

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	vii
Liste des tableaux	ix
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
Références	5
II Étude du travail collaboratif	7
2 La recherche collaborative	9
2.1 Présentation	9
2.1.1 Objectifs	9
2.1.2 Hypothèses	10
2.2 Dispositif expérimental et matériel	10
2.3 Méthode	11
2.3.1 Sujets	11
2.3.2 Variables	12
2.3.3 Tâche	14

Table des matières

2.3.4	Procédure	17
2.4	Résultats	17
2.4.1	Amélioration des performances en binôme	18
	Références	21
3	La manipulation collaborative	23
3.1	Présentation	23
3.1.1	Objectifs	23
3.1.2	Hypothèses	24
3.2	Dispositif expérimental et matériel	24
3.3	Méthode	25
3.3.1	Sujets	25
3.3.2	Variables	26
3.3.3	Tâche	27
3.3.4	Procédure	30
	Références	33
4	Les dynamiques de groupe	35
III	Propositions pour le travail collaboratif	37
5	Travail collaboratif assisté par haptique	39
5.1	Présentation	39
5.1.1	Objectifs	39
5.1.2	Hypothèses	40
5.2	Dispositif expérimental et matériel	40
5.3	Méthode	41
5.3.1	Sujets	41
5.3.2	Variables	42
5.3.3	Tâche	43
5.3.4	Procédure	44
	Références	47

IV Synthèse	49
6 Conclusion et perspectives	51
Glossaire	53
Acronymes	55
Annexes	59
A Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design	59

Table des matières

Table des figures

2.1	Illustration du dispositif expérimental	11
2.2	Schéma des phases de la communication verbale	13
2.3	Répartition des résidus sur les molécules	16
2.4	Temps de complétion par résidu	18
2.5	Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu	18
2.6	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu	19
2.7	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme	19
2.8	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme	20
3.1	Illustration du dispositif expérimental	25
3.2	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible	28
5.1	Illustration du dispositif expérimental	40

Table des figures

Liste des tableaux

2.1	Liste des résidus recherchés	14
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>	15
2.3	Synthèse de la procédure expérimentale	17
3.1	Paramètres de complexité des tâches	30
3.2	Synthèse de la procédure expérimentale	31
5.1	Synthèse de la procédure expérimentale	45

Liste des tableaux

Liste des *À faire*

(Section 5.2) 3 ou 4	40
(Section 5.2) Images à compléter	40
(Section 5.2) Deux configurations possibles	40
(Section 5.3.1) Nombre de sujets	41
(Section 5.3.2) Le questionnaire	42
(Section 5.3.3) Deux configurations possibles	44
(Section 5.3.4) à déterminer	44
(Section 5.3.4) Dix minutes	45

Liste des À faire

Première partie

Le sujet

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	État de l’art	3
1.2	Contexte	3
1.2.1	L’amarrage moléculaire	3
	Références	5

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 hydrophylles, 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 , feuillet β , *etc.*) en fonction de critères multiples (articulations, bilan énergétique, régions hydrophobes, *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.*).

Références

MÜLLER, Paul (1994). « Glossary of terms used in physical organic chemistry ».
Dans *Pure and applied chemistry* 66.5, pages 1077–1184 (cf. page 3).

Deuxième partie

Étude du travail collaboratif

Chapitre 2

La recherche collaborative

Sommaire

2.1	Présentation	9
2.1.1	Objectifs	9
2.1.2	Hypothèses	10
2.2	Dispositif expérimental et matériel	10
2.3	Méthode	11
2.3.1	Sujets	11
2.3.2	Variables	12
2.3.3	Tâche	14
2.3.4	Procédure	17
2.4	Résultats	17
2.4.1	Amélioration des performances en binôme	18
	Références	21

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 représente 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.

(\mathcal{H}_2) Stratégies variables en fonction des binômes Cette second hypothèse concerne uniquement les binômes et suppose que les stratégies adoptés seront différentes en fonction des binômes. Cette différence sera liée aux différentes personnalités et aux différentes affinités au sein du binôme.

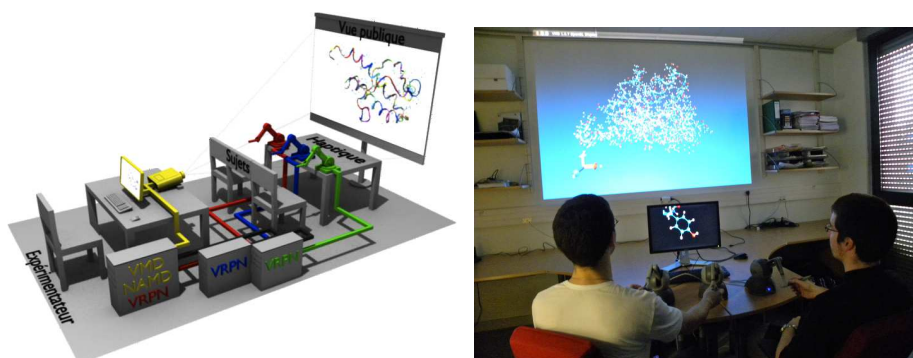
(\mathcal{H}_3) Les sujets préfèrent le travail en binôme La troisième hypothèse est de l'ordre du qualitatif. Elle s'intéresse aux conditions de travail en binôme. L'hypothèse est basée binômes sur l'effet stimulant de travailler à plusieurs mais aussi sur l'aspect humain de ne pas rester seul pour effectuer une tâche répétitive. Il est cependant important que chaque sujet au sein du binôme se considère utile à la réalisation de la tâche.

2.2 Dispositif expérimental et matériel

L'Environnement Virtuel Collaboratif (EVC) utilisé est illustré sur la figure 2.1 page suivante. 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 haptique de manipulation *grab* ;
- 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 *grab* sera attribuer à un seul des deux sujets après une négociation au sein du binôme. Le sujet désigné pour l'outil de manipulation *grab* le sera pour toute la durée de l'expérimentation.



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

Figure 2.1 – Illustration du dispositif expérimental

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'apprentissage.

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au chapitre A page 59.

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 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.

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 14).

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 résidus 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 verbales** 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 page ci-contre.

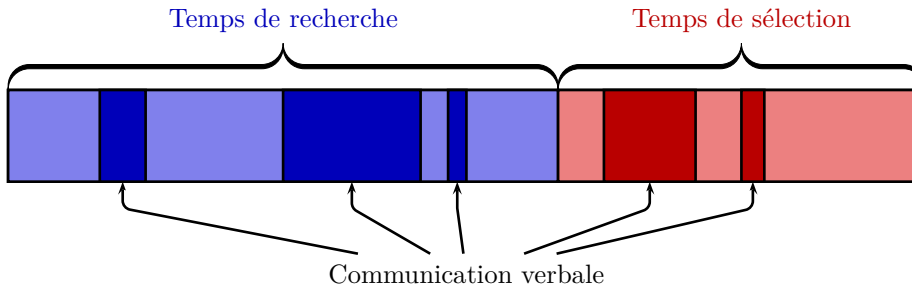


Figure 2.2 – Schéma des phases de la communication verbale

(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.

(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 ?

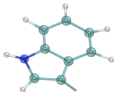

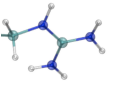
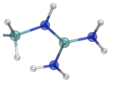
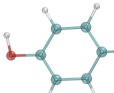
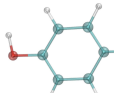
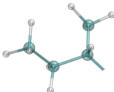
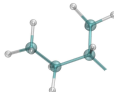
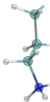
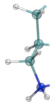
Concernant la communication, les communications verbales concernent tous les échanges, dialogues exposés par la voix. La communication gestuelle représente les gestes que les sujets peuvent effectuer dans le monde réel pour expliquer, désigner ou pour tout autre explication à son partenaire. Enfin, la 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. 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*.

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})	

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 16) et chacun présente différents niveaux de complexité. Les critères de complexité, résumés dans la table 2.2 page suivante, sont les suivants :

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

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 *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).

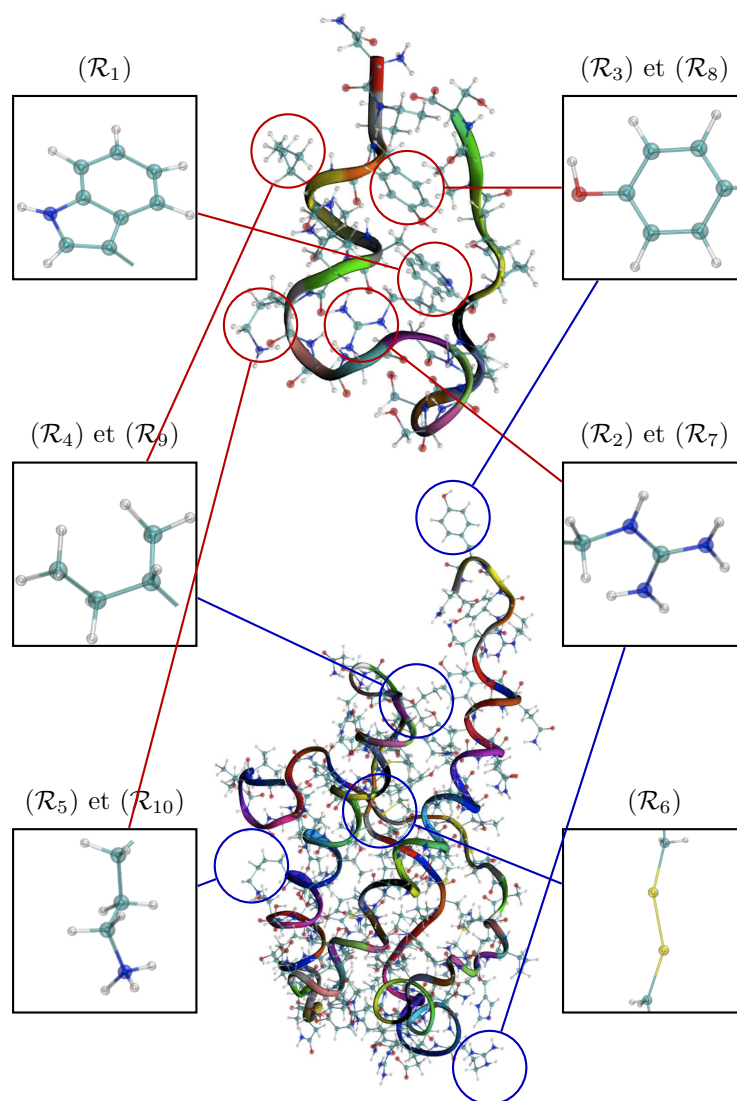
Couleurs Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l'oxygène, blanc pour l'hydrogène, *etc.*). Les atomes qui sont rares seront donc rapidement trouvés grâce à leur couleur différente. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbones) seront plus difficiles à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

Figure 2.3 – Répartition des résidus sur les molécules



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

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la 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 verbales	
	(\mathcal{V}_{d4})	Affinités entre les sujets	
Condition (\mathcal{C}_1)		Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)
Sujet A 10 résidus		Sujet A 10 résidus	Sujet A et B 10 résidus
Sujet B 10 résidus		Sujet A et B 10 résidus	Sujet A 10 résidus
Sujet A et B 10 résidus		Sujet B 10 résidus	Sujet B 10 résidus

2.4 Résultats

Cette section va présenter tous les résultats de cette première étude concernant la recherche lors d'une tâche complexe de collaboration. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne décrivent pas 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 FRIEDMAN [1940], adapté pour les variable intra-population non-paramétriques.

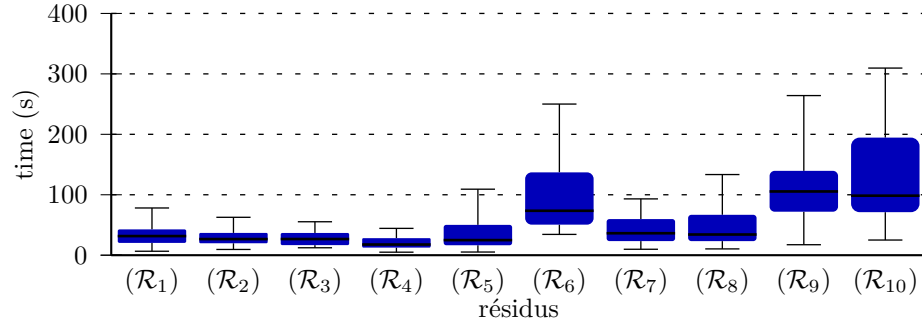


Figure 2.4 – Temps de complétion par résidu

2.4.1 Amélioration des performances en binôme

La figure 2.4 présente le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) 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 complétion (\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 complétion significativement plus importants que les autres résidus.

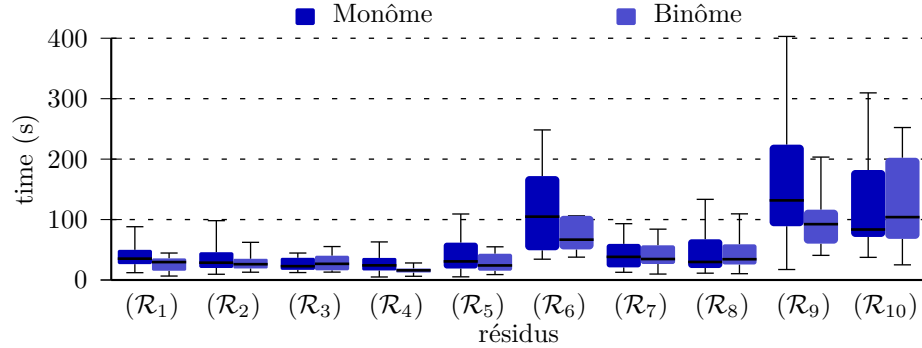


Figure 2.5 – Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu

La figure 2.5 présente les temps de complétion (\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 complétion (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 3$, $df = 1$, $p = 0.082$). Cependant, en se limitant au groupe de trois résidus les plus longs à achever ((\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})), on montre un effet significatif du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 7.7$, $df = 1$, $p = 0.006$).

La figure 2.6 page suivante présente les temps de recherche et de sélection par résidu (\mathcal{V}_{i2}). L'analyse montre un effet significatif des résidus sur le temps de

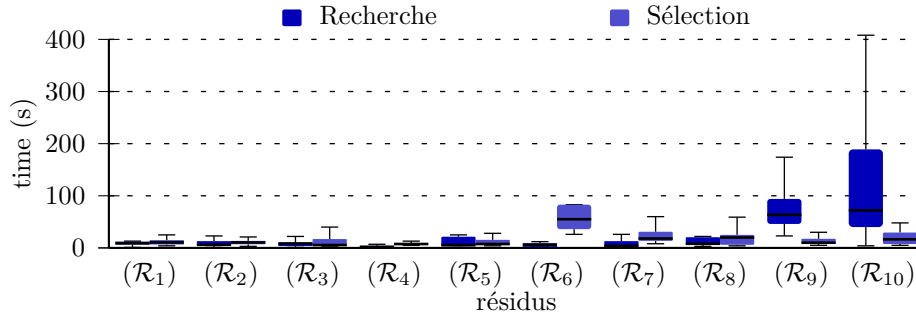


Figure 2.6 – Temps de recherche et de sélection comparés par résidu

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}) génèrent un temps de recherche significativement supérieur à tous les autres. L'analyse montre également un effet significatif des résidus sur le 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) génère un temps de sélection significativement supérieur à tous les autres.

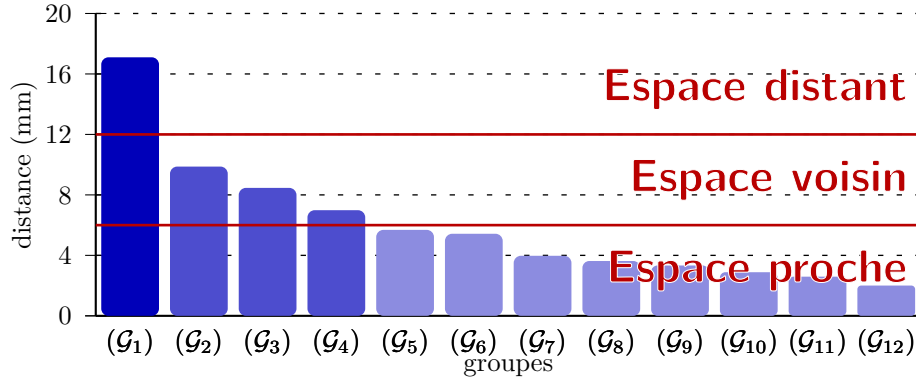


Figure 2.7 – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme

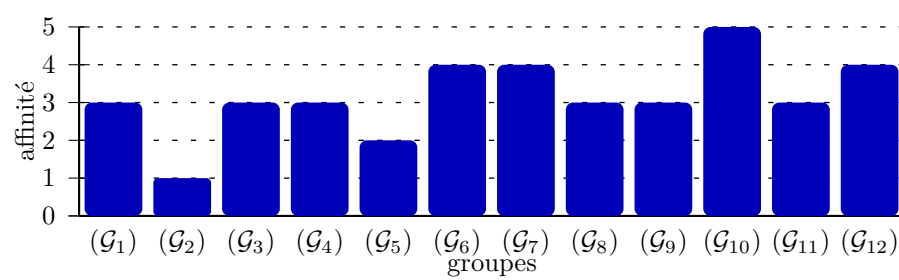


Figure 2.8 – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme

Références

- BROWN, Morton B. et Alan B. and FORSYTHE (1974). « Robust tests for equality of variances ». Dans *Journal of the American statistical association* 69.346, pages 364–367 (cf. page 17).
- FRIEDMAN, Milton (1940). « A comparison of alternative tests of significance for the problem of m rankings ». Dans *The annals of mathematical statistics* 11.1, pages 86–92 (cf. page 17).
- HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 18, 19).
- 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 ». Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 18, 19).
- SHAPIRO, Samuel S. et Martin B. WILK (déc. 1965). « An analysis of variance test for normality (complete samples) ». Dans *Biometrika* 52.3/4, pages 591–611 (cf. page 17).

Chapitre 3

La manipulation collaborative

Sommaire

3.1	Présentation	23
3.1.1	Objectifs	23
3.1.2	Hypothèses	24
3.2	Dispositif expérimental et matériel	24
3.3	Méthode	25
3.3.1	Sujets	25
3.3.2	Variables	26
3.3.3	Tâche	27
3.3.4	Procédure	30
	Références	33

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 9) 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 seconde 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.

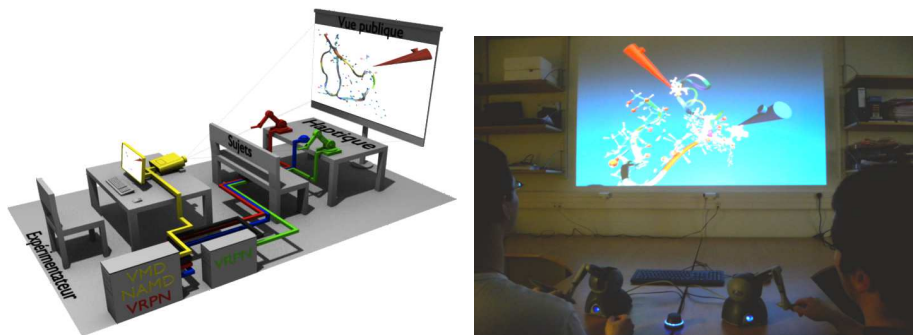
(\mathcal{H}_3) L'apprentissage est plus performant pour les binômes L'hypothèse suppose que le travail collaboratif va stimuler l'apprentissage. L'échange des connaissances améliore l'apprentissage mais aussi grâce la multiplicité des avis et des idées pour répondre à un problème ou comprendre un événement.

3.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 3.1 page ci-contre. Comme pour la première expérimentation (voir section 2.2 page 10), l'EVC propose une visualisation par-

tagée (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*.



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

Figure 3.1 – Illustration du dispositif expérimental

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 59.

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 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.

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 illustre ces différents effets graphiques.

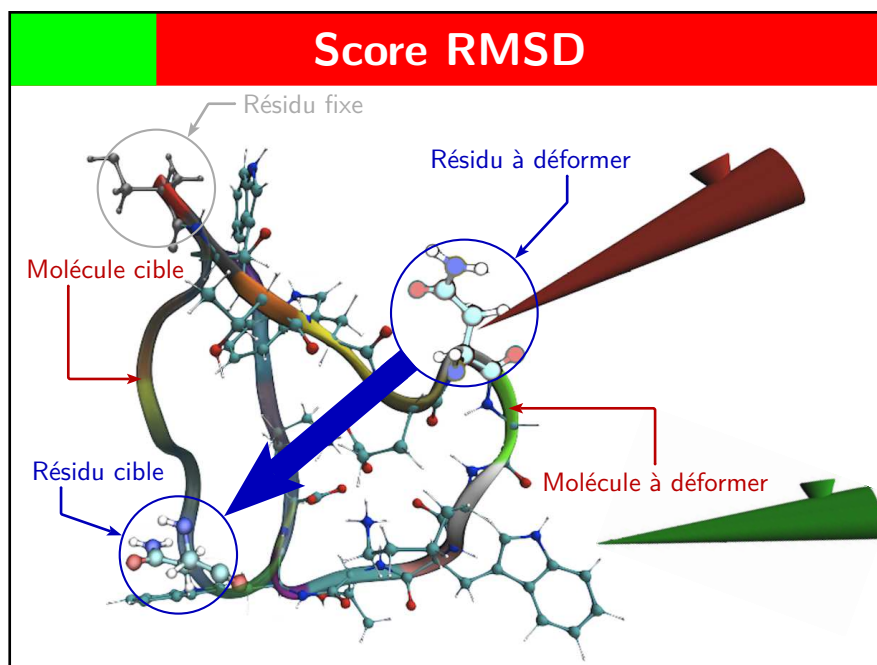


Figure 3.2 – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, des scores sont affichés en temps-réel (voir figure 3.2). Le premier score est le score *Root Mean Square Deviation* (RMSD) qui permet de mesurer la différence entre deux déformations d'une même molécule en calculant la différence entre chaque pair d'atomes (voir équation 3.1).

$$\text{RMSD}(\mathbf{c}, \mathbf{m}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|c_i - m_i\|^2} \quad (3.1)$$

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

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 seconde 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 générale 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 générale 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 la table 3.1 page suivante selon les critères suivants :

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

résidu libre C'est le nombre de résidus 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’apprentissage, 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’apprentissage 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 la table 3.2 page suivante.

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

Références

- COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVASNIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric β -hairpins ». Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. pages 29, 30).
- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 27).
- NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 29).

Chapitre 4

Les dynamiques de groupe

Troisième partie

Propositions pour le travail collaboratif

Chapitre 5

Travail collaboratif assisté par haptique

Sommaire

5.1	Présentation	39
5.1.1	Objectifs	39
5.1.2	Hypothèses	40
5.2	Dispositif expérimental et matériel	40
5.3	Méthode	41
5.3.1	Sujets	41
5.3.2	Variables	42
5.3.3	Tâche	43
5.3.4	Procédure	44
	Références	47

5.1 Présentation

5.1.1 Objectifs

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

Le principal facteur observé sera les performances du groupe. Les performances regardées seront le temps mis pour achever la tâche mais également la qualité

de la solution trouvée. En effet, la qualité de la solution est une variable non-négligeable dans le cadre d'une tâche d'amarrage moléculaire.

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

5.1.2 Hypothèses

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

5.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 5.1. L'EVC propose une visualisation partagée (vue publique) à l'aide d'un vidéoprojecteur sur un grand écran. Les **3 ou 4** sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

- une interface haptique de manipulation de la molécule ;
- une interface haptique pour la coordination des différents acteurs ;
- deux interfaces haptiques de déformation *tug*.

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

Figure 5.1 – Illustration du dispositif expérimental

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

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

- un outil haptique attaché virtuellement à la molécule permettant de déplacer la molécule ;
- un SpaceNavigator[®] permettant d'orienter la molécule.

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

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

3 ou 4
Quelle configuration choisissons nous ?

Images à compléter
Il va falloir créer la scène Blender correspondante et faire des photos du dispositif expérimental

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au chapitre A page 59.

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 *grab* sera attribuer à un seul des deux sujets après une négociation au sein du binôme. Le sujet désigné pour l'outil de manipulation *grab* le sera pour toute la durée de l'expérimentation.

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'apprentissage.

5.3 Méthode

5.3.1 Sujets

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

Ils ont été recrutés au sein du laboratoire Institut de Biologie Physico-Chimie (IBPC) et sont chercheurs en biologie moléculaire. Ils ont tous le français comme

Nombre de sujets
Remplir toutes les informations statistiques concernant les sujets

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

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

5.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Présence de l'assistance** 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 : « sans assistance » ou « avec assistance ». L'assistance est l'aide haptique ajouté aux différents outils de manipulation, de désignation et de déformation afin d'améliorer l'interaction et la communication entre les sujets pendant la tâche.

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

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

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

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

Le questionnaire
Écrire le questionnaire soumis au sujet

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

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

5.3.3 Tâche

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

Description de la tâche

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

Afin de réaliser la tâche, différentes mesures sont disponibles en temps-réel pour les sujets. La première de ces mesures est le score `RMSD` qui est décrit dans la section 3.3.3 page 28. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par *Scalable Molecular Dynamics* (NAMD).

Le premier complexe de molécules proposé, couramment nommé NUSE:NUSG [BURMANN et al. 2010], a pour identifiant PDB **2KVG**. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1 294 atomes et 929 atomes.

Deux configurations possibles

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

Les outils disponibles

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

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

- un outil haptique attaché virtuellement à la molécule permettant de déplacer la molécule ;
- un SpaceNavigator® permettant d'orienter la molécule.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5.3.4 Procédure

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

à déterminer

Il faudra trouver une molécule d'apprentissage

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

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

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

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 5.1.

Table 5.1 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Amarrage d'un complexe de molécule	
Hypothèses	(\mathcal{H}_1) Amélioration de performance par assistance haptique	
Variable in-dépendantes	(\mathcal{V}_{i1}) Présence de l'assistance	
	(\mathcal{V}_{i2}) Complexe de molécules à assembler	
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Temps de complétion	
	(\mathcal{V}_{d2}) Nombre de sélections	
	(\mathcal{V}_{d3}) Communications verbales et gestuelles	
	(\mathcal{V}_{d4}) Évaluation qualitative du système	
Condition (\mathcal{C}_1)		Condition (\mathcal{C}_2)
Sans assistance		Avec assistance
NusE:NusG		NusE:NusG

Références

- BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010). « A NusE :NusG complex links transcription and translation ». Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 43).
- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 42).

Quatrième partie

Synthèse

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Glossaire

amarrage moléculaire

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe stable. iii, 3, 39, 43, 53

bimanuel

Qui se fait avec les deux mains. 23, 24, 30

binôme

Groupe constitué de 2 personnes. iii, v, 9–13, 15, 18, 20, 23–27, 30, 41, 42

curseur

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 53

docking moléculaire

Voir amarrage moléculaire. 3

effecteur terminal

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. 12, 26, 42

homoscedasticité

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 15

monôme

Groupe constitué d'une unique personne. v, 9–11, 18, 23–27, 41

résidu

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. v, vii, 4, 12, 13, 15, 18, 26–30, 40–42, 44

variable dépendante

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 40, 53

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. 11, 12, 26, 42, 53

variable inter-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 26

variable intra-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 11, 12, 15, 26, 42

Acronymes

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. 10, 13, 24, 27, 40, 43

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. 41

cnrs–limsi

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 11, 25

namd

Programme de simulation pour la dynamique moléculaire. 43

rmsd

Appelé Écart Quadratique Moyen en français, il permet – dans le cadre de la biologie moléculaire – de mesurer la différence entre deux déformations d'une même molécule. 28, 43

Acronymes

Annexes

Annexe A

Shaddock – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design

Annexe A. SHADDOCK – Collaborative Virtual Environment for Molecular Design