

Thèse en Informatique

Jean SIMARD

Interactions haptiques collaboratives pour la manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

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

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

Table des matières

| | |
|---|----------|
| Table des matières | iii |
| Table des figures | v |
| Liste des tableaux | vii |
| | |
| I Le sujet | 1 |
| | |
| 1 Introduction | 3 |
| 1.1 État de l’art | 3 |
| 1.2 Contexte | 3 |
| 1.2.1 L’amarrage moléculaire | 3 |
| | |
| II Étude du travail collaboratif | 5 |
| | |
| 2 La recherche collaborative | 7 |
| 2.1 Présentation | 7 |
| 2.1.1 Objectifs | 7 |
| 2.1.2 Hypothèses | 7 |
| 2.2 Dispositif expérimental et matériel | 8 |
| 2.3 Méthode | 9 |
| 2.3.1 Sujets | 9 |
| 2.3.2 Variables | 9 |
| 2.3.3 Tâche | 11 |
| 2.3.4 Procédure | 13 |
| 2.4 Résultats | 15 |

Table des matières

| | | |
|------------|--|-----------|
| 3 | La manipulation collaborative | 17 |
| 3.1 | Présentation | 17 |
| 3.1.1 | Objectifs | 17 |
| 3.1.2 | Hypothèses | 18 |
| 3.2 | Dispositif expérimental et matériel | 18 |
| 3.3 | Méthode | 19 |
| 3.3.1 | Sujets | 19 |
| 3.3.2 | Variables | 19 |
| 3.3.3 | Tâche | 21 |
| 3.3.4 | Procédure | 24 |
| 4 | Les dynamiques de groupe | 25 |
| III | Propositions pour le travail collaboratif | 27 |
| 5 | Travail collaboratif assisté par haptique | 29 |
| IV | Synthèse | 31 |
| 6 | Conclusion et perspectives | 33 |
| | Glossary | 35 |
| | Acronyms | 37 |
| | Appendices | 41 |
| A | Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design | 41 |

Table des figures

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Illustration du dispositif expérimental | 8 |
| 2.2 | Schéma des phases de la communication verbale | 10 |
| 2.3 | Répartition des résidus sur les molécules | 14 |
| 2.4 | Temps de complétion par résidu | 16 |
| 2.5 | Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu | 16 |
| 3.1 | Illustration du dispositif expérimental | 19 |
| 3.2 | Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible | 22 |

Table des figures

Liste des tableaux

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Liste des résidus recherchés | 12 |
| 2.2 | Paramètres de complexité des résidus – C arbone en <i>cyan</i> , A zote en <i>bleu</i> , O xygène en <i>rouge</i> et S oufre en <i>jaune</i> | 13 |
| 2.3 | Synthèse de la procédure expérimentale | 15 |
| 3.1 | Paramètres de complexité des tâches | 23 |
| 3.2 | Synthèse de la procédure expérimentale | 24 |

Liste des tableaux

Liste des *À faire*

Liste des À faire

Première partie

Le sujet

Chapitre 1

Introduction

1.1 État de l’art

1.2 Contexte

1.2.1 L’amarrage moléculaire

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

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

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

Pour chacun de ces différents niveaux, le processus de manipulation est similaire et peut être séparé en sous-tâches :

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

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

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

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

Deuxième partie

Étude du travail collaboratif

Chapitre 2

La recherche collaborative

2.1 Présentation

2.1.1 Objectifs

Dans cette première expérimentation, nous proposons d'étudier la première des quatre sous-tâches élémentaires (voir Section 1.2.1 page 3) : la *recherche*. Cette sous-tâche est cruciale car elle a un impact important sur les sous-tâches suivantes. Les difficultés liées à la complexité de l'environnement virtuel moléculaire seront étudiées à travers l'étude de cette sous-tâche.

Cette première expérimentation a pour objectif principal de comparer un monôme et un binôme. Deux facteurs seront étudiés lors de cette comparaison.

Le premier facteur concerne les performances. Les performances représentent à la fois le temps total pour réaliser la tâche mais aussi les ressources mises en place pour accéder à ce résultat. Un binôme sera-t-il plus performant qu'un monôme ?

Le second facteur concerne les méthodes et les stratégies de travail. C'est principalement l'évolution de ces stratégies au sein des binômes qui focalisera notre attention. Le travail en binôme permettra de mettre en avant différentes stratégies de travail discriminées en fonction de la communication, des espaces de travail, de la répartition des tâches, *etc.*

2.1.2 Hypothèses

(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme La première hypothèse est une amélioration des performances pour les binômes comparés aux monômes. Cette amélioration se traduira principalement par une réalisation de la même tâche en un temps réduit.

Un micro de bureau est placé en face des deux sujets afin de capter toutes les communications orales. L'enregistrement, réalisé à l'aide du logiciel Audacity, débute à la fin de la phase d'entraînement.

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au Chapitre A page 41.

2.3 Méthode

2.3.1 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 27.8$ ($\sigma = 7.19$) ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

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

Chaque participants 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.

2.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-population, c'est-à-dire que tous les sujets sont expérimentés dans toutes les modalités de cette variable. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». Les sujets seuls et les sujets en couples ont à leur disposition deux outils haptiques de déformation et un outil haptique de manipulation. Pour les binômes, seulement un des deux sujets est désigné pour l'utilisation exclusive de l'outil de manipulation. 24 monômes et 12 binômes ont été testés ce qui fait deux fois plus de monômes que de binômes.

(\mathcal{V}_{i2}) **Résidu recherché** La seconde variable indépendante est une variable intra-population. (\mathcal{V}_{i2}) concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans deux molécules (voir Table 2.1 page 12).

Variables dépendantes

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

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

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

Il n'y a pas de limite de temps pour réaliser la tâche.

(\mathcal{V}_{d2}) **La distance entre les espaces de travail** Cette distance est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux présents durant l'expérimentation. Cette distance représente donc une distance physique du monde réel, pas une distance virtuelle. Elle est de l'ordre du centimètre.

(\mathcal{V}_{d3}) **Les communications orales** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. Ces mesures discriminent la phase de recherche de la phase de sélection (voir (\mathcal{V}_{d1})) comme indiqué plus précisément sur la Figure 2.2.

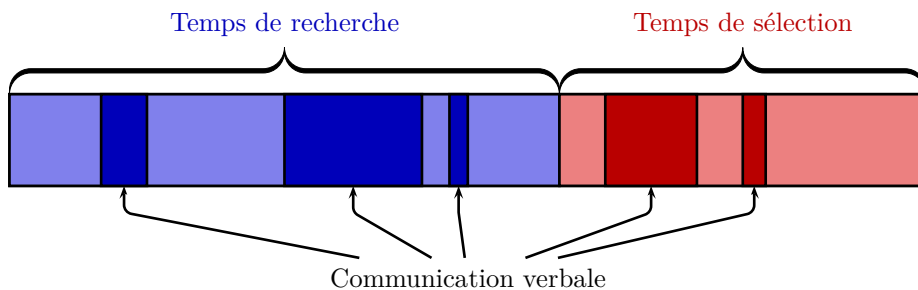


Figure 2.2 – Schéma des phases de la communication verbale

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

1. Les sujets ne se connaissent pas ;
2. Les sujets travaillent dans la même entreprise, le même laboratoire ;
3. Les sujets travaillent dans la même équipe ;
4. Les sujets travaillent dans le même bureau ;
5. Les sujets sont amis.

(\mathcal{V}_{d5}) **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Il est constitué de plusieurs questions (notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux).

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

1. Dans quelle configuration vous êtes-vous senti le plus efficace : *seul* ou *en collaboratif* ?
2. Vous êtes vous senti utile dans la configuration collaborative (par opposition à pénalisant) ?
3. Pensez-vous avoir une position de meneur dans la configuration collaborative ?
4. Comment évalueriez-vous votre taux de communication...
 - verbale ?
 - gestuelle ?
 - virtuelle ?

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

2.3.3 Tâche

La tâche proposée est la recherche et la sélection dans un EVC sur des molécules complexes. Les motifs à rechercher dans les structures moléculaires sont les résidus du Table 2.1 page suivante. Une fois le résidu trouvé, les sujets doivent le sélectionner puis l'extraire hors de la sphère virtuelle englobant la molécule. Les sujets possèdent deux outils pour trouver, sélectionner puis extraire ces motifs :

- ils peuvent explorer la molécule en la déplaçant ou en la tournant à l'aide de l'outil *grab* ;
- ils peuvent déformer la molécule à l'aide de l'outil *tug*.

La première molécule est couramment nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] et a pour identifiant PDB 1L2Y sur la *Protein DataBase*¹. La seconde molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB 2KFL. Cinq résidus sont présents sur chaque molécule (voir Figure 2.3 page 14) et chacun présente différents niveaux de complexité. Les critères de complexité, résumés dans le Table 2.2 page 13, sont les suivants :

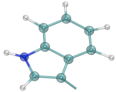

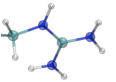
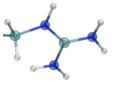
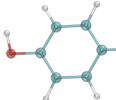
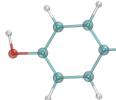
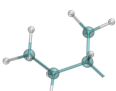
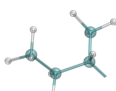
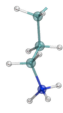
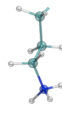
Position La position du résidu peut se trouver sur le pourtour de la molécule, en position *externe* ou à l'intérieur, au milieu de l'amas d'atome (position

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

Table 2.1 – Liste des résidus recherchés

(a) Résidus sur la molécule TRP-CAGE

(b) Résidus sur la molécule Prion

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

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 influe énormément sur la complexité de la recherche. On distingue trois formes différentes :

Chaîne Un enchaînement d’atomes seuls les atomes d’hydrogène sont de part et d’autres de cet enchaînement.

Cercle Une chaîne d’atomes de carbone ou d’azote qui boucle sur elle-même.

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

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

Similarité Certains résidus à chercher sont très similaires à d’autres résidus également présents sur la molécule. De par leur similarité, ils vont mobiliser la recherche sur des résidus incorrects.

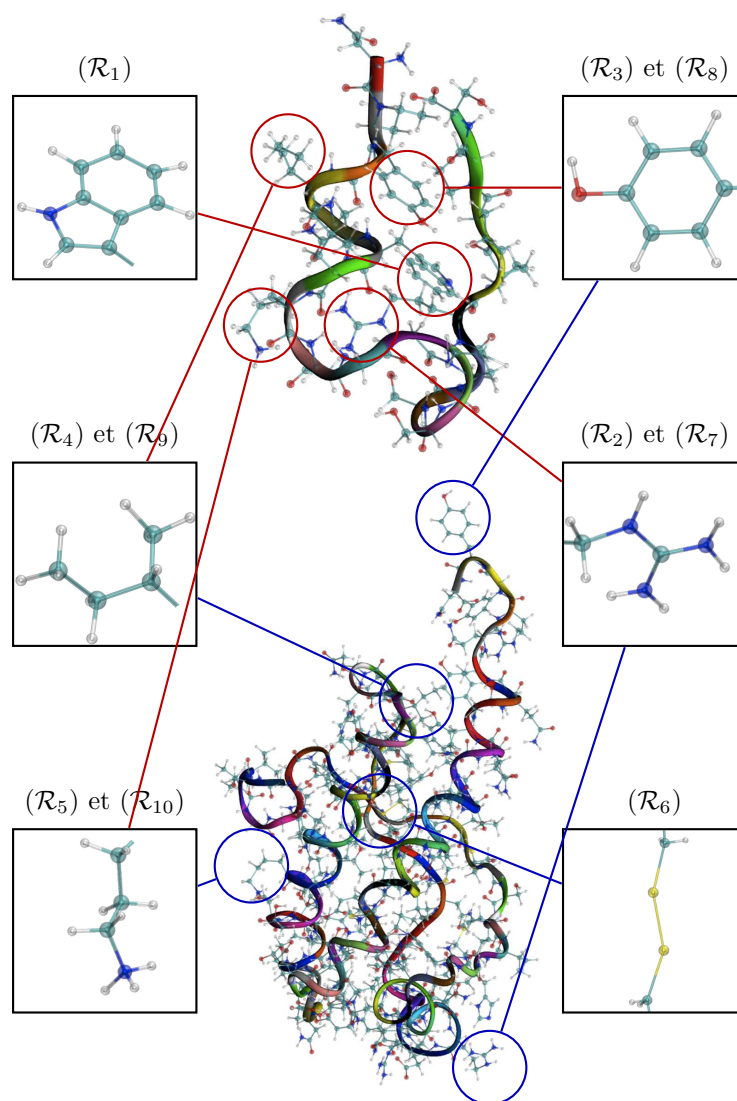
Table 2.2 – Paramètres de complexité des résidus – Carbone en *cyan*, Azote en *bleu*, Oxygène en *rouge* et Soufre en *jaune*

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

2.3.4 Procédure

Pour débiter cette expérimentation, les sujets sont confrontés à un exemple sur la molécule TRP-ZIPPER [CHRISTEN et al. 2009] avec l’identifiant PDB

Figure 2.3 – Répartition des résidus sur les molécules



2KFL. Pendant la phase d'entraînement, les outils sont introduits et expliqués un par un. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans le Table 2.3.

Table 2.3 – Synthèse de la procédure expérimentale

| Tâche | Recherche et sélection de motifs | |
|--------------------------------|--|--------------------------------|
| Hypothèses | (\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme | |
| | (\mathcal{H}_2) Stratégies variables en fonction des binômes | |
| | (\mathcal{H}_3) Les sujets préfèrent le travail en binôme | |
| Variable in-dépendantes | (\mathcal{V}_{i1}) Nombre de sujets | |
| | (\mathcal{V}_{i2}) Résidu à chercher | |
| Variable dépendantes | (\mathcal{V}_{d1}) Temps de complétion | |
| | (\mathcal{V}_{d2}) Distance entre les espaces de travail | |
| | (\mathcal{V}_{d3}) Communication orales | |
| | (\mathcal{V}_{d4}) Affinités entre les sujets | |
| Condition (\mathcal{C}_1) | | Condition (\mathcal{C}_2) |
| Sujet A 10 résidus | | Sujet A 10 résidus |
| Sujet B 10 résidus | | Sujet A et B 10 résidus |
| Sujet A et B 10 résidus | | Sujet B 10 résidus |

2.4 Résultats

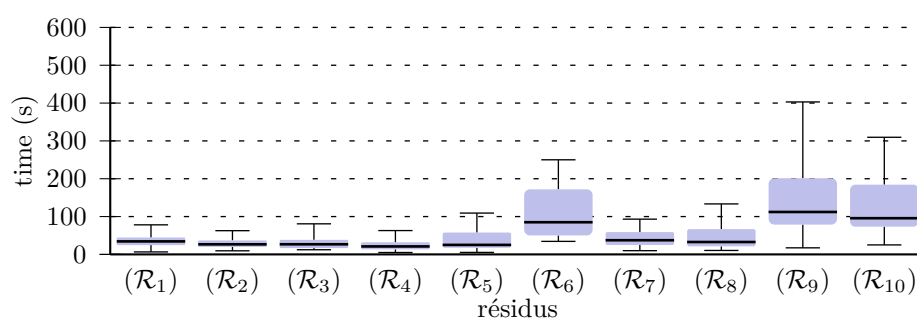


Figure 2.4 – Temps de complétion par résidu

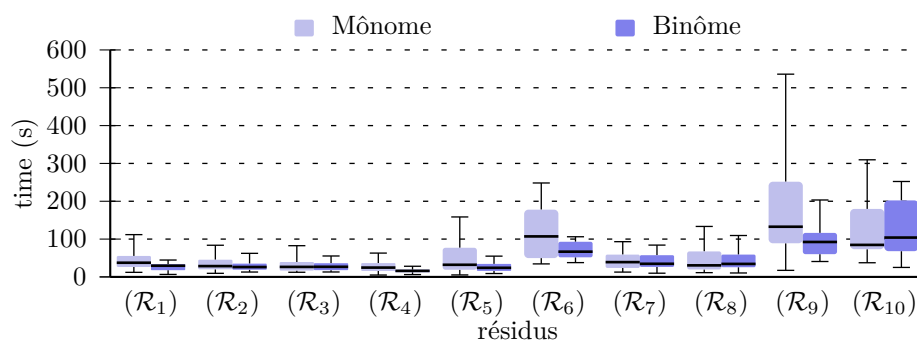


Figure 2.5 – Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu

Chapitre 3

La manipulation collaborative

3.1 Présentation

3.1.1 Objectifs

Après avoir traité la sous-tâche élémentaire de *recherche*, la seconde expérimentation traitera des sous-tâches élémentaires de *sélection* et de *déformation* (voir Section 1.2.1 page 3). Ces sous-tâches introduisent des actions qui nécessitent une grande synchronisation et permet de stimuler les collaborations étroites. La précédente expérimentation (voir Chapitre 2 page 7) a souligné l'avantage de la collaboration sur des tâches nécessitant un couplage fort. Les tâches proposées dans cette expérimentation sont élaborées pour stimuler les interactions entre les sujets.

L'expérimentation va de nouveau comparer un *monôme* et un *binôme*. La manipulation *bimanuelle* est opposée à la manipulation collaborative afin de tester les performances de synchronisation. En effet, la synchronisation d'un seul sujet utilisant ces deux mains face à deux sujets utilisant chacun une seule de leur main. Trois facteurs seront étudiés lors de cette comparaison.

Le premier facteur concerne les performances. Les performances représentent à la fois le temps total pour réaliser la tâche mais aussi les ressources mises en place pour accéder à ce résultat. Un *binôme* en configuration collaborative sera-t-il plus performant qu'un *monôme* en configuration *bimanuelle* ?

Le second facteur observé sera la complexité de la tâche proposée. Le lien entre la complexité de la tâche et la configuration (collaborative ou *bimanuelle*) est étudié en fonction des performances.

Le troisième facteur concerne l'apprentissage. En effet, quelque soit l'application et l'expérimentation proposée à des sujets, un phénomène d'apprentissage peut

être observé. Cette expérimentation compare l'évolution de l'apprentissage entre les configurations collaboratives et bimanuelle.

3.1.2 Hypothèses

(\mathcal{H}_1) Amélioration des performances en binôme La première hypothèse est une amélioration des performances pour les binômes en collaboratif comparés aux monômes en bimanuel. Cette amélioration se traduira principalement par une réalisation de la même tâche en un temps réduit. D'autres variables seront observées comme le nombre de sélections et la vitesse moyenne afin d'observer la répartition du travail entre les ressources disponibles.

(\mathcal{H}_2) Les binômes sont plus performants sur les tâches complexes Cette second hypothèse concerne la corrélation entre la complexité de la tâche et la configuration (binôme en collaboratif ou monôme en bimanuel) sur les performances. L'hypothèse formule que les binômes seront plus performants que les monômes sur les tâches les plus complexes.

(\mathcal{H}_3) L'apprentissage est plus performant pour les binômes L'hypothèse suppose que le travail collaboratif va stimuler l'apprentissage. L'échange des connaissances améliore l'apprentissage mais aussi grâce la multiplicité des avis et des idées pour répondre à un problème ou comprendre un événement.

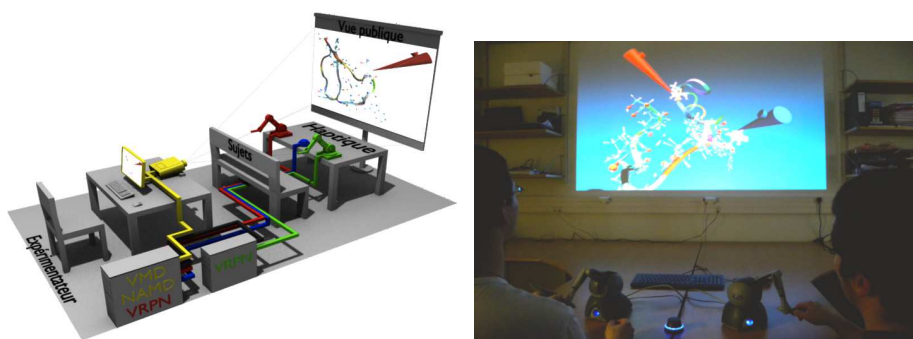
3.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la Figure 3.1 page suivante. Comme pour la première expérimentation (voir Section 2.2 page 8), l'EVC propose une visualisation partagée (vue publique) à l'aide d'un vidéoprojecteur sur un grand écran. Le ou les sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

- un interface de manipulation de type souris 3D ;
- deux interfaces haptiques de déformation *tug*.

Les sujets ont la possibilité de communiquer entre eux sans restriction. Pour les monômes, le sujet peut utiliser chaque outil comme il le souhaite. Pour les binômes, chaque sujet se voit attribuer un outil de déformation *tug*. L'outil de manipulation (la souris 3D) est laissé libre d'utilisation pour chacun des deux sujets.

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au Chapitre A page 41.



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

Figure 3.1 – Illustration du dispositif expérimental

3.3 Méthode

3.3.1 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 25.9$ ($\sigma = 4.70$) ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

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

Chaque participants 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.

3.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable inter-population, c'est-à-dire que les sujets sont expérimentés dans une seule modalité de cette variable. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». Les sujets seuls et les sujets en couples ont à leur disposition deux outils haptiques de déformation et un outil haptique de manipulation. Pour les binômes, seulement un des deux sujets est

désigné pour l'utilisation exclusive de la souris 3D. 12 monômes et 12 binômes sont testés.

(\mathcal{V}_{i2}) **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-population. Deux molécules de complexités différentes sont testées. Deux tâches de déformation sur chacune de molécules sont proposées : 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-population. Tous les sujets seront confrontés trois fois à la même tâche afin de voir l'effet de l'apprentissage en monôme et en binôme.

Variables dépendantes

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

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

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

(\mathcal{V}_{d4}) **La distance active entre les espaces de travail** Cette distance est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux présents seulement lorsque ces deux effecteurs terminaux sont en cours de manipulation (un atome ou un résidu est sélectionné).

(\mathcal{V}_{d5}) **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets (variable en fonction des monômes et des binômes). Il est constitué de plusieurs questions (notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux). Un questionnaire différent est adressé aux monômes et aux binômes.

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

1. Vous êtes-vous senti efficace ?

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

Pour les binômes, le questionnaire est le suivant (les questions sont posées à chaque sujet du binôme) :

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

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

3.3.3 Tâche

La tâche proposée est la déformation dans un EVC sur des molécules complexes. Deux niveaux différents de manipulation sont proposés :

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

Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation d'une molécule afin de la rendre conforme à un modèle. L'intégralité des atomes de la molécule à déformer est affiché. De plus, un *ruban* de cette molécule est affiché. En ce qui concerne la molécule cible (le modèle), seul un affichage de type *ruban* est utilisé. Cet affichage est appliqué en filigrane.

Lorsqu'un sujet sélectionne un atome ou un résidu, ce dernier est mis en surbrillance. De plus, l'atome ou le résidu correspondant sur la molécule cible est affiché afin de connaître la position finale de la sélection courante. La Figure 3.2 page suivante illustre ces différents effets graphiques.

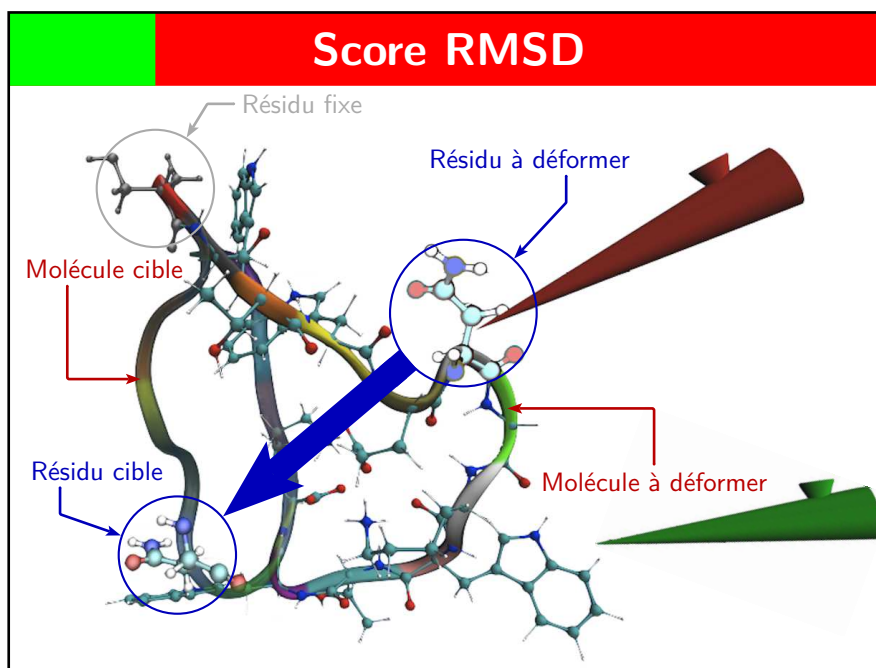


Figure 3.2 – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

La description des tâches

Une tâche pour chacun de ces deux échelles de manipulation est proposé sur chacune des deux molécules. La première molécule est couramment nommée TRP-ZIPPER [COCHRAN et al. 2001] a pour identifiant PDB 1LE1. La second molécule est couramment nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] a pour identifiant PDB 1L2Y. On peut donc distinguer quatre tâches différentes :

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

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

Tâche 2a Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle intra-moléculaire. Seulement trois résidus sont laissés libres tandis

que tous les autres sont fixés. Les contraintes physiques de cette tâche sont relativement faibles. Cependant, la difficulté de cette tâche réside dans la recherche des *résidus* à déformer qui ne sont pas aisés à trouver.

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

Un résumé de la complexité des quatre tâches est exposé dans le Table 3.1 selon les critères suivants :

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

résidu libre C'est le nombre de *résidus* non fixés sur la molécule ;

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

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

Table 3.1 – Paramètres de complexité des tâches

| | Tâche 1a | Tâche 1b | Tâche 2a | Tâche 2b |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|
| Nombre d'atomes | 218 | 304 | 218 | 304 |
| résidu libre | 11 | 19 | 3 | 7 |
| Cassure | 1 | 2 | 0 | 1 |
| Champ de force | Moyen | Moyen | Faible | Fort |

Les outils disponibles

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

3.3.4 Procédure

Pour débiter cette expérimentation, les sujets sont confrontés à un exemple sur la molécule Prion [COCHRAN et al. 2001] ayant pour identifiant PDB **1LE1**. Pendant la phase d’entraînement, les outils sont introduits et expliqués un par un. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l’expérimentateur. Dans le cas des binômes, cette phase d’entraînement est également l’occasion de choisir qui, parmi les deux sujets, sera en charge de la manipulation de la molécule à l’aide de l’outil de manipulation *grab*.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans le Table 3.2.

Table 3.2 – Synthèse de la procédure expérimentale

| Tâche | Déformation d’une molécule | | |
|--------------------------------|-------------------------------|---|-------------------------------|
| Hypothèses | (\mathcal{H}_1) | Amélioration des performances en binôme | |
| | (\mathcal{H}_2) | Binômes plus performants sur les tâches complexes | |
| | (\mathcal{H}_3) | Apprentissage plus performant en binôme | |
| Variable in-dépendantes | (\mathcal{V}_{i1}) | Nombre de sujets | |
| | (\mathcal{V}_{i2}) | Complexité de la tâche | |
| | (\mathcal{V}_{i3}) | Niveau d’apprentissage | |
| Variable dépendantes | (\mathcal{V}_{d1}) | Temps de complétion | |
| | (\mathcal{V}_{d2}) | Nombre de sélections | |
| | (\mathcal{V}_{d3}) | Distance passive entre les espaces de travail | |
| | (\mathcal{V}_{d4}) | Distance active entre les espaces de travail | |
| | (\mathcal{V}_{d5}) | Réponses qualitatives | |
| Condition (\mathcal{C}_1) | Condition (\mathcal{C}_2) | Condition (\mathcal{C}_3) | Condition (\mathcal{C}_4) |
| Bimanuel ($N = 1$) | Bimanuel ($N = 1$) | Collaboratif ($N = 2$) | Collaboratif ($N = 2$) |
| Tâche 1A | Tâche 1B | Tâche 1A | Tâche 1B |
| Tâche 1B | Tâche 1A | Tâche 1B | Tâche 1A |
| Tâche 2A | Tâche 2B | Tâche 2A | Tâche 2B |
| Tâche 2B | Tâche 2A | Tâche 2B | Tâche 2A |

Chapitre 4

Les dynamiques de groupe

Sommaire

| | | |
|-------|----------------------------------|---|
| 1.1 | État de l’art | 3 |
| 1.2 | Contexte | 3 |
| 1.2.1 | L’amarrage moléculaire | 3 |

Troisième partie

Propositions pour le travail collaboratif

Chapitre 5

Travail collaboratif assisté par haptique

Sommaire

| | | |
|------------|--|-----------|
| 2.1 | Présentation | 7 |
| 2.1.1 | Objectifs | 7 |
| 2.1.2 | Hypothèses | 7 |
| 2.2 | Dispositif expérimental et matériel | 8 |
| 2.3 | Méthode | 9 |
| 2.3.1 | Sujets | 9 |
| 2.3.2 | Variables | 9 |
| 2.3.3 | Tâche | 11 |
| 2.3.4 | Procédure | 13 |
| 2.4 | Résultats | 15 |

Quatrième partie

Synthèse

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Sommaire

| | | |
|-------|---|----|
| 3.1 | Présentation | 17 |
| 3.1.1 | Objectifs | 17 |
| 3.1.2 | Hypothèses | 18 |
| 3.2 | Dispositif expérimental et matériel | 18 |
| 3.3 | Méthode | 19 |
| 3.3.1 | Sujets | 19 |
| 3.3.2 | Variables | 19 |
| 3.3.3 | Tâche | 21 |
| 3.3.4 | Procédure | 24 |

Glossary

amarrage moléculaire

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe stable. iii, 3, 25, 35

bimanuel

Qui se fait avec les deux mains. 17, 18

binôme

Groupe constitué de 2 personnes. 7–11, 15, 17–21, 23, 24

curseur

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 35

docking moléculaire

Voir amarrage moléculaire. 3

effecteur terminal

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. 10, 20

monôme

Groupe constitué d'une unique personne. 7–9, 17–20

résidu

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. 3, 9–11, 13, 20–23

variable dépendante

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

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. 9, 19, 20

variable inter-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 19

variable intra-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 9, 20

Acronyms

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. 8, 11, 18, 21

cnrs-limsi

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 9, 18

Acronyms

Appendices

Annexe A

Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design