stable est exactement ce qu'une tâche de *docking* moléculaire cherche à réaliser. De plus, la déformation est une tâche permettant de stimuler les actions coordonnées pour une collaboration étroitement couplée.

Trois molécules sont utilisées dans le cadre de cette expérimentation. Prion  
20 est une molécule très complexe et sera simplement utilisé dans la phase d'entraînement. TRP-ZIPPER et TRP-CAGE seront chacune utilisée dans deux scénarios distincts. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 189.

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, un score est affiché en temps-réel (voir figure 4.1 page suivante). Le score affiché est le RMSD qui permet de  
25 mesurer la différence de forme entre deux déformations d'une même molécule en calculant la différence entre chaque paire d'atomes. L'équation 4.1 est utilisée pour le calcul de cette différence.

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

où  $N$  est le nombre total d'atomes et  $c_i$ ,  $m_i$  sont respectivement les atomes  $i$   
30 de la molécule à comparer  $\mathbf{c}$  et de la molécule modèle  $\mathbf{m}$ .



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

## Description des scénarios

Quatre scénarios sont proposés sur deux molécules avec deux niveaux de manipulation différents. Les deux niveaux différents de manipulation sont :

- inter-moléculaire (à l'échelle d'un résidu) pour un niveau de déformation avec une granularité élevée ;
- intra-moléculaire (à l'échelle d'un atome) pour un niveau de déformation avec une granularité fine.

Les paragraphes qui vont suivre décrivent les quatre scénarios basés sur les critères de complexité suivants :

10 **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 ;

15 **Cassure** Ce sont des angles dans la chaîne principale de la molécule ; elles représentent les jonctions entre hélices- $\alpha$  et/ou les feuillets- $\beta$  et nécessitent deux points d'accroche pour être reformées ;

**Champ de force** C'est l'intensité des forces dans les zones de déformation ; il exprime l'énergie minimum nécessaire à déployer pour atteindre l'objectif et se traduit par trois niveaux (*faible, moyen et fort*).

20 **Scénario 1A** Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle inter-moléculaire. Un résidu à l'extrémité<sup>1</sup> est fixé afin d'*ancrer* la molécule dans la scène virtuelle et éviter d'éventuelles dérives hors du champ visuel. L'intégralité des onze autres résidus est libre de mouvement ce qui en fait une molécule assez malléable avec un champ de force moyennement contraint. La forme général de la molécule peut être comparée  
25 à un **V** : la chaîne de résidus de la molécule contient une cassure. La difficulté de ce scénario réside dans la nécessité de maintenir les résidus déjà placés pendant que le reste de la molécule est déformée.

**Scénario 1B** Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE  
30 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 ce qui en fait une molécule assez malléable avec un champ de force moyennement contraint. La forme général de la molécule peut être

---

1. La molécule forme une chaîne carbonée ; il s'agit ici d'une des extrémités de cette chaîne.

comparée à un **W** : la chaîne de résidus de la molécule contient deux cassures. Ce scénario est plus difficile que le scénario 1A car le nombre d'atomes à placer est plus élevé et qu'il est nécessaire de maintenir en place 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 et tous les autres résidus sont fixés. Le champ de force au sein de la zone de déformation pour cette molécule est très faible et aucune cassure n'est à reformer. Cependant, la difficulté de ce scénario réside dans la précision de la déformation nécessaire. En effet, plutôt que de modifier la position des résidus, ce scénario nécessite la modification de l'orientation d'un résidu donc une précision accrue dans la sélection et la déformation des atomes.

**Scénario 2B** Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l'échelle intra-moléculaire. Seulement six résidus sont laissés libres et tous les autres résidus sont fixés. Le champ de force au sein de la zone de déformation est très important et l'énergie qu'il est nécessaire de déployer pour réussir cette déformation est importante. Cette déformation ne peut être réalisée qu'avec la manipulation simultanée et coordonnée de deux résidus : ceci permet de recréer la cassure.

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

**Table 4.1** – Paramètres de complexité des tâches

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

### 4.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation, basée sur le dispositif expérimental présenté dans le chapitre A page 187, a subi quelques modifications qui seront détaillées dans les sections suivantes. Un résumé de la méthode expérimentale se trouve dans

la table 4.2 page 89 qu'on pourra retrouver de manière détaillée dans la section B.2 page 198.

## Matériel

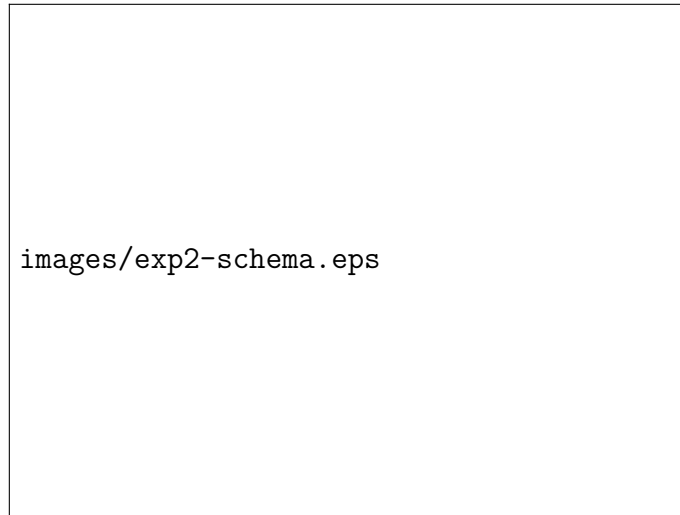
Pour cette seconde expérimentation, une unique modification a été effectuée  
5 par rapport à la plate-forme de base (voir section A.1 page 188). En effet, suite à la première expérimentation, nous avons beaucoup remis en cause la présence de l'outil d'orientation de la molécule. Cet outil permettant de modifier l'orientation de la molécule est nécessaire. Cependant, la forme sous laquelle il est présenté n'est pas idéale. L'outil d'orientation *grab* a posé des  
10 problèmes manifestes d'interaction à certains sujets qui ne réussissaient pas à s'approprier l'outil.

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

En ce qui concerne l'utilisation des outils de déformation en binôme, chaque  
25 sujet possède à sa disposition un outil de déformation. La répartition de l'outil d'orientation est laissée à la responsabilité des deux membres du binôme. Pour les monômes, le sujet peut utiliser les deux outils de déformation en configuration bimanuelle. Il peut également utiliser l'outil d'orientation mais dans ce cas, il est forcé de lâcher un des deux outils de déformation. Pour  
30 des raisons d'équité entre les monômes et les binômes, l'utilisation de la souris 3D désactive toutes les sélections effectuées avec un outil de déformation. De cette façon, les membres du binôme ne peuvent pas utiliser l'outil d'orientation en même temps que les outils de déformations (contrainte physique inhérente au monômes).

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





**Figure 4.2** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 4.3** – Photographie du dispositif expérimental

## Visualisation

Pour cette seconde expérimentation, quatre scénarios sont proposés et présentés dans la section 4.3.1 page 82. Ces molécules sont représentées avec les rendus graphiques de base (CPK et *NewRibbon*). Cependant, la tâche nécessite d'afficher la molécule dans son état stable qui est l'objectif que doivent atteindre les sujets. Cette molécule ne peut pas être représentée avec tous les atomes pour deux raisons. Tout d'abord, l'intégralité des atomes serait une surcharge du rendu visuel. De plus, la précision nécessaire pour les déformations demandées ne nécessite pas un affinement au niveau atomique. C'est pourquoi, la molécule dans son état stable sera discrètement affichée avec un rendu *NewRibbon* en transparence.

Des images représentant les différents scénarios dans leurs états initiaux sont présentées. Les scénarios inter-moléculaires 1A et 1B sont respectivement représentés sur la figure 4.4 et la figure 4.5 page ci-contre. Les scénarios intra-moléculaires 2A et 2B sont respectivement représentés sur la figure 4.6 page suivante et la figure 4.7 page 88.



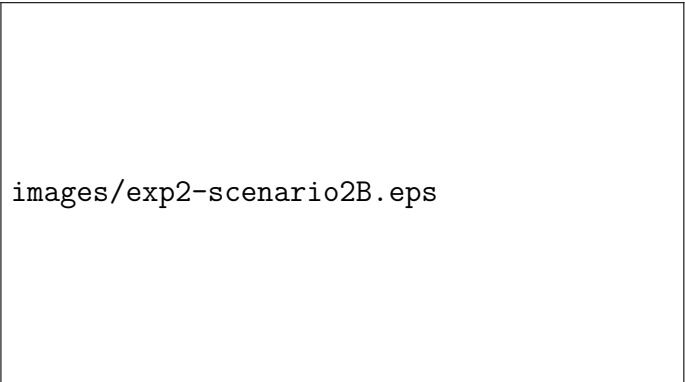
**Figure 4.4** – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A



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



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



images/exp2-scenario2B.eps

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

### Outils de manipulation

Concernant l'outil d'orientation de la molécule, maintenant assuré par une souris 3D, une légère modification a été effectuée. Grâce au choix du matériel qui permet de différencier aisément les translations et les rotations, nous  
5 avons choisi de ne conserver que les DDLs en rotation. En effet, la molécule n'a pas besoin d'être déplacée à l'écran et c'est surtout l'orientation la molécule qui est nécessaire aux sujets. Ceci permet également d'éviter que les molécules ne sortent de l'espace visuel des sujets (scène vidéoprojetée) à cause d'une mauvaise manipulation. De plus, ce choix permet d'enlever une part de la  
10 charge cognitive aux manipulateurs.

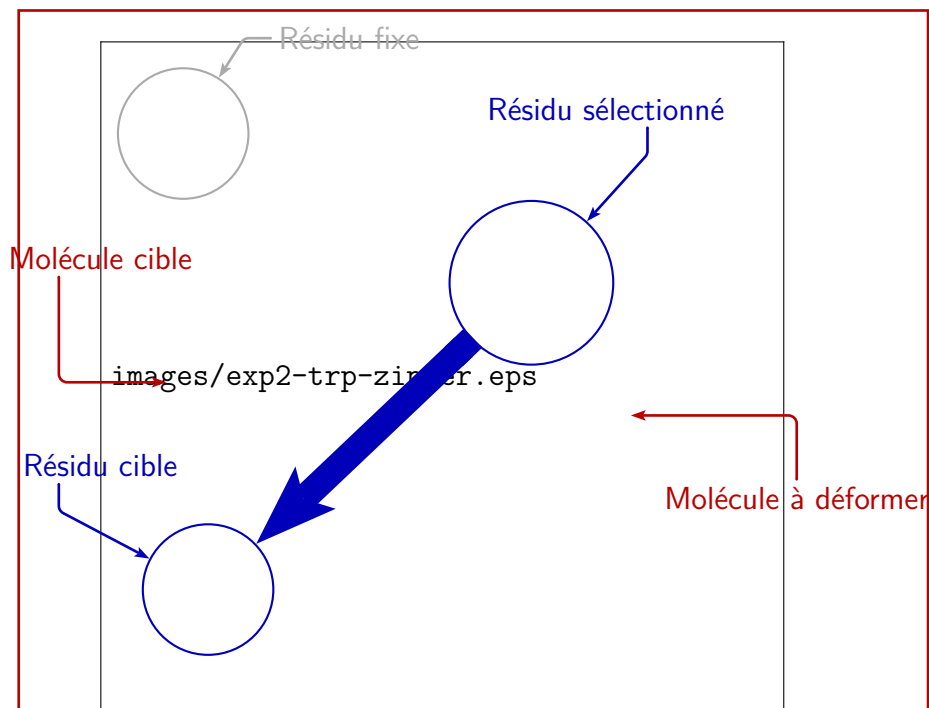
En ce qui concerne les outils de déformation, quelques modifications concernant le rendu visuel ont été effectuées. La tâche consiste à reconstituer une molécule dans son état d'équilibre. Pour aider les sujets dans cette tâche, nous avons affiché un rendu visuel en transparence de la molécule dans son  
15 état stable. Pour augmenter l'aide visuelle apportée, nous allons également indiquer l'emplacement final d'un résidu sélectionné. En effet, dès qu'un sujet sélectionne un résidu, ce résidu est mis en surbrillance. Le résidu correspondant sur la molécule stable est également mis en surbrillance comme expliqué sur la figure 4.8 page 90. Le résidu de la molécule stable est représenté par  
20 un rendu CPK coloré de la couleur du curseur du sujet concerné.

## 4.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette seconde étude concernant la déformation de molécules complexes en

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

<b>Tâche</b>	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 $\mathcal{H}_4$ Les sujets préfèrent le travail en collaboration		
<b>Variables indépendantes</b>	$\mathcal{V}_{i1}$ Nombre de sujets $\mathcal{V}_{i2}$ Complexité de la tâche $\mathcal{V}_{i3}$ Niveau d'apprentissage		
<b>Variables 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 $\mathcal{V}_{d5}$ Vitesse moyenne $\mathcal{V}_{d6}$ 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>	<b>Condition <math>\mathcal{C}_4</math></b>
1 sujet Bimanuel	1 sujet Bimanuel	2 sujets Collaboratif	2 sujets Collaboratif
Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B
Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A
Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B
Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A



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

configuration collaborative. 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

5 suivant les cas :

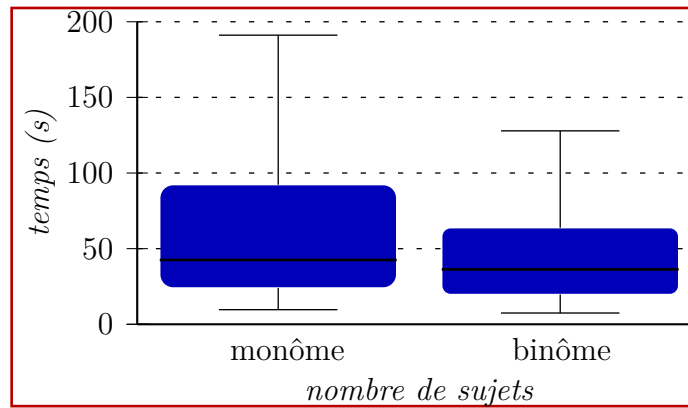
- test de FRIEDMAN [1940] pour les variables intra-sujets non-paramétriques ;
- test de KRUSKAL et WALLIS [1952] pour les variables inter-sujets non-paramétriques.

#### 4.4.1 Amélioration des performances en binôme

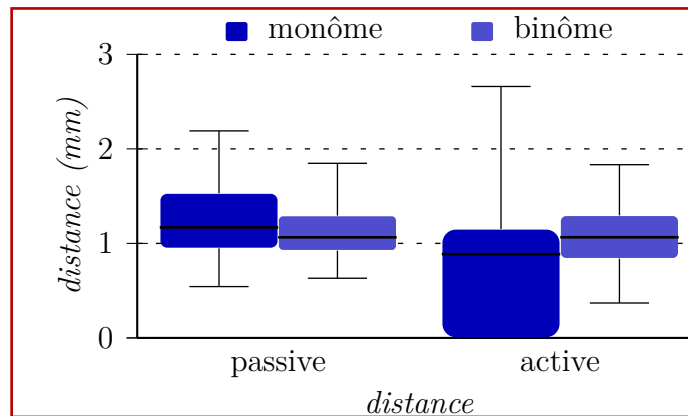
##### 10 Données et statistiques

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

15 La figure 4.10 page suivante présente la distance passive  $\mathcal{V}_{d3}$  et active  $\mathcal{V}_{d4}$  entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L’analyse



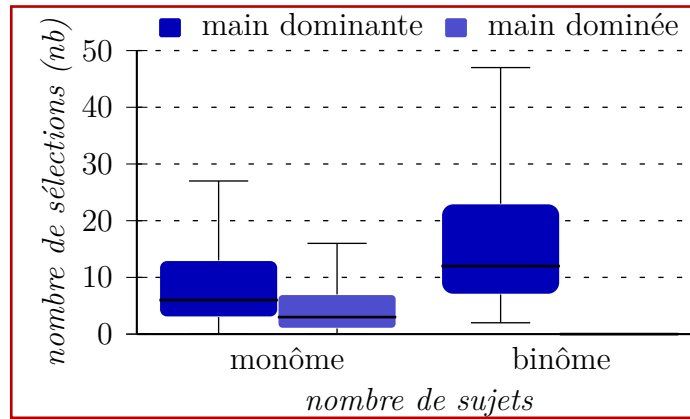
**Figure 4.9** – Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets



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

montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance passive  $\mathcal{V}_{d3}$  ( $\chi^2 = 2.8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.092$ ). Cependant, l'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  ( $\chi^2 = 21.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

- 5 On peut également comparer les distances passive et active en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . 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 ( $\chi^2 = 2.5$ ,  
10  $df = 1$ ,  $p = 0.114$ ).



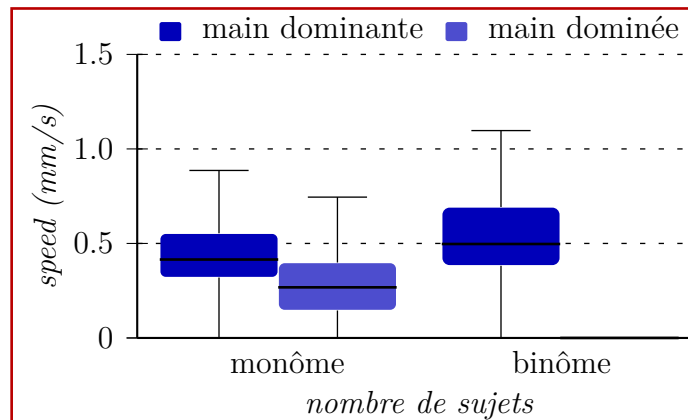
**Figure 4.11** – Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonction du nombre de sujets

La figure 4.11 présente le nombre de sélections par main dominante/dominée  $\mathcal{V}_{d2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . Les binômes n'utilisant que leur main dominante, il n'y a pas de résultat pour la main dominée. On constate un déséquilibre du nombre de sélections entre la main dominante et la main dominée pour les monômes. L'analyse montre qu'il y a un effet significatif  
15 du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre total de sélections (somme des mains dominante et dominée pour les monômes)  $\mathcal{V}_{d2}$  ( $\chi^2 = 6.3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.012$ ).

Le nombre de sélections pour la main dominante comptabilise les sélections des deux sujets du binôme contrairement aux monômes : ceci explique le  
20 nombre plus élevé de sélections en binômes. Cependant, si on compare le nombre moyen de sélections par sujet (pour la main dominante), l'analyse 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  $\mathcal{V}_{d2}$  ( $\chi^2 = 0$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.912$ ).

La figure 4.12 page suivante présente la vitesse moyenne des effecteurs terminaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ .  
25





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

L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  ( $\chi^2 = 122.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). L'analyse montre un déséquilibre de vitesse moyenne entre la main dominante et dominée des monômes avec un effet significatif ( $\chi^2 = 51.1$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). L'analyse montre également un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  de la main dominante ( $\chi^2 = 23$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

## Analyse et discussion

Le premier résultat sur la figure 4.9 page 91 nous permet de confirmer notre hypothèse  $\mathcal{H}_1$  : les binômes sont plus performants que les monômes. Cependant, la suite de l'analyse va permettre de mettre en avant les paramètres précis pour lesquels il y a un gain de performances ainsi que les scénarios les plus adaptés à cette configuration de travail.

Pour commencer, les distances moyennes entre les effecteurs terminaux nous permet d'observer un déséquilibre de performances entre les monômes et les binômes (voir figure 4.10 page 91). En effet, la distance passive entre les effecteurs terminaux (distance moyenne sur toute la durée de la tâche) est plus importante pour les monômes que pour les binômes. Cependant, la distance active (seulement lorsque les deux effecteurs terminaux sont en phase de sélection) montre un effet inverse. En effet, la manipulation bimanuelle (pour les monômes) constitue une charge de travail cognitive importante. Le sujet doit alors être capable de gérer deux effecteurs terminaux à chaque instant. Cette configuration a mené la plupart des sujets à utiliser seulement un effecteur terminal en laissant le second sur le côté afin que le curseur ne

gène pas à l'écran. La main dominée n'est utilisée que dans les cas où le sujet estime que c'est absolument nécessaire pour achever la tâche. Ceci a pour effet d'augmenter la distance passive moyenne. Cependant, la distance est censée représenter l'espace de travail couvert au sein de l'environnement virtuel.

5 Dans ce cas, elle est incorrecte car bien que la distance soit importante, elle ne représente pas un espace de travail étant donné que le deuxième effecteur terminal n'est pas utilisé.

La distance active permet d'éviter ce biais de mesure. En effet, cette mesure ne prend pas en compte les phases d'inactivité d'un effecteur terminal. On

10 constate alors que les binômes couvrent un plus grand espace de travail. Les monômes couvrent un espace de travail plus restreint car ils peuvent focaliser visuellement sur une seule zone de travail à la fois. Par conséquent, les deux effecteurs terminaux se trouvent toujours proche de la zone de manipulation, dans la zone de focus du sujet.

15 La figure 4.11 page 92 confirme ce déséquilibre. En effet, on constate un nombre total de sélections plus grand pour les binômes (19.4 sélections) que pour les monômes (14.1 sélections). Là encore, le sujet effectuant la tâche en monôme n'exploite pas pleinement les deux outils en sa possession : la charge de travail cognitive est trop importante. En effet, la Théorie des Res-

20 sources Multiples (TRM) [WICKENS 1984] estime que la gestion de plusieurs ressources pour la même modalité est impossible. Cependant, les analyses statistiques montrent que l'outil utilisé par la main dominante obtient un taux d'utilisation identique entre les monômes et les binômes. Les binômes en configuration monomanuelle répartissent correctement la charge de travail

25 entre les deux ressources disponibles ce qui n'est pas le cas des monômes.

Cependant, l'outil associé à la main dominante est gêné par la configuration bimanuelle. En effet, l'analyse montre une différence significative entre la vitesse moyenne de la main dominante des monômes et celle des binômes. La configuration bimanuelle provoque une séquentialité dans les actions du

30 sujet : il manipule avec un outil, puis avec l'autre mais rarement les deux en même temps. Cette séquentialité a pour effet des pauses alternatives entre les outils ce qui explique une vitesse moyenne plus basse.

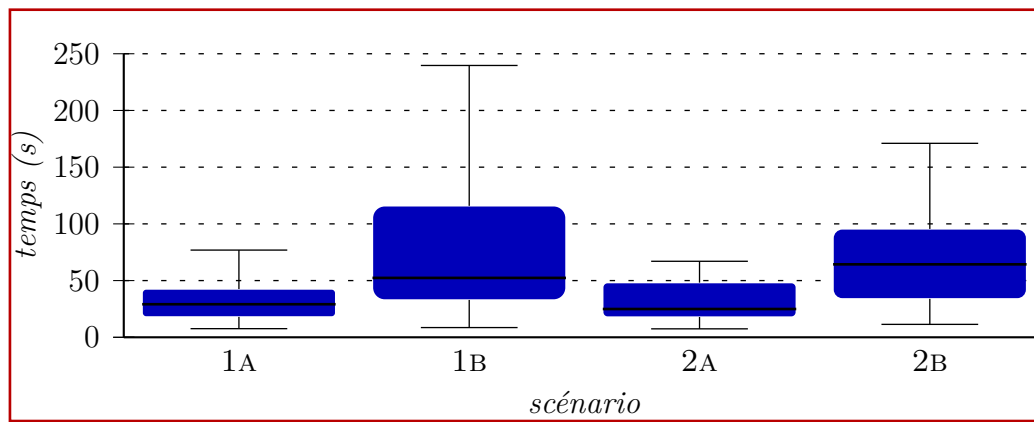
Cette section nous a permis de constater que le travail en binôme permet de meilleures performances que le travail en monôme. Une analyse plus détaillée a mis en avant la difficulté du travail en configuration bimanuelle : la

35 charge de travail cognitive à assumer avec deux outils est trop importante. Cette difficulté a pour effet de fortement dégrader le taux d'utilisation d'un des deux outils. On constate également une légère baisse de l'utilisation de l'outil associé à la main dominante. Pour résumer, il est préférable de distri-

buer les ressources disponibles (outils de manipulation dans notre cas) entre différents participants : la configuration bimanuelle apporte une charge de travail cognitive trop importante.

#### 4.4.2 Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche

##### Données et statistiques

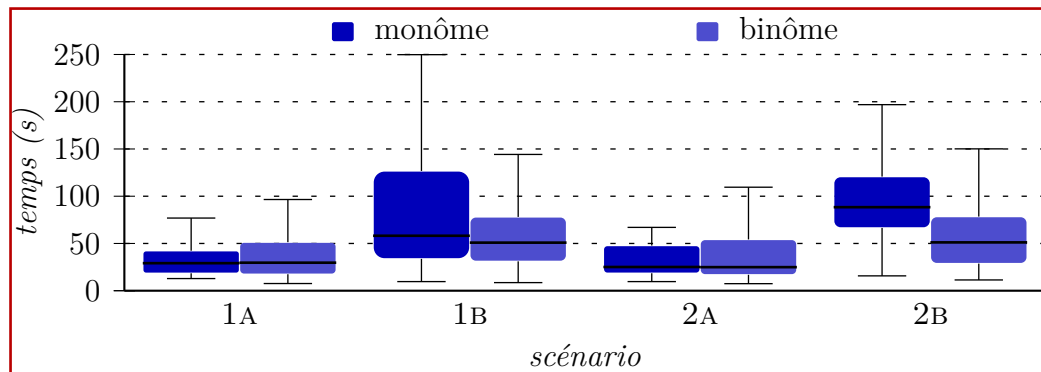


**Figure 4.13** – Temps de réalisation des scénarios

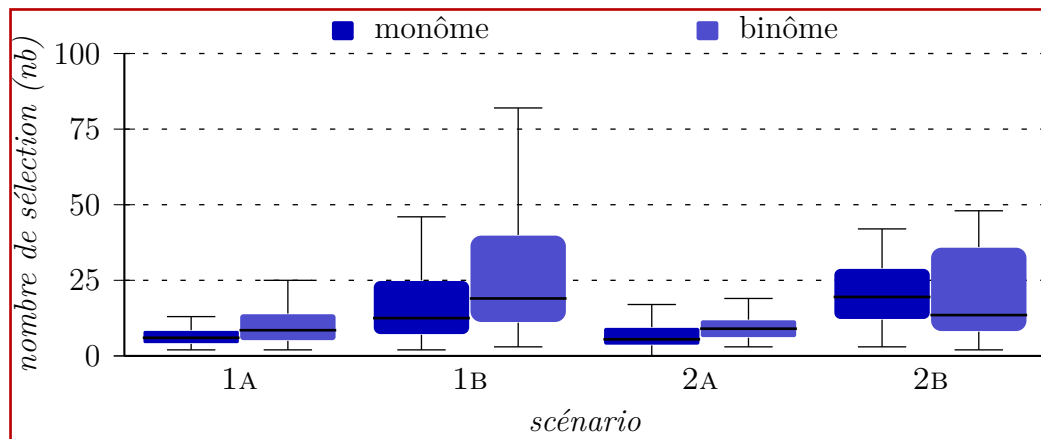
La figure 4.13 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  en fonction de la complexité de la tâche  $\mathcal{V}_{i2}$  (temps cumulé des monômes et des binômes). L'analyse montre un effet significatif de la complexité de la tâche  $\mathcal{V}_{i2}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$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

La figure 4.14 page suivante présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 0.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.713$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 10.4$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.001$ ).

La figure 4.15 page suivante présente le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre

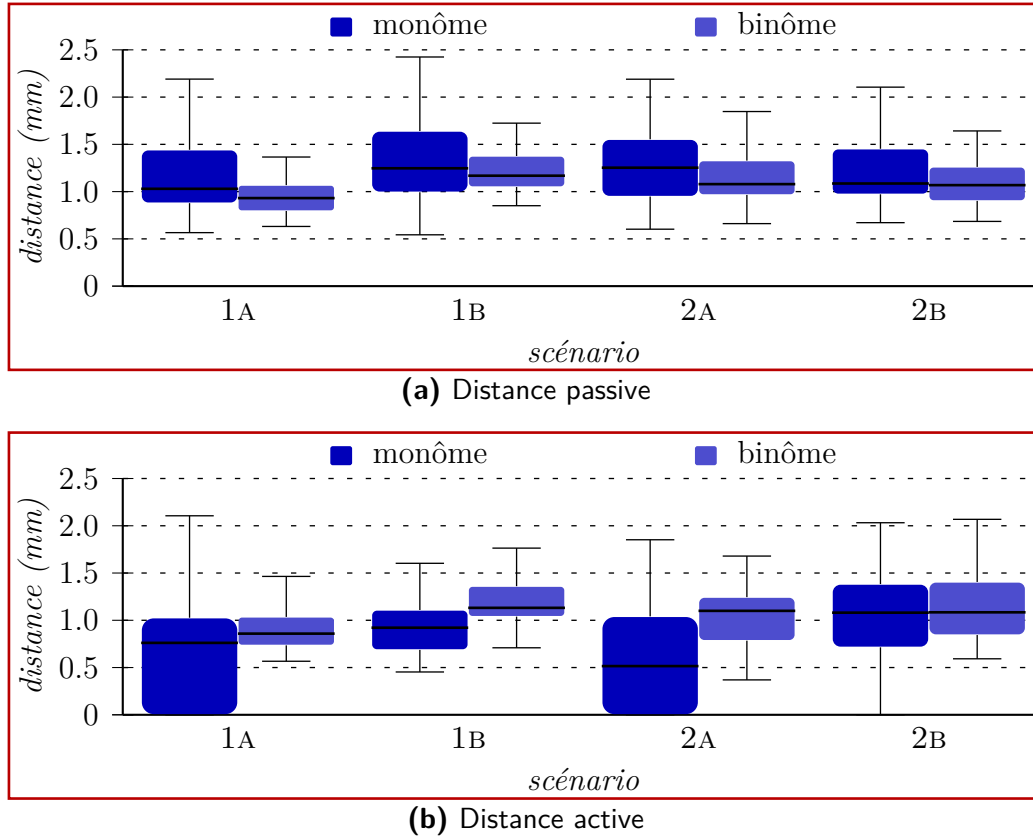


**Figure 4.14** – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets



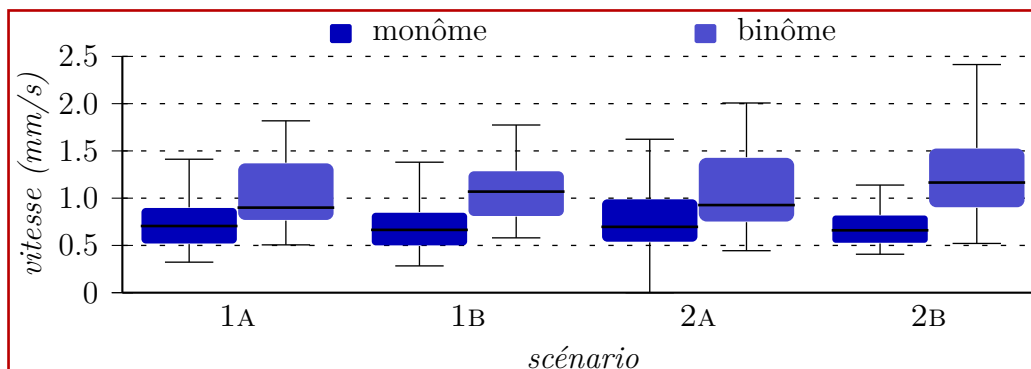
**Figure 4.15** – Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets

de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 11.5$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). Cependant, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 0.4$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.504$ ).



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

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



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

La figure 4.17 présente la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 32.2$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). De même, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  pour les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 72.5$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

### Analyse et discussion

L'analyse du temps de réalisation des différentes tâches ainsi que la table 4.1 page 83 nous permet de classer ces tâches par niveau de complexité : les scénarios 1A et 2A sont simples alors que les scénarios 1B et 2B sont complexes. En effet, les scénarios 1A et 2A concernent la molécule TRP-ZIPPER contenant peu d'atomes et de résidus libres. Par contre, les scénarios 1B et 2B, dont le nombre d'atomes et de résidus libres est plus important, est constitué de champ de force à fortes contraintes physiques et nécessité la formation de plusieurs cassures.

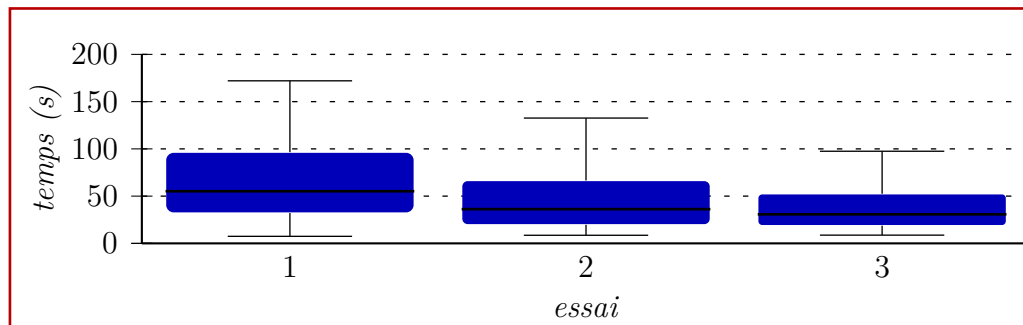
En observant les différences de performances entre les monômes et les binômes sur la figure 4.14 page 96, on constate que l'apport du travail collaboratif n'est vrai que dans le cas des tâches complexes. La contrainte des tâches complexes réside dans la nécessité d'avoir recours aux deux outils pour achever la tâche. En effet, en observant la figure 4.16a page précédente, l'analyse de la distance active montre une différence significative entre les monômes et les binômes pour les scénarios simples. Sur la base des résultats de la section précédente (voir section 4.4.1 page 90), les monômes ont tendance à délaier

le deuxième outil à cause de la forte charge cognitive qu'ajoute la configuration bimanuelle. L'outil délaissé augmente ainsi la valeur de la distance passive mesurée en étant mis à l'écart. En observant seulement les scénarios simples 1A et 2A, on constate que la distance passive des monômes est plus importante que celle des binômes. On en conclue que les monômes que la complexité de ces scénarios n'a pas nécessité une manipulation bimanuelle et que la tâche a pu être achevée avec un seul outil de déformation. Il y a donc peu d'intérêt d'effectuer ces tâches peu complexe en collaboration puisqu'il n'y a aucune amélioration significative des performances bien que le nombre de ressources utilisées (les outils de déformation) soit doublé.

Cependant, pour les scénarios complexes, l'analyse ne montre pas de différence significative de la distance passive entre les monômes et les binômes. Pour ces scénarios, l'utilisation du deuxième outil est nécessaire et malgré la charge cognitive importante que cela représente pour les monômes, la tâche est réalisée à l'aide des deux outils (configuration bimanuelle). Dans ce cadre, la configuration monomanuelle adoptée par les binômes permet de meilleures performances comme le montre les analyses pour une distance active similaire. En effet, l'espace de travail couvert par les monômes est identique à celui des binômes mais leur incapacité à traiter cognitivement cette charge supplémentaire de travail les rend moins performants.

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

Dans cette section, nous avons montré que les améliorations de performances des binômes par rapport aux monômes étaient très liées à la complexité de la tâche. En effet, sur des tâches de faible complexité, les monômes obtiennent de bonnes performances (même en configuration monomanuelle) alors que les binômes souffrent de conflits de coordination : les performances sont similaires. Cependant, dans le cas de tâche complexes, les conflits de coordination ne sont pas suffisamment pénalisants et la collaboration permet d'obtenir de meilleures performances que le travail seul. Dans la section précédente, nous avons montré que la configuration bimanuelle ne permet pas d'égaliser les performances d'un travail en collaboration. Complétons cette conclusion par le fait qu'elle est surtout vraie pour les scénarios complexes.

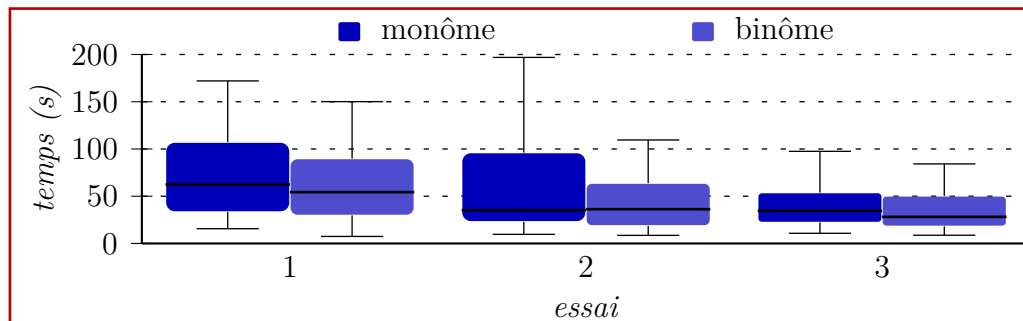


**Figure 4.18** – Temps de réalisation de chaque essai

### 4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes

#### Données et statistiques

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



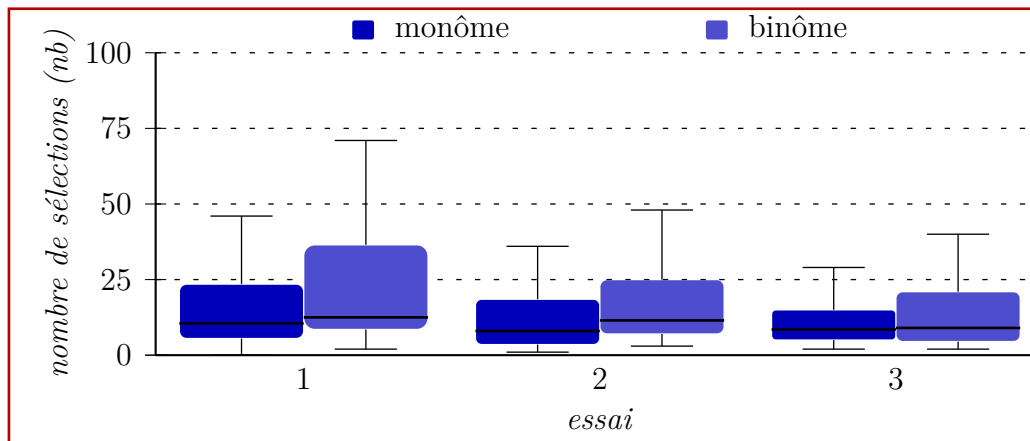
**Figure 4.19** – Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

La figure 4.19 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  des différents essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour le premier essai ( $\chi^2 = 1.3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.263$ ), le deuxième essai ( $\chi^2 = 1.2$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.276$ ) ou le troisième essai ( $\chi^2 = 2.5$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.115$ ).

De plus, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les monômes ( $\chi^2 = 7.1$ ,  $df = 2$ ,  $p = 0.028$ )



et pour les binômes ( $\chi^2 = 19.8$ ,  $df = 2$ ,  $p \ll 0.05$ ). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative seulement à partir de dernier essai pour les monômes alors que l'évolution est significative dès le deuxième essai pour les binômes.

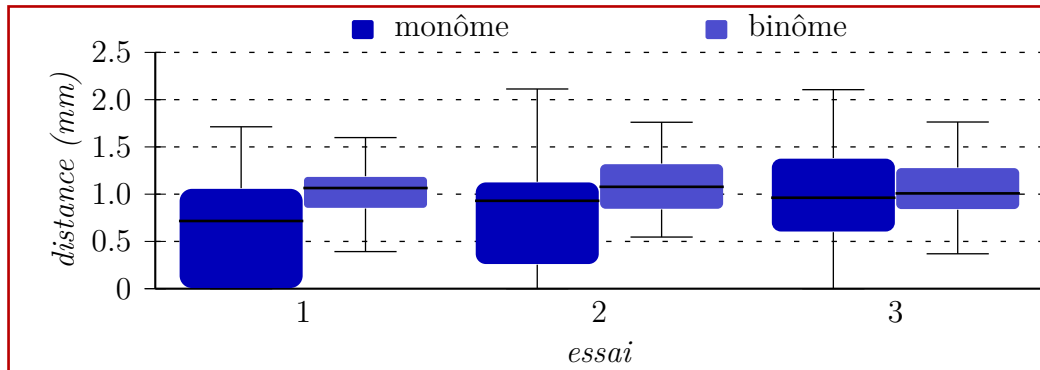


**Figure 4.20** – Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets

- 5 La figure 4.20 présente le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  des différents essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour le premier essai ( $\chi^2 = 3.3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.068$ ) ou le troisième essai ( $\chi^2 = 0.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.715$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du  
10 nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour le deuxième essai ( $\chi^2 = 3.8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.05$ ).

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

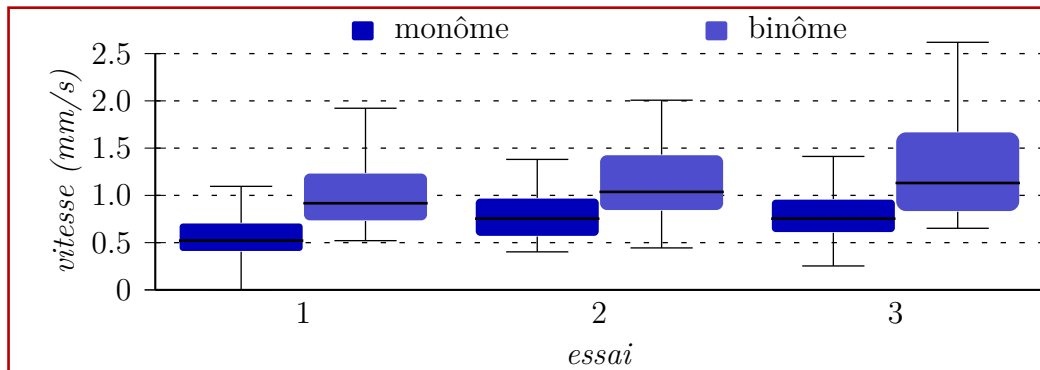
La figure 4.21 page suivante présente la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  des différents  
20 essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . La distance passive n'a pas été prise en considération étant donné le biais de mesure décrit dans la section 4.4.1 page 90. L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  pour le premier essai ( $\chi^2 = 21.4$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ) et pour le deuxième essai ( $\chi^2 = 8.5$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.004$ ) mais pas



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

pour le troisième essai ( $\chi^2 = 0.8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.362$ ).

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



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

La figure 4.22 présente la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  des différents essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  pour le premier essai ( $\chi^2 = 50$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ), le second essai ( $\chi^2 = 25.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ) et le troisième essai ( $\chi^2 = 33.1$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

De plus, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai  $\mathcal{V}_{i3}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  pour les monômes ( $\chi^2 = 40.5$ ,  $df = 2$ ,  $p \ll 0.05$ ) et les binômes ( $\chi^2 = 9$ ,  $df = 2$ ,  $p = 0.011$ ). Le test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre dans chaque cas  
5 (monôme et binôme) une augmentation significative après le premier essai.

## Analyse et discussion

L'observation des temps de réalisation de la tâche (voir figure 4.18 page 100) nous permet de caractériser un apprentissage réel sur l'ensemble des trois réalisations de la tâche. Le détail de l'apprentissage en fonction du nombre  
10 de sujets sur la figure 4.19 page 100 apporte cependant un point important : les binômes améliorent plus rapidement leurs performances que les monômes. En effet, on constate une amélioration franche des performances dès le second essai dans le cas des binômes alors que ce n'est que sur le dernier essai que les monômes montrent une évolution. L'amélioration plus rapide des  
15 performances chez les binômes suggère un apprentissage plus rapide de la tâche, des outils et de tous les éléments de la plate-forme<sup>2</sup>.

En observant l'évolution des variables  $\mathcal{V}_{d1}$  (temps de réalisation) et  $\mathcal{V}_{d2}$  (nombre de sélections), on constate que les binômes ont un apprentissage rapide. Le temps de réalisation décroît ainsi que le nombre de sélections  
20 ce qui n'est pas le cas des monômes. En effet, le temps de réalisation des monômes décroît alors que le nombre de sélections ne décroît pas de manière significative. Au-fur-et-à-mesure des essais, les monômes apprennent et intègre la manipulation en configuration bimanuelle : ils augmentent ainsi leurs performances (diminution du temps de réalisation et du nombre de  
25 sélections de la main dominante) tout conservant un nombre de sélections relativement constant (par une augmentation du nombre de sélections de la main dominée).

On observe clairement l'apprentissage progressif du deuxième outil mis à disposition des monômes dans la figure 4.21 page ci-contre. Alors que l'espace de  
30 travail des binômes reste stable sur l'ensemble des essais, celui des monômes s'étend au-fur-et-à-mesure des essais jusqu'à atteindre une valeur similaire à celle des binômes. En effet, seul l'apprentissage permet de s'affranchir en partie de la charge cognitive importante que représente la manipulation bimanuelle [WICKENS 1984] : avec l'apprentissage, les monômes sont capables  
35 de gérer un espace de travail de plus en plus grand. Le potentiel du deuxième

---

2. On observe une amélioration des performances par apprentissage mais rien ne permet de distinguer quel aspect de la tâche a été intégrée le plus vite.

outil n'est pas ignoré et il est utilisé (avec la main dominée) comme un moyen de fixer un résidu déjà déplacé pendant que l'autre outil déforme. Ceci permet de déformer une partie de la molécule tout en conservant la stabilité de la partie déjà déformée. Les monômes ont la capacité d'adopter une stratégie plus adaptée à la situation car aucune limite de surcharge cognitive ne contraint les sujets.

En ce qui concerne les vitesses moyennes, les monômes comme les binômes s'améliorent en manipulant plus rapidement. Cependant, les binômes restent nettement plus rapides que les monômes. Cette amélioration peut être mise en relation avec l'amélioration des temps de réalisation : la tâche est réalisée plus rapidement car les sujets manipulent plus rapidement.

Dans cette section, nous avons mis en évidence les améliorations en terme d'apprentissage pour les configurations collaboratives sans distinction sur les aspects de l'apprentissage (plate-forme, outils, tâche, *etc.*). En effet, les binômes atteignent des performances optimales rapidement tandis que les monômes ont besoin de plus de temps pour converger vers de bonnes performances. La capacité des binômes à communiquer, échanger et conseiller permet de mutualiser l'apprentissage et de l'accélérer. De plus, un binôme peut bénéficier des connaissances spécifiques ou de l'expérience d'un des membres du binôme et ainsi mutualiser les aptitudes de chacun pour créer une vraie dynamique de groupe. La configuration bimanuelle offre une alternative de manipulation aux monômes avec une surcharge de travail trop importante : l'apprentissage est plus difficile. De plus, les monômes ont probablement atteint les limites de la charge cognitive maximum supportée avec cette configuration : l'ajout de nouvelles fonctionnalités serait probablement inefficace (contrairement aux binômes).

#### 4.4.4 Résultats qualitatifs

Le questionnaire est destiné à évaluer la collaboration du point de vue de l'utilisateur.

Tout d'abord, la grande majorité des sujets travaillant en binôme se sont trouvés utiles dans cette tâche de collaboration ( $\mu = 3.1$ ,  $\sigma = 0.8$ )<sup>3</sup>. Ce résultat élevé permet de vérifier que les sujets ne se sentent pas mis de côté et participent activement à la réalisation de la tâche. Cette collaboration peut se traduire par une participation active à la déformation ou par une participation plutôt passive (échanges verbaux, conseils, remarques, *etc.*).

---

3. L'échelle de notation comprise entre 1 à 5 mais les moyennes ont été normalisées entre 0 et 4.

Dans un cas comme dans l'autre, les sujets ne sont pas isolés ce qui permet d'éviter les phénomènes de paresse sociale.

Le sentiment d'avoir été meneur durant la réalisation de la tâche est relativement neutre ( $\mu = 2$ ,  $\sigma = 0.6$ ). Cependant, cette question semble biaisée.

- 5 En effet, les sujets ne souhaitent pas prétendre avoir été meneur ou chef des opérations par modestie. Paradoxalement, ils ne souhaitent pas non plus avouer avoir été dirigé par quelqu'un d'autre par fierté. D'ailleurs, on observe un écart-type relativement bas concernant cette note ce qui signifie que la majorité des sujets ont répondu de façon neutre.
- 10 L'évaluation de la communication confirme ce qui a été observé dans la précédente expérimentation (voir section 3.4.3 page 72). En effet, l'importance de la communication verbale a été mise en avant ( $\mu = 2.4$ ,  $\sigma = 1.2$ ). Par opposition, les sujets ont considéré qu'ils n'utilisaient quasiment pas la modalité virtuelle ( $\mu = 0.9$ ,  $\sigma = 1$ ) et encore moins la modalité gestuelle ( $\mu = 0.3$ ,  
15  $\sigma = 0.6$ ) pour communiquer. La communication verbale étant la plus naturelle, il n'est pas étonnant d'obtenir un tel score. De la même façon, la communication gestuelle est compliquée étant donné que les sujets sont en train de manipuler une interface haptique. De plus, leur vision se focalise principalement sur le déroulement de la tâche à l'écran mais pas sur le partenaire  
20 ce qui laisse peu de place à la communication gestuelle. Cependant, les sujets estiment ne pas souvent avoir recours aux communications virtuelles. Cette modalité de communication offre des possibilités intéressantes puisqu'elle est intégrée à l'environnement de travail et matérialisée principalement par le curseur. L'expérimentation ne proposant aucune fonctionnalité particulière  
25 permettant d'exploiter cette modalité de communication explique probablement ce faible taux d'utilisation. La dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 131) propose des outils de désignation qui vont permettre d'exploiter le potentiel de ce canal de communication.

- Pour finir, les sujets ont été interrogés sur leur configuration de travail préférée. Le questionnaire propose aux sujets d'évaluer une configuration pour  
30 laquelle ils n'ont pas testés. La configuration monomanuelle en monôme (qui n'a pas été testée) a été relativement peu choisie ( $\mu = 0.8$ ,  $\sigma = 1$ ). Les sujets évalués en monôme sont mitigés sur l'intérêt d'une configuration monomanuelle en binôme ( $\mu = 2.2$ ,  $\sigma = 1.2$ ). De la même façon, les sujets évalués en  
35 binôme sont mitigés sur l'intérêt d'une configuration bimanuelle en monôme ( $\mu = 1.9$ ,  $\sigma = 1.3$ ). Quoiqu'il en soit, ils ont été seulement 41.7 % à préférer la configuration bimanuelle en monôme alors qu'ils ont été 58.3 % à opter pour la configuration monomanuelle en binôme. Une majorité des sujets semble préférer la configuration collaborative.

## 4.5 Synthèse

### 4.5.1 Résumé des résultats

Dans cette seconde expérimentation, nous avons comparé et étudié les performances de monômes et de binômes sur une tâche de déformation avec un nombre identique de ressources. De plus, nous avons cherché à observer l'apport de la configuration collaborative sur l'apprentissage sur les performances. L'objectif était de placer la configuration collaborative dans un contexte de déformation avec de nouvelles contraintes par rapport aux tâches de recherche et de sélection.

Il a été montré qu'avec un nombre de ressources déterminées (un outil de manipulation et deux outils de déformation dans notre cas), il est préférable de les répartir sur plusieurs sujets. Cette répartition des ressources permet une meilleure distribution cognitive des charges de travail. En effet, la charge cognitive est trop importante pour un utilisateur seul. La configuration collaborative, bien que souffrant de conflits de coordination, obtient tout de même des meilleures performances.

Deuxièmement, nous avons montré que la configuration collaborative est particulièrement performante pour les scénarios à forte complexité. En ce qui concerne les scénarios à faible complexité, les performances d'une configuration collaborative ne sont ni meilleures, ni moins bonne que celle d'un seul manipulateur en configuration bimanuelle. On notera tout de même que les sujets semblent préférer la configuration collaborative.

Le troisième résultat important concerne l'apprentissage. Nous avons montré que le travail en collaboration a une influence sur l'évolution de l'apprentissage. En effet, l'apprentissage est catalysé par la communication et les échanges entre les sujets. La complexité de la tâche ainsi que de la plateforme (rendu visuel, outils, *etc.*) nécessite un apprentissage important. L'apprentissage accéléré provoqué par une configuration collaborative est donc un avantage permettant d'appréhender plus rapidement la tâche à réaliser.

### 4.5.2 Conclusion

Cette expérimentation nous a permis de comparer une configuration collaborative à une configuration bimanuelle possédant chacune le même nombre de ressources. Nous avons vu les avantages d'une configuration collaborative avec des binômes. L'étape suivante sera l'étude du travail collaboratif sur des

groupes de plus de deux sujets. Ceci devrait permettre d'augmenter encore le potentiel cognitif du groupe.

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

L'ajout de sujets supplémentaires va probablement générer des dynamiques de groupes qui n'avait pas de raison d'exister au sein d'un binôme. Cette  
10 troisième étude permettra l'observation des dynamiques et de les caractériser. L'objectif sera de détecter les limites et les contraintes afin de pouvoir fournir des outils pour répondre aux problématiques soulevées.

Cette deuxième expérimentation a également permis de remettre en cause la pertinence d'une manipulation en configuration bimanuelle. D'après les  
15 analyses, la charge cognitive qu'apporte la gestion d'un deuxième outil de déformation est trop importante. Cependant, l'outil de déformation est relativement complexe à appréhender. Il ne faut donc pas exclure la possibilité de fournir un outil simple et un outil complexe pour une manipulation en configuration bimanuelle. Nous verrons que la configuration de la dernière  
20 étude (voir chapitre 6 page 131) propose une configuration bimanuelle avec un outil simple de déplacement et un outil plus complexe de désignation.

Le questionnaire nous a également permis de mettre en avant les lacunes en ce qui concerne l'utilisation de la modalité virtuelle. La dernière expé-  
rimentation sera l'occasion d'introduire des nouveaux outils adaptés pour  
25 permettre d'utiliser efficacement cette modalité pour la communication et en particulier, un outil de désignation.





# La dynamique de groupe

## Sommaire

---

5	<b>5.1 Introduction</b>	<b>110</b>
	<b>5.2 Collaboration de groupe</b>	<b>110</b>
	5.2.1 Travaux existants	110
	5.2.2 Objectifs	112
	<b>5.3 Présentation de l'expérimentation</b>	<b>113</b>
10	5.3.1 Description de la tâche	113
	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental	114
	<b>5.4 Résultats</b>	<b>118</b>
	5.4.1 Amélioration des performances	118
	5.4.2 Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration	122
15	5.4.3 Définition d'un meneur	126
	<b>5.5 Synthèse</b>	<b>129</b>
	5.5.1 Résumé des résultats	129
20	5.5.2 Conclusion	130

---

## 5.1 Introduction

À présent, les différentes PCVs ont été étudiées dans un contexte de collaboration étroitement couplée à travers les deux précédents chapitres. Cependant, l'observation du travail collaboratif ne peut être restreint à l'étude des binômes. En effet, ROETHLISBERGER *et al.* [1939] ont mis en évidence les dynamiques de groupe basés sur les travaux de Elton MAYO. Ces dynamiques de groupe montre une collaboration très différente de que ce que nous avons pu observer chez les binômes.

Ce chapitre constitue notre première étude sur le travail collaboratif avec des groupes d'utilisateurs<sup>1</sup>. Au regard des travaux existants, une dynamique de groupe devrait émerger. Cependant, notre contexte de travail est différent des précédents travaux sur le sujet : nous nous intéressons aux collaborations étroitement couplées. C'est dans ce contexte que nous allons observer les dynamiques de groupe qui émergent. Nous nous plaçons de nouveau dans un contexte de déformation moléculaire qui fournit un environnement d'étude propice aux collaboratio étroitement couplée. De plus, nous souhaitons tester l'utilité du *brainstorming*<sup>2</sup> qui d'après A. F. OSBORN [1963], améliore les performances de groupe.

## 5.2 Collaboration de groupe

### 5.2.1 Travaux existants

L'ouvrage de MUGNY *et al.* [1995] abordent les problématiques de la psychologie sociale dans le cadre général et consacre une partie à la dynamique de groupe. Les premières études sur la dynamique de groupe date de la révolution industrielle entre la fin du XVIII<sup>e</sup> siècle et au début du XIX<sup>e</sup> siècle avec en particulier, les travaux de Elton MAYO au sein de l'entreprise *Hawthorne Works*. Cette étude, destinée à étudier l'effet des conditions de travail (température, temps de pause, *etc.*), a été effectuée entre les années 1927 et 1932. Cependant, l'étude a montré que l'amélioration de la productivité des ouvriers n'était pas liée aux conditions de travail. ROETHLISBERGER *et al.* [1939] expliquent cette amélioration par la stimulation sociale qu'exerce chaque individu sur ses partenaires : c'est la facilitation sociale. Les résultats de cette étude sur les groupes de taille importante sont actuellement utilisés

---

1. BALES [1950] considère qu'un groupe est constitué au minimum de trois personnes.

2. Pour la suite des développements, le mot *brainstorming* sera utilisé plutôt que le mot *remue-méninges* car il est plus utilisé dans la littérature.

dans les techniques modernes de *management* [BRUCE 2006 ; J. C. WOOD et M. C. WOOD 2004].

Cependant, en parallèle à cette théorie de la dynamique des groupes basée sur la facilitation sociale, RINGELMANN [1913] met en évidence une théorie  
5 radicalement différente. En effet, à travers un exercice de traction sur une corde, il montre que la somme des efforts individuels est plus importante que l'effort combiné du groupe, chaque sujet se fiant à son voisin pour réaliser la tâche. Ce phénomène, appelé paresse sociale, s'oppose aux résultats obtenus par ROETHLISBERGER *et al.* [1939] sur la facilitation sociale. Une étude plus  
10 poussée de ce phénomène, effectuée par LATANÉ *et al.* [1979], confirme les résultats obtenus sur la paresse sociale. Cependant, LATANÉ *et al.* [1979] proposent de limiter ce problème en renforçant la responsabilité individuelle plutôt que de la diffuser sur le groupe. La responsabilisation par la définition de rôles distincts permet de ne pas se décharger des actions à réaliser sur ses  
15 partenaires tout en conservant les effets bénéfiques de la facilitation sociale.

Une part de ces études sur la dynamique de groupe est consacrée aux groupes de petites tailles appelés également groupes restreints. BALES [1950] proposent les premières analyses sur ces groupes de trois à une vingtaine de partenaires. Les résultats montrent que quelque soit la taille du groupe, le  
20 groupe sera dominé par un voire deux membres du groupe. Cependant, ZAJONC [1965] montre que les groupes sont performants sur des tâches simples mais peu performants sur des tâches complexes. En effet, les tâches simples sont réalisées sans crainte du jugement ou de l'évaluation par les partenaires. Sur une tâche de nature complexe, l'évaluation et le jugement par les partene-  
25 naires est un frein et a pour conséquences de faire baisser les performances du groupe.

Au sein des groupes restreints, A. F. OSBORN [1963] propose d'améliorer les performances dans les groupes restreints par l'introduction de la notion de *brainstorming*. Pourtant, DIEHL et STROEBE [1987] montrent que le *brains-*  
30 *torming* apporte moins de bénéfices en groupe que lorsqu'il est effectué individuellement. POOLE et HOLLINGSHEAD [2005] expliquent que les groupes focalisent en priorité sur les informations qu'ils ont en commun. La peur de l'évaluation négative va empêcher l'émergence de solutions originales. Cependant, TUCKMAN [1965] considère que le *brainstorming* permet tout de même  
35 de renforcer la cohésion sociale et d'améliorer les performances du groupe à long terme.

Jusqu'à présent, les études concernant la dynamique des groupes et plus particulièrement celle concernant les groupes restreints sont nombreuses. Cependant, chaque étude proposée concerne des tâches autour d'une collaboration

faiblement couplée. Dans ce chapitre, nous étudions la dynamique des groupes autour d'une collaboration fortement couplée afin d'observer les différences avec les configurations précédemment étudiées dans la littérature.

### 5.2.2 Objectifs

5 Dans cette troisième étude, nous souhaitons étudier le travail collaboratif pour les groupes restreints. Jusqu'à présent, nous avons été confrontés à des binômes. La littérature montre des stratégies propres aux groupes restreints et distinctes de celles adoptées par les binômes. Nous souhaitons étudier cette dynamique de groupe pour la collaboration étroitement couplée.

10 Étant donné les résultats obtenus dans nos précédentes études, nous souhaitons observer une amélioration des performances en fonction du nombre d'utilisateurs pour un scénario de collaboration étroitement couplée. Pourtant, les conclusions de ZAJONC [1965] montrent que les groupes sont moins performants lorsqu'ils sont confrontés à une tâche complexe. Cependant, étant  
15 donné la coordination nécessaire demandée par la tâche, nous pensons que les conclusions obtenues pour la collaboration étroitement couplée seront différentes de celles obtenues par ZAJONC [1965] dans le cadre d'une tâche à faible couplage. En effet, nous avons vu précédemment que la configuration bimanuelle menait à une surcharge cognitive difficile à traiter par les sujets; la coordination nécessaire pour les scénarios proposés devrait donner  
20 un avantage aux groupes restreints.

D'après les conclusions de BALES [1950], un groupe est toujours mené par un ou deux utilisateurs, quelque soit la taille du groupe. Nous émettons l'hypothèse que ces meneurs vont également apparaître dans le cadre d'une  
25 collaboration étroitement couplée.

Enfin, nous souhaitons proposer une solution pour limiter les conflits de coordination. BALES [1950] a noté que les groupes restreints consacrent du temps pour se connaître (sans rapport avec la tâche à réaliser) puis discutent à propos de la stratégie à adopter. Afin de répondre à ce besoin de se  
30 connaître, les groupes choisis dans cette expérimentation sont tous constitués de sujets se connaissant déjà dans le cadre professionnel. Puis, afin d'améliorer l'efficacité d'une discussion à propos de l'élaboration d'une stratégie, nous souhaitons tester la mise en place d'une période de *brainstorming* au début de la tâche. Nous émettons l'hypothèse que cette période permettra  
35 aux groupes de s'organiser et d'élaborer une stratégie afin d'améliorer les performances globales du groupe. De plus, si l'hypothèse précédente se vérifie, le *brainstorming* devrait permettre d'identifier plus rapidement le ou les

meneurs du groupe.

## 5.3 Présentation de l'expérimentation

### 5.3.1 Description de la tâche

- La tâche proposée est la déformation de molécules dans un EVC. L'objectif est de rendre une molécule complexe conforme à une molécule modèle. Dans cette expérimentation, la molécule TRP-CAGE est utilisée pour la phase d'entraînement. Des molécules plus complexes (Prion et Ubiquitin) sont utilisées pour les scénarios de déformation collaborative. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 189.
- Le mécanisme de sélection et d'affichage est strictement identique à la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 83). De la même façon, le système d'évaluation basé sur le score RMSD est identique. On pourra trouver la description de ces éléments dans la section 4.3.1 page 80.

#### Description des scénarios

- Deux scénarios sont proposés : un scénario avec des interactions faiblement couplées et un scénario avec des interactions fortement couplées. Les paragraphes suivants décrivent ces deux scénarios :

**Scénario 1** Basé sur la molécule Prion, il nécessite de replacer correctement une chaîne de 16 résidus par rapport à un modèle. Cette chaîne se trouve en périphérie de la molécule et n'est donc pas soumise à de fortes contraintes physiques. Ce scénario est divisible en tâches élémentaires présentant de faibles interactions physiques. L'objectif est d'obtenir une collaboration faiblement couplée.

**Scénario 2** Basé sur la molécule Ubiquitin, il nécessite de replacer correctement une chaîne de 19 résidus par rapport à un modèle. Cette chaîne se trouve au sein de la molécule où elle est soumise à de fortes contraintes physiques, notamment au milieu de la chaîne ; le contrôle précis de la déformation au milieu de la chaîne est complexe. La réalisation de ce scénario nécessite plusieurs points de contrôle et une coordination de l'ensemble des sujets. L'objectif est d'obtenir une collaboration étroitement couplée.

### 5.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Le dispositif expérimental utilisé, basé sur celui présenté dans le chapitre A page 187, a été adapté pour les besoins de l'expérimentation. Les modifications sont présentées dans les sections qui vont suivre. Le protocole expérimental est détaillé dans la section B.3 page 201 avec un résumé dans la table 5.1 page 117.

#### Matériel

Cette expérimentation se focalise sur le travail de groupe et en particulier, sur les quadrinômes. Il est nécessaire d'ajouter deux outils de déformation supplémentaires à la plate-forme (voir section A.1 page 188). Deux PHANTOM Omni® supplémentaires sont posés sur la table, devant les sujets, de manière à ce que chacun puisse avoir accès à une interface haptique. Un serveur VRPN exécuté par des machines de faible puissance est ajouté pour chaque nouvel PHANTOM Omni®.

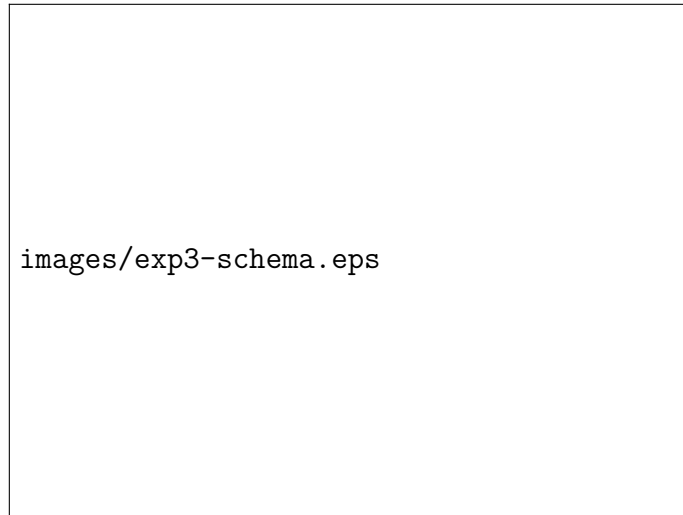
Chaque sujet d'un quadrinôme possède un outil de déformation à sa disposition. En ce qui concerne les binômes, chaque sujet possède deux outils pour une configuration bimanuelle.

Cette expérimentation sur le travail collaboratif de groupe est l'occasion d'observer les communications. Afin d'enregistrer ces communications, une caméra vidéo SONY® (PJ50V HD) a été placée derrière les sujets afin de filmer les sujets de dos et l'écran de vidéoprojection dans un même plan. Cet enregistrement permet de conserver toutes les communications orales ainsi que les actions effectuées en parallèle (action virtuelle ou réelle). Ces vidéos sont exportées et séquencées *a fortiori* à l'aide du logiciel iMovie.

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

#### Visualisation

Cette expérimentation propose une tâche relativement similaire à la précédente expérimentation. La principale différence concerne la complexité des molécules puisque les molécules contiennent une centaine de résidus contrairement à la précédente expérimentation concernant des molécules d'une quinzaine de résidus. La molécule Prion est utilisée pour le scénario 1 (voir fi-



**Figure 5.1** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 5.2** – Photographie du dispositif expérimental

gure 5.3) ; la molécule Ubiquitin est utilisée pour le scénario 2 (voir figure 5.4 page ci-contre).



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

## Outils de manipulation

Cette expérimentation fait intervenir des quadrinômes. Cependant, c'est la  
5 première expérimentation pour laquelle aucun outil d'orientation de la mo-  
lécule n'est fourni aux sujets. En effet, étant donné les observations des pré-  
cédentes expérimentations, nous avons jugé que la présence de cet outil est  
générateur de conflits de coordination. Durant les précédentes expérimenta-  
tions, le nombre de conflits de coordination était relativement limités car ils  
10 ne concernaient que des binômes. Avec des quadrinôme, un tel outil pourrait  
produire beaucoup plus de chaos, ce que nous souhaitons éviter.

En ce qui concerne les outils de déformation, ce sont exactement les mêmes  
que dans la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 88). Chaque  
résidu qu'un sujet sélectionne est mis en surbrillance à la fois sur la molécule  
15 déformable et sur la molécule modèle.





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

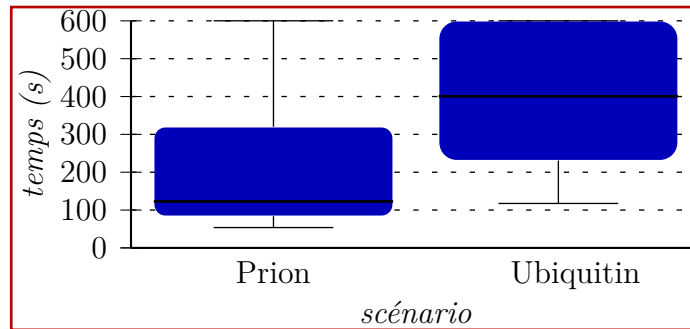
**Table 5.1** – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation d'une molécule en groupe			
Hypothèses	$\mathcal{H}_1$	Amélioration des performances en quadrinôme		
	$\mathcal{H}_2$	Émergence de meneur dans le quadrinôme		
	$\mathcal{H}_3$	Le <i>brainstorming</i> structure le quadrinôme		
Variables indépendantes	$\mathcal{V}_{i1}$	Nombre de sujets		
	$\mathcal{V}_{i2}$	Complexité de la tâche		
	$\mathcal{V}_{i3}$	Temps alloué pour le <i>brainstorming</i>		
Variables dépendantes	$\mathcal{V}_{d1}$	Temps de réalisation		
	$\mathcal{V}_{d2}$	Fréquence des sélections		
	$\mathcal{V}_{d3}$	Vitesse moyenne		
	$\mathcal{V}_{d4}$	Force moyenne appliquée par les sujets		
	$\mathcal{V}_{d5}$	Communications verbales		
Condition $\mathcal{C}_1$	Condition $\mathcal{C}_2$	Condition $\mathcal{C}_3$	Condition $\mathcal{C}_4$	
2 sujets	2 sujets	4 sujets	4 sujets	
Bimanuel	Bimanuel	Monomanuel	Monomanuel	
Pas de <i>brainstorming</i>	1 mn de <i>brainstorming</i>	Pas de <i>brainstorming</i>	1 mn de <i>brainstorming</i>	
Scénario 1	Scénario 1	Scénario 1	Scénario 1	
Scénario 2	Scénario 2	Scénario 2	Scénario 2	

## 5.4 Résultats

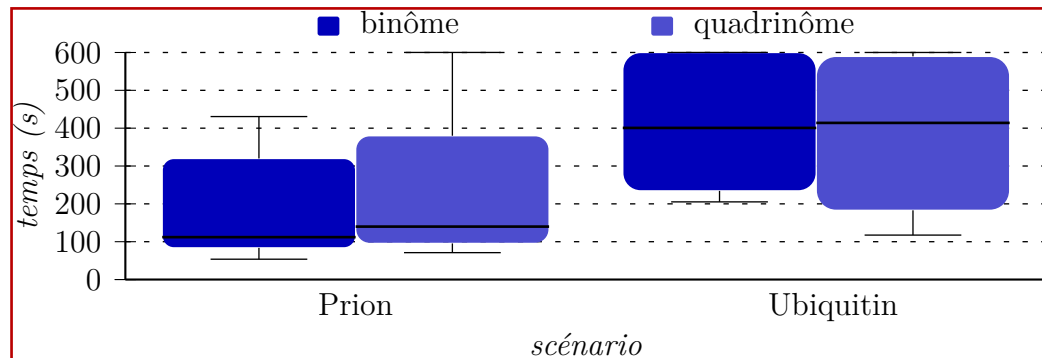
### 5.4.1 Amélioration des performances

#### Données et tests statistiques



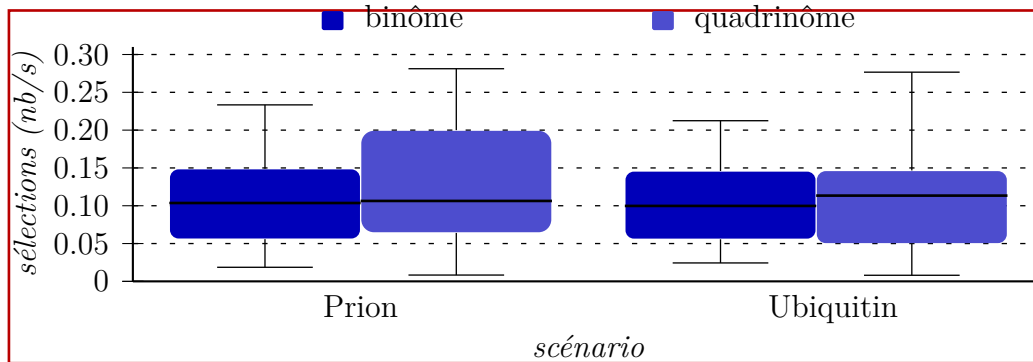
**Figure 5.5** – Temps de réalisation des scénarios

- La figure 5.5 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque scénario  $\mathcal{V}_{i2}$ .  
5 L'analyse montre un effet significatif des scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 33.3$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).



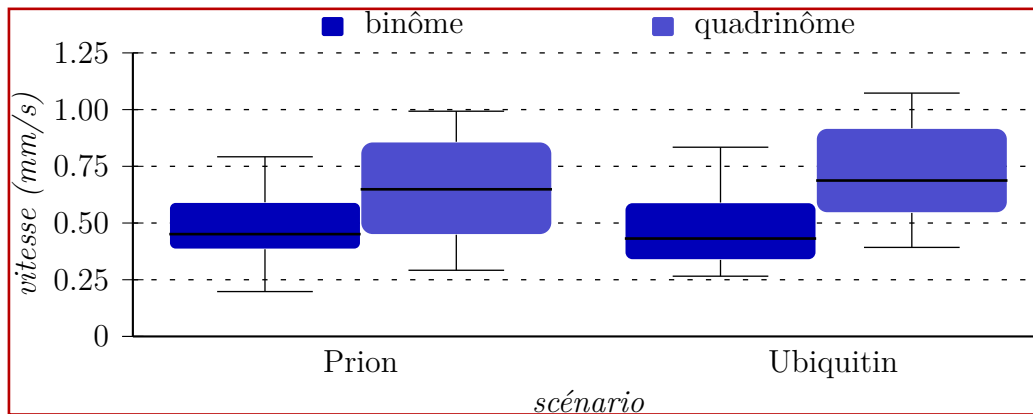
**Figure 5.6** – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

- La figure 5.6 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque scénario  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de la molécule Prion ( $\chi^2 = 0$ ,  $df = 1$ ,  $p = 1$ ). De la même façon, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de la molécule Ubiquitin ( $\chi^2 = 2$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.157$ ).  
10



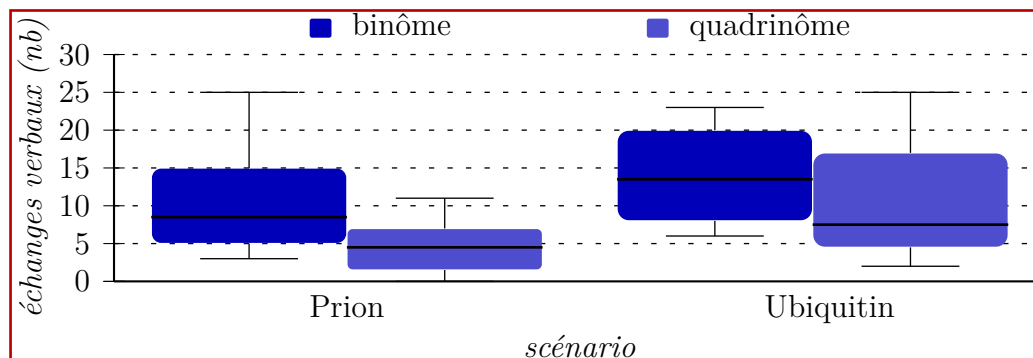
**Figure 5.7** – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.7 présente la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  de chaque scénario  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  de la molécule Prion ( $\chi^2 = 1.6$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.209$ ). De la même façon, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  de la molécule Ubiquitin ( $\chi^2 = 0.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.724$ ).



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

La figure 5.8 présente la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d3}$  de chaque scénario  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d3}$  de la molécule Prion ( $\chi^2 = 4.5$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.034$ ). De la même façon, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d3}$  de la molécule Ubiquitin ( $\chi^2 = 8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.005$ ).



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

La figure 5.9 présente le nombre d’échanges verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  de chaque scénario  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L’analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre d’échanges verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  de la molécule Prion ( $\chi^2 = 11.8$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre d’échanges verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  de la molécule Ubiquitin ( $\chi^2 = 4.3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.039$ ).

## Analyse et discussion

Les deux tâches proposées sont de natures très différentes. Malgré l’apprentissage, la figure 5.5 page 118 montre que la molécule Ubiquitin a été la plus longue à réaliser : la tâche collaborative étroitement couplée est plus complexe que la tâche faiblement couplée. Pourtant, les molécules n’ont pas été alternées lors de la procédure expérimentale (voir section B.3.4 page 203) : c’est toujours la molécule Prion qui a été présentée en premier aux sujets. De plus, de nombreux groupes ont atteint la limite de 10 mn lors de la réalisation du scénario 2 (Ubiquitin). Nous pouvons en déduire que la collaboration étroitement couplée est plus complexe à appréhender par les sujets.

L’étude précédente présentée dans le chapitre 3 page 49 a montré que les performances sont meilleures lorsque les ressources disponibles (outils de manipulation) sont partagés entre plusieurs utilisateurs. Cependant, cette étude compare deux configurations collaboratives. On constate d’après la figure 5.6 page 118 que les quadrinômes obtiennent des performances identiques aux binômes, quel que soit le scénario. D’ailleurs, les binômes et les quadrinômes ont également effectué des fréquences de sélections similaires ce qui confirme ce résultat (voir figure 5.7 page précédente).

Pourtant, la figure 5.8 page 119 montre des différences significatives entre les binômes et les quadrinômes concernant la vitesse moyenne des effecteurs terminaux. L'étude exposée par ROETHLISBERGER *et al.* [1939] a mis en évidence le phénomène de facilitation sociale : les utilisateurs se motivent  
5 entre eux pour réaliser la tâche. Ceci permet aux quadrinômes d'obtenir une activité intense avec peu de phases de relâchement durant la réalisation de la tâche. La vitesse moyenne est ainsi augmentée de manière significative chez les quadrinômes.

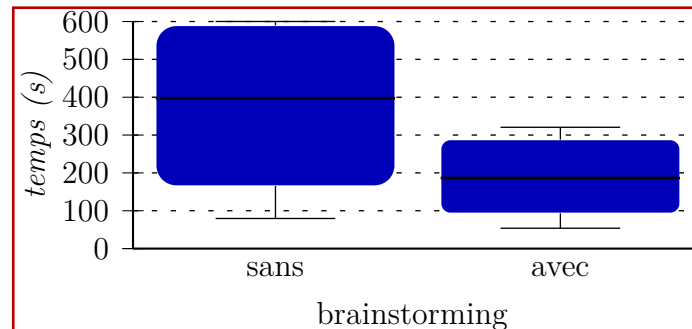
Dans l'étude précédente, nous avons également mis en évidence la présence  
10 de conflits de coordination chez les binômes. Ces conflits de coordination entravent la progression de la tâche. Cependant, nous avons constaté que les sujets parviennent à résoudre ces conflits grâce à la communication verbale. Dans cette troisième expérimentation, la figure 5.9 page précédente montre que le nombre d'échanges verbaux en quadrinôme est inférieur à celui en bi-  
15 nôme. Ce résultat est surprenant étant donné que le nombre d'interactions possibles entre les sujets (et donc les conflits de coordination) sont plus nombreux chez les quadrinômes. En effet, un conflit de coordination intervient lorsqu'au moins deux collaborateurs manipulent sur la même zone de travail. Les combinaisons de conflits dans un quadrinôme sont plus nombreuses que  
20 dans un binôme.

Il semble que la différence entre un binôme et un groupe restreint influe sur la manière de communiquer. À partir d'observations effectuées durant la phase expérimentale, nous avons pu constater que certains sujets se montraient relativement silencieux, même en situation de conflit de coordination. Nous  
25 verrons dans la section 5.4.3 page 126 que la présence d'un meneur dans un groupe perturbe la communication verbale au sein d'un groupe. En l'occurrence, le meneur a tendance à monopoliser la parole et à gérer les conflits de coordination.

Dans cette section, nous n'avons constaté aucune évolution des performances  
30 entre les binômes et les quadrinômes. Cependant, malgré un nombre potentiel de conflits de coordination important et une communication verbale faible, les quadrinômes obtiennent des performances similaires aux binômes. L'augmentation de la vitesse moyenne, provoquée par le phénomène de facilitation sociale déjà remarqué par ROETHLISBERGER *et al.* [1939], permet d'expli-  
35 quer ces performances. En effet, la facilitation sociale permet de réduire les phases d'inaction en stimulant l'intérêt des sujets pour la tâche à réaliser. Afin d'améliorer les performances d'un quadrinôme, il faudrait faciliter les communications verbales pour une gestion optimale des conflits de coordination.

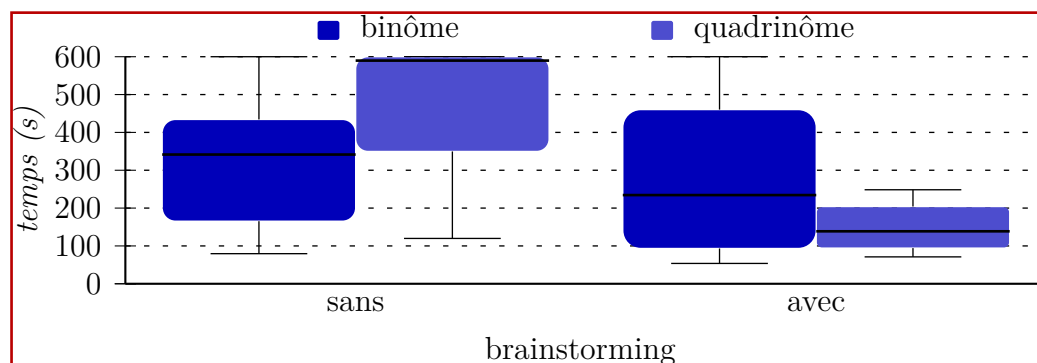
## 5.4.2 Utilité du *brainstorming* pour la collaboration

### Données et tests statistiques



**Figure 5.10** – Temps de réalisation avec ou sans *brainstorming*

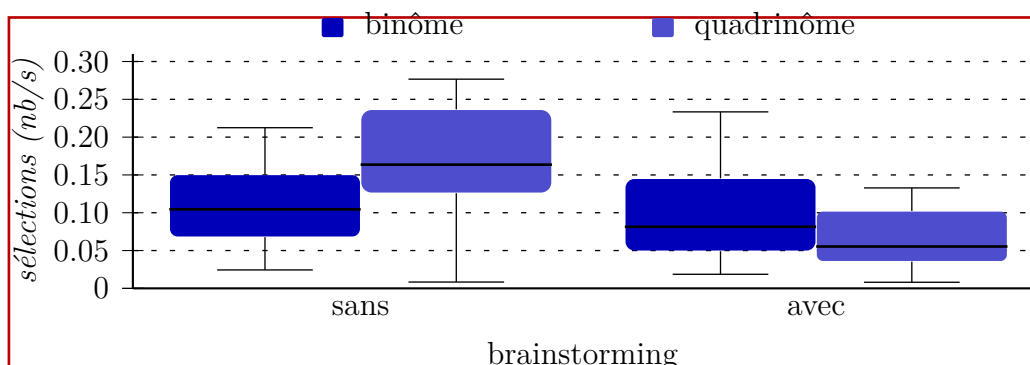
La figure 5.10 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$ . L'analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 11.2$ ,  $df = 1$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



**Figure 5.11** – Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

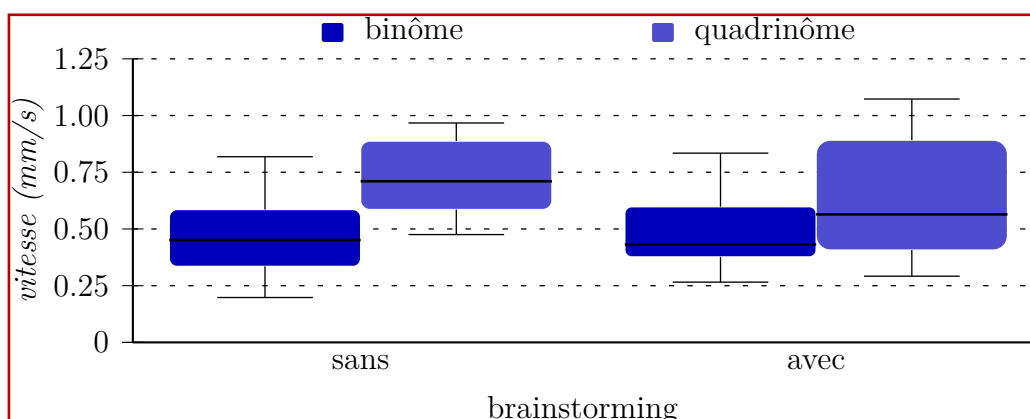
La figure 5.11 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le temps de réalisation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

La figure 5.12 page suivante présente la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ .



**Figure 5.12** – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

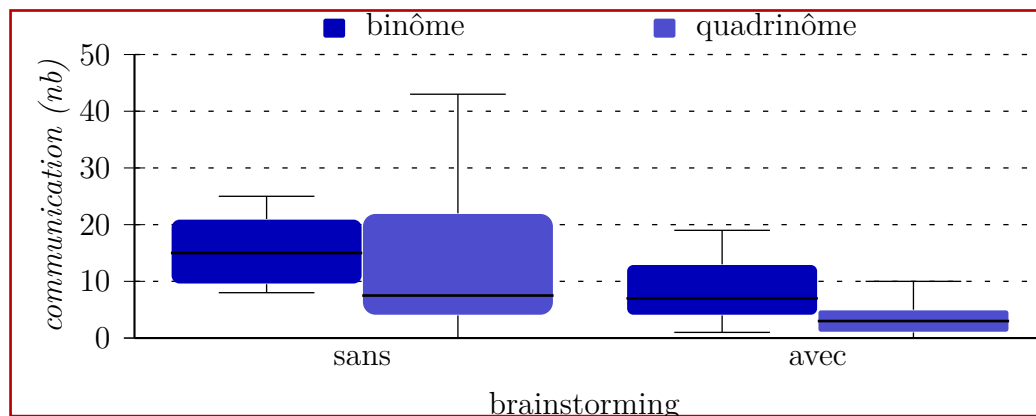
L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  des binômes ( $\chi^2 = 1.2$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.265$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  des quadrinômes ( $\chi^2 = 11$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).



**Figure 5.13** – Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

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

La figure 5.14 page suivante présente le nombre d'ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  pour les groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets



**Figure 5.14** – Nombre d’ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

$\mathcal{V}_{11}$ . L’analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le nombre d’ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des binômes ( $\chi^2 = 12.9$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le nombre d’ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des quadrinômes ( $\chi^2 = 4.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.042$ ).

## 5 Analyse et discussion

La figure 5.14 nous permet de constater une baisse significative du nombre d’échanges verbaux pour les sujets ayant eu une période de *brainstorming*. Le *brainstorming* permet une réflexion préalable sur la tâche afin d’aboutir à une stratégie de travail concernant différents éléments :

- répartition et distribution du travail ;
- organisation du travail dans l’espace ;
- organisation du travail dans le temps ;
- identification des rôles de chaque manipulateur ;
- prévisions sur l’évolution de l’environnement.

Cependant, la figure 5.11 page 122 et la figure 5.12 page précédente montrent que le *brainstorming* est seulement bénéfique pour les quadrinômes. En effet, les binômes n’obtiennent aucune évolution significative des performances avec ou sans *brainstorming*. De même, la figure 5.13 page précédente montre que la vitesse moyenne de l’effecteur terminal des binômes n’évolue pas. La configuration bimanuelle est certainement la raison de cette vitesse inférieure.

Le peu d’intérêt que présente le *brainstorming* pour les binômes s’explique par deux raisons. Le *brainstorming* étant utilisé pour définir une stratégie de travail, il permet de réduire le nombre de conflits de coordination. Le



nombre de conflit de coordination pour les binômes étant faible par rapport à celui des quadrinômes, l'intérêt du *brainstorming* est amoindri. De plus, nous avons vu que la gestion des conflits de coordination s'effectue par une communication verbale. La communication en binôme est relativement naturelle alors que la communication dans un groupe de plus de trois sujets s'avère plus compliquée : problème de prise de parole, conversation entre deux sujets monopolisant la parole, *etc.* La gestion des conflits de coordination est quasiment optimale pour les binômes, même sans *brainstorming*, ce qui n'est pas le cas pour les quadrinômes.

Cependant, la figure 5.11 page 122 et la figure 5.12 page 123 mettent en évidence l'amélioration des performances pour les quadrinômes. Nous avons vu dans la section 5.4.1 page 118 que les quadrinômes éprouvent des difficultés dans la résolution des conflits de coordination. D'après les figures observées, le *brainstorming* permet l'élaboration d'une stratégie et la définition des rôles de chacun des sujets. L'élaboration d'une stratégie réduit de façon importante le nombre de conflits de coordination pendant la réalisation de la tâche et ainsi améliore les performances. De plus, la mise en place de rôles pour chacun des sujets avant le début de la tâche permet de distribuer la tâche ou de l'organiser le cas échéant et ainsi d'éviter le phénomène de paresse sociale ce qui rejoint les conclusions faites par LATANÉ *et al.* [1979] sur l'identification des rôles.

Dans le cas de la molécule Prion, la tâche comporte un faible niveau d'interaction entre les zones à déformer ; elle peut aisément être divisée en quatre tâches élémentaires. D'ailleurs, l'analyse des communications verbales a montré que c'était la stratégie choisie par tous les groupes ayant effectué un *brainstorming*. La molécule Ubiquitin comportant un fort niveau d'interaction, nécessite plus de coordination mais peut être divisée en deux tâches élémentaires. Dans ce cas, le *brainstorming* aboutit à une scission du groupe en deux binômes qui réaliseront chacun une partie de la déformation. Ceci permet d'avoir des gestions de conflits de coordination locaux et restreint ainsi son effet au binôme concerné.

De plus, la période de *brainstorming* permet de partitionner le temps de réflexion et le temps de manipulation. En effet, l'analyse des communications verbales permet de constater que les groupes n'ayant pas eu de période de *brainstorming* ( $\mathcal{C}_1$  et  $\mathcal{C}_3$ ) tentent tout de même d'élaborer une stratégie de travail. Cependant, la manipulation crée une charge de travail cognitive importante. Les capacités cognitives des sujets sont alors partagées entre la manipulation et l'élaboration d'une stratégie. Les sujets ne sont pas pleinement attentifs à l'élaboration de la stratégie et peuvent en plus ne pas être attentifs en même temps que leurs collègues. La réflexion sur la meilleure

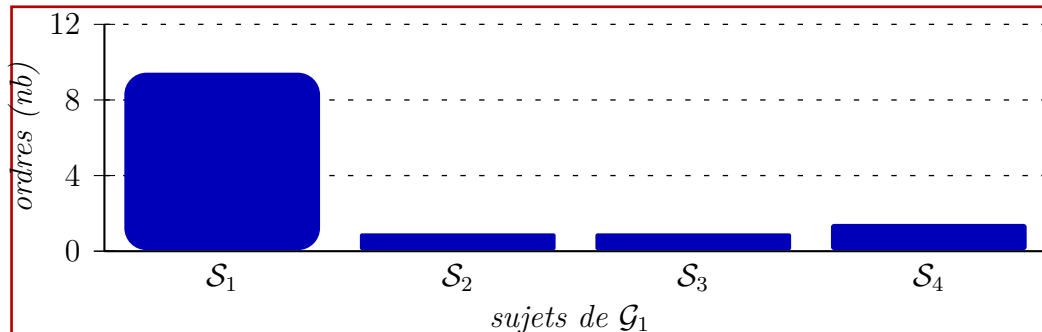
stratégie à choisir n'est donc pas optimale.

Cette section nous a permis de confirmer l'intérêt d'un *brainstorming* pour structurer les groupes : cette période n'est bénéfique que pour les quadri-nômes. En effet, elle permet d'éviter les problèmes de paresse sociale évoqués  
 5 par LATANÉ *et al.* [1979] en stimulant la création de rôles pour chaque manipulateur. Nous verrons dans la section suivante que le groupe va s'organiser autour d'un meneur et que les autres manipulateurs se placeront plutôt dans un rôle de suiveurs. L'émergence rapide d'un meneur va permettre au groupe de se structurer et d'avoir une répartition des tâches plus rapide.

### 10 5.4.3 Définition d'un meneur

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

### 15 Données et statistiques

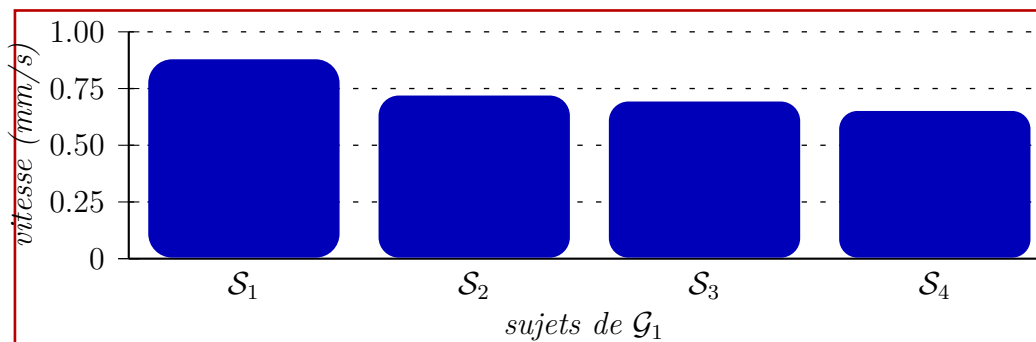


**Figure 5.15** – Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de  $\mathcal{G}_1$

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

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

La figure 5.17 page 128 présente les profils de force  $\mathcal{V}_{d4}$  des sujets  $S_1$  et  $S_2$  du groupe  $\mathcal{G}_1$ . Chaque période où la force est maintenue représente une sélection



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

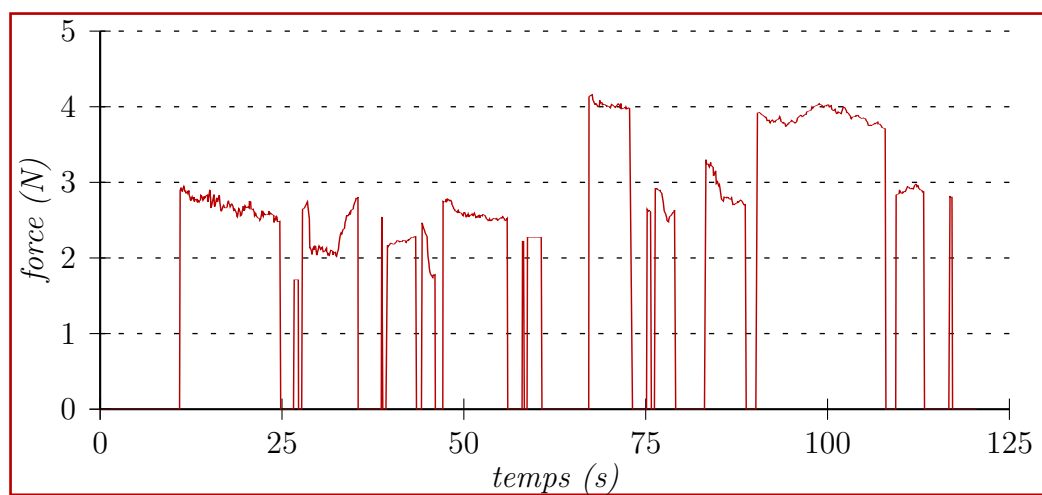
(voir figure 5.17b page suivante). On constate un profil très chaotique pour le sujet  $S_1$  avec un grand nombre de sélections (11 sélections). Par opposition, le profil du sujet  $S_2$  est très peu chaotique avec un petit nombre de sélections (4 sélections  $> 10$  s). De plus, les efforts maximaux produits par le sujet  $S_2$  sont plus importants que ceux du  $S_1$  (5 N pour  $S_2$  contre 4 N pour  $S_1$ ).

## Analyse et discussion

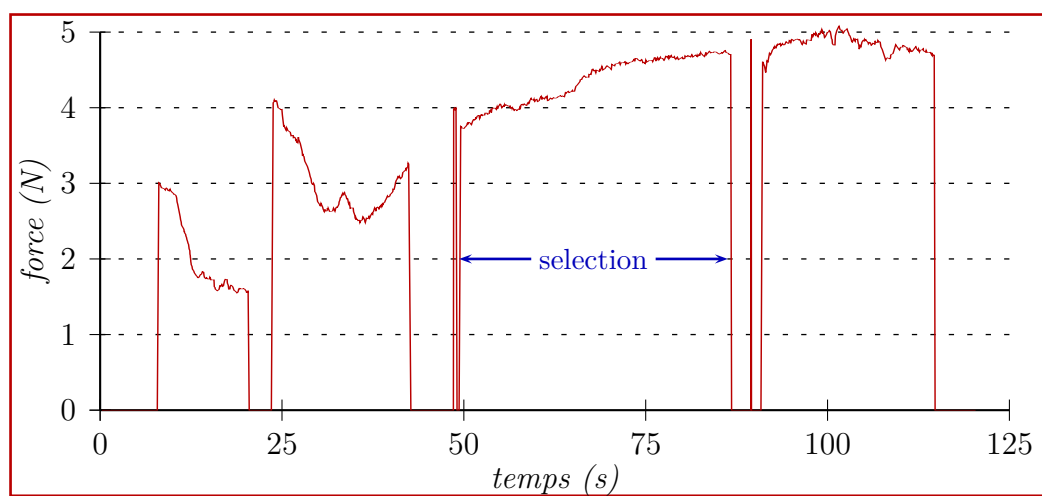
Le meneur est celui qui dirige les opérations. Cependant, les groupes de notre expérimentation sont des groupes sans hiérarchie : aucun chef ou meneur n'est prédéterminé. En effet, nos groupes sont des structures informelles dans lesquelles aucun rôle n'est prédéfini. Dans la précédente section, nous avons identifié l'émergence de rôles, en particulier au cours du *brainstorming*. Parmi les rôles, on distingue le rôle du meneur, déjà identifié dans les travaux de BALES [1950]. Nous allons à présent définir le rôle du meneur ainsi que les rôles de suiveurs.

La figure 5.16 et la figure 5.17a page suivante nous permet de déterminer la stratégie de travail du meneur. En effet, on constate un grand nombre de sélections ainsi qu'une vitesse élevée. Le meneur explore l'environnement pour prendre des décisions. Son exploration est constituée de sélections de courte période avec une force appliquée relativement faible. Ces nombreuses sélections ont pour objectif de consulter différentes zones de la molécule pour évaluer le travail restant. Il proposera à un autre sujet d'effectuer à sa place, les déformations qu'il aura jugé nécessaire.

Par opposition, les suiveurs n'explorent pas l'environnement. En effet, la figure 5.17b page suivante montre un nombre de sélections peu élevées mais des sélections maintenues sur une longue période de temps. Le suiveur accepte un



(a) Profil de force de  $S_1$



(b) Profil de force de  $S_2$

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

ordre du meneur et effectue la déformation jusqu'à atteindre l'objectif fixé. Les manipulations des suiveurs sont plutôt lentes car les déformations nécessitent de la précision dans la manipulation. De plus, l'effort déployé est plus important car toute l'attention du suiveur est portée sur la déformation. Le meneur ne déploie pas autant d'effort car il n'effectue pas les déformations.

Pour conclure cette section, le meneur a un rôle crucial dans la dynamique du groupe. C'est lui qui va définir et répartir les tâches : il élabore la stratégie du groupe. Cette répartition permet à chaque sujet de se faire attribuer une tâche bien identifiée. L'identification des rôles est nécessaire pour obtenir de bonnes performances et éviter le phénomène de paresse sociale (voir ?? page ??). Cependant, le meneur doit être accepté par les autres membres afin d'obtenir une bonne harmonie dans le groupe.

## 5.5 Synthèse

### 5.5.1 Résumé des résultats

Cette expérience a permis d'étudier et de comparer des binômes en configuration bimanuelle avec des quadrinômes en configuration monomanuelle. L'objectif était d'observer l'évolution des performances en fonction du nombre de participants ainsi que les nouvelles contraintes liées aux dynamiques de groupe.

Les résultats ont montré que l'augmentation du nombre de sujets ne permettait pas systématiquement d'améliorer les performances du groupe. En effet, les quadrinômes, bien que plus rapides dans leurs mouvements grâce au phénomène de facilitation sociale, obtiennent des performances identiques aux binômes. Les quadrinômes perdent du temps dans la résolution des conflits de coordination qui sont plus nombreux que chez les binômes.

Cependant, une analyse basée sur la possibilité d'établir une stratégie de travail au préalable a permis d'approfondir cette conclusion. Le *brainstorming* permet une organisation préalable du groupe permettant de meilleures performances tout en réduisant le nombre de conflits de coordination. L'élaboration d'une stratégie de travail est surtout bénéfique pour les quadrinômes qui sont confrontés à de nombreux conflits de coordination en temps normal.

De plus, ce *brainstorming* permet de faire émerger les rôles rapidement au sein de cette structure informelle. L'émergence d'un meneur est nécessaire pour organiser le groupe, diviser le travail et répartir les tâches. D'un autre côté, les suiveurs acceptent la présence de ce meneur et l'assistent dans la

réalisation de la tâche. Le meneur va se distinguer par une exploration plus large et plus rapide de l'environnement afin d'avoir une vision globale de la tâche à réaliser. Les suiveurs effectuent plutôt des déformations longues et locales.

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

### 5.5.2 Conclusion

Nous venons de montrer l'intérêt d'avoir un groupe structuré lorsque le nombre de participants excède deux. Notre prochaine et dernière expérimentation aura pour objectif de tester la plate-forme avec des experts de la  
15 déformation moléculaire. Pour cela, nous allons leur fournir des outils haptiques permettant de faciliter le travail collaboratif.

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

- 20 Cependant, la manière de travailler du meneur est très différente de celle d'un suiveur. Des outils haptiques adaptés aux besoins de chacun seront donc proposés afin d'améliorer leur possibilités d'interactions. En l'occurrence, le meneur n'effectue pas réellement de déformation, il semble donc peu nécessaire de lui donner la possibilité de le faire. Ainsi, on le libère d'une partie de  
25 sa charge cognitive pour le focaliser sur son rôle de meneur.

En ce qui concerne le suiveur, il est affecté à la déformation. Il est particulièrement occupé à effectuer des déformations de façon locale. Il faut donc lui laisser la possibilité d'effectuer des déformations locales et précises. Cependant, il faut également lui faciliter la communication avec le meneur et lui  
30 rendant accessible les consignes rapidement. Le meneur ayant une vision plus globale de la tâche à réaliser, il peut être justifié de donner ponctuellement des outils de déformation plus grossier.

La majorité de ces outils seront implémentés dans la dernière version de la plate-forme afin d'effectuer une expérimentation avec des experts de la déformation moléculaire. Ces outils seront évalués à la fois en terme d'amélioration  
35 sur les performances mais également en terme d'utilisabilité. Le chapitre 6 page suivante décrit ces nouveaux outils et l'ensemble de l'expérimentation.

# Travail collaboratif assisté par haptique

## Sommaire

5	<b>6.1</b>	<b>Introduction . . . . .</b>	<b>132</b>
	<b>6.2</b>	<b>Assistance haptique pour la communication . .</b>	<b>132</b>
	<b>6.3</b>	<b>Présentation de l'expérimentation . . . . .</b>	<b>132</b>
	6.3.1	Description de la tâche . . . . .	132
10	6.3.2	Spécificités du protocole expérimental . . . . .	135
	<b>6.4</b>	<b>Résultats . . . . .</b>	<b>140</b>
	6.4.1	Amélioration des performances . . . . .	140
	6.4.2	Amélioration de la communication . . . . .	143
	<b>6.5</b>	<b>Synthèse . . . . .</b>	<b>145</b>
15	6.5.1	Résumé des résultats . . . . .	145
	6.5.2	Conclusion . . . . .	145

## 6.1 Introduction

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

Le second facteur concernera l'évaluation qualitative du système par les utilisateurs. Il est primordial de recueillir l'avis des utilisateurs en ce qui concerne une plate-forme de travail. Des outils haptiques inconfortables, des détails visuels incohérents, des interactions peu intuitives sont autant de paramètres qui peuvent rendre un système inefficace.

## 6.2 Assistance haptique pour la communication

## 6.3 Présentation de l'expérimentation

### 6.3.1 Description de la tâche

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

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

**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.

---

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



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

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

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

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

## Description des outils

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

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

**Outil de déformation** Un outil de déformation au niveau atomique est fourni aux deux opérateurs présents lors de l'expérimentation. Nous souhaitons donné la possibilité au coordinateur d'indiqué rapidement qu'une

---

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

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

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

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

- 1 PHANTOM Omni® est l'outil de désignation destiné au coordinateur ;
- 2 PHANTOM Omni® sont les outils de déformation destinés aux opérateurs ;
- 1 PHANTOM Desktop® est l'outil de manipulation destiné au coordinateur.

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

## Description de la tâche

Le visuel est identique à la tâche présentée pour la troisième expérimentation (voir section 5.3.2 page 114). En effet, la molécule est représentée en CPK et *NewRibbon*. La molécule cible est représentée en *NewRibbon* transparent.

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

**Scénario 2** La seconde tâche consiste à reconstituer le complexe de molécules NUSE:NUSG. En effet, la molécule NUSG est laissée complètement libre et doit être amarrée à la molécule NUSE : c'est une tâche de *do-*  
15 *cking* moléculaire simplifié. On distingue deux phases dans cette tâche ; il faut approcher la molécule NUSG puis il faut affiner l'amarrage par une déformation interne de NUSG. Tous les outils (désignation, déformation et manipulation) sont proposés dans ce scénario ; la molécule NUSG est attachée à l'outil de manipulation et l'ensemble des atomes  
20 de la chaîne carbonée principale de la molécule NUSE sont fixes afin d'éviter que la molécule ne dérive.

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

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

Afin de réaliser la tâche, différentes mesures sont disponibles en temps-réel  
30 pour les sujets. La première de ces mesures est le score RMSD qui est décrit dans la section 4.3.1 page 80. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par NAMD et représentant une synthèse des énergies électriques et des énergies de VAN DER WAALS.

## 6.3.2 Spécificités du protocole expérimental

35 Les sections suivantes décrivent l'ensemble des modifications apportées à la plate-forme de base (voir chapitre A page 187) et principalement aux outils.

La méthode expérimentale est exposée dans la section B.4 page 204. Un résumé de cette méthode se trouve dans la table 6.1 page 140.

## Matériel

Dans cet quatrième et dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils destinés à améliorer les interactions entre les membres d'un trinôme. Deux sujets auront toujours à leur disposition deux outils de déformation adaptés pour le processus de désignation (voir section 6.3.2 page suivante). Le troisième sujet aura à sa disposition trois outils dont deux basés sur une interface haptique. Les deux interfaces haptiques utilisées sont un PHANTOM Omni® et un PHANTOM Desktop®, tous deux associés à une machine de faible puissance pour le serveur VRPN. De plus, ce troisième sujet aura accès à un outil de manipulation. En effet, bien que les outils d'orientation soient générateurs de conflits de coordination, il s'est avéré au cours de la troisième expérimentation que certaines situations requièrent un tel outil. Durant la première expérimentation, une interface haptique avait été utilisé mais n'était pas vraiment adaptée pour cette fonctionnalité. Au cours de la seconde expérimentation, c'est une souris 3D qui a remplacé l'interface haptique. Bien que cet outil soit très adapté pour cette fonctionnalité, il est relativement complexe à prendre en main et nécessite un apprentissage. Cet apprentissage n'est pas acceptable durant un processus expérimental d'environ une heure. C'est donc une simple souris USB qui a été choisi comme outil de manipulation : il est un peu moins adapté pour l'orientation d'une molécule qu'une souris 3D mais est nettement plus intuitif pour la plupart des sujets qui sont habitués à manipuler ce type de périphérique.

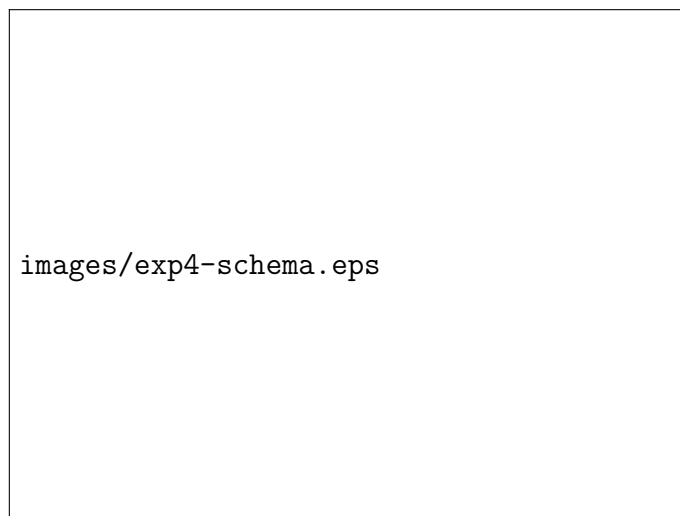
De la même manière que dans la troisième expérimentation, une caméra vidéo SONY® (HDR-CX550) a été installée derrière les sujets afin de filmer à la fois les sujets et l'écran de vidéoprojection. Le son est également capté par la caméra. Là encore, les vidéos sont exportées et séquencées *a fortiori*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

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

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

## Visualisation

Dans cette quatrième et dernière expérimentation, les molécules étant très importantes, surtout pour le complexe de molécules NUSE:NUSG, nous avons



**Figure 6.1** – Schéma du dispositif expérimental

**Figure 6.2** – Photographie du dispositif expérimental

décidé de donner un rendu secondaire aux atomes. En effet, ils sont à présents rendus de manière transparente. Cependant, nous verrons dans la section suivante que le coordinateur aura la possibilité de colorer les résidus au besoin. Pour le reste, le rendu visuel est similaire à celui des expérimentations trois et

5 quatre. La figure 6.3 page suivante représente la molécule Ubiquitin et la figure 6.4 page suivante représente le complexe de molécules NUSE:NUSG.

## Outils de manipulation

Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont


10 l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation par molécule que nous nommerons outil de manipulation<sup>3</sup>. Ces outils sont décrits dans la section 2.4.3 page 45.

**Outil de désignation** Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un

15


---

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



images/exp4-scenario1.eps

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



images/exp4-scenario2.eps

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

moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur désigne une cible. Le coordinateur est renseigné sur l'acceptation de cette désignation par l'arrêt de cette vibration. De plus, tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

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

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

**Outil d'orientation** Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. La souris est donc le troisième périphérique destiné au coordinateur. Le choix de surcharger le coordinateur est délibéré afin de limiter au maximum les manipulations à la souris. En effet, la modification de l'orientation de la molécule ne modifie pas la position

des curseurs qui se trouvent dans un référentiel différent. En d’autres termes, la rotation de la molécule va perturber les opérateurs qui sont en train d’effectuer des déformations en modifiant la position des atomes. En mettant à disposition la souris comme troisième outil pour le coordinateur, l’objectif est qu’elle soit peu utilisée, seulement lorsque c’est réellement nécessaire.

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

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

5

## 6.4 Résultats

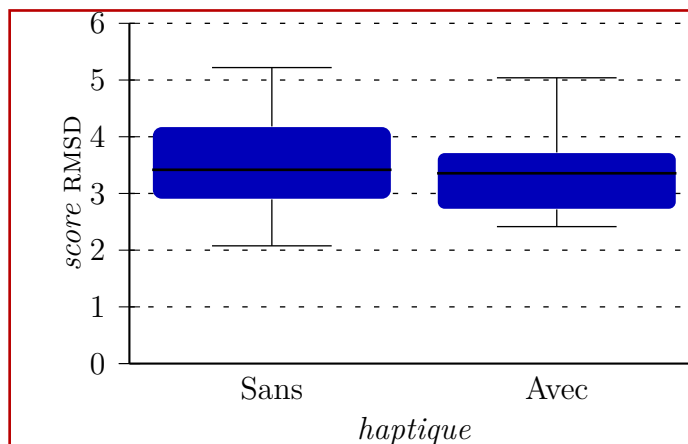
Cette section présente et analyse l’ensemble des mesures expérimentales de cette quatrième étude. Les données ont été confrontées au test des rangs signés [WILCOXON 1945].

### 10 6.4.1 Amélioration des performances

#### Données et tests statistiques

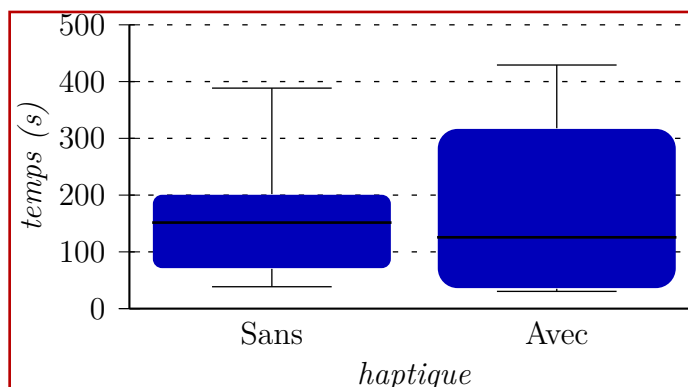
La figure 6.5 page suivante présente le score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d1}$  avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$ . L’analyse montre qu’il n’y a pas d’effet significatif de





**Figure 6.5** – Score RMSD minimum atteint avec et sans haptique

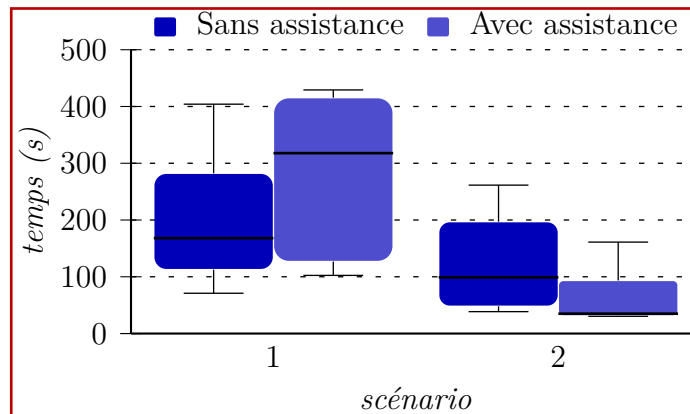
la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $W = 87$ ,  $p = 0.348$ ).



**Figure 6.6** – Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique

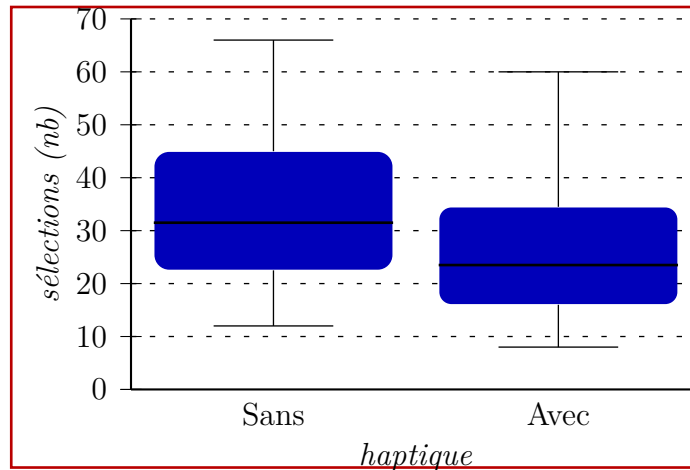
La figure 6.6 présente le temps du score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d2}$  avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif de la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps du score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d2}$  ( $W = 81$ ,  $p = 0.528$ ).

La figure 6.7 page suivante présente le temps du score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d2}$  avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  pour chaque scénario. L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif de la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps du score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d2}$  pour la molécule Ubiquitin ( $W = 13$ ,  $p = 0.547$ ). L'analyse montre un effet significatif de la présence



**Figure 6.7** – Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario

d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps du score RMSD minimum atteint  $\mathcal{V}_{d2}$  pour le complexe de molécules NUSE:NusG ( $W = 36$ ,  $p = 0.008$ ).



**Figure 6.8** – Nombre de sélections par les opérateurs avec et sans haptique

La figure 6.8 présente le nombre de sélections effectuées par les opérateurs pour une déformation  $\mathcal{V}_{d3}$  avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre un effet significatif de la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d3}$  ( $W = 333$ ,  $p = 0.013$ ).

## Analyse et discussion

En observant le meilleur score RMSD obtenu par les participants avec et sans haptique, on constate qu'il n'y a pas d'amélioration significative des performances (voir figure 6.5 page 141). L'assistance haptique proposée ne  
5 semble pas permettre d'améliorer la collaboration entre les sujets. D'ailleurs, ni le score RMSD, ni le temps pour atteindre ce score n'est amélioré avec les outils d'assistance haptique à la communication proposés (voir figure 6.6 page 141).

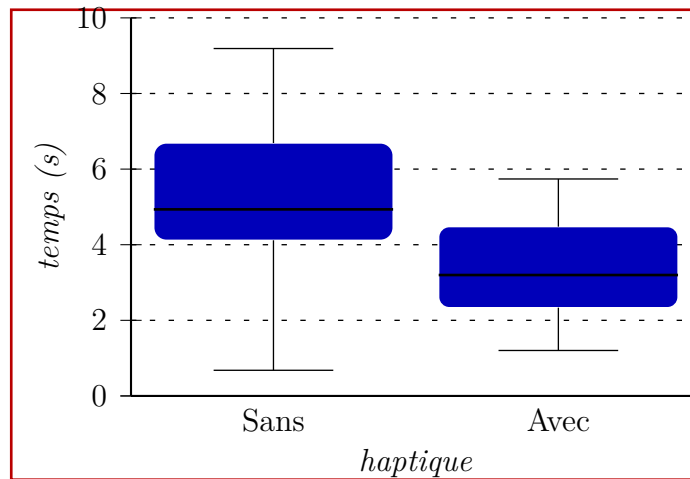
Pourtant, si on effectue une observation détaillée en fonction des tâches pro-  
10 posées, on constate que sur le complexe de molécules NUSE:NUSG, les outils d'assistance permettent d'améliorer significativement les performances. En ce qui concerne le scénario 1 (molécule Ubiquitin), aucune évolution n'est observée. Le complexe de molécules NUSE:NUSG (scénario 2) reste clairement la tâche la plus complexe à réaliser de part le nombre de résidus à déformer et  
15 part la taille globale des deux molécules en présence. D'ailleurs, les annotations vidéos ont permis de constater à plusieurs reprises une sorte d'abandon face à la complexité de la tâche. Cependant, il semble que la présence d'outils d'assistance à la communication a permis d'améliorer significativement les performances globales.

### 6.4.2 Amélioration de la communication

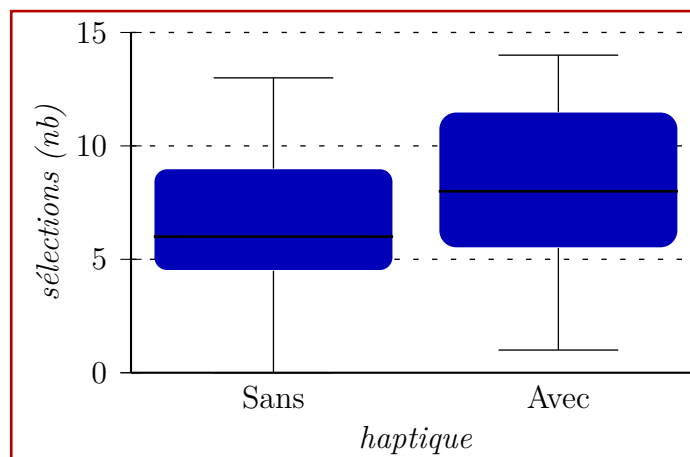
#### Données et tests statistiques

La figure 6.9 page suivante présente le temps moyen mis par un opérateur pour accepter une désignation avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre un effet significatif de la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur ce temps  
25 moyen ( $W = 408$ ,  $p = 0.006$ ).

La figure 6.10 page suivante présente le nombre de sélections au cours du processus de désignation avec et sans haptique  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre un effet significatif de la présence d'une assistance haptique  $\mathcal{V}_{i1}$  sur ce nombre de sélections ( $W = 87$ ,  $p = 0.005$ ).



**Figure 6.9** – Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique



**Figure 6.10** – Nombre de sélection au cours du processus de désignation avec et sans haptique

**Analyse et discussion**

## **6.5 Synthèse**

### **6.5.1 Résumé des résultats**

### **6.5.2 Conclusion**



## **Conclusion et perspectives**





# Bibliographie

[ABAGYAN et TOTROV 1994]

ABAGYAN, Ruben et Maxim TOTROV (jan. 1994). « Biased probability Monte Carlo conformational searches and electrostatic calculations for peptides and proteins ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 235.3, pages 983–1002 (cf. page 9).

[ABAGYAN *et al.* 1994]

ABAGYAN, Ruben, Maxim TOTROV et Dmitry KUZNETSOV (mai 1994). « ICM - a new method for protein modeling and design : applications to docking and structure prediction from the distorted native conformation ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 15.5, pages 488–506. ISSN : 0192-8651 (cf. page 9).

[ALLPORT 1924]

ALLPORT, Floyd H. (1924). *Social psychology*. Anglais. Boston, MA, USA : Houghton Mifflin (cf. page 18).

[ALTHOFF *et al.* 2007a]

ALTHOFF, Klaus-Dieter, Meike REICHLE, Kerstin BACH, Alexandre HANFT et Regis NEWO (déc. 2007a). « Agent based maintenance for modularised case bases in collaborative multi-expert systems ». Anglais. Dans *Proceedings of Artificial Intelligence, 12th UK Workshop on Case-Based Reasoning*. AI, pages 7–18 (cf. page 24).

[ALTHOFF *et al.* 2007b]

ALTHOFF, Klaus-Dieter, Kerstin BACH, Jan-Oliver DEUTSCH, Alexandre HANFT, Jens MÄNZ, Thomas MÜLLER, Regis NEWO, Meike REICHLE, Martin SCHAAF et Karl-Heinz WEIS (sept. 2007b). « Collaborative Multi-Expert-Systems – Realizing knowledge-product-lines with case factories and distributed learning systems ». Anglais. Dans *Proceedings on the 3rd Workshop on Knowledge Engineering and Software Engineering (KESE 2007)*. Sous la direction de Joachim BAUMEISTER et Dietmar SEIPEL. KESE. Osnabrück (cf. page 24).

[JMOL 2011]

JMOL. JMOL : *an open-source Java viewer for chemical structures in 3D*.  
Anglais. Sourceforge.net. URL : <http://www.jmol.org/> (visité le 3 juin  
2011) (cf. page 40).

5 [ARUNAN *et al.* 2011]

ARUNAN, Elangannan, Gautam R. DESIRAJU, Roger A. KLEIN, Joanna  
SADLEJ, Steve SCHEINER, Ibon ALKORTA, David C. CLARY, Robert H.  
CRABTREE, Joseph J. DANNENBERG, Pavel HOBZA, Henrik G. KJAER-  
GAARD, Anthony C. LEGON, Benedetta MENNUCCI et David J. NESBITT  
10 (juil. 2011). « Definition of the hydrogen bond (IUPAC recommendations  
2011) ». Anglais. Dans *Pure and applied chemistry* 83.8, pages 1637–1641  
(cf. page 6).

[BACH *et al.* 2010]

BACH, Kerstin, Meike REICHLE et Klaus-Dieter ALTHOFF (2010). An-  
glais. Dans BICHINDARITZ, Isabelle, Lakhmi C. JAIN, Sachin VAIDYA  
15 et Ashlesha JAIN. *Computational intelligence in healthcare 4 : advanced  
methodologies*. Tome 4. Studies in Computational Intelligence. Springer.  
Chapitre 9. ISBN : 978-3642144639 (cf. page 25).

[BAKER *et al.* 1999]

20 BAKER, Michael, Tia HANSEN, Richard JOINER et David R. TRAUM  
(jan. 1999). « The role of grounding in collaborative learning tasks ». Anglais.  
Dans DILLENBOURG, Pierre. *Collaborative learning : cognitive  
and computational approaches*. 2<sup>e</sup> édition. Advances in learning and  
instruction series. Elsevier Science / Pergamon. Chapitre 3, pages 129–  
25 147. ISBN : 978-0080430737 (cf. page 27).

[BALES 1950]

BALES, Robert F. (1950). *Interaction process analysis : a method for the  
study of small groups*. Anglais. Addison-Wesley (cf. pages 110–112,  
127, 201).

30 [BANDURA 1986]

BANDURA, Albert (1986). *Social foundations of thought and action : a  
social cognitive theory*. Anglais. Prentice-Hall series in social learning  
theory. Prentice-Hall. ISBN : 0-13-815614-X (cf. page 15).

[BARBIČ et D. L. JAMES 2007]

35 BARBIČ, Jernej et Doug L. JAMES (août 2007). « Time-critical distri-  
buted contact for 6-DoF haptic rendering of adaptively sampled reduced  
deformable models ». Anglais. Dans *Eurographics Symposium on Com-  
puter Animation*. SIGGRAPH. San Diego, CA, USA : Eurographics  
Association, pages 171–180. ISBN : 978-1-59593-624-4 (cf. page 25).

[BATTER et BROOKS JR. 1972]

BATTER, James J. et Frederick P. BROOKS JR. (1972). « GROPE-1 : a computer display to the sense of feel ». Anglais. Dans *International Federation for Information Processing Congress*. IFIP '71. North-Holland, pages 759–763 (cf. page 9).

[BAUGH *et al.* 2011]

BAUGH, Evan H., Sergey LYSKOV, Brian D. WEITZNER et Jeffrey J. GRAY (août 2011). « Real-time PyMOL visualization for Rosetta and PyRosetta ». Anglais. Dans *PLoS ONE* 6.8, e21931 (cf. page 40).

10 [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. pages 10, 42).

15 [BERGMAN *et al.* 1993]

BERGMAN, Lawrence D., Jane S. RICHARDSON, David C. RICHARDSON et Frederick P. BROOKS Jr. (1993). « VIEW - an exploratory molecular visualization system with user-definable interaction sequences ». Anglais. Dans *Proceedings of the 20th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. SIGGRAPH '93. Anaheim, CA : ACM, pages 117–126. ISBN : 0-89791-601-8 (cf. page 10).

[BETBEDER et TCHOUNIKINE 2004]

BETBEDER, Marie-Laure et Pierre TCHOUNIKINE (jan. 2004). « Modélisation et perception de l'activité dans l'environnement Symba ». Dans *Actes de RFIA'04*. Toulouse, France, pages 1217–1225 (cf. page 29).

[BIVALL PERSSON 2008]

BIVALL PERSSON, Petter (nov. 2008). « Learning molecular interaction concepts through haptic protein visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of Svenska föreningen för grafisk databehandling*. SIGRAD 2008. Linköping University Electronic Press, pages 17–19 (cf. page 12).

[BIVALL PERSSON *et al.* 2007]

BIVALL PERSSON, Petter, Matthew COOPER, Lena TIBELL, Shaaron AINSWORTH, Anders YNNERMAN et Bengt-Harald JONSSON (mar. 2007). « Designing and evaluating a haptic system for biomolecular education ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference 2007*. IEEE Computer Society Press, pages 171–178. ISBN : 1-4244-0905-5 (cf. page 12).

[BLALOCK et SMITH 1984]

BLALOCK, J. Edwin et Eric M. SMITH (mai 1984). « Hydropathic anti-complementarity of amino acids based on the genetic code ». Anglais. Dans *Biochemical and Biophysical Research Communications* 121.1, pages 203–207. ISSN : 0006-291X (cf. page 6).

[BOWMAN 1999]

BOWMAN, Douglas A. (juin 1999). « Interaction techniques for common tasks in immersive virtual environments : design, evaluation, and application ». Anglais. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia Institute of Technology (cf. pages 50, 55).

[BROOKE 1996]

BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall MCCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. pages 184, 204, 206, 217).

[B. R. 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 44).

[BROOKS JR. *et al.* 1990]

BROOKS JR., Frederick P., Ouh-Young MING, James J. BATTER et Jerome P. KILPATRICK (1990). « Project GROPEHaptic displays for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 17th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. Dallas, TX, USA : ACM, pages 177–185. ISBN : 0-89791-344-2 (cf. page 10).

[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. pages 60, 90).

[BRUCE 2006]

BRUCE, Kyle (2006). « Henry S. Dennison, Elton Mayo, and human relations historiography ». Anglais. Dans *Management and Organizational History* 1.2, pages 177–199 (cf. page 111).

[BUISINE *et al.* 2011]

BUISINE, Stéphanie, Guillaume BESACIER, Améziane AOUSSAT et Frédéric VERNIER (2011). « How do interactive tabletop systems influence collaboration ? » Anglais. Dans *Computers in Human Behavior*. En cours d'impression. ISSN : 0747-5632. DOI : 10.1016/j.chb.2011.08.010 (cf. pages 22, 24).

[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 complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. pages 133, 189).

[CAHOUR et PENTIMALLI 2005]

CAHOUR, Béatrice et Barbara PENTIMALLI (avr. 2005). « Conscience périphérique et travail coopératif dans un café-restaurant ». Dans *Activités* 2.1, pages 23–47 (cf. page 30).

[CASE *et al.* 2005]

CASE, David A., Thomas E. CHEATHAM, Tom DARDEN, Holger GOHLKE, Ray LUO, Kenneth M. MERZ, Alexey ONUFRIEV, Carlos SIMMERLING, Bing WANG et Robert J. WOODS (déc. 2005). « The Amber biomolecular simulation programs ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 26.16, pages 1668–1688. ISSN : 1096-987X (cf. page 42).

[CASTRO 1994]

CASTRO, John M. de (sept. 1994). « Family and friends produce greater social facilitation of food intake than other companions ». Anglais. Dans *Physiology & Behavior* 56.3, pages 445–455. ISSN : 0031-9384 (cf. page 19).

[CHASTINE 2007]

CHASTINE, Jeffrey W. (2007). « On inter-referential awareness in collaborative augmented reality ». Anglais. Adviser-Zhu, Ying. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia State University. ISBN : 978-0-549-19185-8 (cf. pages 26, 28).

[CHASTINE *et al.* 2006]

CHASTINE, Jeffrey W., Ying ZHU et Jon A. PRESTON (nov. 2006). « A framework for inter-referential awareness in collaborative environments ». Anglais. Dans *International Conference on Collaborative Computing : Networking, Applications and Worksharing*, page 30 (cf. page 28).

[CHASTINE *et al.* 2005]

CHASTINE, Jeffrey W., Jeremy C. BROOKS, Ying ZHU, G. Scott OWEN, Robert W. HARRISON et Irene T. WEBER (2005). « AMMP-Vis : a collaborative virtual environment for molecular modeling ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Monterey, CA, USA : ACM, pages 8–15. ISBN : 1-59593-098-1 (cf. page 28).

[CHASTINE *et al.* 2007]

CHASTINE, Jeffrey W., Kristine NAGEL, Ying ZHU et Luca YEARSOVICH (mai 2007). « Understanding the design space of referencing in collaborative augmented reality environments ». Anglais. Dans *Proceedings of Graphics Interface*. GI '07. Montréal, Canada : ACM, pages 207–214. ISBN : 978-1-56881-337-0 (cf. page 29).

[CHASTINE *et al.* 2008]

CHASTINE, Jeffrey W., Kristine NAGEL, Ying ZHU et Mary HUDACHEK-BUSWELL (mar. 2008). « Studies on the effectiveness of virtual pointers in collaborative augmented reality ». Anglais. Dans *Proceedings of the IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI '08. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 117–124. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. page 29).

[CHAVENT *et al.* 2011]

CHAVENT, Matthieu, Antoine VANEL, Alex TEK, Bruno LEVY, Sophie ROBERT, Bruno RAFFIN et Marc BAADEN (oct. 2011). « GPU-accelerated atom and dynamic bond visualization using hyperballs : a unified algorithm for balls, sticks, and hyperboloids ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 32.13, pages 2924–2935. ISSN : 1096-987X (cf. page 50).

[CHIDAMBARAM et TUNG 2005]

CHIDAMBARAM, Laku et Lai Lai TUNG (juin 2005). « Is out of sight, out of mind? An empirical study of social loafing in technology-supported groups ». Anglais. Dans *Information Systems Research* 16.2, pages 149–168 (cf. pages 21, 22).

[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 ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. pages 132, 189).

[CHURCH *et al.* 1977]

CHURCH, George M., Joel L. SUSSMAN et Sung-Hou KIM (avr. 1977).  
« Secondary structural complementarity between DNA and proteins ».  
Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences* 74.4,  
5 pages 1458–1462 (cf. page 4).

[A. CLARK 1998]

CLARK, Andy (mar. 1998). *Being there : putting brain, body, and world  
together again*. Anglais. Bradford Books. Cambridge, Mass. : MIT  
Press. ISBN : 978-0262531566 (cf. page 15).

10 [A. CLARK 2001]

— (mar. 2001). « Reasons, robots and the extended mind ». Anglais.  
Dans *Mind and Language* 16.2, pages 121–145 (cf. page 15).

[Herbert H. CLARK et SCHAEFER 1989]

15 CLARK, Herbert H. et Edward F. SCHAEFER (avr. 1989). « Contributing  
to discourse ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 13.2, pages 259–294.  
ISSN : 1551-6709 (cf. page 27).

[Herbet H. CLARK et BRENNAN 1991]

20 CLARK, Herbet H. et Susan E. BRENNAN (1991). « Grounding in com-  
munication ». Anglais. Dans. *Perspectives on socially shared cognition*.  
Sous la direction de Lauren B. RESNICK, John M. LEVINE et Stephanie B.  
TEASLEY. American Psychological Association. Chapitre 7, pages 127–  
149 (cf. pages 25, 27).

[COCHRAN *et al.* 2001]

25 COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVAS-  
NIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric  $\beta$ -hairpins ». Anglais.  
Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the  
United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. pages 133,  
189).

[COCKBURN et WEIR 1999]

30 COCKBURN, Andy et Philip WEIR (sept. 1999). « An investigation of  
groupware support for collaborative awareness through distortion-oriented  
views ». Anglais. Dans *International Journal of Human Computer In-  
teraction* 11.3, pages 231–255 (cf. page 30).

[CONEIN 2004]

35 CONEIN, Bernard (juil. 2004). « Cognition distribuée, groupe social et  
technologie cognitive ». Dans *Réseaux* 2.124, pages 53–79 (cf. page 15).

- [CUMMINGS *et al.* 1995]  
CUMMINGS, Maxwell D., Trevor N. HART et Randy J. READ (mai 1995). « Monte Carlo docking with ubiquitin ». Anglais. Dans *Protein Science* 4.5, pages 885–899. ISSN : 1469-896X (cf. page 9).
- 5 [DAUNAY *et al.* 2007]  
DAUNAY, Bruno, Alain MICAELLI et Stéphane RÉGNIER (avr. 2007). « 6 DoF haptic feedback for molecular docking using wave variables ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Robotics and Automation. ICRA 2007*, pages 840–845. ISBN : 1-4244-0601-3 (cf. page 12).
- 10 [DAUNAY et RÉGNIER 2009]  
DAUNAY, Bruno et Stéphane RÉGNIER (2009). « Stable six degrees of freedom haptic feedback for flexible ligand-protein docking ». Anglais. Dans *Computer Aided Design* 41.12, pages 886–895. ISSN : 0010-4485 (cf. pages 12, 14).
- 15 [DAVIES *et al.* 2005]  
DAVIES, R. Andrew, Nigel W. JOHN, John N. MACDONALD et Keith H. HUGHES (mar. 2005). « Visualization of molecular quantum dynamics : a molecular visualization tool with integrated Web3D and haptics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 10th international conference on 3D Web technology. Web3D '05*. Bangor, United Kingdom : ACM, pages 143–  
20 150. ISBN : 1-59593-012-4 (cf. pages 10, 11).
- [DELALANDE *et al.* 2009]  
DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAA-  
DEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive  
25 simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. pages 11, 43, 78).
- [DELALANDE *et al.* 2010]  
DELALANDE, Olivier, Nicolas FERREY, Benoist LAURENT, Marc GUÉ-  
ROULT, Brigitte HARTMANN et Marc BAADEN (jan. 2010). « Multi-  
30 resolution approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device ». Anglais. Dans *Pacific Symposium on Biocomputing*, pages 205–215 (cf. pages 11, 12, 50, 52, 78).
- [DELANO 2002]  
35 DELANO, Warren L. (2002). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org> (visité le 25 sept. 2011) (cf. page 10).



[DEWAN et H. SHEN 1998]

DEWAN, Prasun et HongHai SHEN (mar. 1998). « Controlling access in multiuser interfaces ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 5.1, pages 34–62. ISSN : 1073-0516 (cf. page 24).

5 [DIEHL et STROEBE 1987]

DIEHL, Michael et Wolfgang STROEBE (1987). « Productivity loss in brainstorming groups : toward the solution of a riddle ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 53.3, pages 497–509. ISSN : 0022-3514 (cf. page 111).

10 [DILLENBOURG *et al.* 1996]

DILLENBOURG, Pierre, David R. TRAUM et Daniel SCHNEIDER (sept. 1996). « Grounding in multi-modal task-oriented collaboration ». Anglais. Dans *Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence in Education*, pages 401–407 (cf. page 27).

15 [DINDO *et al.* 2009]

DINDO, Marietta, Andrew WHITEN et Frans B. M. de WAAL (mai 2009). « Social facilitation of exploratory foraging behavior in capuchin monkeys (*Cebus apella*) ». Anglais. Dans *American Journal of Primatology* 71.5, pages 419–426. ISSN : 1098-2345 (cf. page 18).

20 [DIX 1997]

DIX, Alan (1997). « Challenges for cooperative work on the web : an analytical approach ». Anglais. Dans *Computer Supported Cooperative Work* 6.2-3, pages 135–156. ISSN : 0925-9724 (cf. page 22).

[DIX *et al.* 2003]

25 DIX, Alan, Janet E. FINLAY, Gregory D. ABOWD et Russel BEALE (déc. 2003). *Human-computer interaction*. Anglais. 3<sup>e</sup> édition. Pearson/Prentice-Hall. ISBN : 978-0130461094 (cf. page 23).

[DOMINJON 2006]

30 DOMINJON, Lionel (avr. 2006). « Contribution à l'étude des techniques d'interaction 3D pour la manipulation d'objets avec retour haptique en environnement virtuel à échelle humaine ». Thèse de doctorat. Laval, France : École doctorale d'Angers (cf. page 84).

[DOURISH et BELLOTTI 1992]

35 DOURISH, Paul et Victoria BELLOTTI (oct. 1992). « Awareness and coordination in shared workspaces ». Anglais. Dans *Proceedings of the 1992 ACM conference on Computer-Supported Cooperative Work*. CSCW '92. Toronto, Ontario, Canada : ACM, pages 107–114. ISBN : 0-89791-542-9 (cf. page 29).

[DREES *et al.* 1996]

DREES, Robert C., Jürgen PLEISS et Rolf D. SCHMID (1996). « Highly Immersive Molecular Modeling (HIMM) : an architecture for the integration of molecular modeling and virtual reality ». Anglais. Dans *German Conference on Bioinformatics*, pages 190–192 (cf. page 10).

[DREES *et al.* 1998]

DREES, Robert C., Jürgen PLEISS, Rolf D. SCHMID et Dieter ROLLER (juin 1998). « Integrating molecular modeling tools and virtual reality engines : an architecture for a Highly Immersive Molecular Modeling (HIMM) environment ». Anglais. Dans *Proceedings of the Computer Graphics International 1998*. CGI '98. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 391–392. ISBN : 0-8186-8445-3 (cf. page 10).

[ELLIS *et al.* 1991]

ELLIS, Clarence A., Simon J. GIBBS et Gail REIN (jan. 1991). « Groupware : some issues and experiences ». Dans *Communication on ACM* 34.1, pages 39–58 (cf. pages 34, 36).

[EWING *et al.* 2001]

EWING, Todd J. A., Shingo MAKINO, A. Geoffrey SKILLMAN et Irwin D. KUNTZ (mai 2001). « DOCK 4.0 : search strategies for automated molecular docking of flexible molecule databases ». Anglais. Dans *Journal of Computer-Aided Molecular Design* 15.5, pages 411–428 (cf. page 9).

[FEREY *et al.* 2008]

FEREY, Nicolas, Guillaume BOUYER, Christine MARTIN, Patrick BOURDOT, Julien NELSON et Jean-Marie BURKHARDT (mar. 2008). « User needs analysis to design a 3D multimodal protein-docking interface ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2008 IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI '08. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 125–132. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. pages 52, 78).

[FISCHER et BEENSCH 1894]

FISCHER, Emil et Leo BEENSCH (août 1894). « Ueber einige synthetische Glucoside ». Allemand. Dans *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft* 27.2, pages 2478–2486. ISSN : 1099-0682 (cf. page 4).

[FOUSHEE et HELMREICH 1987]

FOUSHEE, H. Clayton et Robert L. HELMREICH (1987). « Group interaction and flight crew performance ». Anglais. Dans *Human factors in modern aviation*. Sous la direction d'Earl L. WIENER et David C. NAGEL, pages 189–227 (cf. pages 15, 17).

[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. pages 60, 90).

5 [FRIESNER *et al.* 2004]

FRIESNER, Richard A., Jay L. BANKS, Robert B. MURPHY, Thomas A. HALGREN, Jasna J. KLICIC, Daniel T. MAINZ, Matthew P. REPASKY, Eric H. KNOLL, Mee SHELLEY, Jason K. PERRY, David E. SHAW, Perry FRANCIS et Peter S. SHENKIN (mar. 2004). « Glide : a new approach  
10 for rapid, accurate docking and scoring. 1. Method and assessment of docking accuracy. » Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 47.7, pages 1739–1749. ISSN : 0022-2623 (cf. page 9).

[FUCHS *et al.* 2006]

FUCHS, Philippe, David AMARANTI, Malika AUVRAY, Mohamed BENALI-  
15 KOUDJA, Alain BERTHOZ, Éric BERTON, Jean BLOUIN, Simon BOUISSET, Christophe BOURDIN, Jean-Marie BURKHARDT, Luca LATINI CORAZZINI, Gabriel M. GAUTHIER, Édouard GENTAZ, Marie-Dominique GIRAUDO, Moustapha HAFEZ, Yvette HATWELL, Bernard HENNION, Daniel MESTRE, Franck MULTON, Jean-Paul PAPIN, Patrick PÉRUCH,  
20 Guillaume RAO, Nicolas TSINGOS, Jean-Louis VERCHER et Olivier WARUSFEL (mar. 2006). *Traité de la réalité virtuelle*. Sous la direction de Philippe FUCHS. 3<sup>e</sup> édition. Tome 1. Laval, France : Presses de l'École des Mines de Paris (cf. pages 50, 184).

[GAUTIER *et al.* 2008]

25 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  
30 (cf. page 25).

[GEORGE 1990]

GEORGE, Jennifer M. (avr. 1990). « Personality, Affect, and Behavior in Groups ». Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 75.2, pages 107–116. ISSN : 0021-9010 (cf. page 15).

35 [GEORGE et L. R. JAMES 1993]

GEORGE, Jennifer M. et Lawrence R. JAMES (oct. 1993). « Personality, affect, and behavior in groups revisited : comment on aggregation, levels of analysis, and a recent application of within and between analysis ».

Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 78.5, pages 798–804. ISSN : 0021-9010 (cf. page 15).

[GIBSON 1977]

5 GIBSON, James J. (avr. 1977). « Perceiving, acting, and knowing : towards an ecological psychology ». Anglais. Dans SHAW, R., J. BRANSFORD et University of MINNESOTA. CENTER FOR RESEARCH IN HUMAN LEARNING. *Perceiving, acting, and knowing : toward an ecological psychology*. Sous la direction de Robert E. SHAW et John D. BRANSFORD. Hoboken, NJ, USA : Lawrence Erlbaum Associates. Chapitre 8, pages 127–143.  
10 ISBN : 978-0470990148 (cf. page 17).

[GIBSON 1979]

— (1979). *The ecological approach to visual perception*. Anglais. Boston : Houghton Mifflin. ISBN : 978-0395270493 (cf. page 17).

[GORLATCH *et al.* 2009]

15 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 79).

[GRASSET 2004]

20 GRASSET, Raphaël (avr. 2004). « Environnement de réalité augmentée 3D coopératif : approche colocalisée sur table ». Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier (cf. page 23).

[GRASSET et GASCUEL 2002]

25 GRASSET, Raphaël et Jean-Dominique GASCUEL (juil. 2002). « MARE : Multiuser Augmented Reality Environment on real table setup ». Anglais. Dans *29th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*. SIGGRAPH. San Antonio, Texas, Etats-Unis : ACM, pages 213–213 (cf. page 24).

[GROSDIDIER 2007]

30 GROSDIDIER, Aurélien (2007). « EADock : design of a new molecular docking algorithm and some of its applications ». Anglais. Thèse de doctorat. Grenoble, France : UFR de Pharmacie, Université Joseph Fourier (cf. page 7).

[GRÜNWALD 2008]

35 GRÜNWALD, Martin (2008). *Human haptic perception : basics and applications*. Anglais. Springer. ISBN : 978-3764376116 (cf. page 9).

[GUTWIN et GREENBERG 2000]

GUTWIN, Carl et Saul GREENBERG (juin 2000). « The mechanics of collaboration : developing low cost usability evaluation methods for shared workspaces ». Anglais. Dans *Proceedings of the 9th IEEE International Workshops on Enabling Technologies : Infrastructure for Collaborative Enterprises*. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 98–103. ISBN : 0-7695-0798-0 (cf. page 22).

[GUTWIN *et al.* 1996]

GUTWIN, Carl, Saul GREENBERG et Mark ROSEMAN (août 1996). « Workspace awareness in real-time distributed groupware : framework, widgets, and evaluation ». Anglais. Dans *Proceedings of HCI on People and Computers XI*. London, UK : Springer-Verlag, pages 281–298. ISBN : 3-540-76069-5 (cf. page 30).

[HAAN *et al.* 2002]

HAAN, Gerwin de, Michal KOUTEK et Frits H. POST (nov. 2002). « Towards intuitive exploration tools for data visualization in VR ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. VRST '02. Hong Kong, China : ACM, pages 105–112. ISBN : 1-58113-530-0 (cf. page 11).

[HALGREN *et al.* 2004]

HALGREN, Thomas A., Robert B. MURPHY, Richard A. FRIESNER, Hege S. BEARD, Leah L. FRYE, W. Thomas POLLARD et Jay L. BANKS (mar. 2004). « Glide : a new approach for rapid, accurate docking and scoring. 2. Enrichment factors in database screening ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 47.7, pages 1750–1759 (cf. page 9).

[S. G. HARKINS et SZYMANSKI 1988]

HARKINS, Stephen G. et Kate SZYMANSKI (juil. 1988). « Social loafing and self-evaluation with an objective standard ». Anglais. Dans *Journal of Experimental Social Psychology* 24.4, pages 354–365. ISSN : 0022-1031 (cf. page 21).

[HART et READ 1992]

HART, Trevor N. et Randy J. READ (juil. 1992). « A multiple-start Monte Carlo docking method ». Anglais. Dans *Proteins : Structure, Function, and Bioinformatics* 13.3, pages 206–222. ISSN : 1097-0134 (cf. page 9).

[HASENKNOPF 2005]

HASENKNOPF, Bernold (nov. 2005). « Polyoxométallates fonctionnalisés : de l'assemblage supramoléculaire vers les nanobiotechnologies ». Habilitation à Diriger des Recherches. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (cf. page 4).

- [HERTZUM 2008]  
HERTZUM, Morten (mar. 2008). « Collaborative information seeking : The combined activity of information seeking and collaborative grounding ». Anglais. Dans *Information Processing and Management* 44.2, pages 957–962. ISSN : 0306-4573 (cf. page 28).
- [HERTZUM 2010]  
— (nov. 2010). « Breakdowns in collaborative information seeking : A study of the medication process ». Anglais. Dans *Information Processing and Management* 46.6, pages 646–655. ISSN : 0306-4573 (cf. page 28).
- [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. pages 10, 42).
- [HOLLAN *et al.* 2000]  
HOLLAN, James, Edwin L. HUTCHINS et David KIRSH (juin 2000). « Distributed cognition : toward a new foundation for human-computer interaction research ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.2, pages 174–196. ISSN : 1073-0516 (cf. page 15).
- [HOLM 1979]  
HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 61, 63, 95, 100–103).
- [HOU et SOURINA 2010]  
HOU, XiYuan et Olga SOURINA (2010). « Haptic rendering algorithm for biomolecular docking with torque force ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 International Conference on Cyberworlds*. CW '10. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 25–31. ISBN : 978-0-7695-4215-7 (cf. pages 12, 13).
- [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 38).

[HUITEMA et LIERE 2000]

HUITEMA, Henk et Robert van LIERE (oct. 2000). « Interactive visualization of protein dynamics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 11th IEEE Visualization Conference*. VIS '00. Salt Lake City, UT, USA : IEEE Computer Society, pages 465–468. ISBN : 0-7803-6478-3 (cf. page 10).

[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. pages 10, 40, 184).

10 [HUTCHINS 1995]

HUTCHINS, Edwin L. (juil. 1995). « How a cockpit remembers its speeds ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 19.3, pages 265–288. ISSN : 1551-6709 (cf. page 15).

[HUTCHINS 1996]

15 — (sept. 1996). *Cognition in the wild*. Anglais. 2<sup>e</sup> édition. Cambridge : MIT Press. ISBN : 0262581469 (cf. page 15).

[IGLESIAS *et al.* 2008]

20 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 38).

[INGHAM *et al.* 1974]

25 INGHAM, Alan G., George LEVINGER, James GRAVES et Vaughn PECKHAM (juil. 1974). « The Ringelmann effect : studies of group size and group performance ». Anglais. Dans *Journal of Experimental Social Psychology* 10.4, pages 371–384. ISSN : 0022-1031 (cf. page 21).

[JIANG *et al.* 2003]

30 JIANG, Sulin, Andrei TOVCHIGRECHKO et Ilya A VAKSER (2003). « The role of geometric complementarity in secondary structure packing : a systematic docking study ». Anglais. Dans *Protein Science* 12.8, pages 1646–1651 (cf. page 6).

[JONES *et al.* 1997]

35 JONES, Gareth, Peter WILLETT, Robert C. GLEN, Andrew R. LEACH et Robin TAYLOR (avr. 1997). « Development and validation of a genetic algorithm for flexible docking ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 267.3, pages 727–748. ISSN : 0022-2836 (cf. page 9).

[JUNUZOVIC et DEWAN 2009]

JUNUZOVIC, Sasa et Prasun DEWAN (nov. 2009). « Serial vs. concurrent scheduling of transmission and processing tasks in collaborative systems ». Anglais. Dans *Collaborative Computing : Networking, Applications and Worksharing*. Sous la direction d'Elisa BERTINO, James B. D. JOSHI, Ozgur AKAN, Paolo BELLAVISTA, Jiannong CAO, Falko DRESSLER, Domenico FERRARI, Mario GERLA, Hisashi KOBAYASHI, Sergio PALAZZO, Sartaj SAHNI, Xuemin (Sherman) SHEN, Mircea STAN, Jia XIAOHUA, Albert ZOMAYA et Geoffrey COULSON. Tome 10. Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering 3. Orlando, FL, USA : Springer Berlin Heidelberg, pages 746–759. ISBN : 978-3-642-03354-4 (cf. page 23).

[KARAU et K. D. WILLIAMS 1993]

KARAU, Steven J. et Kipling D. WILLIAMS (oct. 1993). « Social loafing : a meta-analytic review and theoretical integration ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 65.4, pages 681–706. ISSN : 0022-3514 (cf. page 21).

[KERR et BRUUN 1981]

KERR, Norbert L. et Steven E. BRUUN (juin 1981). « Ringelmann revisited : alternative explanations for the social loafing effect ». Anglais. Dans *Personality and Social Psychology Bulletin* 7.2, pages 224–231 (cf. pages 20, 21).

[KESSLER *et al.* 1999]

KESSLER, Naama, Daniele PERL-TREVES, Lia ADDADI et Miriam EISENSTEIN (oct. 1999). « Structural and chemical complementarity between antibodies and the crystal surfaces they recognize ». Anglais. Dans *Proteins : Structure, Function, and Bioinformatics* 34.3, pages 383–394. ISSN : 1097-0134 (cf. page 6).

[KHATIB *et al.* 2011]

KHATIB, Firas, Frank DIMAIO, Seth COOPER, Maciej KAZMIERCZYK, Mirosław GILSKI, Szymon KRZYWDA, Helena ZABRANSKA, Iva PICOVA, James THOMPSON, Zoran POPOVIĆ, Mariusz JASKOLSKI et David BAKER (oct. 2011). « Crystal structure of a monomeric retroviral protease solved by protein folding game players ». Anglais. Dans *Nature on Structural and Molecular Biology* 18.10, pages 1175–1177 (cf. page 8).

[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 38).

[KIRSH 1999]

5 KIRSH, David (1999). « Distributed cognition, coordination and environment design ». Dans *Proceedings of the European Cognitive Science Society*, pages 1–11 (cf. page 17).

[KLOSOWSKI *et al.* 2002]

10 KLOSOWSKI, James T., Peter D. KIRCHNER, Julia VALUYEVA, Greg ABRAM, Christopher J. MORRIS, Robert H. WOLFE et Thomas JACKMAN (mai 2002). « Deep View : high-resolution reality ». Anglais. Dans *IEEE Computer Graphics and Applications* 22.3, pages 12–15. ISSN : 0272-1716 (cf. page 10).

[KNAUF 2010]

15 KNAUF, Audrey (mai 2010). *Les dispositifs d'intelligence économique : compétences et fonctions utiles à leur pilotage*. Intelligence économique. L'Harmattan. ISBN : 9782296119321 (cf. page 14).

[KOUTEK *et al.* 2002]

20 KOUTEK, Michal, Jeroen van HEES, Frits H. POST et A. F. BAKKER (mai 2002). « Virtual spring manipulators for particle steering in molecular dynamics on the responsive workbench ». Anglais. Dans *Proceedings of the workshop on Virtual environments 2002*. EGVE '02. Barcelona, Spain : Eurographics Association, pages 53–62. ISBN : 1-58113-535-1 (cf. page 11).

[KRAUT 2003]

25 KRAUT, Robert E. (2003). « Applying social psychological theory to the problems of group work ». Anglais. Dans. *HCI models theories and frameworks : toward a multidisciplinary science*. Sous la direction de John M. CARROLL. San Francisco, CA, USA : Morgan Kaufmann. Chapitre 12, pages 325–356 (cf. page 21).

30 [KRAVITZ et B. MARTIN 1986]

KRAVITZ, David A. et Barbara MARTIN (mai 1986). « Ringelmann rediscovered : the original article ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 50.5, pages 936–941. ISSN : 0022-3514 (cf. page 20).

[KŘENEK *et al.* 1999]

35 KŘENEK, Aleš, Martin ČERNOHORSKÝ et Zdeněk KABELÁČ (1999). « Haptic visualization of molecular model ». Anglais. Dans *International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision*, pages 133–139 (cf. page 10).

[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 90).

5 [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2005]

LAI-YUEN, Susana K. et Yuan-Shin LEE (déc. 2005). « Computer-aided molecular design (CAMD) with force-torque feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of the 9th International Conference on Computer Aided Design and Computer Graphics*. CAD-CG '05. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 199–204. ISBN : 0-7695-2473-7 (cf. page 12).

[LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006]

— (2006). « Interactive computer-aided design for molecular docking and assembly ». Anglais. Dans *Computer-Aided Design and Applications* 3.6, pages 701–710 (cf. pages 12, 13).

[LATANÉ *et al.* 1979]

LATANÉ, Bibb, Kipling WILLIAMS et Stephen HARKINS (juin 1979). « Many hands make light the work : the causes and consequences of social loafing ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 37.6, pages 822–832. URL : <http://content.apa.org/journals/psp/37/6/822> (cf. pages 20, 21, 111, 125, 126).

[LEACH *et al.* 2006]

LEACH, Andrew R., Brian K. SHOICHET et Catherine E. PEISHOFF (oct. 2006). « Prediction of protein-ligand interactions. Docking and scoring : successes and gaps ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 49.20, pages 5851–5855. ISSN : 1522-2667 (cf. page 6).

[Y.-G. LEE et LYONS 2004]

LEE, Yong-Gu et Kevin W. LYONS (jan. 2004). « Smoothing haptic interaction using molecular force calculations ». Anglais. Dans *Computer-Aided Design* 36.1, pages 75–90. ISSN : 0010-4485 (cf. page 11).

[LENNARD-JONES 1924a]

LENNARD-JONES, John E. (oct. 1924a). « On the determination of molecular fields. I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature ». Anglais. Dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106.738, pages 441–462. ISSN : 09501207 (cf. pages 11, 12).

- [LENNARD-JONES 1924b]  
— (oct. 1924b). « On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas ». Anglais. Dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106.738, pages 463–477. ISSN : 09501207 (cf. page 11).  
5
- [LEUF et CUNNINGHAM 2001]  
LEUF, Bo et Ward CUNNINGHAM (2001). *The wiki way : quick collaboration on the Web*. Anglais. Boston, MA, USA : Addison-Wesley. ISBN : 0-201-71499-X (cf. page 14).
- 10 [LEVINE *et al.* 1997]  
LEVINE, David, Michael FACELLO, Philip HALLSTROM, Gregory REEDER, Brian WALENZ et Fred STEVENS (avr. 1997). « STALK : an interactive system for virtual molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE Computer in Sciences and Engineering* 4.2, pages 55–65. ISSN : 1070-9924  
15 (cf. pages 12, 51, 78).
- [LIKERT 1932]  
LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 210, 216, 217, 223).
- 20 [LOEFFLER et WINN 2009a]  
LOEFFLER, Hannes H. et Martyn D. WINN (sept. 2009a). *Large biomolecular simulation on HPC platforms 1 : experiences with AMBER, Gromacs and NAMD*. Anglais. Rapport technique. Science et Technology Facilities Council (cf. page 42).
- 25 [LOEFFLER et WINN 2009b]  
— (sept. 2009b). *Large biomolecular simulation on HPC platforms 2 : DL\_POLY, Gromacs, LAMMPS and NAMD*. Anglais. Rapport technique. Science et Technology Facilities Council (cf. page 42).
- [MANN et WHITNEY 1947]  
30 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 61, 63, 95, 100–103).
- [MARSH *et al.* 2006]  
35 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 38).

- [MAYER 1903]  
MAYER, August (1903). « Über Einzel- und Gesamtleistung des Schul-  
kindes : Ein Beitrag zur experimentellen Pädagogik ». Allemand. Thèse  
de doctorat. Leipzig, German : Université de Zürich (cf. page 17).
- 5 [MCCOY *et al.* 1997]  
MCCOY, Airlie J., V. CHANDANA EPA et Peter M. COLMAN (mai 1997).  
« Electrostatic complementarity at protein/protein interfaces ». Anglais.  
Dans *Journal of Molecular Biology* 268.2, pages 570–584. ISSN : 0022-2836  
(cf. page 6).
- 10 [MEAGHER et CARLSON 2004]  
MEAGHER, Kristin L. et Heather A. CARLSON (oct. 2004). « Incorpor-  
ating protein flexibility in structure-based drug discovery : using HIV-1  
protease as a test case ». Anglais. Dans *Journal of the American Che-  
mical Society* 126.41, pages 13276–13281 (cf. page 8).
- 15 [MEUMANN 1904]  
MEUMANN, Ernst (1904). *Haus und Schularbeit : Experimente an Kin-  
dern Der Volksschule*. Allemand. Kessinger Publishing, LLC. ISBN :  
9781161193947 (cf. page 17).
- [MOEDE 1927]  
20 MOEDE, Walther (1927). « Die Richtlinien der Leistungs-Psychologie ». Allemand. Dans *Industrielle Psychotechnik* 4, pages 193–209 (cf. page 20).
- [MORRIS *et al.* 1998]  
MORRIS, Garrett M., David S. GOODSELL, Robert S. HALLIDAY, Ruth  
HUEY, William E. HART, Richard K. BELEW et Arthur J. OLSON (nov.  
25 1998). « Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and  
an empirical binding free energy function ». Anglais. Dans *Journal of  
Computational Chemistry* 19.14, pages 1639–1662. ISSN : 1096-987X (cf.  
page 9).
- [MUGNY *et al.* 1995]  
30 MUGNY, Gabriel, Jean-Léon BEAUVOIS et Dominique OBERLÉ (1995).  
*Relations humaines, groupes et influence sociale*. La psychologie sociale.  
Presses universitaires de Grenoble (cf. page 110).
- [J. MÜLLER *et al.* 2006]  
MÜLLER, Jens, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER et Sergei GORLATCH (déc.  
35 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 79).

- [P. 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. pages 7, 31).
- 5 [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. pages 132, 189).
- [D. A. NORMAN 1988]  
10 NORMAN, Donald A. (mai 1988). *The psychology of everyday things*. Anglais. New York : Basic Books. ISBN : 978-0385267748 (cf. page 17).
- [D. A. NORMAN 1991]  
— (juin 1991). *Designing interaction : psychology at the human-computer interface*. Anglais. Sous la direction de John M. CARROLL. New  
15 York, NY, USA : Cambridge University Press. ISBN : 0-521-40056-2 (cf. page 17).
- [D. A. NORMAN 1999]  
— (mai 1999). « Affordance, conventions, and design ». Anglais. Dans *Interactions* 6.3, pages 38–43. ISSN : 1072-5520 (cf. page 17).
- 20 [J. 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  
25 Computer Society, pages 33–37 (cf. page 38).
- [NURISSE 2010]  
NURISSE, Alessandra (mai 2010). « Études in silico des interactions protéines-carbohydrates ». Thèse de doctorat. Université Joseph-Fourier - Grenoble I (cf. page 4).
- 30 [OBEYSEKARE *et al.* 1996]  
OBEYSEKARE, Upul, Chas WILLIAMS, Jim DURBIN, Larry ROSENBLUM, Robert ROSENBERG, Fernando GRINSTEIN, Ravi RAMAMURTHI, Alexandra LANDSBERG et William SANDBERG (oct. 1996). « Virtual workbench - a non-immersive virtual environment for visualizing and interacting with  
35 3D objects for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 7th conference on Visualization '96*. VIS '96. San Francisco, California, USA : IEEE Computer Society Press, pages 345–359. ISBN : 0-89791-864-9 (cf. page 51).

[A. F. OSBORN 1963]

OSBORN, Alex Faickney (1963). *Applied imagination : principles and procedures of creative problem-solving*. Anglais. Scribner (cf. pages 110, 111).

5 [ÖSTERBERG *et al.* 2002]

ÖSTERBERG, Fredrik, Garrett M. MORRIS, Michel F. SANNER, Arthur J. OLSON et David S. GOODSELL (jan. 2002). « Automated docking to multiple target structures : incorporation of protein mobility and structural water heterogeneity in AutoDock ». Anglais. Dans *Proteins* 46.1, pages 34–40 (cf. pages 8, 9).

10 [OUH-YOUNG *et al.* 1988]

OUH-YOUNG, Ming, Michael E. PIQUE, John HUGHES, Neela SRINIVASAN et Frederick P. BROOKS JR. (avr. 1988). « Using a manipulator for force display in molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Robotics and Automation*. Tome 3. Philadelphia, PA, USA, pages 1824–1829 (cf. page 10).

[PATEL *et al.* 1999]

PATEL, Vimla L., David R. KAUFMAN, Vanessa G. ALLEN, Edward H. SHORTLIFFE, James J. CIMINO et Robert A. GREENES (sept. 1999). « Toward a framework for computer-mediated collaborative design in medical informatics ». Anglais. Dans *Methods of Information in Medicine* 38.3, pages 158–176. ISSN : 0026-1270 (cf. page 17).

[PATEL *et al.* 2000]

25 PATEL, Vimla L., Kayla N. CYTRYN, Edward H. SHORTLIFFE et Charles SAFRAN (juin 2000). « The collaborative health care team : the role of individual and group expertise ». Anglais. Dans *Teaching and Learning in Medicine* 12.3, pages 117–132 (cf. page 17).

[PAVLOVIĆ *et al.* 1996]

30 PAVLOVIĆ, Vladimir I., Rajeev SHARMA et Thomas S. HUANG (oct. 1996). « Gestural interface to a visual computing environment for molecular biologists ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Automatic Face and Gesture Recognition*, page 30 (cf. page 51).

[PETERLÍK 2009]

35 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 78).

[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 40).

[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. pages 42, 184).

[POLYS *et al.* 2004]

POLYS, Nicholas F., Chris NORTH, Douglas A. BOWMAN, Andrew RAY, Maxim MOLDENHAUER et Chetan DANDEKAR (jan. 2004). « Snap2Diverse : coordinating information visualizations and virtual environments ». Anglais. Dans *Visualization and data analysis* 5295.1, pages 189–200. ISSN : 0277786X (cf. page 51).

[POOLE et HOLLINGSHEAD 2005]

POOLE, Marshall Scott et Andrea B. HOLLINGSHEAD (2005). *Theories of small groups : interdisciplinary perspectives*. Anglais. Sage. ISBN : 9780761930761 (cf. page 111).

[RAREY *et al.* 1997]

RAREY, Matthias, Bernd KRAMER et Thomas LENGAUER (juil. 1997). « Multiple automatic base selection : Protein–ligand docking based on incremental construction without manual intervention ». Anglais. Dans *Journal of Computer-Aided Molecular Design* 11.4, pages 369–384. ISSN : 0920-654X (cf. page 9).

[RAREY *et al.* 1999]

— (mar. 1999). « Docking of hydrophobic ligands with interaction-based matching algorithms. » Anglais. Dans *Bioinformatics* 15.3, pages 243–250 (cf. page 9).

[RINGELMANN 1913]

RINGELMANN, Maximilien (1913). « Recherches sur les moteurs animés : Travail de l’homme ». Dans *Annales de l’Institut National Argonomique*. Sous la direction de Jean-Baptiste BAILLIÈRE. Tome 12. 2. Librairie Agricole De La Maison Rustique, pages 1–40 (cf. pages 19, 20, 111, 180).

- [ROETHLISBERGER *et al.* 1939]  
 ROETHLISBERGER, Fritz J., William J. DICKSON et Harold A. WRIGHT (nov. 1939). *Management and the worker*. Anglais. Cambridge, Mass : Harvard University Press (cf. pages 18, 110, 111, 121).
- 5 [ROSCELLE et TEASLEY 1995]  
 ROSCELLE, Jeremy et Stephanie D. TEASLEY (1995). « The construction of shared knowledge in collaborative problem solving ». Anglais. Dans *Computer-Supported Collaborative Learning*. Sous la direction de Claire O'MALLEY. Berlin : Springer, pages 69–97 (cf. page 13).
- 10 [SALLNÄS 2004]  
 SALLNÄS, Eva-Lotta (mar. 2004). « The effect of modality on social presence, presence and performance in collaborative virtual environments ». Anglais. Thèse de doctorat. KTH, Numerical Analysis et Computer Science, NADA. ISBN : 91-7283-707-1 (cf. page 30).
- 15 [SALLNÄS *et al.* 2000]  
 SALLNÄS, Eva-Lotta, Kirsten RASMUS-GRÖHN et Calle SJÖSTRÖM (déc. 2000). « Supporting presence in collaborative environments by haptic force feedback ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.4, pages 461–476. ISSN : 1073-0516 (cf. page 44).
- 20 [SANKARANARAYANAN *et al.* 2003]  
 SANKARANARAYANAN, Ganesh, Suzanne WEGHORST, Michel SANNER, Alexandre GILLET et Arthur OLSON (mar. 2003). « Role of haptics in teaching structural molecular biology ». Anglais. Dans *Proceedings of the 11th Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems*. HAPTICS'03. Washington, DC, USA : IEEE  
 25 Computer Society, pages 363–366. ISBN : 0-7695-1890-7 (cf. page 11).
- [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  
 30 sciences* 20.9, pages 374–376 (cf. page 40).
- [SCHERMERHORN *et al.* 2009]  
 SCHERMERHORN, John, James G. HUNT, Richard N. OSBORN et Mary UHL-BIEN (jan. 2009). *Organizational behavior*. Anglais. 11<sup>e</sup> édition. John Wiley & Sons, Inc. ISBN : 978-0470294413 (cf. page 20).
- 35 [SCHULZ-GASCH et STAHL 2004]  
 SCHULZ-GASCH, Tanja et Martin STAHL (déc. 2004). « Scoring functions for protein-ligand interactions : a critical perspective ». Anglais. Dans *Drug Discovery Today : Technologies* 1.3, pages 231–239. ISSN : 1740-6749 (cf. page 6).



[SEASHORE 1899]

SEASHORE, Carl E. (mai 1899). « The dynamogenic factors in pacemaking and competition ». Anglais. Dans *Psychological Review* 6.3, pages 336–338. ISSN : 0033-295X. DOI : 10.1037/h0069301 (cf. page 17).

5 [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. pages 60, 90).

[W. SHEN *et al.* 2006]

10 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  
15 (cf. page 78).

[MERCURIAL 2011]

MERCURIAL. *Mercurial : source control management*. Anglais. Mercurial community. URL : <http://mercurial.selenic.com/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 14).

20 [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. pages 43, 78, 183).

25 [STEINER 1972]

STEINER, Ivan Dale (sept. 1972). *Group process and productivity*. Anglais. Social psychology. New York : Academic Press, Inc. ISBN : 978-0012663509 (cf. page 20).

[STONE *et al.* 2010]

30 STONE, John, Axel KOHLMAYER, Kirby VANDIVORT et Klaus SCHULTEN (déc. 2010). « Immersive molecular visualization and interactive modeling with commodity hardware ». Anglais. Dans *Advances in Visual Computing*. Sous la direction de George BEBIS, Richard BOYLE, Bahram PARVIN, Darko KORACIN, Ronald CHUNG, Riad HAMMOUND, Muhammad  
35 HUSSAIN, Tan KAR-HAN, Roger CRAWFIS, Daniel THALMANN, David KAO et Lisa AVILA. Tome 6454. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin / Heidelberg, pages 382–393. ISBN : 978-3-642-17273-1 (cf. page 12).

- [STRAUSS 2002]  
 STRAUSS, Bernd (juil. 2002). « Social facilitation in motor tasks : a review of research and theory ». Anglais. Dans *Psychology of Sport and Exercise* 3.3, pages 237–256. ISSN : 1469-0292. DOI : 10.1016/S1469-0292(01)00019-X (cf. page 18).
- [SUBAŞI 2006]  
 SUBAŞI, Erk (juin 2006). « Rigid molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Thèse de doctorat. Koç University (cf. page 12).
- [SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006]  
 SUBAŞI, Erk et Çağatay BAŞDOĞAN (juin 2006). « A new approach to molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of Eurohaptics*, pages 141–145 (cf. page 12).
- [SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2008]  
 — (fév. 2008). « A new haptic interaction and visualization approach for rigid molecular docking in virtual environments ». Anglais. Dans *Presence : Teleoper. Virtual Environ.* 17.1, pages 73–90. ISSN : 1054-7460 (cf. page 12).
- [SUBVERSION 2011]  
 SUBVERSION. *APACHE SUBVERSION : Enterprise-class centralized version control for the masses*. Anglais. Apache Software Foundation. URL : <http://subversion.apache.org/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. pages 14, 24).
- [SULEIMAN et WATSON 2008]  
 SULEIMAN, James et Richard WATSON (nov. 2008). « Social loafing in technology-supported teams ». Anglais. Dans *Computer Supported Cooperative Work*. CSCW 17.4. 10.1007/s10606-008-9075-6, pages 291–309. ISSN : 0925-9724 (cf. page 21).
- [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 78).
- [SZYMANSKI et S. G. HARKINS 1987]  
 SZYMANSKI, Kate et Stephen G. HARKINS (nov. 1987). « Social loafing and self-evaluation with a social standard ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 53.5, pages 891–897. ISSN : 0022-3514 (cf. page 21).

[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 79).

[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. pages 39, 184).

[GIT 2011]

GIT. GIT : *the fast version control system*. Anglais. Software Freedom Conservacy. URL : <http://www.git-scm.com/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 14).

[PYMOL 2011]

— . *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. Schrödinger, LLC. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 3 juin 2011) (cf. page 40).

[TRIPLETT 1898]

TRIPLETT, Norman (juil. 1898). « The dynamogenic factors in pace-making and competition ». Anglais. Dans *The American Journal of Psychology* 9.4, pages 507–533. ISSN : 00029556 (cf. pages 17, 18).

[TRIPLETT 1900]

— (juil. 1900). « The psychology of conjuring deceptions ». Anglais. Dans *The American journal of psychology* 11.4, pages 439–510 (cf. page 179).

[TUCKMAN 1965]

TUCKMAN, Bruce (juin 1965). « Developmental sequence in small groups ». Anglais. Dans *Psychological bulletin* 63.6, pages 384–399 (cf. page 111).

[VIJAY-KUMAR *et al.* 1987]

VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987). « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. pages 133, 189).

[WAGNER 2004]

WAGNER, Christian (2004). « Wiki : a technology for conversational knowledge management and group collaboration ». Anglais. Dans *Communications of the Association for Information Systems* 13.1, pages 265–289 (cf. page 14).

- [WEGHORST 2003]  
WEGHORST, Suzanne (déc. 2003). « Augmented tangible molecular models ». Anglais. Dans *Proceedings of International Conference on Artificial Reality and Telexistence*. ICAT 2003 (cf. pages 11, 12).
- 5 [WEGNER 1987]  
WEGNER, Daniel M. (1987). « Transactive memory : a contemporary analysis of the group mind ». Dans *Theories of group behavior*. Sous la direction de Brian MULLEN et George R. GOETHALS, pages 185–208 (cf. page 15).
- 10 [WICKENS 1984]  
WICKENS, Christopher D. (1984). « Processing resources in attention ». Anglais. Dans *Varieties of Attention*. Academic Press, pages 63–101 (cf. pages 94, 103, 184).
- [WILCOXON 1945]  
15 WILCOXON, Frank (déc. 1945). « Individual comparisons by ranking methods ». Anglais. Dans *Biometrics Bulletin* 1.6, pages 80–83. ISSN : 00994987 (cf. page 140).
- [WOLLACOTT et MERZ JR. 2007]  
WOLLACOTT, Andrew M. et Kenneth M. MERZ JR. (mar. 2007). « Haptic applications for molecular structure manipulation ». Anglais. Dans  
20 *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 25.6, pages 801–805. ISSN : 1093-3263 (cf. page 12).
- [J. C. WOOD et M. C. WOOD 2004]  
WOOD, John Cunningham et Michael C. WOOD (2004). *George Elton Mayo : critical evaluations in business and management*. Tome 1.  
25 Critical evaluations in business and management. Routledge. ISBN : 9780415323918 (cf. page 111).
- [WOOLLEY *et al.* 2010]  
WOOLLEY, Anita Williams, Christopher F. CHABRIS, Alex PENTLAND,  
30 Nada HASHMI et Thomas W. MALONE (oct. 2010). « Evidence for a collective intelligence factor in the performance of human groups ». Anglais. Dans *Science* 330.6004, pages 686–688 (cf. page 27).
- [YAMMARINO et MARKHAM 1992]  
YAMMARINO, Francis J. et Steven E. MARKHAM (avr. 1992). « On the  
35 application of within and between analysis : are absence and affect really group-based phenomena ? » Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 77.2, pages 168–176. ISSN : 0021-9010 (cf. page 15).

[YERKES et DODSON 1908]

YERKES, Robert M. et John D. DODSON (nov. 1908). « The relation of strength of stimulus to rapidity of habit-formation ». Anglais. Dans *Journal of Comparative Neurology and Psychology* 18.5, pages 459–482. ISSN : 1550-7149 (cf. pages 18, 19).

[ZAJONC 1965]

ZAJONC, Robert B. (juil. 1965). « Social facilitation ». Anglais. Dans *Science* 149, pages 269–274 (cf. pages 19, 111, 112, 201).

[ZAJONC 1969]

— (avr. 1969). *Animal social psychology; a reader of experimental studies*. Anglais. Series in psychology. New York, NY, USA : Wiley. ISBN : 9780471981053 (cf. page 18).

[ZHANG 1997]

ZHANG, JiaJie (avr. 1997). « The nature of external representations in problem solving ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 21.2, pages 179–217. ISSN : 1551-6709 (cf. page 16).

[ZHANG 1998]

— (1998). « A distributed representation approach to group problem solving ». Anglais. Dans *Journal of the American Society for Information Science* 49.9, pages 801–809. ISSN : 1097-4571 (cf. page 17).

[ZHANG et D. A. NORMAN 1994]

ZHANG, JiaJie et Donald A. NORMAN (jan. 1994). « Representations in distributed cognitive tasks ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 18.1, pages 87–122. ISSN : 0364-0213 (cf. page 16).

[ZHANG et PATEL 2006]

ZHANG, JiaJie et Vimla L. PATEL (2006). « Distributed cognition, representation, and affordance ». Anglais. Dans *Pragmatics & Cognition* 14.2, pages 333–341 (cf. page 15).



# Glossaire

## **bimanuel**

Qui se fait avec les deux mains. 79, 84, 88, 93, 94, 98, 99, 103–107, 112, 114, 116, 124, 129, 200

## **binôme**

Groupe constitué de 2 personnes. iv, v, vii, x, 49, 50, 59–61, 63, 65, 67–71, 74, 77, 79, 80, 84, 88, 90, 92–95, 97–107, 110, 112, 114, 116, 118–125, 129, 196–204, 206, 212, 217, 218

## **conflit de coordination**

Conflit entre deux sujets qui peut survenir lorsque les deux sujets tente d'accéder ou de déformer un objet au même instant. 20, 69–72, 74, 99, 106, 112, 116, 121, 124, 125, 129, 130, 138

## **curseur**

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 181

## **docking moléculaire**

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe de molécules stable. iii, ix, xv, 3, 4, 6–9, 11–13, 24, 31, 78, 80, 134, 137

## **effecteur terminal**

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. xi, xii, 90, 92–94, 97, 101, 120, 124, 126, 181, 198, 201, 202, 205, 208

## **facilitation sociale**

En anglais *social facilitation* [TRIPLETT 1900], phénomène de groupe où les personnes fournissent plus d'efforts grâce à la présence de partenaires. 17–19, 21, 110, 111, 120, 121, 129

## **homoscedasticité**

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 60, 88

**meneur**

En anglais *leader*, personne qui dirige un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est celui qui prend les décisions (voir aussi suiveur). v, 72, 105, 109, 112, 116, 121, 126, 127, 129, 130, 182, 203, 218

**monomanuel**

Qui se fait avec une main. 79, 94, 99, 105, 116, 129

**monôme**

*Groupe* constitué d'une unique personne. vii, x, 59–61, 63, 72, 74, 79, 80, 84, 90, 92–95, 97–106, 196, 197, 199–202, 212, 217, 218

 **paresse sociale**

En anglais *social loafing* [RINGELMANN 1913], phénomène de groupe où les personnes fournissent moins d'effort pour la réalisation d'une tâche que s'ils effectuaient la tâche seuls. 19–23, 25, 104, 111, 125, 126, 129

**quadrinôme**

Groupe constitué de 4 personnes. 114, 116, 118–126, 129, 203, 204, 206

**réalité virtuelle**

C'est une simulation informatique interactive qui immerge un ou plusieurs utilisateurs dans un environnement multimodal. 9, 11, 12

**résidu**

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. x, xiii, xv, 31, 41, 42, 47, 48, 50, 52, 53, 55, 57, 59, 61, 63–65, 68–71, 74, 75, 82, 83, 88, 98, 103, 113, 114, 116, 134, 135, 138, 145, 191, 197–199, 201

**structure informelle**

Groupe de personnes sans structures ni hiérarchie. 127, 129

**suiveur**

En anglais *follower*, personne qui se laisse diriger dans un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est une personne qui ne prend pas de décision (voir aussi meneur). 72, 126, 127, 129, 130, 181

**trinôme**

Groupe constitué de 3 personnes. 135, 138

**variable dépendante**

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 182



**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. 182, 197, 201, 204, 207

5 **variable inter-sujets**

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 90, 201, 204

**variable intra-sujets**

10 Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 60, 90, 197, 201, 204, 207



# Acronymes

## AFM

Microscope permettant l'observation de la topologie de la surface d'un échantillon au niveau atomique. 50

## 5 CUDA

Technologie permettant d'utiliser l'unité graphique d'un ordinateur pour effectuer des calculs à hautes performances. 34

## DDL

10 Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre.  
ix, 12, 44, 45, 51, 86

## 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. 37, 52, 75, 78–80, 113, 134, 190

## 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. 43

## 20 ICM

Méthode de recherche dans un espace de solutions similaire à une descente de gradient. 7, 9

## IMD

25 Programme permettant de connecter le logiciel de visualisation moléculaire VMD avec le logiciel de simulation NAMD pour une simulation interactive en temps-réel [STADLER *et al.* 1997]. 34, 43, 78, 185

## ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel IMD. 43

#### CNRS—LIMSI

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. 196, 200, 203

#### NAMD

5 Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS *et al.* 2005]. 34, 42, 43, 47, 78, 137, 185, 190

#### PCV

10 Dans une application de réalité virtuelle, les activités d'un sujet peuvent toujours être décomposées en quatre comportements de base, appelés Primitive Comportementale Virtuelle (PCV), qui sont : observer, se déplacer, agir et communiquer [FUCHS *et al.* 2006]. 50, 78, 110, 186

#### RMSD

15 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. xii, 80, 113, 137, 141–143, 145, 202, 205, 207, 209

#### SUS

Échelle de notation entre 0 et 100 proposée par BROOKE [1996] permettant d'évaluer l'utilisabilité d'un système. vii, 208, 219, 224, 225

#### 20 TRM

Cette théorie, élaborée par WICKENS [1984] (MRT pour *Multiple Resource Theory*), propose un modèle pour la gestion des charges de travail pour un humain. 94

#### UDP

25 c'est un des principaux protocole de télécommunication sur internet ; il a pour distinction de ne pas vérifier l'intégrité des données transmises. 78

#### UML

30 C'est un langage graphique de modélisation utilisé principalement en génie logiciel. ix, x, 34

#### VMD

Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY *et al.* 1996]. x, 9, 12, 34, 39–45, 50, 51, 59, 165, 185, 190, 191

#### VRPN

35 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]. 34, 39, 45, 57, 114, 138, 190

# Annexes



Annexe



## **Dispositif expérimental**

## A.1 Matériel expérimental

Les expérimentations se basent sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 33. Dans cette section, nous allons présenter le matériel utilisé et sa disposition.

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

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

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

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

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

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

---

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



## A.2 Présentation des molécules

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

### A.2.1 Liste des molécules

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

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

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

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

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

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

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

### A.2.2 Représentation des molécules

La représentation des molécules est un domaine de recherche à part entière. En effet, la complexité et l'abondance d'informations à visualiser nécessite

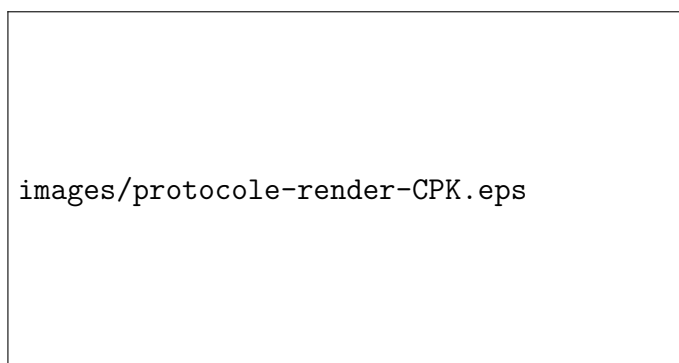
---

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

des rendus graphiques avancés et complémentaires. De plus, la quantité importante d'informations à représenter peut nécessiter une machine puissante afin de générer un rendu en temps-réel. Heureusement, VMD possède un moteur de rendu graphique avancé (voir ?? page ??), aussi bien en terme de  
5 choix de rendu qu'en terme d'accélération graphique.

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

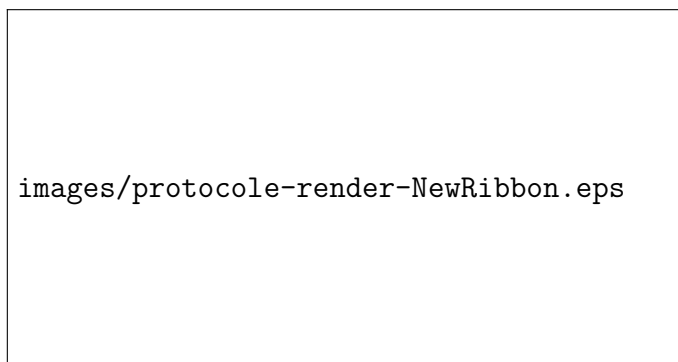
10 Tout d'abord, les atomes étant l'élément constituant de la molécule, il est nécessaire de les représenter en intégralité. Cependant, ils sont très nombreux et produisent rapidement une surcharge de la scène donc le choix de leur taille est primordial. Une première solution est de s'affranchir, partiellement,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



**Figure A.1** – Représentation des atomes avec CPK

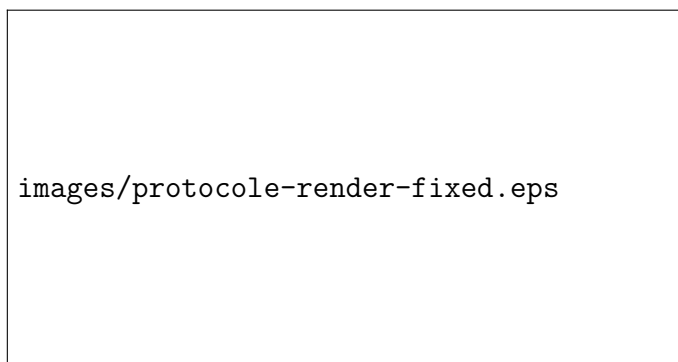
Cependant, la représentation de la molécule exclusivement avec les atomes  
20 et les liaisons entre les atomes ne permet pas d'appréhender la structure globale. En effet, on peut voir une molécule comme un long brin qui se replie sur lui-même avec des feuilles tout le long du brin. Il est donc pertinent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

25 Pour finir, pour des raisons physiques d'interaction, certains atomes sont fixés au niveau de la simulation afin d'éviter des dérives de la molécule. Ces atomes



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

sont signalés visuellement par une représentation en gris (voir figure A.3 page suivante).



**Figure A.3** – Représentation des atomes fixés en gris

## A.3 Outils de manipulation

La plate-forme de base propose deux interfaces haptiques. Ces deux interfaces haptiques sont utilisées comme interfaces de déformation de la molécule :  
5 des outils *tug*. Pour comprendre ce que sont des outils de déformation, on peut se reporter à la section 2.4.2 page 45. Au cours des trois premières expérimentations, seules quelques modifications du rendu visuel associés à ces outils sont effectués. Cependant, la quatrième expérimentation apporte des modifications plus lourdes de cet outil que ce soit au niveau visuel ou au  
10 niveau haptique. On pourra se reporter aux chapitres respectifs pour plus de détails.

De plus, un outil de manipulation et d'orientation de la molécule sera proposé sous différentes formes au cours des différentes expérimentations. Ce sera par l'intermédiaire d'un outil *grab* dans la première expérimentation (voir section 3.3.2 page 57), par une souris 3D dans la seconde (voir section 4.3.2 page 84) puis par une simple souris USB dans la dernière expérimentation (voir section 6.3.2 page 136).

# Méthode expérimentale

## Sommaire

5	<b>A.1 Matériel expérimental . . . . .</b>	<b>188</b>
	<b>A.2 Présentation des molécules . . . . .</b>	<b>189</b>
	A.2.1 Liste des molécules . . . . .	189
	A.2.2 Représentation des molécules . . . . .	189
10	<b>A.3 Outils de manipulation . . . . .</b>	<b>192</b>

## B.1 Première expérimentation

### B.1.1 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.

### B.1.2 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une distribution d'âge de  $\mu = 27.8$ ,  $\sigma = 7.2$  ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au

sein du Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs, assistants de recherche, étudiants en thèse ou stagiaires dans les domaines suivants :

- 5 – 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  
10 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.

### 15 B.1.3 Variables

#### Variables indépendantes

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

20  $\mathcal{V}_{i2}$  **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 54). Différents niveaux de complexité caractérisent chaque résidu (voir table 3.2 page 55).

#### Variables dépendantes

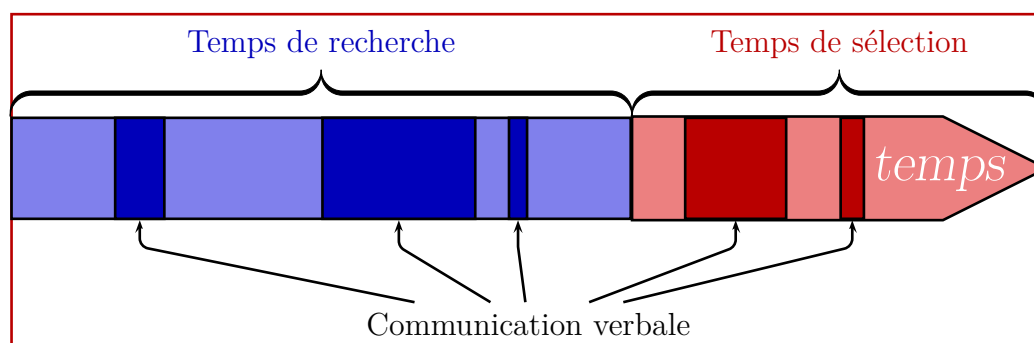
25  $\mathcal{V}_{d1}$  **Temps de réalisation** Ce temps est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire trouver le résidu et l'extraire de la molécule. Il n'y a pas de limite de temps pour réaliser la tâche. Ce temps est divisé en deux phases bien distinctes :

**La recherche** C'est la phase pendant laquelle les sujets cherchent le résidu.  
30 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.

5  $\mathcal{V}_{d2}$  **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.

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



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

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

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

$\mathcal{V}_{d5}$  **Force moyenne appliquée par les sujets** Le force appliquée par chaque sujet sur les atomes pendant 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  
5 la section C.1 page 210.

### B.1.4 Procédure

L'expérimentation débute par une phase d'apprentissage sur 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  
10 maximum 5 mn. L'expérimentateur est disponible pour répondre aux questions des sujets.

Lorsque l'étape d'apprentissage est terminée, nous présentons aux sujets la série de 10 résidus selon la procédure suivante. Le premier résidu est affiché sur l'écran LCD et les sujets débutent la phase de recherche. Lorsque le résidu  
15 est identifié, sélectionné puis extrait hors de la molécule, l'application est arrêtée. Ensuite, un second résidu est affiché, l'application est de nouveau démarrée et ainsi de suite pour les 10 résidus à identifier. 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  
20 biais lié à l'apprentissage de la plate-forme et de la tâche. Les sujets sont tenus de trouver et extraire dix résidus en monôme et dix résidus 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 :

- 25 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), un questionnaire leur est proposé. Chaque  
30 sujet répond au questionnaire de manière autonome, sans communiquer avec son partenaire.

## B.2 Seconde expérimentation

### B.2.1 Hypothèses

Les hypothèses de cette nouvelle étude sont en grande partie basée sur l'étude  
5 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  
10 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.

15  $\mathcal{H}_2$  **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  
20 l'hypothèse que le travail en collaboration augmente la vitesse d'apprentissage  
de la tâche. En effet, nous supposons que l'interaction entre les partenaires  
va stimuler l'apprentissage et permettre l'échange des connaissances.

$\mathcal{H}_4$  **Les sujets préfèrent le travail en collaboration** Nous souhaitons évaluer  
auprès des utilisateurs l'intérêt vis-à-vis du travail collaboratif. Notre  
25 hypothèse est que les utilisateurs préfèrent le travail collaboratif. En effet,  
le contact social et la possibilité de communiquer sont des apports appréciés  
dans le milieu du travail.

### B.2.2 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 25.9$ ,  
 $\sigma = 4.7$  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 ;
- 5 – réalité virtuelle et système immersifs ;
- audio-acoustique.

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

10 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.

## B.2.3 Variables

### Variables indépendantes

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

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

$\mathcal{V}_{i3}$  **Le niveau d'apprentissage** La troisième variable indépendante est une variable intra-sujets. Tous les sujets sont confrontés trois fois à la même série de tâches (quatre scénarios) sur trois jours successifs afin d'observer l'effet  
25 de l'apprentissage en monôme et en binôme.

### Variables dépendantes

$\mathcal{V}_{d1}$  **Temps de réalisation** C'est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre la conformation finale. Le temps est limité à 10 mn. Au-delà de cette limite, l'application est arrêtée

$\mathcal{V}_{d2}$  **Nombre de sélections** C'est le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome ou un résidu est sélectionné par chacun des deux effecteur terminal.

5  $\mathcal{V}_{d3}$  **Distance passive entre les espaces de travail** C'est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux pendant toute la durée de chaque tâche. Mesurée dans l'espace physique de l'utilisateur, elle est de l'ordre du centimètre.

$\mathcal{V}_{d4}$  **Distance active entre les espaces de travail** Basée sur le même principe que la précédente, elle mesure la distance entre les deux effecteurs terminaux. Cependant, la moyenne est calculée seulement sur les distances lorsque les deux effecteurs terminaux sont en phase de sélection, lorsqu'ils sont actifs. Les distances ne sont pas prises en compte lorsque les deux effecteurs terminaux sont inactifs ou que seulement un des deux est en phase de sélection.  
15 Cette moyenne est également de l'ordre du centimètre.

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

$\mathcal{V}_{d6}$  **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets  
20 (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 exposé dans la section C.2 page 216.

## B.2.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule  
25 Prion. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontées aux scénarios 1A et 1B. Les scénarios sont alternés entre les groupes de sujets  
30 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 achevés, 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 ou  
5 lorsque 10 mn de déformation sont dépassées.

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

## B.3 Troisième expérimentation

### 10 B.3.1 Hypothèses

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

$\mathcal{H}_1$  **Amélioration des performances en quadrinôme** Nous émettons l'hypothèse que les performances des quadrinômes seront meilleures que les performances des binômes. Cette hypothèse vient contredire les conclusions obtenue par ZAJONC [1965] concernant les tâches complexes. Cependant, notre contexte est différent puisqu'il concerne la collaboration étroite et nous pensons que dans ce contexte, il est nécessaire d'augmenter le nombre de sujets  
15 pour améliorer les performances, même sur une tâche complexe.  
20

$\mathcal{H}_2$  **Émergence de meneur dans le quadrinôme** D'après BALES [1950], les groupes restreints voient émerger un voire deux meneurs, quelque soit la taille du groupe. Nous émettons l'hypothèse que l'émergence d'un meneur aura également lieu dans notre contexte de collaboration étroitement couplée.

$\mathcal{H}_3$  **Le *brainstorming* structure le quadrinôme** Dans cette nouvelle expérimentation, nous allons étudier la mise en place d'une période de réflexion, également appelée *brainstorming*, avant le début de la tâche. Nous émettons l'hypothèse que cette période de réflexion sera principalement utile pour les quadrinômes.  
25

### B.3.2 Sujets

16 sujets (4 femmes et 12 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 26.1$ ,  $\sigma = 5.3$  ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont étudiants, chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

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

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

### B.3.3 Variables

#### Variables indépendantes

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

$\mathcal{V}_{i2}$  **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées et décrites dans la section 5.3.1 page 113.

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

## Variables dépendantes

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

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

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

$\mathcal{V}_{d4}$  **Force moyenne appliquée par les sujets** La force appliquée sur les atomes durant la simulation par les sujets est mesurée. C'est la force appliquée lorsqu'un atome est sélectionné. La mesure conservée est la valeur moyenne sur l'ensemble de la tâche réalisée.

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

**Les observations** pour indiquer aux autres sujets une intention d'action ou pour informer sur l'état actuel de l'environnement ;

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

## B.3.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule TRP-CAGE. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Les sujets ayant déjà réalisé une expérience sur la plate-forme, cette phase est effectuée pour se remémorer l'environnement et les outils. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontés au scénario 1. Puis dans un second temps, le scénario 2 leur est proposé. Pour chaque scénario, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil RMSD  
5 (voir section 4.3.1 page 80) désiré est atteint. L'ordre de ces deux scénarios n'est pas contre-balancé sur les différents groupes de sujets.

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

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

## 15 **B.4 Quatrième expérimentation**

### **B.4.1 Hypothèses**

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

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

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



## B.4.2 Sujets

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

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

Nombre de sujets  
Remplir toutes les in-  
formations statistiques  
concernant les sujets

## B.4.3 Variables

### Variables indépendantes

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

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

### 25 Variables dépendantes

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

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

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

$\mathcal{V}_{d4}$  **Communications verbales et gestuelles** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. De plus, la vidéo permet de mettre en relation les différentes phases de l'expérimentation (déformation, désignation, modification du point de vue de la scène, *etc.*) avec la quantité de temps de parole.

$\mathcal{V}_{d5}$  **Test d'utilisabilité de la plate-forme** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Ce questionnaire est une traduction en français du questionnaire SUS (*System Usability Scale*) proposé par BROOKE [1996]. La traduction soumise aux sujets est disponible dans la section C.3 page 217. Il nous permet d'obtenir un score d'utilisabilité de la plate-forme compris entre 0 et 100.

#### B.4.4 Procédure

La procédure expérimentale se déroule en neuf phases bien distinctes.

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

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

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

**Phase 3 : introduction de l'haptique** Cette troisième phase est également une phase d'entraînement sur la molécule Prion. L'entraînement porte sur l'introduction des assistances haptiques (présentées dans la section 6.3.1 page 133) sur les outils de désignation et de déformation. De plus, cette seconde molécule d'entraînement permet de familiariser les sujets avec une molécule de taille importante. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire pour une bonne compréhension des assistances haptiques proposées.

**Phase 4 : outil de manipulation** Cette nouvelle phase d'entraînement sur la molécule TRP-ZIPPER est destinée à introduire l'outil de manipulation. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire afin que le coordinateur assimile correctement ce nouvel outil.

**Phase 5 : première étape d'évaluation** Cette première étape d'évaluation concerne les deux scénarios à réaliser (scénario 1 et scénario 2) sur la molécule Ubiquitin et le complexe de molécules NUSE:NUSG. L'évaluation s'effectue en deux étapes, avec et sans assistance haptique. En fonction des groupes et afin de contrebalancer la variable  $\mathcal{V}_{11}$ , la première étape d'évaluation s'effectue avec ou sans haptique.

On présente le scénario 1 puis le scénario 2 toujours dans cet ordre. Pour le scénario 1, seuls les outils de désignation et de déformation sont présents. Tous les outils disponibles sont proposés pour le scénario 2.

Au début de chaque scénario, une période de 1 mn de *brainstorming* est laissée aux sujets pendant laquelle ils peuvent visualiser et explorer la molécule non soumise à la simulation. Ensuite, la phase de déformation est proposée. L'objectif est d'atteindre le score RMSD le plus petit possible dans un temps limité à 8 mn. Les sujets peuvent décider de s'arrêter avant les 8 mn s'ils estiment ne pas pouvoir obtenir un meilleur score.

**Phase 6 : première partie du questionnaire** Lorsque la première étape d'évaluation est terminée, une première partie du questionnaire est proposée aux sujets (voir section C.3 page 217). La section à remplir dépend du premier

passage : avec ou sans assistance haptique. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

**Phase 7 : Deuxième étape d'évaluation** La deuxième étape d'évaluation est identique à la première excepté pour la variable  $\mathcal{V}_{i1}$ . Si les sujets ont été confrontés à une assistance haptique dans la première étape, alors la seconde étape s'effectuera sans assistance haptique et réciproquement.

Durant cette deuxième étape, il n'y a pas de phase exploratoire étant donné que les sujets connaissent déjà la molécule. Seules les deux phases de déformations de 8 mn, Ubiquitin puis NUSE:NUSG, sont proposées.

**Phase 8 : deuxième partie du questionnaire** La seconde partie du questionnaire est complémentaire à la première (voir section C.3 page 217). Les mêmes questions sont abordées mais pour cette deuxième étape de l'évaluation donc avec une condition différente concernant l'assistance haptique. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

**Phase 9 : questionnaire d'utilisabilité** Pour terminer l'expérimentation, les sujets sont invités à remplir un questionnaire d'utilisabilité (voir section C.3 page 217). Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux. Des informations concernant les caractéristiques du sujet sont également demandées à la fin du questionnaire. L'enregistrement vidéo est arrêté à la fin de cette phase.



# Questionnaires

## Sommaire

5	<b>B.1 Première expérimentation . . . . .</b>	<b>194</b>
	B.1.1 Hypothèses . . . . .	194
	B.1.2 Sujets . . . . .	194
	B.1.3 Variables . . . . .	195
10	B.1.4 Procédure . . . . .	197
	<b>B.2 Seconde expérimentation . . . . .</b>	<b>198</b>
	B.2.1 Hypothèses . . . . .	198
	B.2.2 Sujets . . . . .	198
	B.2.3 Variables . . . . .	199
15	B.2.4 Procédure . . . . .	200
	<b>B.3 Troisième expérimentation . . . . .</b>	<b>201</b>
	B.3.1 Hypothèses . . . . .	201
	B.3.2 Sujets . . . . .	202
	B.3.3 Variables . . . . .	202
20	B.3.4 Procédure . . . . .	203
	<b>B.4 Quatrième expérimentation . . . . .</b>	<b>204</b>
	B.4.1 Hypothèses . . . . .	204
	B.4.2 Sujets . . . . .	205
	B.4.3 Variables . . . . .	205
25	B.4.4 Procédure . . . . .	206

## C.1 Première expérimentation

Le questionnaire proposé durant cette expérimentation est constitué de deux parties. La deuxième partie est exclusivement réservée aux binômes et n'était  
5 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.

images/exp1-questionnaire-1.ps

images/exp1-questionnaire-2.ps



images/exp1-questionnaire-3.ps

images/exp1-questionnaire-4.ps

images/exp1-questionnaire-5.ps

## C.2 Seconde expérimentation

Le questionnaire proposé durant la seconde expérimentation est décliné en deux versions : une version pour les monômes et une version pour les binômes.

- 5 Le questionnaire est soumis aux sujets oralement par l'expérimentateur et les réponses sont directement reportées dans une tableau. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

### C.2.1 Questionnaire pour les monômes

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

- 10 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 ?

### 15 C.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 ?
- 20 2. Comment évalueriez-vous votre taux de communication. . .
- verbale ?
  - gestuelle ?
  - virtuelle ?
3. Vous sentez-vous utile dans le groupe (par opposition à pénalisant) ?
- 25 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 ?

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  
5 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).

### **C.3 Quatrième expérimentation**

- 10 Le questionnaire proposé durant la quatrième et dernière expérimentation contient une traduction en français du questionnaire SUS proposé par BROOKE [1996]. Une explication détaillé de ce questionnaire se trouve dans la section C.3.1 page 223. Le questionnaire est soumis sous un format papier et chaque utilisateur est invité à y répondre seul, sans l'aide de ces partenaires. Il est  
15 constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

images/exp4-questionnaire-1.ps

images/exp4-questionnaire-2.ps

images/exp4-questionnaire-3.ps



images/exp4-questionnaire-4.ps

images/exp4-questionnaire-5.ps

### C.3.1 Le questionnaire SUS

#### Les questions

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

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

#### Évaluation du score SUS

Afin d'évaluer le score SUS à partir du questionnaire, chaque question doit  
avoir une note comprise entre 0 et 4. Concernant les questions 1, 3, 5, 7 et  
25 9, on prend le score compris en 1 et 5 auquel on enlève 1. Concernant les  
questions 2, 4, 6, 8 et 10, on soustrait de 5 le score compris en 1 et 5. Pour  
terminer, on multiplie par 2.5 la somme de l'ensemble des scores. Le score  
final obtenu est une note comprise entre 0 et 100.

#### Exemple de score SUS

30 Imaginons un questionnaire rempli de la façon suivante :

- Q1. réponse 5  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$
- Q2. réponse 4  $\Rightarrow$  score  $5 - 4 = 1$

Q3. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

Q4. réponse 1  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$

Q5. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

5 Q6. réponse 3  $\Rightarrow$  score  $5 - 3 = 2$

Q7. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

Q8. réponse 4  $\Rightarrow$  score  $5 - 4 = 1$

Q9. réponse 5  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$

Q10. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $5 - 2 = 3$

10 Le score total peut maintenant être calculé.

5470  $(4 + 1 + 1 + 4 + 1 + 2 + 1 + 1 + 4 + 3) \times 2.5 = 22 \times 2.5 = 55$