

École Doctorale d'Informatique de PARIS-Sud (EDIPS)

Jean SIMARD

Collaboration haptique étroitement couplée pour la déformation moléculaire interactive

Thèse soutenue le *<à définir>*

pour l'obtention du grade de

Docteur en informatique de l'Université PARIS-Sud

en présence de

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

Thèse préparée au

Laboratoire d'Informatique, de Mécanique et de Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI)

Table des matières

Table des matières	iii
Table des figures	ix
Liste des tableaux	xv
Résumé	xvii
Abstract	xix
Introduction	1
1 Étude bibliographique	3
1.1 Introduction	4
1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire	4
1.2.1 Le <i>docking</i> moléculaire	4
1.2.2 Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire	6
1.2.3 <i>Docking</i> moléculaire en environnement virtuel	8
1.2.4 Plateformes collaboratives pour la biologie moléculaire	13
1.3 Approche collaborative pour les problèmes complexes	16
1.3.1 La distribution cognitive des charges de travail	17
1.3.2 La facilitation sociale	20
1.3.3 La paresse sociale	22
1.4 Collaboration en environnement virtuel	25
1.4.1 Mécanismes de la communication de groupe	25

Table des matières

1.4.2	Communication en environnement virtuel	29
1.4.3	Stratégies de collaboration	30
1.5	Conclusion	34
2	Shaddock – Plateforme de manipulation collaborative de mo- lécules	37
2.1	Introduction	38
2.2	Architecture matérielle et logicielle	38
2.2.1	Travail collaboratif synchrone et colocalisé	38
2.2.2	Architecture logicielle adoptée	41
2.3	Plateforme de simulation et de visualisation	43
2.3.1	Module de visualisation moléculaire	44
2.3.2	Module de simulation moléculaire	46
2.4	Les outils d’interaction	48
2.4.1	Outil d’interaction utilisé	48
2.4.2	Outils existants	49
2.4.3	Outils de manipulation avancés	49
3	Recherche collaborative de résidu sur une molécule	53
3.1	Introduction	54
3.2	Exploration et sélection collaborative	54
3.2.1	Travaux existants	54
3.2.2	Objectifs	56
3.3	Présentation de l’expérimentation	57
3.3.1	Description de la tâche	57
3.3.2	Spécificités du protocole expérimental	61
3.4	Résultats	63
3.4.1	Amélioration des performances en binôme	65
3.4.2	Stratégies de travail	69
3.4.3	Résultats qualitatifs	76
3.5	Conclusion	77
3.5.1	Résumé des résultats	77
3.5.2	Synthèse et perspectives	78

4	Déformation collaborative de molécule	81
4.1	Introduction	82
4.2	Déformation collaborative en environnement virtuel	82
4.2.1	Travaux existants	82
4.2.2	Objectifs	83
4.3	Présentation de l'expérimentation	84
4.3.1	Description de la tâche	84
4.3.2	Spécificités du protocole expérimental	87
4.4	Résultats	91
4.4.1	Amélioration des performances en binôme	93
4.4.2	Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche	98
4.4.3	Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	102
4.4.4	Résultats qualitatifs	107
4.5	Conclusion	108
4.5.1	Résumé des résultats	108
4.5.2	Synthèse et perspectives	109
5	La dynamique de groupe	111
5.1	Introduction	112
5.2	Collaboration de groupe	112
5.2.1	Travaux existants	112
5.2.2	Objectifs	114
5.3	Présentation de l'expérimentation	115
5.3.1	Description de la tâche	115
5.3.2	Spécificités du protocole expérimental	116
5.4	Résultats	120
5.4.1	Amélioration des performances	120
5.4.2	Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration	124
5.4.3	Définition d'un meneur	128
5.5	Conclusion	131

Table des matières

5.5.1	Résumé des résultats	131
5.5.2	Synthèse et perspectives	132
6	Travail collaboratif assisté par haptique	135
6.1	Introduction	136
6.2	Assistance haptique pour la communication	136
6.2.1	Travaux existants	136
6.2.2	Objectifs	137
6.3	Présentation de l'expérimentation	138
6.3.1	Description de la tâche	138
6.3.2	Spécificités du protocole expérimental	139
6.4	Résultats	144
6.4.1	Amélioration des performances	144
6.4.2	Amélioration de la communication	149
6.4.3	Évaluation qualitative	153
6.5	Conclusion	156
6.5.1	Résumé des résultats	156
6.5.2	Synthèse et perspectives	157
	Conclusion et perspectives	159
	Bibliographie	161
	Glossaire	193
	Acronymes	197
	Annexes	201
A	Dispositif expérimental	201
A.1	Matériel expérimental	202
A.2	Présentation des molécules	203
A.2.1	Liste des molécules	203

A.2.2	Représentation des molécules	203
A.3	Outils de manipulation	206
B	Méthode expérimentale	207
B.1	Première expérimentation	208
B.1.1	Hypothèses	208
B.1.2	Sujets	208
B.1.3	Variables	209
B.1.4	Procédure	211
B.2	Seconde expérimentation	211
B.2.1	Hypothèses	211
B.2.2	Sujets	212
B.2.3	Variables	213
B.2.4	Procédure	214
B.3	Troisième expérimentation	214
B.3.1	Hypothèses	214
B.3.2	Sujets	215
B.3.3	Variables	216
B.3.4	Procédure	217
B.4	Quatrième expérimentation	218
B.4.1	Hypothèses	218
B.4.2	Sujets	218
B.4.3	Variables	219
B.4.4	Procédure	220
C	Questionnaires	223
C.1	Première expérimentation	224
C.2	Seconde expérimentation	230
C.2.1	Questionnaire pour les monômes	230
C.2.2	Questionnaire pour les binômes	230
C.3	Quatrième expérimentation	231
C.3.1	Le questionnaire SUS	237

Table des matières

Table des figures

1.1	Complexe de molécules assemblé à partir de deux molécules	5
1.2	Mesures pour l'évaluation du <i>docking</i> moléculaire	6
1.3	Illustration d'une molécule avec ces hélices- α et ces feuillets- β	8
1.4	Représentation avancée proposée par BERGMAN <i>et al.</i> [1993]	10
1.5	Visualisation multimodale proposée par DAVIES <i>et al.</i> [2005]	11
1.6	Potentiel de LENNARD-JONES [1924a]	12
1.7	<i>Docking</i> moléculaire à l'aide d'une interface à cinq Degrés De Liberté (DDLs) [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006]	13
1.8	<i>Docking</i> moléculaire rigide avec le Virtuouse TM 6D35–45 [DAUNAY et RÉGNIER 2009]	14
1.9	Plateforme de collaboration inter-universités proposée par [DOVE <i>et al.</i> 2005]	15
1.10	Manipulation collaborative de molécule avec représentation des mains des participants [CHASTINE <i>et al.</i> 2005]	16
1.11	Représentation d'un système cognitivement distribué	19
1.12	Résultats obtenus par TRIPLETT [1898] avec des cyclistes	20
1.13	Loi de YERKES et DODSON [1908] sur le lien entre la stimulation des individus et les performances	22
1.14	Résultats obtenus par RINGELMANN [1913] et présentés par KRAVITZ et B. MARTIN [1986]	23
1.15	Synthèse des effets de la collaboration selon SULEIMAN et WATSON [2008]	24
1.16	Inter-référencement visuel proposé par CHASTINE <i>et al.</i> [2007] à l'aide de techniques de réalité augmentée	28
1.17	Collaboration à plusieurs utilisateurs	31

Table des figures

1.18	Collaboration à plusieurs experts	33
1.19	Collaboration par manipulateur et observateur	34
1.20	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes	36
2.1	Diagramme de déploiement UML de la plateforme Shaddock	39
2.2	Diagramme de composant UML du nœud VMD	40
2.3	Classification des tâches collaboratives selon ELLIS <i>et al.</i> [1991]	40
2.4	Illustration des rendus graphiques de molécules sur VMD (<i>Visual Molecular Dynamics</i>)	46
2.5	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés	50
2.6	Les quatre étapes de la désignation	52
3.1	Répartition des résidus sur les molécules	59
3.2	Schéma du dispositif expérimental	62
3.3	Photographie du dispositif expérimental	62
3.4	Temps de réalisation par résidu	65
3.5	Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu	66
3.6	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu	66
3.7	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus \mathcal{R}_6 , \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10}	69
3.8	Affinité entre les sujets pour chaque binôme	69
3.9	Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme	70
3.10	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme	70
3.11	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection entre les sujets pour chaque binôme	71
3.12	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme	71
3.13	Couplage physique et structure entre les résidus	74
4.1	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible	85
4.2	Schéma du dispositif expérimental	88
4.3	Photographie du dispositif expérimental	88

4.4	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A	89
4.5	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B	90
4.6	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A	90
4.7	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B	91
4.8	Illustration des rendus pour l’affichage de la molécule	93
4.9	Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets	94
4.10	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets	94
4.11	Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonction du nombre de sujets	95
4.12	Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets	96
4.13	Temps de réalisation des scénarios	98
4.14	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets	98
4.15	Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets	99
4.16	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets	100
4.17	Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets	100
4.18	Temps de réalisation de chaque essai	102
4.19	Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets	103
4.20	Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets	104
4.21	Distance active entre les effecteurs terminaux pour chaque essai en fonction du nombre de sujets	104
4.22	Vitesse moyenne pour chaque essai en fonction du nombre de sujets	105
5.1	Schéma du dispositif expérimental	117
5.2	Photographie du dispositif expérimental	117
5.3	Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1	118

Table des figures

5.4	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2 . . .	119
5.5	Temps de réalisation des scénarios	120
5.6	Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants	120
5.7	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants	121
5.8	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants	121
5.9	Nombre d'échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants	122
5.10	Temps de réalisation avec ou sans <i>brainstorming</i>	124
5.11	Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i>	124
5.12	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i>	125
5.13	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i>	125
5.14	Nombre d'ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i>	126
5.15	Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de \mathcal{G}_1	128
5.16	Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de \mathcal{G}_1	129
5.17	Profil de force du groupe \mathcal{G}_1 sur la molécule Prion	130
6.1	Schéma du dispositif expérimental	140
6.2	Photographie du dispositif expérimental	141
6.3	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1 . . .	142
6.4	Représentation de la molécule NUSE :NUSG pour le scénario 2	142
6.5	Score <i>Root Mean Square Deviation</i> (RMSD) minimum atteint avec et sans haptique	145
6.6	Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique	145
6.7	Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario	146

6.8	Nombre de sélections par seconde effectuées par un opérateur pour la déformation avec et sans haptique	146
6.9	Temps moyen d'une sélection effectuée par un opérateur pour la déformation avec et sans haptique	147
6.10	Temps moyen pour atteindre une cible désignée lors d'une désignation avec et sans haptique	147
6.11	Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique	149
6.12	Nombre de désignations acceptées au cours du processus de désignation avec et sans haptique	150
6.13	Vitesse moyenne du coordinateur avec et sans haptique	150
6.14	Temps de parole des sujets avec et sans haptique	151
6.15	Temps de parole des sujets en fonction de l'ordre de passage de l'assistance haptique	151
A.1	Représentation des atomes avec CPK	204
A.2	Représentation de la structure principale de la molécule avec <i>NewRibbon</i>	205
A.3	Représentation des atomes fixés en gris	205
B.1	Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu	210

Table des figures

Liste des tableaux

1.1	Liste non-exhaustive de solutions logicielles de <i>docking</i> moléculaire	9
3.1	Liste des résidus recherchés	58
3.2	Paramètres de complexité des résidus – Carbone en <i>cyan</i> , Azote en <i>bleu</i> , Oxygène en <i>rouge</i> et Soufre en <i>jaune</i>	60
3.3	Synthèse de la méthode expérimentale	64
4.1	Paramètres de complexité des tâches	87
4.2	Synthèse de la procédure expérimentale	92
5.1	Synthèse de la procédure expérimentale	119
6.1	Synthèse de la procédure expérimentale	144

Liste des tableaux

Résumé

<Background>

<Ma thèse>

<Développement de la plateforme>

<Études de cas>

<Proposition de solution>

<Synthèse et perspectives>

Abstract

Abstract

Introduction

Étude bibliographique

Sommaire

1.1	Introduction	4
1.2	Contexte de travail : la modélisation moléculaire	4
1.2.1	Le <i>docking</i> moléculaire	4
1.2.2	Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire	6
1.2.3	<i>Docking</i> moléculaire en environnement virtuel	8
1.2.4	Plateformes collaboratives pour la biologie moléculaire	13
1.3	Approche collaborative pour les problèmes complexes	16
1.3.1	La distribution cognitive des charges de travail	17
1.3.2	La facilitation sociale	20
1.3.3	La paresse sociale	22
1.4	Collaboration en environnement virtuel	25
1.4.1	Mécanismes de la communication de groupe	25
1.4.2	Communication en environnement virtuel	29
1.4.3	Stratégies de collaboration	30
1.5	Conclusion	34

1.1 Introduction

Ce travail de thèse aborde de nombreux concepts, de la biologie moléculaire au système interactifs temps-réel en passant par la psychologie sociale. Il est nécessaire de fixer le contexte dans lequel se place nos travaux : le *docking* moléculaire. Ce dernier offre un contexte de travail extrêmement complexe, idéal pour justifier une approche par le travail collaboratif.

Cette étude bibliographique permettra dans un premier temps de comprendre les contraintes de complexité qui s'appliquent au *docking* moléculaire ainsi que les solutions actuellement proposées. Dans un second temps, nous verrons les apports de la collaboration pour la résolution de problèmes complexes en soulignant les avantages et les inconvénients d'une telle approche. Pour terminer, nous nous intéresserons plus précisément à la collaboration au sein d'un environnement virtuel, la manière dont elle s'organise et les concepts essentiels à la mise en place d'une plateforme.

1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous allons nous intéresser à la modélisation moléculaire et plus précisément au *docking* moléculaire¹. Cette section a pour objectif de présenter le *docking* moléculaire puis expose les différentes solutions existantes pour traiter ce problème.

1.2.1 Le *docking* moléculaire

Dans le domaine de la modélisation moléculaire, le *docking* moléculaire consiste à prédire la conformation optimale entre deux molécules afin de créer un complexe de molécules stable (voir figure 1.1 page ci-contre). Le *docking* moléculaire permet soit de découvrir de nouvelles molécules (par assemblage de deux ou plusieurs molécules), soit de comprendre la nature d'un complexe de molécules obtenu par cristallographie². FISCHER et BEENSCH [1894] illus-

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

2. La cristallographie permet de déterminer les molécules présentes dans un complexe de molécules mais ne permet pas de déterminer avec précisions comment elles sont assemblées.

trent le *docking* moléculaire avec le modèle « clef-serrure » décrit de la façon suivante.

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

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

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

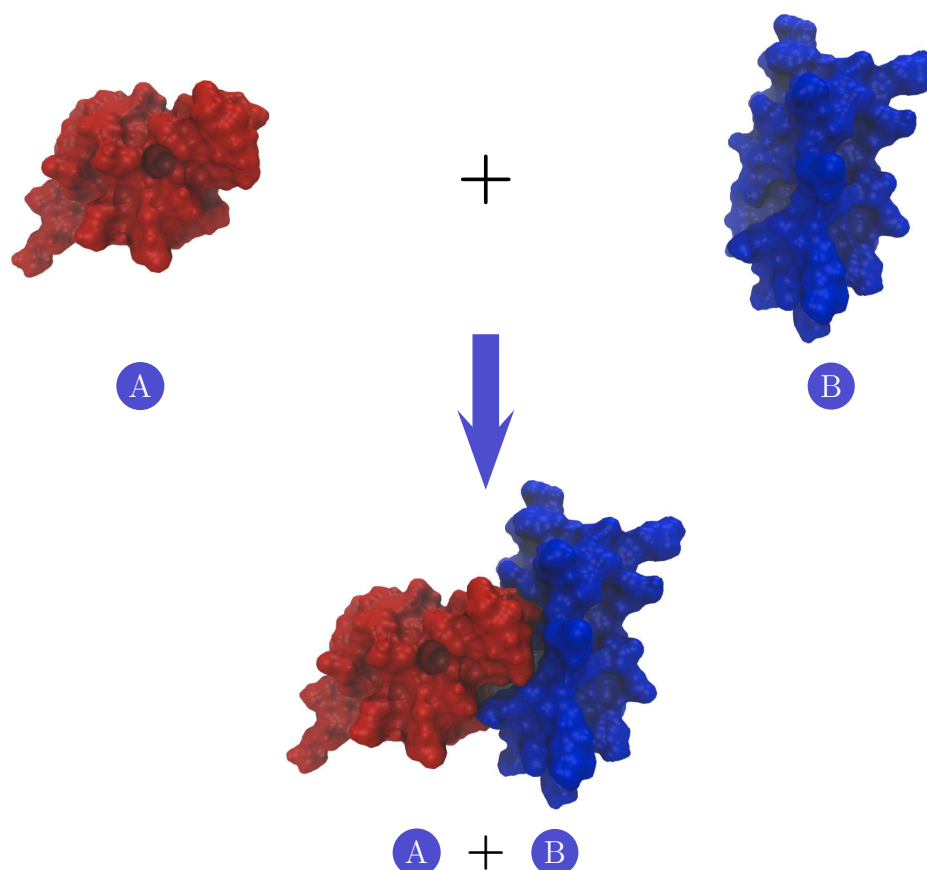


Figure 1.1 – Complexe de molécules assemblé à partir de deux molécules

La métaphore s'arrête ici. En effet, si pour vérifier la concordance d'une clef avec une serrure, il suffit de tester l'ouverture de la serrure, l'évaluation d'un complexe de molécules est moins évidente. La stabilité d'un complexe de molécules est principalement évaluée selon deux critères : la complémentarité

géométrique et la complémentarité chimique (voir figure 1.2). La complémentarité géométrique, parfois nommée complémentarité structurelle [CHURCH *et al.* 1977], consiste à trouver les parties de chaque molécule qui s’imbriquent le mieux l’une avec l’autre, comme un puzzle en 3D. JIANG *et al.* [2003] montre l’importance de la complémentarité géométrique dans le *docking* moléculaire dans l’évaluation d’un complexe de molécules. La figure 1.2a illustre la complémentarité géométrique dans une représentation simplifiée en 2D.

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

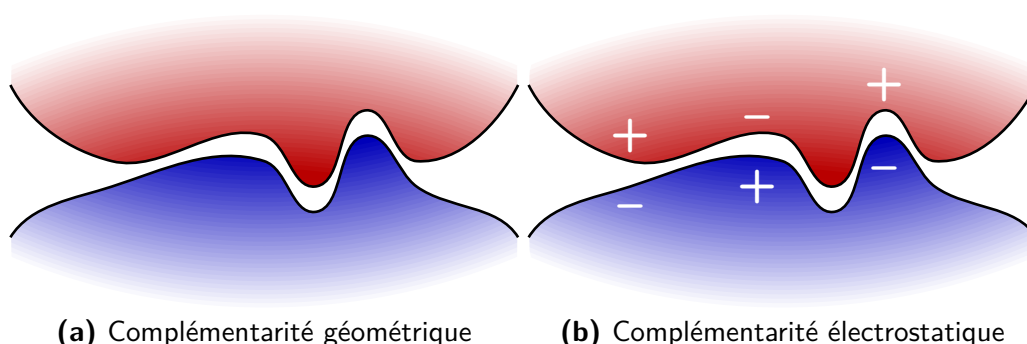


Figure 1.2 – Mesures pour l’évaluation du *docking* moléculaire

Le nombre de combinaisons géométriques et le nombre de contraintes chimiques font du *docking* moléculaire une tâche de recherche très complexe. Une exploration exhaustive de l’espace de recherche est impossible. La section suivante présente les différentes solutions logicielles existante pour tenter de trouver des solutions de *docking* moléculaire.

1.2.2 Recherche de solutions de *docking* moléculaire

La recherche de solutions de *docking* moléculaire consiste à trouver les zones de liaisons entre les molécules. Les algorithmes de recherche se basent principalement sur deux éléments : l’évaluation et l’optimisation. L’évaluation consiste à calculer un score pour la conformation trouvée. L’optimisation s’intéresse à l’amélioration et à l’affinage des conformations.

SCHULZ-GASCH et STAHL [2004] ou encore LEACH *et al.* [2006] proposent un état de l’art sur les moyens d’évaluer un *docking* moléculaire. Les algorithmes de recherche commencent par identifier les différents sites de liaisons potentiels par complémentarité géométrique. Cette première évaluation permet de filtrer l’espace des solutions. Puis une évaluation chimique partielle ou complète est éventuellement effectuée.

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

Cependant, les solutions présentées ci-dessus se basent sur une approximation importante de l’environnement moléculaire : les molécules sont considérées comme des corps rigides. En effet, une molécule est constituée d’un ensemble d’atomes possédant chacun une mobilité par rapport à ces voisins ; une molécule s’apparente plutôt à un corps flexible. La flexibilité d’une molécule peut être vue à différents niveaux de granularité, de l’atome aux molécules en passant par les structures secondaires (hélices- α et feuillets- β). On peut distinguer trois niveaux de flexibilité différentes :

Niveau inter-moléculaire Cette déformation au niveau macro-moléculaire concerne des transformations de grande amplitude sur chaque molécule. Elle permet de trouver la meilleure concordance entre les molécules en terme de position et d’orientation.

Niveau intra-moléculaire Cette déformation est au niveau moléculaire. L’amarrage de deux molécules (ou plus) permet d’obtenir de nombreux sites de liaison qui doivent être optimisées en fonction de critères variés (la complémentarité géométrique, les forces électrostatiques, *etc.*). La flexibilité s’organise alors autour de macro-structures telles que les structures secondaires qui font de la molécule une sorte de chaîne articulée (voir figure 1.3 page suivante).

Niveau atomique Cette déformation très fine va optimiser la position des atomes au niveau du site de liaison en modifiant l’état des résidus (groupement d’atomes). L’intérêt de cette étape sera portée sur plusieurs types d’interactions chimiques à échelle réduite (les ponts hydrogènes, les zones hydrophobiques et hydrophylles, les ponts salins, les forces de VAN DER WAALS [P. MÜLLER 1994], *etc.*).

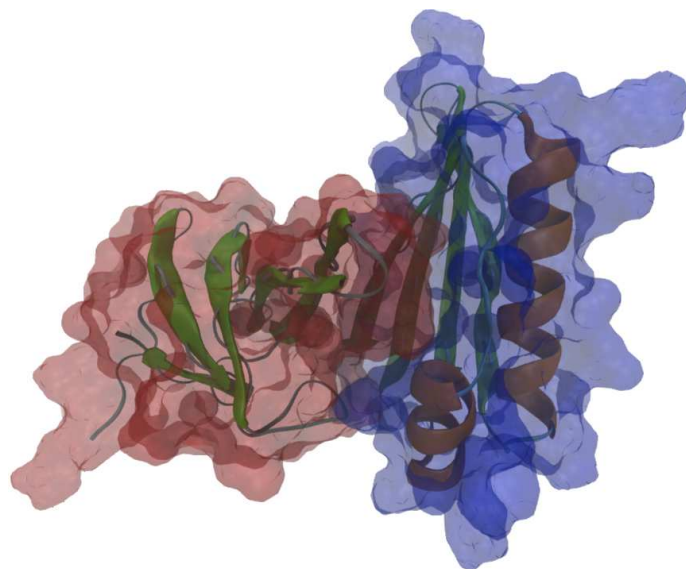


Figure 1.3 – Illustration d'une molécule avec ces hélices- α et ces feuillets- β

La complexité induite par la flexibilité rend l'exploration de l'espace de recherche encore plus complexe par rapport aux corps rigides considérés précédemment. Afin de répondre à cette problématique supplémentaire, différentes approches, basées sur des plateformes de *docking* moléculaire (voir table 1.1 page ci-contre), ont été proposées afin de réduire l'espace de recherche :

- Une partie du complexe de molécules étudié est rendue rigide ;
- Utiliser plusieurs conformations rigides d'une molécule [MEAGHER et CARLSON 2004] ;
- Découper l'espace de recherche avec une granularité plus grossière pour améliorer les performances d'évaluation [ÖSTERBERG *et al.* 2002].

La flexibilité introduit une complexité importante dans la recherche de solutions en *docking* moléculaire. Cependant, nous allons voir dans la section suivante que l'utilisation des capacités combinées de l'humain et de la machine permet une approche différente face à ce problème complexe.

1.2.3 *Docking* moléculaire en environnement virtuel

Malgré une communauté scientifique très active pour améliorer les solutions de *docking* moléculaire existantes et se rapprocher toujours plus près de conditions biologiques réalistes, la complexité du problème rend difficile la découverte de solutions pertinentes. Devant cette complexité, une approche alternative basée sur l'introduction de l'humain et de ses capacités de décisions au sein du processus de recherche. En effet, bien que moins rapide pour

1.2. Contexte de travail : la modélisation moléculaire

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

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

traiter un grand nombre de données, un expert est capable de classer plus intelligemment les solutions pertinentes et les solutions aberrantes.

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

Avec l'immersion dans un environnement virtuel, le problème de la représentation des molécules se pose rapidement. BERGMAN *et al.* [1993] proposent la plateforme VIEW avec différentes possibilités de rendus graphiques pour représenter une molécule (voir figure 1.4 page suivante). Les environnements virtuels offrent une certaine souplesse dans la représentation des molécules ce qui a permis d'imaginer différentes manières d'afficher une molécule en fonction des informations à mettre en évidence. Des logiciels dédiés à ce genre de tâche ont alors pu voir le jour comme VMD [HUMPHREY *et al.* 1996] ou PYMOL [DELANO 2002].

Cependant, la nature statique de ces visualisations ne permet pas de comprendre la dynamique chimique au sein d'une molécule. HUITEMA et LIERE [2000]

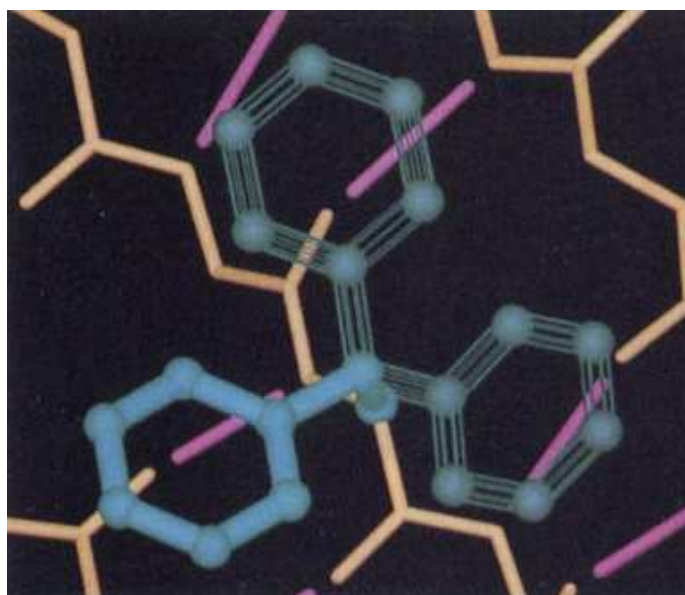


Figure 1.4 – Représentation avancée proposée par BERGMAN *et al.* [1993]

proposent un outil pour visualiser des trajectoires d'atomes afin d'appréhender la dynamique des protéines. Puis KŁOSOWSKI *et al.* [2002] franchissent une étape supplémentaire en proposant une visualisation temps-réel de la dynamique d'une molécule à l'aide du moteur de simulation Gromacs [BERENDSEN *et al.* 1995 ; HESS *et al.* 2008]. Enfin, KŘENEK *et al.* [1999] puis DAVIES *et al.* [2005] apporte une visualisation multimodale avec la combinaison des retours visuels et haptiques pour percevoir les champs de force électriques d'une molécule (voir figure 1.5 page ci-contre).

L'utilisation de l'haptique dans ce contexte n'est d'ailleurs pas nouveau. En effet, les biologistes ont également cherché à interagir virtuellement avec les molécules afin de pouvoir s'affranchir de la manipulation dans le monde réel nécessitant une procédure plus longue et plus complexe. Le projet GROPEHaptic³ se propose d'utiliser la modalité haptique pour interagir avec les molécules [BROOKS JR. *et al.* 1990 ; OUH-YOUNG *et al.* 1988]. Puis, une plateforme pour la modélisation moléculaire assistée par ordinateur est proposée avec HIMM (*Highly Immersive Molecular Modeling*) [DREES *et al.* 1996 ; DREES *et al.* 1998] ; l'objectif est de proposer une plateforme immersive et modulable afin de pouvoir facilement changer les différents outils d'interaction. Certains proposent même des interfaces tangibles se substituant aux molécules à manipuler comme WEGHORST [2003] et J.-I. KIM *et al.* [2004].

3. Le projet GROPEHaptic a été réalisé dans le prolongement du projet GROPE.



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

En tenant compte de la flexibilité des molécules, les besoins en interaction se sont affinés ; il n'est plus question de modifier la position d'une molécule, on cherche à présent à modifier la position d'un atome ou d'un groupe d'atomes. Le modèle d'interaction proposé est la traction des atomes par un simple modèle masse-ressort [HAAN *et al.* 2002 ; KOUTEK *et al.* 2002] ce qui permet une déformation des atomes de manière locale. Puis Y.-G. LEE et LYONS [2004] propose de baser les modèles d'interactions haptiques sur l'approximation du champ de force décrit dans [LENNARD-JONES 1924a,b] (voir équation 1.1) ; ce modèle de force a l'avantage de permettre une relative stabilité du retour haptique (voir figure 1.6 page suivante).

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

Les différents outils de manipulation moléculaire se mettant en place, les chercheurs se sont de nouveau orientés vers l'une de leur première problématique : le *docking* moléculaire. Après les projets comme GROPE, d'autres projets de *docking* moléculaire comme STALK [LEVINE *et al.* 1997] voient le jour. La communauté haptique commence également à s'intéresser à cette problématique [SUBAŞI 2006 ; SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006, 2008]. Par exemple,

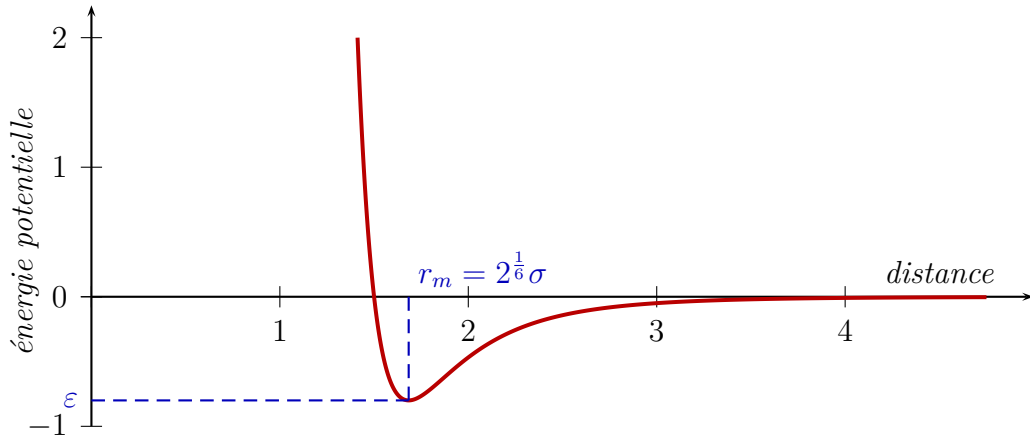


Figure 1.6 – Potentiel de LENNARD-JONES [1924a]

LAI-YUEN et Y.-S. LEE [2005] proposent une interface haptique avec cinq DDLs (voir figure 1.7 page suivante) afin d’effectuer du *docking* moléculaire [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006]. Puis, à l’aide d’interfaces haptiques comme le Virtuouse™ 6D35–45 (six DDLs), la manipulation moléculaire [DAUNAY *et al.* 2007] puis le *docking* moléculaire [DAUNAY et RÉGNIER 2009] accompagné d’une évaluation temps-réel de l’énergie du complexe moléculaire devient possible. Le *docking* moléculaire faisant intervenir des champs de force spécifiques, HOU et SOURINA [2010] proposent des modèles de forces haptiques permettant de ressentir les moments⁴ interviennent au niveau de structures intra-moléculaires ou inter-moléculaires.

Plus récemment, deux projets ont permis d’aboutir à des plateformes de manipulation haptiques de molécules avec un moteur de simulation en temps-réel. Tout d’abord, REDON *et al.* [2005] développent des algorithmes pour la simulation en temps-réel de corps articulés avec un grand nombre de DDLs. Puis, il adapte son travail pour créer un moteur de simulation moléculaire ce qui lui permet d’obtenir des simulations temps-réel [ROSSI *et al.* 2007], utilisable pour la manipulation haptique [BOLOPION *et al.* 2009]. En suivant un cheminement similaire, DELALANDE *et al.* [2009] proposent un outil permettant d’obtenir des simulations moléculaires en temps-réel. Puis dans un second temps, DELALANDE *et al.* [2010] rendent possible la manipulation haptique temps-réel de molécules en proposant la déformation au niveau atomique.

Les différentes briques techniques et logicielles permettant d’effectuer du *docking* moléculaire flexible interactif existent. BOLOPION *et al.* [2009] puis

4. Utilisé ici dans le sens mécanique, force autour d’un pivot (moment ou couple).



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

DELALANDE *et al.* [2010] nous montrent la faisabilité des simulations moléculaires réalistes et interactives. Puis DAUNAY et RÉGNIER [2009] offrent un moyen d'évaluer en temps-réel ces simulations. Le logiciel VMD offre une plateforme de visualisation moléculaire permettant de connecter des outils haptiques [STONE *et al.* 2010]. Des modèles de forces haptiques spécifiques au *docking* moléculaire sont développés [HOU et SOURINA 2010].

En fournissant tous ces outils de visualisation et d'interaction avec des environnement moléculaires virtuels, les possibilités des biologistes sont augmentées. Cependant, la complexité du problème de *docking* moléculaire est tellement importante que nous allons avoir recours à une aide supplémentaire : le travail collaboratif.

1.2.4 Plateformes collaboratives pour la biologie moléculaire

Les applications collaboratives en biologie moléculaire ont commencé à être développées pour répondre au besoin de travailler à plusieurs. L'une des premières application a été proposée par CASHER et RZEPA [1995] sous le nom de EyeChem. Cette application constituée d'une nœud serveur et de nœuds clients sur un réseau interne, permet à plusieurs utilisateurs d'éditer et de manipuler une molécule de manière synchrone.

Sur le même principe, BOURNE *et al.* [1998] développent MICE (*Molecular*



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

Interactive Collaborative Environment), permettant de visualiser des molécules en collaboration distante. Cette application se distingue par l'utilisation d'Internet comme réseau ce qui permet une plus grande souplesse dans le déploiement. TATE *et al.* [2001] étendent les possibilités de MICE en permettant l'édition, la manipulation et l'interaction d'une même molécule par plusieurs utilisateurs. Un projet similaire appelé Chimera, développé par PETTERSEN *et al.* [2004], existe également et propose le même type de fonctionnalités.

Puis, basé sur la plateforme de J.-I. KIM *et al.* [2004] permettant de faire de la modélisation de molécules par gestes, PARK *et al.* [2006] proposent un système distribué de collaboration distante. C'est l'une des premières applications qui aborde le problème du *docking* moléculaire. Les gestes sont effectuées avec des *haptic eggs*, deux petites interfaces tangibles placées dans chaque main de l'utilisateur, chaque *haptic egg* étant l'abstraction d'une molécule. Cependant, le système de communication est déporté dans le temps puisque les utilisateurs ont la possibilité de commenter et de donner des opinions sur la manière de réaliser le *docking* moléculaire à l'aide d'un système de messagerie instantanée. Les décisions sont alors transmises à l'utilisateur qui s'occupe des manipulations en environnement virtuel. Plus récemment, le projet *eMinerals* [DOVE *et al.* 2005], fournit une solution pour la collaboration entre biologistes (messagerie instantanée, vidéo-conférence, serveur centralisé, *etc.*) comme on peut le voir sur la figure 1.9 page ci-contre. Cependant, il s'agit surtout de collaboration distante et permet un travail synchrone ou asynchrone.

1.2. Contexte de travail : la modélisation moléculaire

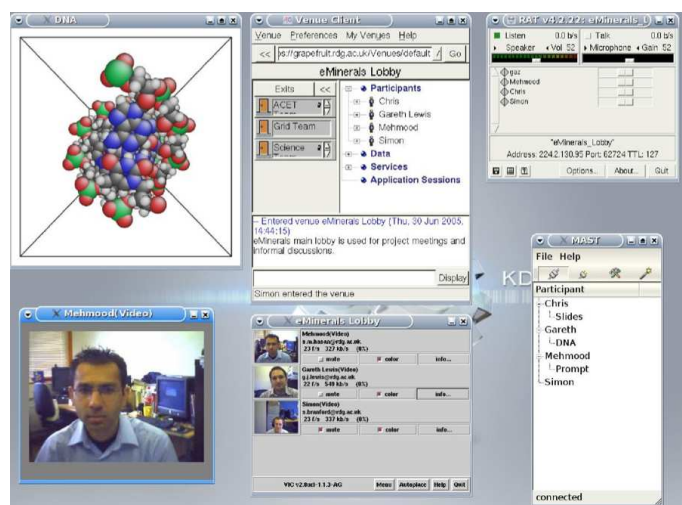


Figure 1.9 – Plateforme de collaboration inter-universités proposée par [DOVE *et al.* 2005]

Parmi les applications collaboratives de biologie moléculaire permettant une interaction synchrone, CHASTINE *et al.* [2005] sont les premiers à s'intéresser aux problèmes de communication entre les sujets (voir section 1.4.1 page 25). À travers l'application AMMP-Vis, il propose des outils pour désigner des zones de l'environnement virtuel. Afin d'améliorer la communication, il propose également de modéliser les mains de chaque utilisateur dans l'environnement virtuel pour que chacun ait conscience des agissement des partenaires (voir figure 1.10 page suivante). Cette plateforme a ensuite été réutilisée sous la forme de AMMP-EXTN afin d'introduire des procédures de contrôle d'accès. Pour éviter les conflits entre les utilisateurs, les différentes strates d'informations (paramètres de visualisation, modélisation, modification des données) ont été soumises à différents droits de visualisation et de modification [MA 2007 ; MA *et al.* 2007].

Cependant, les applications présentées ne concerne que des application de collaboration distante. La manipulation colocalisée permet de créer un environnement de travail social qui permet une meilleure communication. L'application PaulingWorld [SU et LOFTIN 2001 ; SU *et al.* 2000] propose une des premières applications de collaboration colocalisée pour la visualisation et l'interaction. La visualisation s'effectue sur un *Workbench* ce qui permet aux utilisateurs d'avoir un niveau d'interaction similaire dans l'application. Pour améliorer l'immersion, KRIZ *et al.* [2003] proposent aux utilisateurs la visualisation de molécule au travers différents équipements dont un CAVE à l'aide de l'application DIVERSE.



Figure 1.10 – Manipulation collaborative de molécule avec représentation des mains des participants [CHASTINE *et al.* 2005]

Nous venons de présenter plusieurs solutions logicielles et matérielles permettant de créer un espace de collaboration pour la modélisation moléculaire et le *docking* moléculaire. Cependant, la présentation de ces travaux abordent surtout les contraintes techniques nécessaires à la mise en place de tels systèmes sans évoquer les contraintes humaines de la collaboration. Seul CHASTINE *et al.* [2005] semblent avoir abordé les aspects de communication dans ces applications. La prochaine section va nous permettre d’aborder cette problématique.

1.3 Approche collaborative pour les problèmes complexes

C’est grâce à la communauté en psychologie sociale que nous allons à présent définir et caractériser les différents aspects d’une collaboration entre humains. Quels sont les avantages d’un travail en collaboration ? Quels en sont les inconvénients ? En quoi le travail collaboratif est-il un choix pertinent pour appréhender des tâches complexes ?

Avant d’aborder ces différents points, il est nécessaire de préciser la distinction entre travail coopératif et travail collaboratif. Pour comprendre cette différence, nous nous appuyons sur la définition relativement claire proposée par ROSHELLE et TEASLEY [1995].

Cooperative work is accomplished by the division of labour among participants, as an activity where each person is responsible for a portion of the problem solving. We focus on collaboration as the mutual engagement of participants in a coordinated effort to solve the problem together.

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

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

Les travaux présentés ici concernent le travail collaboratif et ne traiterons pas de travail coopératif, sauf mention contraire.

1.3.1 La distribution cognitive des charges de travail

BANDURA [1986] puis FOUSHEE et HELMREICH [1987] sont parmi les premiers à avoir l'intuition que le travail collaboratif apporte plus qu'une simple multiplication des ressources : les interactions entre les individus font émerger des compétences propre au groupe. Par exemple, WEGNER [1987] s'intéresse à la distribution de mémoire dans un groupe : chaque individu ne détient qu'une partie de l'information mais la capacité mémorielle du groupe dans son ensemble est plus importante. GEORGE [1990] souligne également que l'état émotionnel de chacun affecte l'état émotionnel du groupe⁵.

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

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

pour laquelle CONEIN [2004] propose une traduction

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

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

C'est HUTCHINS [1995] qui met en évidence la notion de distribution cognitive des charges de travail avec une étude des interactions qui ont lieu dans un cockpit d'avion. Ces conclusions sont confirmées et explicitées grâce à ses observations en psychologie sociale et ses connaissances en anthropologie [HUTCHINS 1996] : il fait une distinction entre les propriétés cognitives d'un individu et les propriétés cognitives d'un groupe. Ces travaux donnent lieu à la création de deux communautés ; ceux qui considèrent que le travail cognitif d'un groupe d'individus est une somme des propriétés cognitives de chaque individu ; et ceux qui considèrent que certains aspects cognitifs d'un groupe d'individus sont propres à la collaboration.

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

Plus récemment, ZHANG et PATEL [2006] synthétisent la distribution cognitive comme des systèmes ayant des interactions externes (avec des matériels) [ZHANG et D. A. NORMAN 1994] et des interactions internes (avec des collaborateurs) comme illustré sur la figure 1.11 page suivante. Ces éléments externes sont inclus dans le processus de distribution cognitive puisqu'il permettent également de soulager la charge cognitive des individus. D'ailleurs, une liste des propriétés cognitives auxquelles peuvent répondre ces éléments externes est dressées par ZHANG [1997] :

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

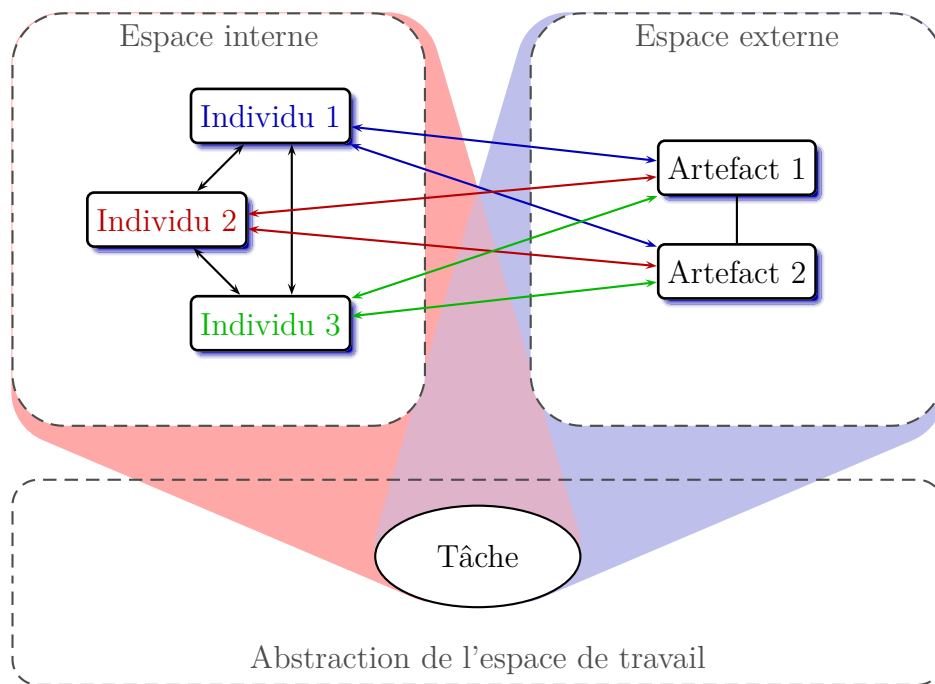


Figure 1.11 – Représentation d'un système cognitivement distribué

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

Nous venons de voir que la collaboration permet de créer une intelligence de groupe mais cette intelligence permet-elle d'augmenter les performances d'un groupe ? FOUSHEE et HELMREICH [1987] montrent qu'une configuration de travail collaboratif peut amener un gain en efficacité mais peut également amener une perte d'efficacité. Par exemple, PATEL *et al.* [1999] montrent une perte d'efficacité sur une application permettant la collaboration distante. ZHANG [1998] esquisse une explication dépendant de la répartition des connaissances dans un groupe : si les connaissances sont complémen-

taires, il y a un gain en efficacité. Nous allons voir dans les sections suivantes que différents phénomènes influent sur les performances d'un groupe.

1.3.2 La facilitation sociale

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

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

Les résultats (voir figure 1.12), largement étudiés par SEASHORE [1899], montrent que les coureurs en présence d'autres individus sont plus rapides que les coureurs effectuant l'épreuve seuls.

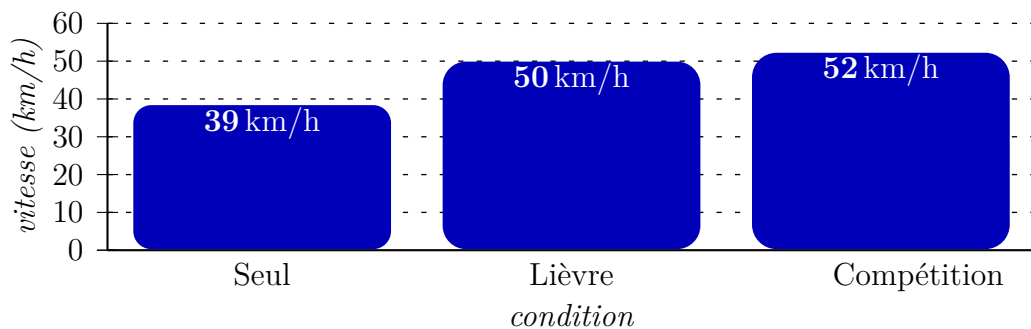


Figure 1.12 – Résultats obtenus par TRIPLETT [1898] avec des cyclistes

Suite à ces résultats, des expérimentations ont été menées sur des étudiants par MAYER [1903] puis par MEUMANN [1904]. MAYER [1903] confronte les étudiants à la réalisation d'une tâche (rédaction de dictée ou résolution de problème arithmétique) sous le regard d'un observateur. Il constate que les étudiants sont plus performants lorsqu'ils sont en présence d'un autre individu. MEUMANN [1904] ajoute une pierre à l'édifice en confirmant avec des tests plus poussés (tests de mémoire, ergographe et dynamomètre) que les étudiants sont toujours moins performants lorsqu'ils sont seuls.

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

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

qui peut-être traduite par

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

ALLPORT [1924] aborde ce phénomène par une collaboration où chaque individu effectue la même tâche. Dans ce même contexte, ROETHLISBERGER *et al.* [1939]⁶ constate que le travail en groupe génère une stimulation qui augmente les performances du groupe : les performances du groupe sont meilleures que la somme des performances individuelles de chacun des membres. La facilitation sociale a également été observée sur des animaux comme les cafards [ZAJONC 1969] ou les singes [DINDO *et al.* 2009].

Cependant, des nuances de ce phénomène commencent à être observées. Par exemple, des différences de performances sont observées en fonction de la nature de la tâche. Déjà, YERKES et DODSON [1908] avait constaté, dans un contexte non-collaboratif, que les performances d'un individu pouvait dépendre de la complexité de la tâche et du niveau de stimulation. Une trop faible ou une trop forte stimulation diminue les performances de l'individu lors de la réalisation d'une tâche complexe (voir figure 1.13 page suivante). Une trop faible stimulation désintéresse l'individu de la tâche alors qu'une stimulation trop importante génère un stress diminuant les capacités de l'individu.

ZAJONC [1965] fait le lien entre la loi de YERKES et DODSON [1908] et la facilitation sociale. En effet, la présence de partenaires dans la réalisation d'une tâche permet une stimulation globale du groupe. Dans le cadre d'une tâche simple, chacun des membres est confiant dans ses propres capacités à réaliser la tâche et la présence d'observateurs va stimuler son besoin de bien réussir la tâche. Les individus ne craignent pas d'être évalué par les collaborateurs sur le travail réalisé. Cependant, l'évaluation par les collaborateurs dans le cadre d'une tâche complexe est différente : la tâche n'étant ni habituelle, ni facile, les membres du groupe perdent leur confiance et craignent un jugement dépréciatif.

Malgré cela, CASTRO [1994] montre que la stimulation sociale est meilleure lorsque les participants se connaissent entre eux. En effet, les participants

6. ROETHLISBERGER *et al.* [1939] base ses conclusions sur les travaux non-publiés de Elton MAYO au sein de l'entreprise *Hawthorne Works*.



Figure 1.13 – Loi de YERKES et DODSON [1908] sur le lien entre la stimulation des individus et les performances

qui se connaissent déjà vont s'affranchir de la peur d'être évalué.

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

1.3.3 La paresse sociale

RINGELMANN [1913] est le premier à constater le phénomène de *paresse sociale*⁷ dans un rapport technique qui sera signalé quelques années plus tard par MOEDE [1927] puis repris de manière détaillée dans la littérature scientifique par KRAVITZ et B. MARTIN [1986]. Il propose une expérience de traction de corde à plusieurs individus et observe la traction totale exercée par le groupe en faisant varier la taille des groupes. La traction totale observée pour un groupe est inférieure à la somme des efforts individuels (voir figure 1.14 page ci-contre). SCHERMERHORN *et al.* [2009] définit la *paresse sociale* de la manière suivante

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

qui peut être traduite par

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

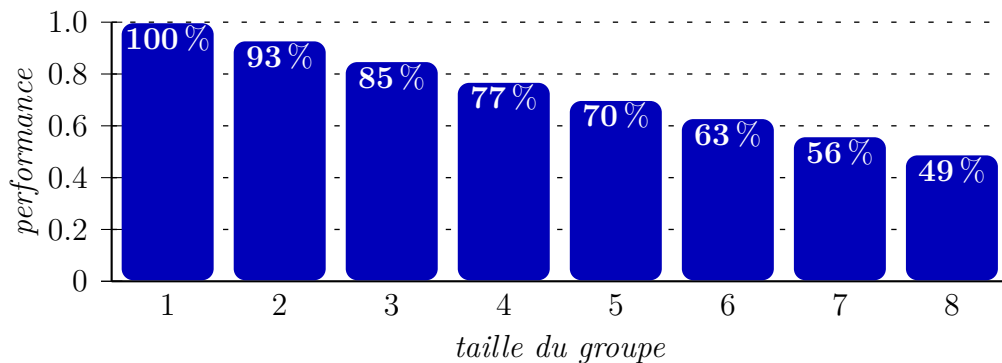


Figure 1.14 – Résultats obtenus par RINGELMANN [1913] et présentés par KRAVITZ et B. MARTIN [1986]

Cependant, les résultats de RINGELMANN [1913] ne permettent pas de déterminer si la perte d'efficacité est liée à un effort individuel plus faible ou à un manque de coordination entre les membres du groupe [STEINER 1972]. Entre temps, LATANÉ *et al.* [1979] ont recréé l'expérience proposée par RINGELMANN [1913] en modifiant le protocole expérimental afin de réduire les erreurs de mesure liées aux conflits de coordination. Bien que les résultats varient légèrement, les conclusions sont les mêmes que celles avancées précédemment. Les travaux de KERR et BRUUN [1981] permettent d'apporter des précisions pour définir les raisons de cette paresse sociale. Chaque membre effectuant strictement la même tâche que ses partenaires, il considère que le travail sera effectué par les autres et qu'il n'a pas besoin de s'investir autant que s'il était seul.

Par la suite, les travaux de recherche ont tenté de modéliser l'évolution de la paresse sociale en fonction du nombre de participants. INGHAM *et al.* [1974] puis KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] montrent que l'ajout d'un premier puis d'un deuxième collaborateur a des conséquences importantes sur la paresse sociale mais que l'ajout de collaborateurs supplémentaires provoque une baisse plus modérée. [SULEIMAN et WATSON 2008] proposent une synthèse de la collaboration, illustrée sur la figure 1.15 page suivante.

Cependant, différentes études proposent des solutions pour contrer les effets de la paresse sociale. Deux propositions ressortent particulièrement : l'identification et l'auto-évaluation. Selon KERR et BRUUN [1981], l'identification a pour objectif de donner un rôle défini et unique à chaque participants. Cette identification permet de responsabiliser chaque participant. LATANÉ

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



Figure 1.15 – Synthèse des effets de la collaboration selon SULEIMAN et WATSON [2008]

et al. [1979] en avaient déjà eu l'intuition puisqu'ils proposent une telle solution dans leurs perspectives. KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] repris par KRAUT [2003] mettent en avant cette idée d'identification à la suite d'expérimentations.

D'ailleurs, KARAU et K. D. WILLIAMS [1993] ont également proposé le principe d'auto-évaluation pour neutraliser les effets de la paresse sociale. De cette manière, les utilisateurs peuvent s'auto-évaluer et évaluer leurs collaborateurs ce qui génère une pression sociale pour favoriser la facilitation sociale [S. G. HARKINS et SZYMANSKI 1988; SZYMANSKI et S. G. HARKINS 1987]. Dans une étude dans laquelle il compare entre autre une configuration de travail collaboratif distribuée avec une configuration colocalisée, CHIDAMBARAM et TUNG [2005] montrent qu'un travail colocalisé permet de faciliter l'auto-évaluation et augmente cette pression sociale. En effet, le travail colocalisé permet d'avoir une meilleure perception des actions de chacun des membres et ainsi d'évaluer de façon plus précise le travail des collaborateurs.

Cependant, CHIDAMBARAM et TUNG [2005] constatent un effet parallèle : certains membres du groupe donnent simplement l'impression qu'ils travaillent sans être réellement effectif. On trouve également les récents travaux de BUISINE *et al.* [2011] qui montrent que l'occupation spatiale de l'environnement est importante : un accès limité à l'espace de travail provoque de la paresse sociale. En effet, si l'accès à une ressource externe ne permet que la présence

d'un seul membre du groupe, les autres membres ne pouvant pas l'utiliser peuvent générer le phénomène de *paresse sociale*. Il est donc préférable d'avoir un accès équitable à l'espace de travail pour tous les membres du groupe (une table ronde par exemple).

La *paresse sociale* est un phénomène qui apporte des contraintes importantes au travail de groupe. Cependant, fournir une identification des rôles de chacun est une première réponse à ce problème, l'auto-évaluation étant la seconde. Comme l'a montré CHIDAMBARAM et TUNG [2005], la collaboration colocalisée est une solution appropriée pour survenir aux besoins de l'auto-évaluation. Cependant, la mise en place d'une plateforme collaborative doit également permettre à chaque utilisateur de s'identifier au sein du processus collaboratif.

1.4 Collaboration en environnement virtuel

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

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

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

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

1.4.1 Mécanismes de la communication de groupe

Certains mécanismes de la communication sont relativement implicites et difficilement observables. D'autres sont plus concrets mais apportent également leurs contraintes et leurs limites. Cette section a pour but de décrire les mécanismes que sont la conscience périphérique et le *grounding*.

La conscience de groupe

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

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

traduit en français par BETBEDER et TCHOOUNIKINE [2004]

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

La conscience des autres partenaires peut concerner aussi bien la position spatiale (réelle ou virtuelle), des informations durables sur un collaborateur (âge, sexe, spécialité, culture, *etc.*) ou encore l'action réalisée par celui-ci [COCKBURN et WEIR 1999]. Cette conscience est bien souvent inconsciente et de nombreux événements peuvent survenir autour d'un participant sans qu'il n'y prête attention. Parfois, ce manque d'attention permet un gain de temps dans l'achèvement de la tâche (par exemple, si le collaborateur éternue, cela n'a pas d'influence sur la réalisation de la tâche). Cependant, le fait de savoir qu'un collaborateur s'est absenté (pour aller aux toilettes par exemple) est beaucoup plus pertinent car il n'est alors plus question de compter sur son aide pendant quelques minutes.

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

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

Cependant, la conscience de groupe est constituée de plusieurs aspects que les sociologues ont cherché à segmenter. GUTWIN *et al.* [1996] propose les quatre catégories de conscience suivantes⁸ :

Conscience informelle Ce sont les informations générales sur les collègues, le type d'informations que les gens connaissent lorsqu'ils travaillent dans le même bureau (âge, origines culturelles, situation familiale, *etc.*) ;

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

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

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

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

Parmi tous ces types de conscience, seule la conscience de l'espace de travail nécessite une mise à jour en temps-réel des informations environnantes par les membres du groupe, surtout dans le cadre d'une collaboration synchrone. Chaque collaborateur émet des informations (action en cours, position du curseur, *etc.*) de manière consciente ou inconsciente. Pour les informations émises de manière inconsciente, elles seront plus ou moins visibles des autres collaborateurs en fonction de leur attention. Cependant, lorsqu'un utilisateur souhaite émettre une information, il doit également être sûr que l'information a été comprise correctement.

Cette notion d'inter-référencement, récemment mise en évidence à travers la plateforme AMMP-Vis [CHASTINE *et al.* 2006 ; CHASTINE *et al.* 2005], a été définie par CHASTINE [2007] de la manière suivante

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

qu'on traduira par

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

Au travers de ces travaux de thèse, CHASTINE [2007] aborde en détail la notion d'inter-référencement. Un utilisateur initie une désignation d'un élément de l'environnement puis un (ou plusieurs) utilisateur(s) reçoit(reçoivent) cette désignation. Cette désignation est caractérisée par plusieurs paramètres :

- une technique de sélection ;
- un groupe d'éléments sélectionnés ;
- une technique de représentation ;
- une relation entre l'initiateur et l'élément sélectionné ;
- une relation entre le (ou les) receveur(s) et l'élément sélectionné ;
- un contexte entre l'initiateur et le (ou les) receveur(s) ;
- un moyen d'accuser réception du référencement (optionnel).

Afin de résoudre cette problématique, CHASTINE *et al.* [2007] se proposent, dans un contexte de collaboration distante, d'utiliser des techniques de réalité augmentée pour désigner les éléments (voir figure 1.16 page suivante). Dans une étude l'année suivante, CHASTINE *et al.* [2008] montrent que les techniques qu'ils proposent pour améliorer l'inter-référencement permettent de limiter les ambiguïtés et d'améliorer les performances globales du groupe.

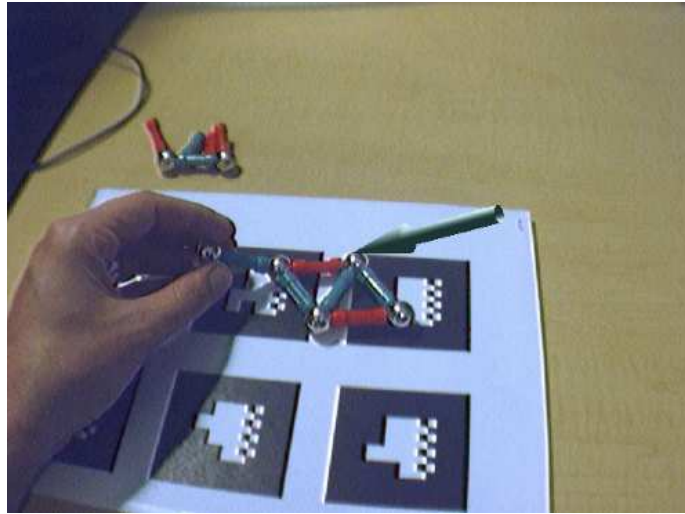


Figure 1.16 – Inter-référencement visuel proposé par CHASTINE *et al.* [2007] à l'aide de techniques de réalité augmentée

L'inter-référencement fait partie du processus d'échange et de communication au sein d'une collaboration synchrone (distante ou colocalisée). Afin d'effectuer des désignations à un collaborateur, il est nécessaire de savoir si le collaborateur est attentif. Il est également nécessaire d'adapter la manière de procéder en fonction des connaissances et des compétences de ce collaborateur. La conscience de groupe prend donc une place importante dans ce processus d'inter-référencement.

Le *grounding*

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

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

qu'on pourrait traduire par

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

Le *grounding* est nécessaire à la transmission d'informations. En effet, un locuteur qui souhaite transmettre une information doit savoir quel jargon il peut utiliser avec son interlocuteur ; il faut également que les deux interlocuteurs aient accès aux mêmes données concernant l'environnement sur lequel ils travaillent. DILLENBOURG *et al.* [1996] étudient ce partage d'informations sur une enquête fictive à propos d'un meurtre. Il constate que chaque membre du groupe se construit sa propre représentation de l'environnement dans lequel il se trouve et évolue en fonction des informations que chacun trouve et de sa culture existante [BAKER *et al.* 1999].

Lors d'un travail de collaboration, chaque membre possède déjà sa propre base de connaissances qui peut être complémentaire ou recouvrir partiellement celle des autres membres. Cependant, durant la réalisation de la tâche, une base de connaissance commune va se créer. HERTZUM [2008] lie les processus de recherche d'informations et de *grounding*. En effet, la recherche d'informations mène les membres du groupe à découvrir l'environnement dans lequel ils évoluent ensemble pour étoffer leur base de connaissance commune. Cependant, en observant le travail d'un hôpital où plusieurs médecins sont à la recherche de symptômes pour diagnostiquer un patient et fournir un traitement approprié, HERTZUM [2010] s'est rendu compte que chaque médecin est capable individuellement de découvrir des symptômes mais que le manque d'échanges entre les différents médecins ne permettait pas toujours d'établir le bon diagnostic.

Afin de constituer correctement une base de connaissance commune, les membres du groupe doivent communiquer. En particulier, ils doivent continuellement être sûr que les éléments dont ils parlent sont bien les mêmes afin de transmettre l'information. Fournir des outils appropriés pour l'inter-référencement devrait permettre d'améliorer la constitution de cette base commune de connaissance.

1.4.2 Communication en environnement virtuel

La communication en environnement virtuel est constituée de différentes composantes. Elle inclut la communication entre les collaborateurs et la communication avec ou à travers l'environnement. DIX [1997] a proposé de classer la communication en quatre catégories différentes.

Communication directe

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

Contrôle et retour sensoriel

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

Feedthrough

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

Grounding

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

1.4.3 Stratégies de collaboration

Avec les différents canaux de communication décrits dans la section 1.4.2 page précédente, conscients pour certains (communication directe, contrôle et retour sensoriel) et inconscients pour d'autres (*feedthrough* et *grounding*), il est possible de définir trois scénarios de collaboration différents basés sur les travaux de DIX *et al.* [2003] et de GRASSET [2004].

Collaboration à plusieurs utilisateurs

Illustré sur la figure 1.17, c'est l'aspect le plus naturel de la distribution cognitive des charges que nous avons déjà découvert dans la section 1.3.1 page 17 : on souhaite diviser la tâche à réaliser entre plusieurs utilisateurs car elle trop complexe ou trop fastidieuse. Chaque participant peut accéder librement aux artefacts et possède la possibilité d'analyser l'environnement par l'observation ou par les retours sensoriels des artefacts.

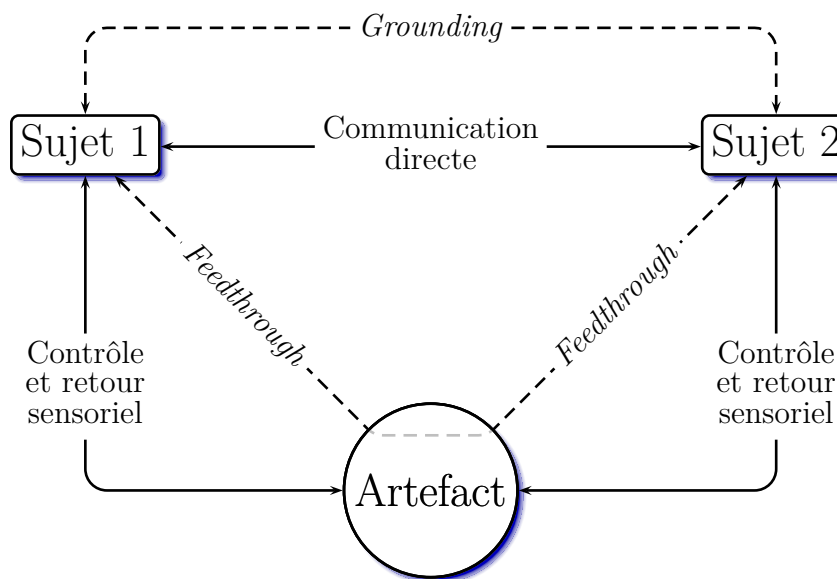


Figure 1.17 – Collaboration à plusieurs utilisateurs

Ce scénario permet une collaboration avec un même niveau d'interaction et d'accès aux ressources entre les collaborateurs ce qui peut faciliter la communication. Cependant, nous avons vu dans la section 1.3.3 page 22 sur la paresse sociale qu'une identification des rôles était préférable. Ce type de scénario aura tendance à favoriser la paresse sociale en proposant des rôles strictement identiques aux utilisateurs.

De plus, on notera que tous les participants accèdent aux mêmes artefacts. Si deux collaborateurs accèdent, modifient ou manipulent en même temps un même artefact, cela peut poser des problèmes de cohérence de l'environnement virtuel ou de sécurité de l'information comme l'explique DEWAN et H. SHEN [1998]. DEWAN et H. SHEN [1998] énoncent une liste de conditions à respecter (automatisation, généralisation, médiation totale, privilège minimum, facilité d'utilisation, efficacité) pour limiter les problèmes de concurrences

d'accès aux codes sources dans le développement de programmes informatiques. Quelques années plus tard, l'outil de développement informatique collaboratif SUBVERSION [2011] voit le jour. GRASSET et GASCUEL [2002] sont également confrontés à ce problème d'accès aux ressources sur sa plateforme multi-utilisateurs MARE et propose un système de contrôle d'accès aux informations. Toutefois, BUISINE *et al.* [2011] soulignent qu'une possibilité d'accès aux artefacts équitablement distribuée entre les utilisateurs permet de réduire la paresse sociale. En effet, si un utilisateur ne parvient pas à accéder aux artefacts, il va s'isoler.

Collaboration à plusieurs experts

Le scénario à plusieurs experts se distingue du scénario à plusieurs utilisateurs par la compétence des membres du groupe : les experts proviennent de spécialités différentes. La médecine est un domaine qui s'adapte très bien à ce type de scénario étant donné le nombre important de spécialités différentes [ALTHOFF *et al.* 2007a ; ALTHOFF *et al.* 2007b]. Les experts possédant des connaissances différentes, il est nécessaire pour eux d'avoir des artefacts adaptés aux besoins de chacun (voir figure 1.18 page suivante). Si on prend l'exemple du *docking* moléculaire, un biologiste n'aura pas les mêmes besoins en information qu'un chimiste et leurs actions sur la tâche à réaliser seront également de natures différentes. Les artefacts se synchronisent entre eux afin de conserver un environnement virtuel cohérent pour l'ensemble des experts.

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

Dans les scénarios à plusieurs experts, les bases de connaissances sont plutôt complémentaires. Il est nécessaire d'identifier les connaissances communes selon BACH *et al.* [2010], notion déjà identifiée comme le *grounding* par Herbert H. CLARK et BRENNAN [1991] (voir section 1.4.1 page 28). Par exemple, le jargon utilisé entre deux experts de spécialités différentes peut devenir une importante contrainte à la communication directe.



Figure 1.18 – Collaboration à plusieurs experts

Collaboration par manipulateur et observateur

Dans les deux scénarios précédents, il est difficile de synchroniser les actions des différents utilisateurs. Dans le scénario à plusieurs utilisateurs, c'est l'accès concurrent aux artefacts qui pose problème ; dans le scénario à plusieurs experts, c'est la synchronisation entre les artefacts. Afin de passer outre ces contraintes, le scénario par manipulateur et observateur propose un accès aux artefacts exclusif à un seul utilisateur du groupe, les autres n'ayant que la possibilité d'interagir directement avec cet utilisateur (voir figure 1.19 page suivante). L'observateur agit alors sur les artefacts par l'intermédiaire du manipulateur.

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

Cependant, l'activité de l'observateur le mène à désigner des objectifs au manipulateur ce qui augmente le besoin de communication. Cette action renvoie aux travaux de CHASTINE [2007] sur l'inter-référencement (voir section 1.4.1 page 25). De plus, un travail récent cherchant à caractériser « l'intelligence d'un groupe » a conclu que l'un des facteurs d'intelligence d'un groupe était

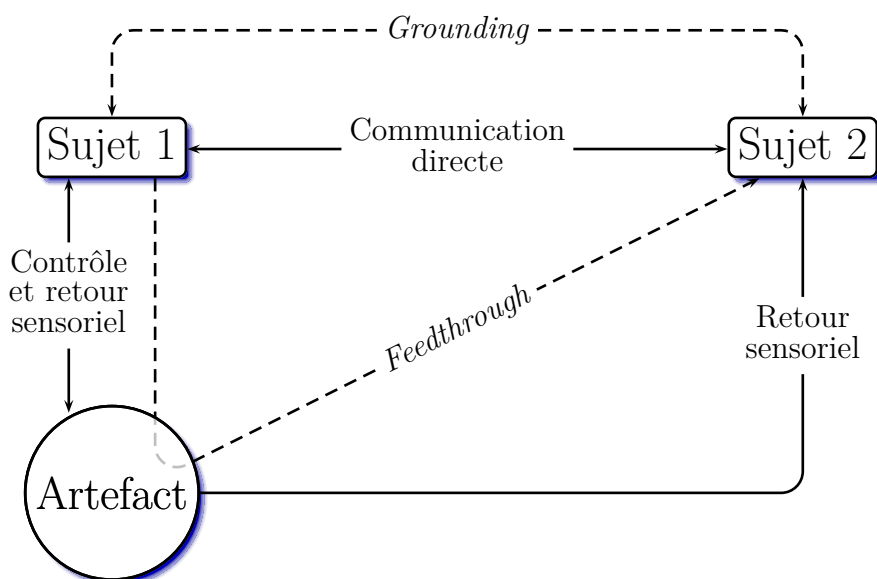


Figure 1.19 – Collaboration par manipulateur et observateur

la répartition équitable des charges de travaux entre les membres du groupe [WOOLLEY *et al.* 2010]. Dans ce scénario, l'asymétrie entre les différents rôles (manipulateur et observateur) semble favoriser un déséquilibre important des charges de travail ce qui n'est pas idéal pour la collaboration.

1.5 Conclusion

À travers ce chapitre, nous avons découvert la complexité que représente la tâche de *docking* moléculaire. En proposant des plateformes collaboratives, les scientifiques ont permis d'améliorer les résultats obtenus mais la collaboration reste relativement faiblement couplée (messages textuels ou verbaux, vidéo-conférence, *etc.*). Pourtant, de récents développements nous permettent enfin d'envisager d'immerger les scientifiques au sein d'une simulation moléculaire en temps-réel. C'est donc afin de répondre à la complexité du *docking* moléculaire que nous souhaitons proposer une plateforme collaborative synchrone et colocalisée pour la déformation moléculaire interactive et temps-réel.

Dans ce chapitre, nous avons également mis en évidence les avantages et les contraintes de la collaboration. La distribution cognitive des charges de travail permet d'apporter une réponse pertinente à la réalisation d'un problème extrêmement complexe tel que le *docking* moléculaire. Cependant, de nom-

breux facteurs (facilitation sociale, paresse sociale, *grounding*, conscience de groupe, *etc.*) interviennent et influent sur la communication et les interactions entre les acteurs de la collaboration. C'est la raison qui nous encourage à envisager la modalité haptique comme un support supplémentaire adéquat pour améliorer les communications et les interactions entre les collaborateurs.

Cependant, un tel contexte de travail (collaboration synchrone et colocalisée, manipulation moléculaire temps-réel, interaction avec retour haptique) n'a encore jamais été étudié. Aucune donnée ne permet d'infirmer ou de confirmer les théories sur la collaboration dans ce contexte bien que des hypothèses puisse être formulées.

Afin d'étudier ce contexte de travail, nous avons souhaiter segmenter les étapes de la déformation moléculaire en nous basant sur les travaux de BOWMAN [1999]. Il identifie quatre tâche élémentaires pour segmenter une interaction en environnement virtuel, nommées *Primitives Comportementales Virtuelles* (PCVs) par FUCHS *et al.* [2006]. Les quatre PCVs pour la manipulation moléculaire, illustrée dans la figure 1.20 page suivante, sont expliquées ci-dessous :

Exploration Cette tâche concerne la recherche et l'identification d'une cible (atome, résidu, structure secondaire, *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 Cette étape consiste à manipuler la cible précédemment sélectionnée pour déformer la structure moléculaire au niveau atomique, intra-moléculaire ou inter-moléculaire. L'objectif inhérent à cette tâche et d'atteindre l'objectif fixé (par exemple, minimiser l'énergie totale du système).

Évaluation Cette dernière partie concerne l'évaluation du 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.*).

Sur la base de ces PCVs, nous avons segmenté notre étude en deux parties distinctes ; une centrée sur le processus d'exploration et de sélection (voir chapitre 3 page 53) ; la seconde centrée sur les processus de manipulation et d'évaluation (voir chapitre 4 page 81). Dans un troisième temps, nous avons souhaiter augmenter la taille des groupes étudiés (voir chapitre 5 page 111).

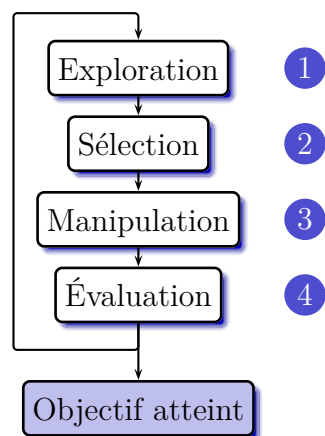


Figure 1.20 – Processus de déformation moléculaire en quatre étapes

Shaddock – Plateforme de manipulation collaborative de molécules

Sommaire

2.1	Introduction	38
2.2	Architecture matérielle et logicielle	38
2.2.1	Travail collaboratif synchrone et colocalisé	38
2.2.2	Architecture logicielle adoptée	41
2.3	Plateforme de simulation et de visualisation . .	43
2.3.1	Module de visualisation moléculaire	44
2.3.2	Module de simulation moléculaire	46
2.4	Les outils d'interaction	48
2.4.1	Outil d'interaction utilisé	48
2.4.2	Outils existants	49
2.4.3	Outils de manipulation avancés	49

2.1 Introduction

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

Nous commencerons par présenter les choix de matériels et d'architecture logicielle (voir section 2.2). L'ensemble des éléments de la plateforme sont organisés selon une architecture client/serveur ; les raisons de ce choix sont expliquées dans la section 2.2.2 page 41.

Ensuite, la plateforme de simulation moléculaire en temps-réel est présentée (voir section 2.3 page 43). Tout d'abord, un module de visualisation est nécessaire pour obtenir des visualisations détaillées et complètes de molécules ; le module est présenté dans la section 2.3.1 page 44. Puis un module de simulation moléculaire est ajouté au module visualisation ; plusieurs solutions sont possible et le module retenu est présenté dans la section 2.3.2 page 46. Cependant, afin d'obtenir une simulation moléculaire interactive temps-réel, un module spécifique doit être ajouté ; il sera présenté dans la section 2.3.2 page 47.

Le module de visualisation moléculaire utilisé propose déjà des outils permettant d'interagir avec les molécules. Ces outils sont présentés dans la section 2.4.2 page 49. Cependant, notre étude du travail collaboratif nous a amené à proposer des outils de manipulation avancés qui seront présentés dans la section 2.4.3 page 49.

Les différents éléments de cette plateforme sont résumés dans deux diagrammes UML (*Unified Modeling Language*). Un diagramme de déploiement UML de la plateforme Shaddock est présenté sur la figure 2.1 page ci-contre. L'application VMD est détaillée dans un diagramme de composant UML sur la figure 2.2 page 40.

2.2 Architecture matérielle et logicielle

2.2.1 Travail collaboratif synchrone et colocalisé

ELLIS *et al.* [1991] a proposé une classification des différentes configurations de travail collaboratif dans le temps et dans l'espace. Il distingue quatre classes principales qu'on peut représenter sur un graphique (voir figure 2.3 page 40).

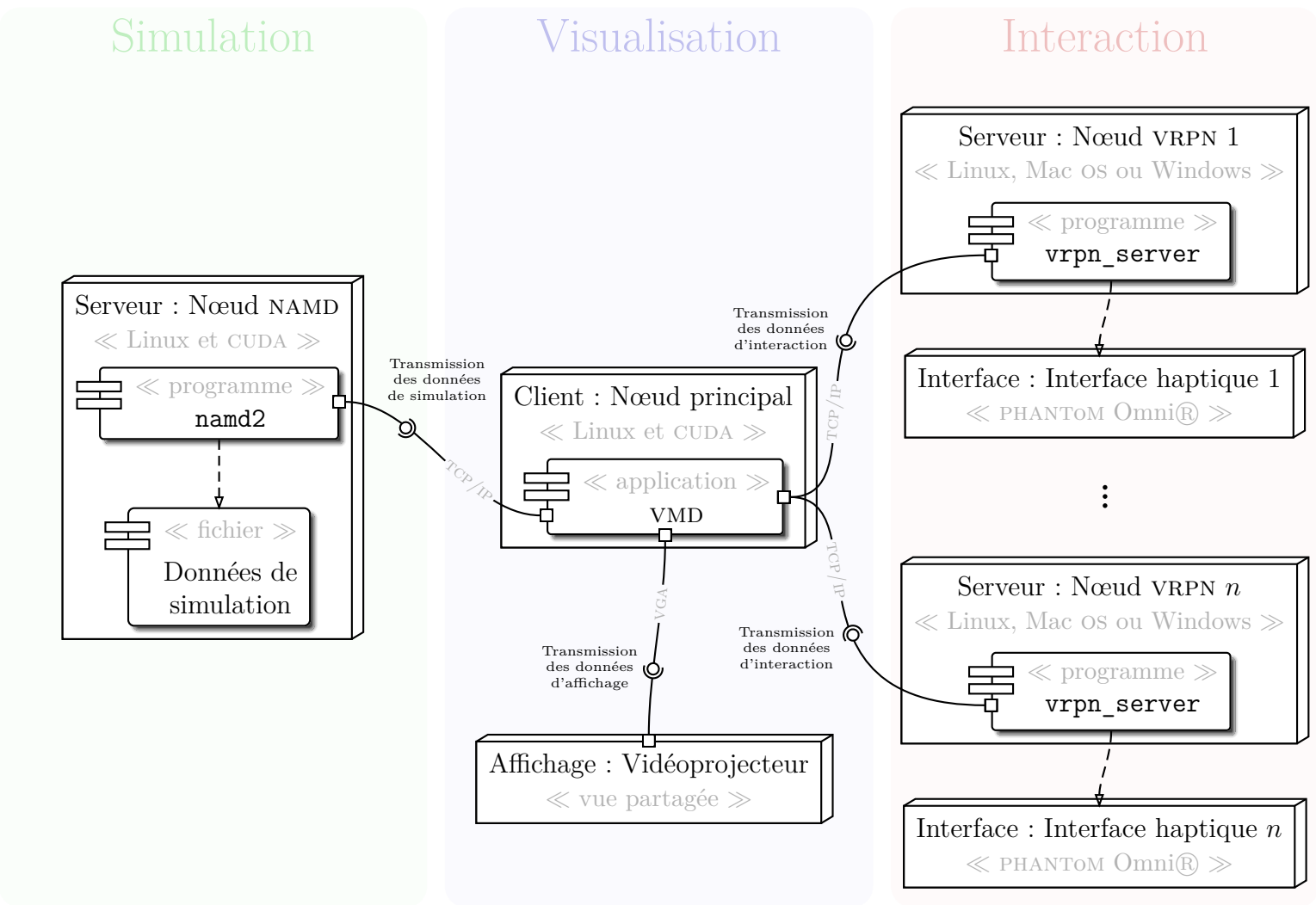


Figure 2.1 – Diagramme de déploiement UML de la plateforme Shaddock

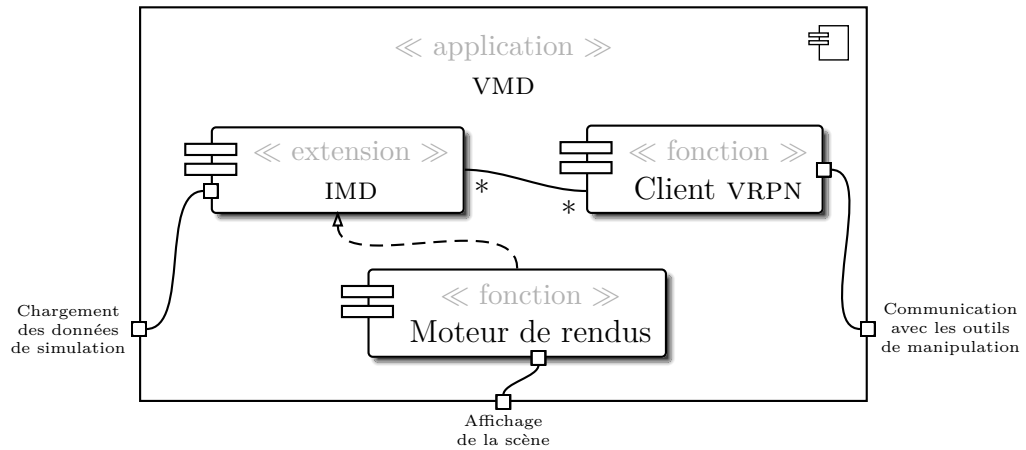


Figure 2.2 – Diagramme de composant UML du nœud VMD

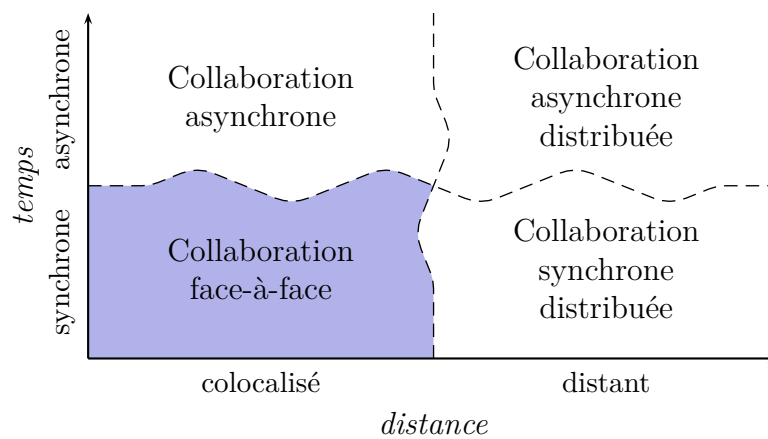


Figure 2.3 – Classification des tâches collaboratives selon ELLIS *et al.* [1991]

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

Tout d'abord, la section 1.4.1 page 25 évoque les problématiques liées à la conscience périphérique des partenaires dans la réalisation d'une tâche collaborative. Étant donné que plusieurs études ont montré que les performances collaboratives sont meilleures lorsque la conscience périphérique est bonne, il nous paraît nécessaire de se placer dans des conditions optimales pour augmenter cette conscience périphérique. La présence physique au même endroit de tous les collaborateurs est la façon la plus naturelle de créer cette conscience de manière optimale. Dans une solution de collaboration distante, de nombreuses informations doivent être enregistrées puis transmises numériquement avec les problématiques de représentations de l'information qui peut se poser.

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

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

2.2.2 Architecture logicielle adoptée

Deux types d'architectures ont été explorés pour les Environnements Virtuels Collaboratifs (EVC) : client/serveur ou pair-à-pair¹.

Architecture pair-à-pair

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

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

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

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

Architecture client/serveur

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

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

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

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

Étant donné que nous nous plaçons dans un contexte de simulation moléculaire, il nous est nécessaire de maintenir un environnement virtuel cohérent tout au long de la simulation. La plateforme Shaddock est pourvue d'une architecture client/serveur comme on peut le voir sur la figure 2.1 page 39.

Serveur de périphériques

Afin de gérer les connexions client/serveur pour les interfaces haptiques, nous utilisons le logiciel VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) développé par TAYLOR II *et al.* [2001]. La connexion avec le moteur de simulation est gérée par un autre module qui sera détaillé plus tard dans la section 2.3.2 page 47.

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

Dans notre cas, l'interface haptique est connectée physiquement à un ordinateur² et un serveur VRPN commande cette interface haptique. C'est seulement par l'intermédiaire de ce serveur VRPN et à travers le réseau que le client (VMD dans notre cas) va interagir avec l'interface haptique.

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

2.3 Plateforme de simulation et de visualisation

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

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

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

Ensuite, Shaddock simule une dynamique moléculaire. Un module de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce module puisse interagir avec le module de visualisation. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation. Le module de simulation choisi est présenté dans la [section 2.3.2](#) page 46.

Cependant, les moteurs de simulation ne sont pas conçus pour effectuer des simulations en temps-réel, et encore moins des simulations interactives en temps-réel. Pourtant, afin de proposer une dynamique moléculaire interactive et temps-réel aux utilisateurs, un module présenté dans la [section 2.3.2](#) page 47 permet de faire communiquer le module de visualisation avec le module de simulation.

2.3.1 Module de visualisation moléculaire

Les outils de visualisation moléculaire disponibles sont relativement nombreux. Parmi les plus populaires, on peut citer PyMOL [[PYMOL 2011](#)], VMD [[HUMPHREY *et al.* 1996](#)], Chimera [[PETTERSEN *et al.* 2004](#)], RasMol [[SAYLE et MILNER-WHITE 1995](#)] sans compter les nombreux dérivés permettant un affichage en ligne tel que Jmol [[JMOL 2011](#)] pour ne citer que le plus connu. PyMOL et VMD se distinguent particulièrement par leurs nombreuses fonctionnalités et leur large utilisation dans le milieu spécialisé.

PyMOL est probablement le logiciel de visualisation le plus utilisé par les experts du domaine car c’est le plus abouti en ce qui concerne les performances d’affichage. Cependant, PyMOL ne permet pas l’affichage de simulations temps-réel³, ni la manipulation interactive de molécules.

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

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

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

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

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

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

CPK affiche tous les atomes de la molécule sous forme de sphères en les reliant par des cylindres ; c'est un affichage très chargé lorsque le nombre d'atomes est important mais la taille des sphères et des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.4a page suivante) ;

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

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

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

Chacune de ces représentations visuelles peut être affectée à tout ou partie de la molécule comme par exemple « le résidu 13 », « seulement les atomes de carbone » ou « tous les résidus entre 1 et 16 sauf les atomes d'hydrogène ». De plus, pour chacune des représentations précédentes, différentes colorations sont possibles permettant de mettre en évidence ou au contraire de rendre discrètes certaines parties de la molécule :

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



Figure 2.4 – Illustration des rendus graphiques de molécules sur VMD

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

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

Transparence rend transparent les objets tout en conservant la teinte;

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

2.3.2 Module de simulation moléculaire

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

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

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

Simulation moléculaire interactive et temps-réel

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

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

La génération automatique de fichier de simulation

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

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

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

2.4 Les outils d'interaction

2.4.1 Outil d'interaction utilisé

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

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

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

Parmi les interfaces haptiques disponibles sur le marché, le PHANTOM Omni® répond à l'ensemble de ces contraintes avec un rapport qualité/prix correct. Le PHANTOM Desktop®, qui répond également aux contraintes, aurait permis des retours haptiques plus fidèles mais son prix élevé ne convient à notre plateforme collaborative où il faudra en déployer plusieurs. De plus, sa connectique (port parallèle) quasiment obsolète, est de plus en plus difficile à trouver sur les ordinateurs récents⁴.

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

2.4.2 Outils existants

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

Une des fonctions élémentaires proposée par VMD est la possibilité d'orienter la scène sur trois DDLs afin d'observer la molécule sous différents angles. C'est la souris qui tient ce rôle et elle peut également être configurée pour translater la molécule ou obtenir diverses informations sur la molécule et sur les atomes. Il est également possible d'utiliser une souris 3D permettant de regrouper les fonctions de translation et d'orientation de la scène. La souris 3D SpaceNavigator® est utilisée dans le cadre de notre seconde expérimentation (voir chapitre 4 page 81).

Ces fonctionnalités de navigation sont complétées par des fonctionnalités de manipulations élémentaires. Il est possible de déplacer des atomes ou des groupes d'atomes à l'aide des périphériques précédemment cités. Cependant, la fonctionnalité qui nous intéresse est la possibilité d'effectuer ces manipulations à l'aide d'interfaces haptiques par l'intermédiaire d'une connexion VRPN (voir section 2.2.2 page 43).

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

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

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

Ces outils ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 53). Cependant, de nombreux outils supplémentaires ont été développés au-fur-et-à-mesure des besoins identifiés durant les expérimentations. Ces nouveaux outils sont détaillés dans la section 2.4.3.

2.4.3 Outils de manipulation avancés

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

Outil de sélection collaboratif

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

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

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

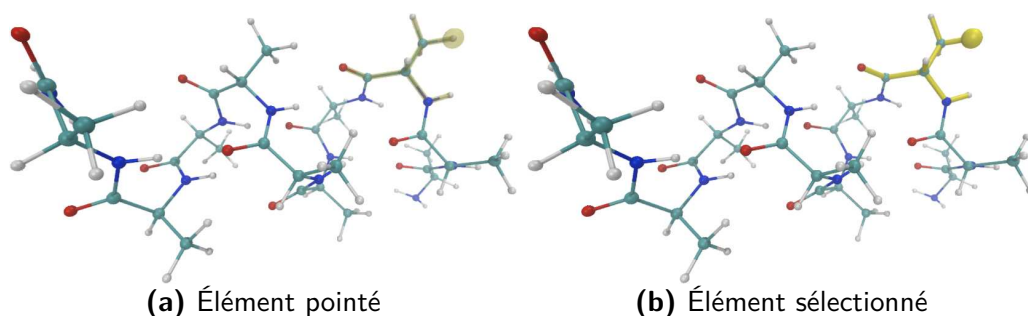


Figure 2.5 – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

Déformation par groupe d'atomes

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

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

- la molécule se trouve la plupart du temps dans un état relativement stable et le déplacement d'un atome perturbe cet état de stabilité par un étirement des structures; le déplacement d'un groupe d'atomes en un bloc permettrait d'éviter cet étirement et de conserver une meilleure stabilité.

C'est pourquoi nous proposons un outil appliquant une force à un groupe d'atomes pour le déplacer tout en conservant la stabilité intrinsèque de ce groupe. Les groupes d'atomes dignes d'intérêt sont les résidus (quelques dizaines d'atomes), les hélices- α ou feuillets- β (quelques dizaines de résidus) et les molécules (enchaînement de hélices- α et de feuillets- β). L'outil de déformation a été généralisé aux résidus et aux molécules. Cependant, la généralisation aux hélices- α et aux feuillets- β a été laissée de côté pour deux raisons :

- la forme allongée de ces structures nécessite de repenser partiellement voire complètement l'outil de déformation car la translation seule ne peut plus être utilisée ;
- les informations concernant ces structures ne sont pas toujours bien renseignées dans les bases de données de molécules.

Cependant, appliquer le même effort à l'ensemble des atomes d'un résidu ou d'une molécule produit un effort total très important. Si l'effort total est trop élevé, les perturbations envoyées à la simulation sont trop importantes et peuvent produire des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation⁵. Afin de conserver un effort total de déformation constant quelque soit le nombre d'atomes sélectionnés, la force appliquée à chaque atome est divisée par le nombre totale d'atomes sélectionnés.

Outil de désignation

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

Recherche d'une cible Cette étape consiste pour un utilisateur \mathcal{A} à identifier une cible à désigner digne d'intérêt; cette cible est choisie en fonction des objectifs de la tâche à réaliser (voir figure 2.6a page suivante).

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

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

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

Sélection d'une cible L'utilisateur \mathcal{B} ayant accepté doit maintenant sélectionner la cible pour achever le processus de désignation ; tant que l'utilisateur \mathcal{B} n'a pas sélectionné le résidu ciblé, le processus ne peut pas être considéré comme terminé et l'effet de surbrillance reste actif ; lorsque la cible est sélectionnée, le processus de manipulation reprend normalement (voir figure 2.6d).

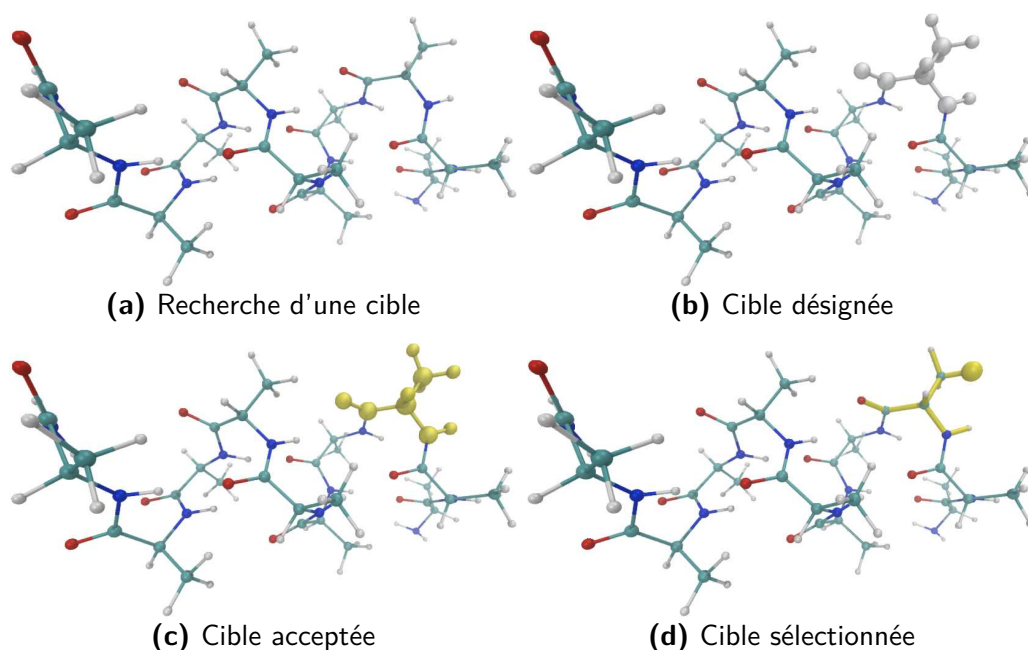


Figure 2.6 – Les quatre étapes de la désignation

Recherche collaborative de résidu sur une molécule

Sommaire

3.1	Introduction	54
3.2	Exploration et sélection collaborative	54
3.2.1	Travaux existants	54
3.2.2	Objectifs	56
3.3	Présentation de l'expérimentation	57
3.3.1	Description de la tâche	57
3.3.2	Spécificités du protocole expérimental	61
3.4	Résultats	63
3.4.1	Amélioration des performances en binôme	65
3.4.2	Stratégies de travail	69
3.4.3	Résultats qualitatifs	76
3.5	Conclusion	77
3.5.1	Résumé des résultats	77
3.5.2	Synthèse et perspectives	78

3.1 Introduction

L'état de l'art du premier chapitre nous a permis d'identifier les principales tâches élémentaires concernant l'interaction en environnement virtuel : les PCVs. Dans cette première étude, nous souhaitons étudier les premières PCVs qui sont l'exploration et la sélection (voir figure 1.20 page 36) dans un contexte de manipulation moléculaire collaborative. Le processus d'exploration et de sélection est primordial à toute manipulation ultérieure.

Dans ce chapitre, nous commencerons par présenter les travaux existants en matière d'exploration et de sélection en environnement virtuel. Puis nous présenterons les objectifs de cette étude pour aboutir sur un protocole expérimental. Les résultats de l'expérimentation seront analysés et discutés dans la dernière partie.

3.2 Exploration et sélection collaborative

3.2.1 Travaux existants

L'exploration et la sélection en environnement virtuel sont des tâches élémentaires relativement peu explorées en environnement virtuel, notamment dans le domaine de la biologie moléculaire. Pourtant, des travaux en biologie moléculaire existent dans les environnement réels mais les contraintes techniques sont très différentes de celles en environnement virtuel ; nous ne nous étendrons pas sur ce sujet.

Actuellement, les tâches d'exploration et de recherche collaborative sont principalement destinées aux applications pour les moteurs de recherche. M. R. MORRIS [2007] souligne que la coopération dans ce domaine existe déjà sur Internet mais que les échanges entre les utilisateurs sont encore trop peu exploités. Sur cette base, PICKENS et GOLOVCHINSKY [2007] propose un système pour la recherche collaborative où des utilisateurs à la recherche d'informations peuvent échanger de manière synchrone les résultats intermédiaires afin de progresser plus rapidement.

En environnement virtuel, WERNERT et HANSON [1999] propose simplement une exploration collaborative de l'environnement virtuel ; un guide permet à l'utilisateur d'explorer plus efficacement un environnement qu'il ne connaît pas. À partir de ce travail, S. HUGHES et LEWIS [2002] propose une tâche de recherche basée sur le principe du guidage mais en supprimant la col-

laboration; le guide est un algorithme qui suggère à l'utilisateur les zones d'intérêt.

L'objectif premier de l'exploration dans notre cas est de pouvoir sélectionner une zone d'intérêt après l'avoir identifiée. En biologie moléculaire, les logiciels les plus utilisés tel que PyMOL ou VMD proposent des moteurs de sélection à base de chaîne de caractères. Par exemple, pour sélectionner tous les atomes de type C, O, N ou CA, on utilisera les commandes suivantes dans PyMOL

```
pymol> select mysel, name c+o+n+ca
```

ou dans VMD

```
vmd> set mysel [atomselect "top" "name C or name O \\  
or name N or name CA"]
```

Cependant, ces méthodes de sélection ne s'intègrent dans aucun processus d'exploration : les zones d'intérêt doivent déjà être identifiées avant de procéder à ce type de sélection. VMD propose ce type d'exploration avec une souris et permet la sélection à l'aide d'une méthode de *picking*¹. Cependant, la sélection par *picking* est limitée par les problèmes de perception de la profondeur.

Différentes approches non collaboratives ont été étudiées pour la sélection en environnement moléculaire virtuel. Par exemple, PAVLOVIĆ *et al.* [1996] propose une plateforme permettant d'interagir avec les molécules en utilisant la voix et les gestes. Cependant, les techniques de segmentations de la parole et des gestes sont encore imprécises. On trouve également les travaux de POLYS *et al.* [2004] qui proposent une interaction avec une *wand*² ou encore les travaux de OBEYSEKARE *et al.* [1996] permettant l'interaction gestuelle avec un gant sur un *Workbench*³. Ces dispositifs sont relativement difficiles à déployer pour des applications collaboratives (multiplication de matériel, accès aux ressources matérielles, *etc.*). De plus, les tâches de manipulation étudiées sont extrêmement simplifiées et n'ont pas d'application réelle en biologie moléculaire.

Cependant, certains travaux se sont consacrés à la mise en place d'une plateforme pour des tâches pertinentes. Par exemple, LEVINE *et al.* [1997] proposent une plateforme d'interaction avec un environnement moléculaire virtuel afin d'explorer un complexe ligand-protéine pour réaliser un *docking*

1. Le *picking* consiste à identifier l'élément pointé par la souris (2D) dans l'environnement virtuel (3D).

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

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

moléculaire. Cependant, le *docking* moléculaire s'effectue ici sur des corps rigides pour simplifier la complexité de l'exploration. On trouve également les travaux de FÉREY *et al.* [2008] mais là encore, il s'agit de corps rigides. Cependant, DELALANDE *et al.* [2010] propose une plateforme en utilisant des périphériques haptiques pour aider à la localisation de ponts ioniques au sein d'une simulation moléculaire en temps-réel sur des corps flexibles. Cependant, les travaux ont évolué vers des corps flexibles avec DELALANDE *et al.* [2010] qui utilisent les périphériques haptiques pour aider à la localisation de ponts ioniques au sein d'une simulation moléculaire en temps-réel. L'interface haptique utilisée permet de ressentir les forces en action dans la simulation et ainsi améliorer le processus d'exploration et de sélection.

Cette brève bibliographie montre que les études manquent concernant les processus d'exploration et de sélection en EVC. Ce chapitre a pour but de proposer une tâche de recherche collaborative dans un environnement moléculaire virtuel afin d'identifier les avantages et les limites de cette approche.

3.2.2 Objectifs

Dans ce chapitre, nous abordons les tâches d'exploration et de sélection dans un EVC. La recherche au sein d'une simulation moléculaire est une tâche très complexe en raison du grand nombre d'atomes et de la flexibilité de la molécule. Nous proposons d'étudier la distribution des charges de travail pour la réalisation de cette tâche.

Les objectifs de cette première étude sont multiples. Tout d'abord, nous souhaitons observer les performances comparées d'un travail autonome face à une configuration de travail collaborative. Notre hypothèse va dans le sens d'une amélioration des performances pour les configurations de travail collaboratives sur des tâches de nature complexe.

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

Ensuite, nous nous intéressons plus précisément aux avis des utilisateurs. Nous supposons que la configuration collaborative est plus appréciée des utilisateurs grâce à l'émulsion sociale qui naît des interactions et de la communication entre les manipulateurs.

Enfin, nous souhaitons valider l'utilisabilité de la plateforme de manipulation proposée afin d'améliorer l'ergonomie des outils proposés. L'évaluation sera

confiée aux sujets. L'objectif est d'identifier les faiblesses pour proposer des solutions dans les versions ultérieures Shaddock.

3.3 Présentation de l'expérimentation

Afin de répondre à nos hypothèses de travail résumées dans la section B.1.1 page 208, nous décrivons ici la tâche proposée aux sujets pour répondre aux objectifs fixés.

3.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée consiste à trouver des résidus au sein d'une molécule puis à les extraire hors de la molécule. Les résidus sont des groupes d'atomes s'associant les uns aux autres le long d'une chaîne carbonée pour former une molécule. Trois molécules sont proposées dans le cadre de cette expérimentation. La molécule TRP-ZIPPER sera utilisée pour la procédure d'apprentissage. Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisées pour la tâche de recherche et d'extraction de résidus : 5 résidus à rechercher et à extraire sont proposés sur chaque molécule. Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisées pour la tâche de recherche et d'extraction de résidus : chaque molécule possède 5 résidus à extraire. Tous les résidus à rechercher sont affichés dans la table 3.1 page suivante. Pour une description précise des molécules, se reporter à la section A.2 page 203.

La figure 3.1 page 59 montre la répartition des résidus sur les deux molécules.

Chaque résidu possède ses propres caractéristiques (position, couleur, *etc.*) offrant des niveaux de complexité différents comme on peut le voir dans la table 3.2 page 60. Les critères de complexité utilisés sont les suivants :

Nombre de résidus Le nombre total de résidus présents dans la molécule.

Un nombre important de résidus surcharge visuellement l'environnement virtuel et augmente le nombre de cibles potentielles.

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

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

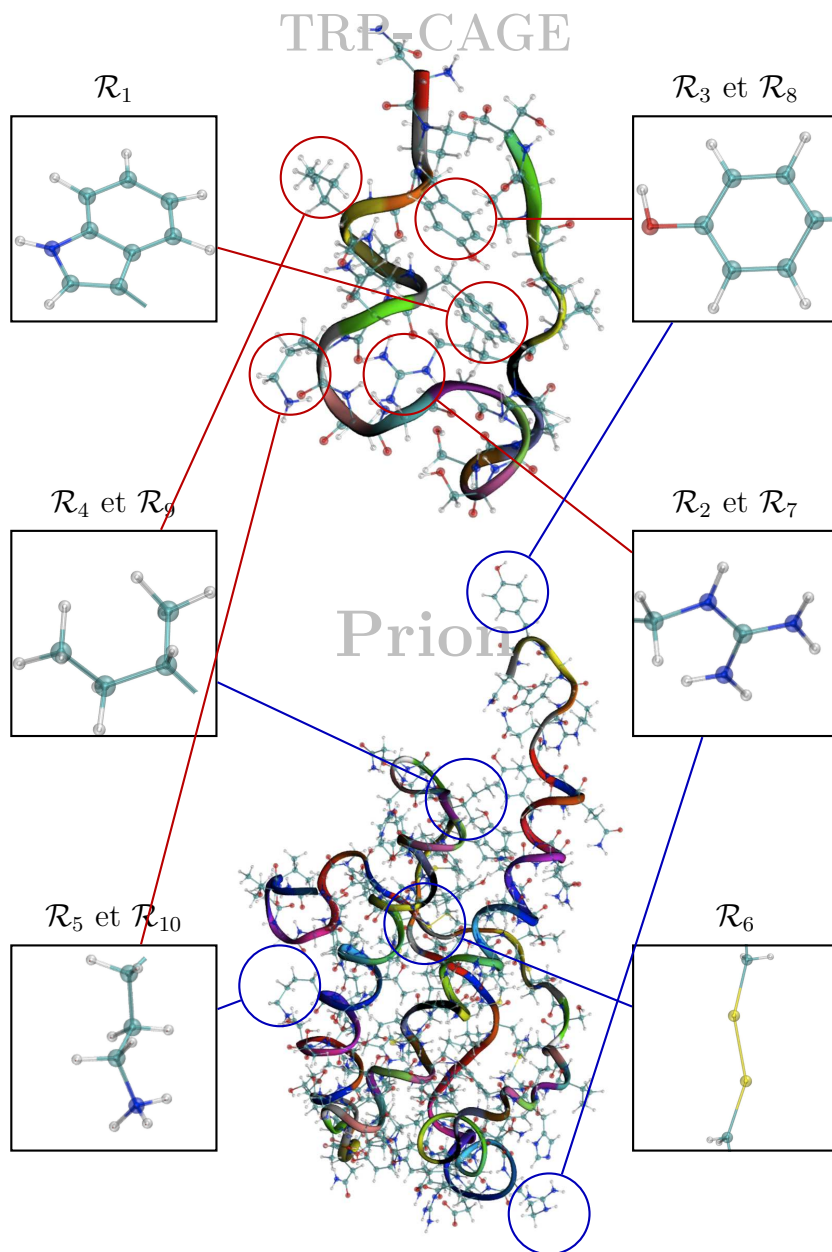
Table 3.1 – Liste des résidus recherchés

(a) Résidus sur la molécule TRP-CAGE

(b) Résidus sur la molécule Prion

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

Figure 3.1 – Répartition des résidus sur les molécules



Chaîne Une chaîne d’atomes (la plupart du temps carbonés) avec des atomes d’hydrogène de chaque côté; difficile à identifier par sa forme relativement neutre.

Cycle Une chaîne fermée d’atomes de carbone ou d’azote; facile à identifier par sa forme très spécifique.

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

Couleurs Les atomes sont colorés en fonction de leur nature (rouge pour l’oxygène, blanc pour l’hydrogène, *etc.*). Les atomes *rare*s sont donc facilement identifiables grâce à leur couleur singulière. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbonés) seront plus difficiles à identifier à cause de leur fréquence d’apparition élevée.

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

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

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

La tâche proposée nécessite deux étapes. Selon BOWMAN [1999], on distingue tout d'abord l'étape d'exploration. Pour explorer la molécule afin d'identifier la cible recherchée, les sujets disposent de l'outil *grab*. Lorsque la cible recherchée est identifiée, les sujets commencent la seconde étape : la sélection. Pour effectuer cette étape de sélection, les sujets disposent de l'outil *tug*. Les outils *grab* et *tug* sont décrits dans la section 2.4.2 page 49.

3.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation est basée sur le dispositif expérimental décrit dans le chapitre A page 201. Cependant, certains choix expérimentaux concernant cette expérimentation sont détaillés dans les sections suivantes. La méthode expérimentale, présentée dans la section B.1 page 208, est résumée dans la table 3.3 page 64.

Matériel utilisé

Cette première expérimentation propose aux sujets d'effectuer une recherche de résidus au sein d'une molécule de taille importante. Les sujets disposent de deux outils de déformation *tug*. Cependant, un outil d'orientation de la molécule est mis à disposition pour des raisons détaillées dans la section 3.3.2 page 63. Un outil supplémentaire nécessite quelques modifications logistiques.

L'outil d'orientation de la molécule est assuré par un PHANTOM Omni® associé à l'outil *grab* (voir section 2.4.2 page 49). L'ajout d'un outil nécessite également l'ajout d'un ordinateur comme serveur VRPN. L'interface est placée devant le sujet en charge de cet outil.

Durant l'expérimentation, le résidu à rechercher est affiché aux sujets pendant toute la durée de la tâche. Afin de ne pas perturber la scène virtuelle, le résidu est affiché sur un écran LCD 17 pouces placé sur la table devant les sujets.

Pour terminer, cette expérimentation doit nous permettre également d'identifier les contraintes en communication d'une tâche collaborative. C'est pourquoi nous enregistrons tous les échanges oraux entre les sujets à l'aide d'un microphone installé sur la table, face aux sujets. L'enregistrement est assuré par le logiciel Audacity®. Un filtrage du bruit de fond est effectué *a fortiori* afin de rendre les enregistrements plus audibles.

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

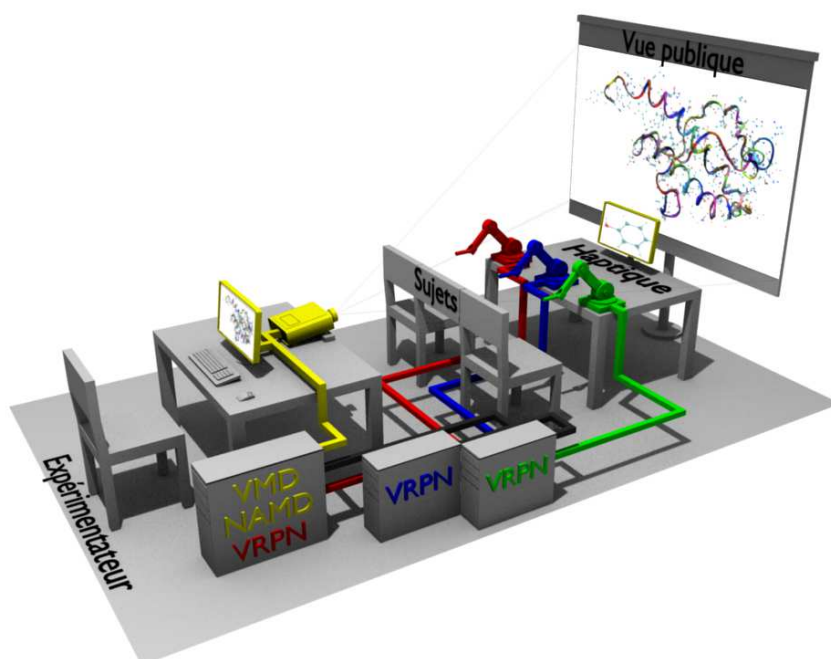


Figure 3.2 – Schéma du dispositif expérimental

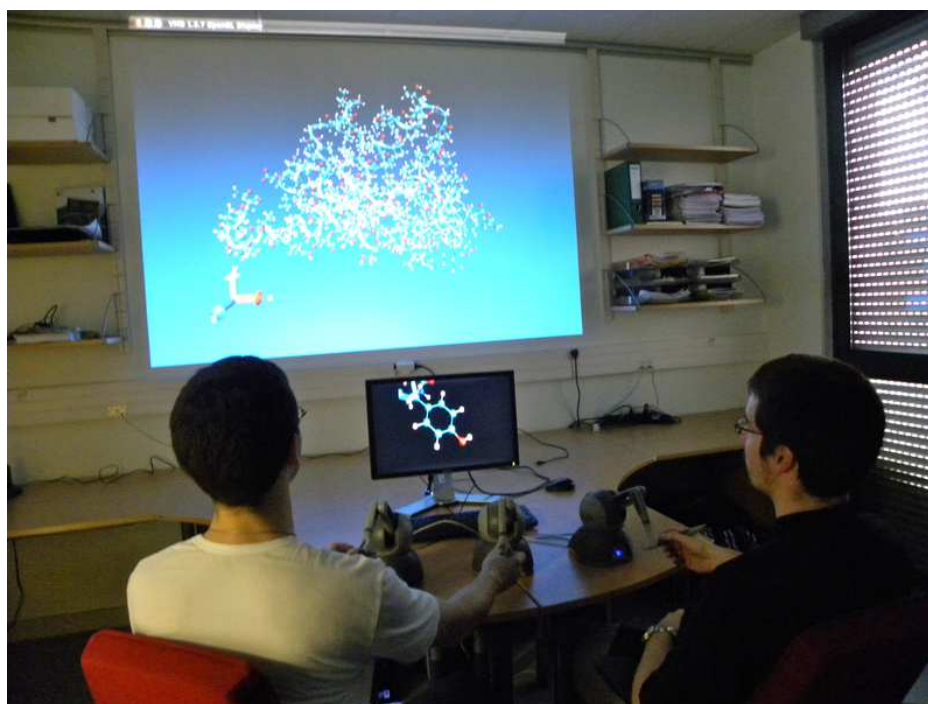


Figure 3.3 – Photographie du dispositif expérimental

Visualisation et représentation

La représentation des molécules utilisées dans cette expérimentation est la représentation classique décrite dans la section A.2.2 page 203. L'illustration des molécules TRP-CAGE et Prion telles qu'elles étaient représentées durant l'expérimentation sont affichées sur la figure 3.1 page 59.

Outils de manipulation

Durant cette tâche de recherche, nous donnons aux utilisateurs la possibilité de déformer la molécule à l'aide de l'outil *tug*. Cependant, afin de fournir un moyen d'explorer la molécule sous tous les angles, nous proposons également un outil d'orientation de la molécule. Sans un tel outil, l'accès à tout résidu qui se trouverait derrière la molécule nécessiterait une longue et fastidieuse déformation.

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

3.4 Résultats

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

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

Table 3.3 – Synthèse de la méthode expérimentale

Tâche	Recherche et sélection de motifs	
Hypothèses	\mathcal{H}_1	Amélioration des performances en binôme
	\mathcal{H}_2	Stratégies variables en fonction des binômes
	\mathcal{H}_3	Les sujets préfèrent le travail en binôme
	\mathcal{H}_4	La plateforme est appréciée des utilisateurs
Variables indépendantes	\mathcal{V}_{i1}	Nombre de sujets
	\mathcal{V}_{i2}	Résidu à chercher
Variables dépendantes	\mathcal{V}_{d1}	Temps de réalisation
	\mathcal{V}_{d2}	Distance entre les espaces de travail
	\mathcal{V}_{d3}	Communication verbales
	\mathcal{V}_{d4}	Affinités entre les sujets
	\mathcal{V}_{d5}	Force moyenne appliquée par le sujet
	\mathcal{V}_{d6}	Réponses qualitatives
Conditions \mathcal{C}_1–\mathcal{C}_4		Conditions \mathcal{C}_5–\mathcal{C}_8
Sujet \mathcal{A} 10 résidus		Sujet \mathcal{A} 10 résidus
Sujet \mathcal{B} 10 résidus		Binôme \mathcal{AB} 10 résidus
Binôme \mathcal{AB} 10 résidus		Sujet \mathcal{B} 10 résidus

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

3.4.1 Amélioration des performances en binôme

Données et statistiques

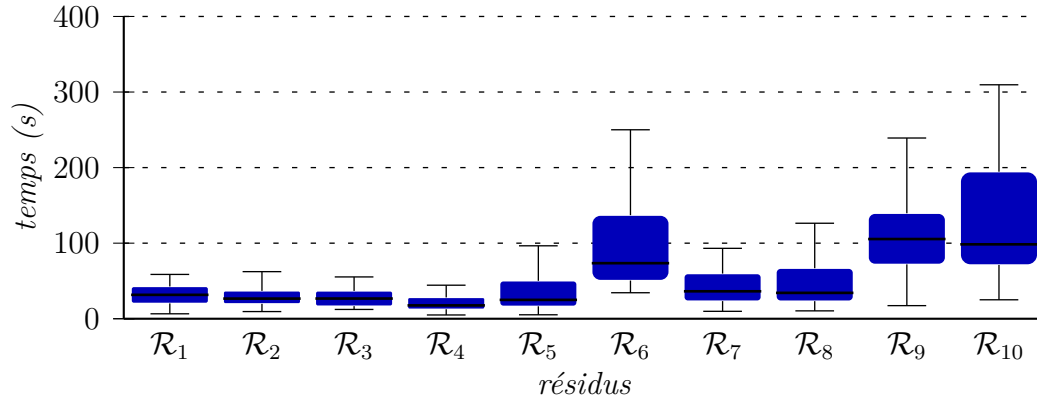


Figure 3.4 – Temps de réalisation par résidu

La figure 3.4 présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} pour l'identification et l'extraction de chaque résidu \mathcal{V}_{i2} . L'analyse montre qu'il y a un effet significatif des résidus \mathcal{V}_{i2} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 163.1$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus \mathcal{R}_6 , \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10} obtiennent des temps de réalisation significativement plus longs de 263.4 % que les autres résidus.

La figure 3.5 page suivante présente les temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} de chaque résidu \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de participants \mathcal{V}_{i1} . L'analyse ne montre pas d'effet significatif du nombre de participants \mathcal{V}_{i1} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 3$, $df = 1$, $p = 0.082$). Cependant, en se limitant au groupe des trois résidus \mathcal{R}_6 , \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10} identifiés précédemment comme significativement plus longs à trouver et extraire, l'analyse montre un effet significatif du nombre de participants \mathcal{V}_{i1} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 7.7$, $df = 1$, $p = 0.006$) avec une diminution de -24.3 %.

La figure 3.6 page suivante présente les temps de recherche et de sélection par résidu \mathcal{V}_{i2} . L'analyse montre un effet significatif des résidus \mathcal{V}_{i2} sur les temps de recherche ($\chi^2 = 97.6$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer



Figure 3.5 – Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu



Figure 3.6 – Temps de recherche et de sélection comparés par résidu

que les résidus \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10} obtiennent des temps de recherche significativement plus longs de 825.8 % que les autres résidus. L'analyse montre également un effet significatif des résidus \mathcal{V}_{i2} sur les temps de sélection ($\chi^2 = 72.8$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que le résidu \mathcal{R}_6 obtient un temps de sélection significativement plus long de 430.2 % que les autres résidus.

Analyse et discussion

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

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

Le travail en binôme comparé au travail en monôme ne montre pas d'amélioration significative bien que la p -value soit très proche du seuil de significativité. Cependant, un test post-hoc a permis de d'identifier les résidus \mathcal{R}_6 , \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10} comme ayant un temps de réalisation significativement plus

long. Sur ce groupe de résidus plus complexes, les binômes obtiennent une amélioration significative des performances par rapport aux monômes. Ce résultat confirme notre hypothèse \mathcal{H}_1 exclusivement sur des tâches de fortes complexité.

Comme développé dans la procédure expérimentale, le temps de réalisation de la tâche peut être séparé en deux parties : le temps de recherche et le temps de sélection (voir figure B.1 page 210). Les résidus \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10} se distinguent par un temps de recherche significativement plus long que les autres résidus (excepté \mathcal{R}_6). En effet, ces deux résidus sont en présence d'autres résidus similaires au sein de la même molécule (voir table 3.2 page 60). Ces similarités ont pour effet de monopoliser l'attention des sujets ce qui provoque une hausse significative du temps de recherche du résidu au sein de la molécule.

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

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

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

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

Temps de sélection prédominant Les sujets ont un temps important alloué à la sélection et à l'extraction du résidu recherché. Le résidu est rapidement identifié mais il est difficile d'y accéder directement. Une phase de déformation est nécessaire pour le sélectionner. Le résidu \mathcal{R}_6 est concerné. Dans cette configuration, le travail collaboratif améliore

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

3.4.2 Stratégies de travail

Données et analyses

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

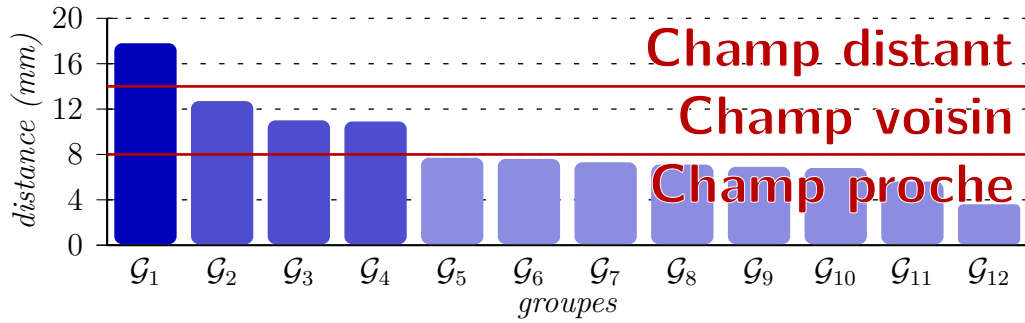


Figure 3.7 – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus \mathcal{R}_6 , \mathcal{R}_9 et \mathcal{R}_{10}

La figure 3.7 présente la distance moyenne entre les espaces de travail \mathcal{V}_{d2} de chaque binôme. Les binômes peuvent être classés en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.

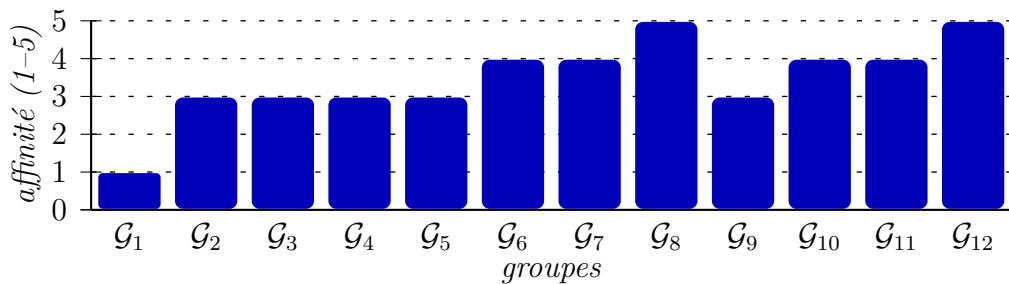


Figure 3.8 – Affinité entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.8 présente les affinités \mathcal{V}_{d4} de chaque binôme. Les notes, comprises entre un et cinq, montre que les binômes choisis ont des affinités relativement

variées. L'affinité entre les sujets du groupe \mathcal{G}_1 est très basse contrairement aux groupes \mathcal{G}_8 et \mathcal{G}_{12} pour lesquelles l'affinité est très élevée.

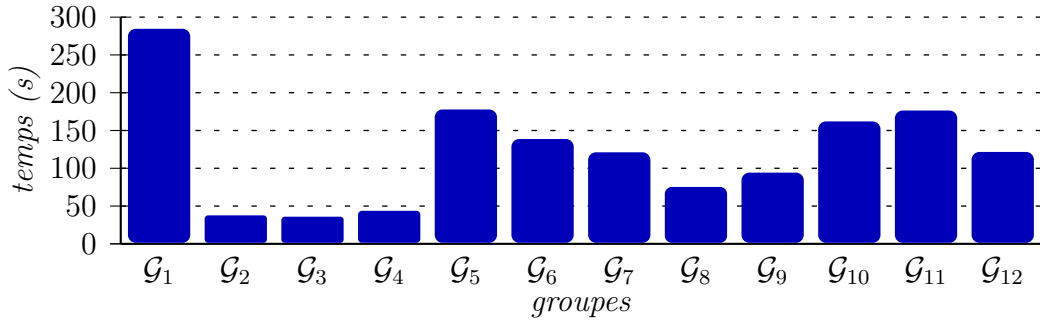


Figure 3.9 – Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.9 présente les temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} de chaque binôme. Le temps de réalisation de \mathcal{G}_1 est particulièrement important (plus d'une fois et demi les autres groupes les plus longs). À l'opposé, on note que \mathcal{G}_2 , \mathcal{G}_3 et \mathcal{G}_4 obtiennent des temps de réalisation extrêmement bas.

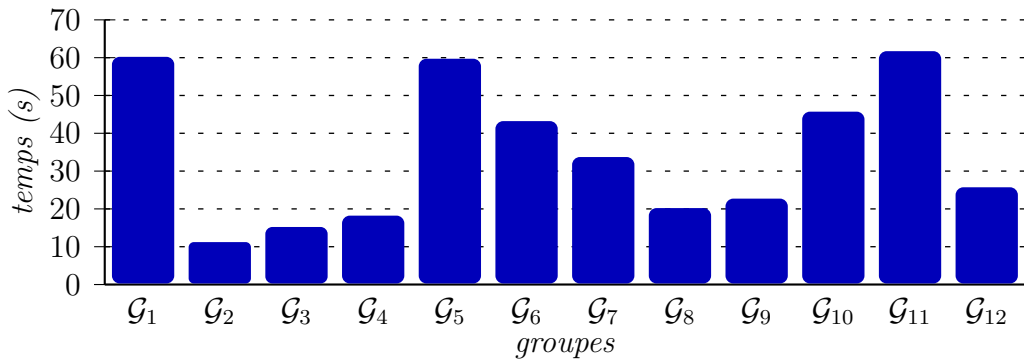


Figure 3.10 – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.10 présente les temps de communication verbale \mathcal{V}_{d3} de chaque binôme. \mathcal{G}_2 , \mathcal{G}_3 et \mathcal{G}_4 ont des temps de communication verbale inférieurs à 20 s. À l'opposé, \mathcal{G}_1 , \mathcal{G}_5 et \mathcal{G}_{11} ont des temps de communication verbale qui approche les 60 s.

La figure 3.11 page suivante présente les pourcentages de temps de communication verbale durant la phase de recherche et durant la phase de sélection de chaque binôme par rapport au temps total de réalisation de la tâche. Le pourcentage représente le rapport du temps de communication verbale durant la phase recherche ou de sélection rapporté respectivement au temps

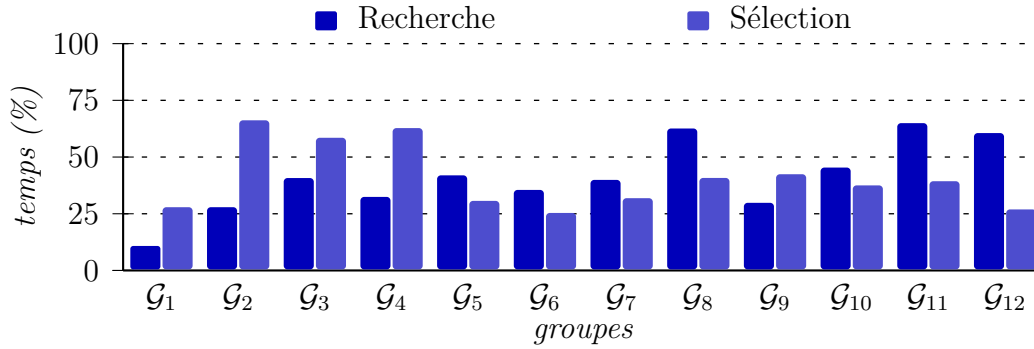


Figure 3.11 – Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection entre les sujets pour chaque binôme

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

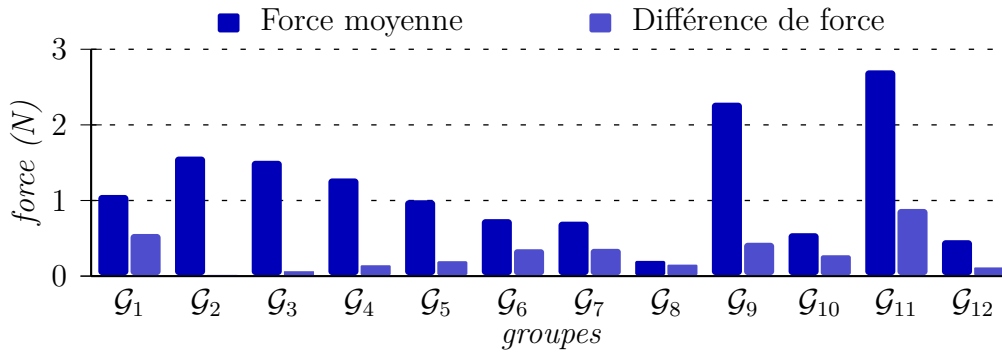


Figure 3.12 – Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.12 représente la force moyenne appliquée par les sujets \mathcal{V}_{d5} et la différence de force entre les sujets. La différence de force est la différence entre les forces moyennes de chaque sujet. \mathcal{G}_9 et \mathcal{G}_{11} apporte un effort moyen très important par rapport aux autres binômes. \mathcal{G}_2 , \mathcal{G}_3 et \mathcal{G}_4 apporte un effort moyen important également tout en ayant une différence de force quasiment nulle entre les deux membres du binôme.

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

entre les espaces de travail, affinités, temps de réalisation de la tâche, communication verbale, forces moyennes appliquées). Trois stratégies sont décrites, distinguées en fonction des distances entre les espaces de travail.

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

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

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

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

Collaboration en champ proche

Caractéristiques La collaboration en champ proche, inférieures à 8 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des distances inférieures à 10 Å ce qui est environ l'envergure d'un résidu⁴. 8 binômes sur 12 sont concernés par cette catégorie (binômes $\mathcal{G}_5, \mathcal{G}_6, \mathcal{G}_7, \mathcal{G}_8, \mathcal{G}_9, \mathcal{G}_{10}, \mathcal{G}_{11}$ et \mathcal{G}_{12}). Étant donné la distance inférieure à 10 Å, les binômes concernés manipulent en collaboration étroite sur les mêmes résidus. Ces binômes se caractérisent par une forte affinité ($\mu = 4$) : ce sont des collègues ou des amis (voir figure 3.8 page 69). D'après la figure 3.9 page 70, ces binômes obtiennent des temps de réalisation de la tâche moyens.

Partage de la tâche La figure 3.12 page précédente montre de fortes disparités entre les binômes concernant la force moyenne appliquée pendant la manipulation. Des observations pendant l'expérimentation ont permis d'identifier deux stratégies adoptées par les sujets : « par contrôle » où les deux sujets effectuent la même action pour obtenir un meilleur contrôle sur les structures manipulées ; « par guidage » où un des deux sujets indique à son partenaire la déformation à effectuer ou la position à atteindre. Le partage des tâches est donc très différent selon les initiatives de chacun des sujets. Cependant, les binômes se distribuent mal la charge de travail comme le montre les différences importantes entre les forces appliquées par les deux sujets (voir figure 3.12 page précédente). En effet, seul un des deux sujets réalise une grande partie de la tâche à réaliser. Le second sujet joue plutôt le rôle du suiveur.

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

Communication Les temps de communication verbale sur la figure 3.11 page 71 montrent une disparité entre les sujets. Les binômes de ce groupe passent plus de temps à communiquer pendant la phase de recherche que pendant la phase de sélection (excepté pour \mathcal{G}_9) ce qui met en évidence les difficultés du travail en champ proche liées aux nombreux conflits de coordination pendant la phase de recherche. En effet, les binômes doivent coordonner leurs mouvements de manipulation pour déplacer un résidu et cette coordination nécessite une communication verbale importante. La collaboration est alors étroitement couplée mais il en résulte une perte de temps à cause du temps alloué à la communication. D'ailleurs, l'analyse des communications verbales a permis de mettre en évidence de nombreuses incompréhensions dans l'inter-référencement (« Pas dans cette direction », « Pas ici mais ici », « C'est juste derrière », *etc.*). En effet, la grande complexité des tâches ainsi qu'une conscience incomplète de l'environnement et de l'état de son partenaire provoque des inter-référencements imprécis entraînant une mauvaise coordination. Ces conflits de coordination et ces incompréhensions diminuent les performances globales du binôme.

Collaboration en champ voisin

Caractéristiques La collaboration en champ voisin, comprises entre 8 mm et 14 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des distances de l'ordre de résidus voisins (entre 10 Å et 20 Å). 3 binômes sur 12 se trouvent dans cette catégorie (binômes \mathcal{G}_2 , \mathcal{G}_3 et \mathcal{G}_4). Ces binômes travaillent en collaboration relativement étroite sur des résidus voisins. La figure 3.13 page suivante montre la dépendance physique ou structurelle entre les résidus voisins. En effet, les résidus interagissent entre eux à travers diverses forces physiques : plus les distances sont courtes, plus les contraintes physiques sont fortes. La figure 3.8 page 69 montre que les binômes concernés ont des affinités moyennes ($\mu = 3$) : ce sont des collègues de bureau ou d'équipe ne travaillant pas forcément sur les mêmes projets. Ces binômes obtiennent de très bonnes performances sur les temps de réalisation de la tâche figure 3.9 page 70.

Partage de la tâche La figure 3.12 page 71 illustre une bonne répartition des efforts entre les deux membres du binôme. En effet, la force moyenne est assez élevée par rapport à la plupart des autres binômes ce qui montre qu'aucun des deux sujets n'est moins actif (ce qui entraînerait une force moyenne moins élevée). La différence des forces moyennes quasi-nulle entre les deux sujets confirme ce résultat. Ceci s'explique par une bonne coordination entre les sujets pendant laquelle les deux membres du binôme vont effectuer des



Figure 3.13 – Couplage physique et structure entre les résidus

actions complémentaires mais de même intensité. La stratégie adoptée peut être définie comme une stratégie *par manipulation complémentaire* : les deux sujets sont attentifs aux actions de leur partenaire afin d’avoir un meilleur contrôle du processus de déformation par une coordination améliorée.

Communication La communication verbale est faible comme le montre la figure 3.10 page 70. La manipulation en champ voisin permet d’être continuellement conscient des actions du partenaire (grâce à la vision périphérique) ce qui limite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des résidus différents restreignant ainsi les conflits de coordination par rapport à la collaboration en champ proche. De plus, la figure 3.11 page 71 montre un nombre de conflits de coordination plus faible pendant la phase de recherche. En effet, la communication verbale est nettement moins importante pendant la phase de recherche que pendant la phase de sélection. L’analyse des communication verbales met en évidence des phases de communication de coordination (« Maintenant, prends ça », « peux-tu m’aider ici ? », « Bien ! », *etc.*). Les performances des binômes travaillant en champ voisin sont relativement élevées bien que quelques conflits de coordination similaires à ceux rencontrés dans une collaboration en champ proche soient présents. Cependant, le nombre de conflits de coordination est plus limité.

Collaboration en champ distant

Caractéristiques La collaboration en champ voisin, supérieures à 14 mm, correspond, dans l’environnement virtuel, à des résidus sans interaction physique (supérieur à 20 Å). 1 binôme sur 12 est concerné par cette catégorie (binôme \mathcal{G}_1). Ce binôme travaille de façon faiblement couplée. En effet, les

membres de ce binôme travaillent de façon complètement indépendante, en limitant au maximum le nombre d'interactions. Les affinités des membres de ce binôme sont très faibles (voir figure 3.8 page 69) : les membres ne se connaissent presque pas. Le binôme obtient de très mauvaises performances en ce qui concerne le temps de réalisation de la tâche comme le montre la figure 3.9 page 70.

Partage de la tâche La figure 3.12 page 71 montre un effort moyen appliqué par les binômes peu élevé (comparé aux stratégies de collaboration en champ voisin). De plus, les forces moyennes appliquées par chacun des deux sujets sont très inégales. Il y a une mauvaise répartition de la charge de travail au sein du binôme.

Communication La figure 3.10 page 70 montre que le temps de communication verbale est assez important. Cependant, le temps de réalisation étant nettement plus important, le taux de communication verbale est beaucoup plus faible que les autres groupes (voir figure 3.11 page 71). En effet, les membres du binôme travaillent à distance et ont peu d'interactions entre eux. Le peu d'interaction permet de limiter le nombre de conflits de coordination ce qui implique le peu de communication verbale comme on peut le voir sur la figure 3.11 page 71. Cette figure montre également que ce binôme communique plus dans les phases de sélection que dans les phases de recherche. En effet, les phases de sélection forcent une collaboration étroite (spécificité de la tâche proposée) et favorisent les conflits de coordination. Cependant, les phases de recherche permettent aux sujets de manipuler de manière distante. Ainsi, ils se définissent leur propre espace de travail mais également leur propre stratégie en fonction des événements locaux à leur espace de travail. Pourtant, la phase de sélection nécessite une collaboration étroite et si les stratégies sont différentes, il en résulte de mauvaises performances dû au temps important pour se coordonner à nouveau.

Synthèse des stratégies de travail

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

Cependant, ce sont les interactions en champ voisins qui produisent les meilleures performances. En effet, les conflits de coordination sont plus limités que pour des interactions en champ proche mais la collaboration est tout de même couplée. Les résultats montrent à la fois de bonnes performances en terme de temps de réalisation mais aussi en terme de répartition des charges de travail tout en limitant les communication verbales. La plupart du temps, les communications verbales sont destinées à la résolution de conflits de coordination : elles sont très chronophages et peuvent être évitées. C'est pour cette raison que nous proposerons des outils haptiques pour améliorer cette gestion des conflits de coordination (voir chapitre 6 page 135).

3.4.3 Résultats qualitatifs

Les résultats qualitatifs sont constitués de deux parties. La première permet de déterminer les impressions des sujets concernant la collaboration, les rôles et efficacité de chacun pendant la tâche. La seconde partie a pour but d'évaluer la plateforme⁵.

Évaluation du travail en collaboration

Les résultats du questionnaire montre qu'une majorité des sujets de cette expérimentation ont apprécié et préféré la réalisation de la tâche en configuration collaborative ($\mu = 3.6$, $\sigma = 0.5$). De plus, le sentiment d'effectuer une tâche en collaboration est fort. L'hypothèse \mathcal{H}_3 est confirmée par les sujets qui préfèrent le travail en collaboration que le travail en monôme.

Durant les tâches collaboratives, les sujets considèrent qu'ils ont effectivement contribué à la réalisation de la tâche ($\mu = 3.1$, $\sigma = 0.9$). Cependant, les sujets considèrent qu'ils ne se sont imposés ni en meneur ou ni en suiveur ($\mu = 2$, $\sigma = 0.5$). En effet, des questions supplémentaires ont permis de mettre en évidence que chaque sujet a tendance à surestimer le rôle du partenaire ($\approx 70\%$).

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

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

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

Évaluation du système

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

Là encore, les résultats permettent de valider l'hypothèse \mathcal{H}_4 . La plateforme est relativement bien évaluée. Il semble cependant nécessaire d'apporter encore des améliorations afin de répondre au mieux aux attentes des utilisateurs.

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

3.5 Conclusion

3.5.1 Résumé des résultats

Dans ce chapitre, nous avons observé et comparé les performances de monômes et de binômes pendant une tâche d'exploration et de sélection sur une simulation moléculaire en temps-réel. L'objectif était de montrer l'intérêt de

la distribution des charges de travail pour l'amélioration des performances puis d'identifier les différentes stratégies de travail. De plus, il fallait valider la pertinence de la plateforme mise en place.

Les approches collaboratives ont prouvé leur intérêt, notamment sur les tâches les plus complexes. Cependant, la complexité d'une tâche est relativement difficile à établir. Au-delà des facteurs de position, de couleur ou de forme, le nombre d'atomes de la molécule (et donc le nombre de résidus) semble jouer un rôle important dans cette complexité. Un grand nombre d'atomes surcharge l'environnement virtuel qui est difficile à appréhender. Un deuxième facteur de complexité constaté durant l'expérimentation, est l'amplitude des contraintes physiques de la molécule. Certaines parties de la molécule sont dans un état de stabilité suffisamment dense pour qu'il soit difficile d'en déformer les résidus.

En observant et en analysant les différentes stratégies de travail, il ressort que les interactions en champ proche et les interactions en champ distant ne sont pas des stratégies très efficaces. En effet, le nombre de conflits de coordination durant les interactions en champ proche est trop important alors que le potentiel de la collaboration est perdu dans les interactions en champ distant. Ce sont les interactions en champ voisin qui offrent les meilleures performances, générant un bon compromis en termes de communication et de gestion des conflits de coordination.

Enfin, les relations sociales entre les différents membres du groupe tiennent une place importante. Les résultats montrent que tout déséquilibre dans le groupe mène à des performances dégradées ce qui rejoint les conclusions de WOOLLEY *et al.* [2010].

3.5.2 Synthèse et perspectives

Basés sur les résultats précédents, certaines perspectives assez évidentes s'imposent et ont guidé les expérimentations qui suivent. Tout d'abord, pour observer en détail le travail collaboratif et ses avantages, il semble nécessaire de proposer des tâches suffisamment complexes ; soit des tâches à fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 81) ; soit la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 111).

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

L'évaluation qualitative par questionnaire apporte également de nombreuses réponses intéressantes. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant la commu-

nication visuelle dans l'EVC au détriment de la communication gestuelle. Des observations durant les phases expérimentales nous ont permis de constater que ce moyen de communication est principalement utilisé pour effectuer des désignations. Proposer des outils adaptés aux contraintes de la désignation en environnement complexe semble être une réponse pertinente.

Enfin, ces évaluations qualitatives ont permis de confirmer une utilisabilité acceptable de l'EVC Shaddock. Des améliorations sont cependant nécessaires en ce qui concerne le rendu visuel et les interactions. De nombreux sujets ont par exemple demandé une mise en surbrillance du résidu survolé avec le curseur. Une assistance haptique pour la sélection (en percevant les cibles de manière haptique) est également une des améliorations possibles.

Déformation collaborative de molécule

Sommaire

4.1	Introduction	82
4.2	Déformation collaborative en environnement virtuel	82
4.2.1	Travaux existants	82
4.2.2	Objectifs	83
4.3	Présentation de l'expérimentation	84
4.3.1	Description de la tâche	84
4.3.2	Spécificités du protocole expérimental	87
4.4	Résultats	91
4.4.1	Amélioration des performances en binôme	93
4.4.2	Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche	98
4.4.3	Amélioration de l'apprentissage pour les binômes	102
4.4.4	Résultats qualitatifs	107
4.5	Conclusion	108
4.5.1	Résumé des résultats	108
4.5.2	Synthèse et perspectives	109

4.1 Introduction

La précédente expérimentation nous a permis d'étudier les premières PCVs que sont l'exploration et la sélection. Afin de compléter notre étude, nous souhaitons à présent nous intéresser au processus de déformation. En effet, la déformation est une tâche permettant de stimuler les actions coordonnées pour une collaboration étroitement couplée. Actuellement, des environnements virtuels existent pour manipuler des molécules rigides pour effectuer un *docking* moléculaire comme les travaux de LEVINE *et al.* [1997] ou encore de FÉREY *et al.* [2008]. Cependant, afin d'effectuer un *docking* moléculaire avancé, il est nécessaire de pouvoir déformer la molécule. Ceci est rendu possible par l'avènement des simulations moléculaires interactives en temps-réel, notamment avec IMD développé par STADLER *et al.* [1997] ou encore ROSSI *et al.* [2007]. Plus récemment, DELALANDE *et al.* [2009] ont également amené une pierre à l'édifice avec MDDriver pour permettre une simulation moléculaire en temps-réel basée sur différents moteurs de simulation (NAMD ou Gromacs). Puis, DELALANDE *et al.* [2010] améliorent la manipulation et la déformation interactive par l'utilisation d'une interface haptique.

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

4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel

4.2.1 Travaux existants

L'utilisation de retours haptiques pour la déformation d'objets flexibles n'est pas une idée nouvelle. Par exemple, W. SHEN *et al.* [2006] proposent une solution pour déformer des objets non-rigides à l'aide de retour haptique. Les objets concernés sont de faible complexité, comme des sphères par exemple. Puis, les travaux de thèse PETERLÍK [2009] abordent les déformations de tissus cellulaires. Là encore, les tâches proposées sont de faible complexité et n'ont pas d'application concrète.

Cependant, afin d'effectuer des déformations complexes, certains chercheurs se sont intéressés aux processus de déformation collaboratifs dans les EVCS. SÜMENGEN *et al.* [2007] proposent une plateforme permettant la déformation de maillages destinés à des simulations d'objets déformables (tissus, organes, *etc.*) dans un EVC ; la simulation de l'objet déformable est partitionnée en fonction des zones de travail des différents utilisateurs. De son côté, TANG *et al.* [2010] proposent une plateforme client/serveur de déformation collaborative de maillages. La présentation de ces deux plateformes de collaboration distante se focalisent principalement sur les contraintes techniques sans aborder les contraintes de la collaboration. J. MÜLLER *et al.* [2006] développent le logiciel Clayworks, complété plus tard par GORLATCH *et al.* [2009], permettant la sculpture virtuelle sur glaise. Dans cette étude, les problématiques d'accès exclusif à certains objets ou à certaines parties d'un objet sont brièvement évoquées afin de faciliter la coordination des différents acteurs.

Tous les travaux présentés ci-dessus proposent une déformation collaborative distante où chaque utilisateur effectue une déformation dans une région restreinte où lui seul peut agir. De cette manière, les contraintes liées à la collaboration entre les acteurs sont en grande partie évitées. Pour cette raison, ce sont principalement les contraintes techniques de la collaboration qui sont abordées mais ni les conflits entre utilisateurs, ni les aspects de communication ne sont évoqués.

4.2.2 Objectifs

Ce chapitre nous permettra d'aborder les problématiques de déformation collaborative. La déformation d'une molécule nécessite de positionner certains éléments de manière précise. La déformation est une tâche nécessitant plus de précision que la recherche car les cibles doivent être déplacées à un endroit défini. Nous souhaitons comparer les performances sur une tâche nécessitant de la coordination pour les étapes de déformation.

L'étude met en jeu un nombre de ressources fixe pour la tâche de déformation pour comparer une distribution des ressources (configuration monomanuelle en binôme) à une mutualisation des ressources (configuration bimanuelle en monôme). En effet, la première étude nous a permis de mettre en avant les contraintes d'une configuration collaborative en terme de temps de communication. Paradoxalement, les utilisateurs qui manipulent seuls sont confrontés à une charge de travail importante. En fournissant un nombre de ressources fixe (deux outils de déformation), nous souhaitons comparer la capacité de coordination d'un binôme, aux capacités de traitement d'un monôme face à

une importante charge de travail. Dans notre hypothèse, nous pensons que les binômes en configuration monomanuelle sont plus performants que les monômes en configuration bimanuelle.

Dans un second temps, nous souhaitons définir un lien entre la complexité de la tâche et le nombre de sujets impliqués. En effet, les tâches complexes fournissent une charge de travail très importante ; plus cette charge de travail est importante et plus les monômes devraient éprouver des difficultés à traiter l'ensemble de cette charge. Nous émettons l'hypothèse que les tâches les plus complexes, représentant la plus grande charge de travail, obtiendront de meilleures performances avec la configuration collaborative.

Enfin, cette seconde étude va nous permettre d'observer l'effet du travail collaboratif sur l'apprentissage. Nous comparons les performances des monômes et des binômes concernant la réalisation d'une même tâche répétée plusieurs fois. Nous supposons que la facilitation sociale (voir section 1.3.2 page 20) et la communication qui a lieu lors d'un travail collaboratif va permettre aux binômes d'appréhender plus rapidement la plateforme, les outils ou encore la tâche.

4.3 Présentation de l'expérimentation

4.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules complexes dans un EVC. L'objectif est de modifier la conformation initiale d'une molécule pour atteindre une conformation stable, une tâche relativement proche du *docking* moléculaire.

Trois molécules sont utilisées dans le cadre de cette expérimentation. Prion est une molécule très complexe et sera simplement utilisé dans la phase d'entraînement. TRP-ZIPPER et TRP-CAGE seront chacune utilisée dans deux scénarios distincts. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 203.

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, un score est affiché en temps-réel en haut de l'écran (voir figure 4.1 page suivante). Le score affiché est le RMSD (voir équation 4.1) qui mesure l'écart géométrique entre deux conformations d'une même molécule.

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

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

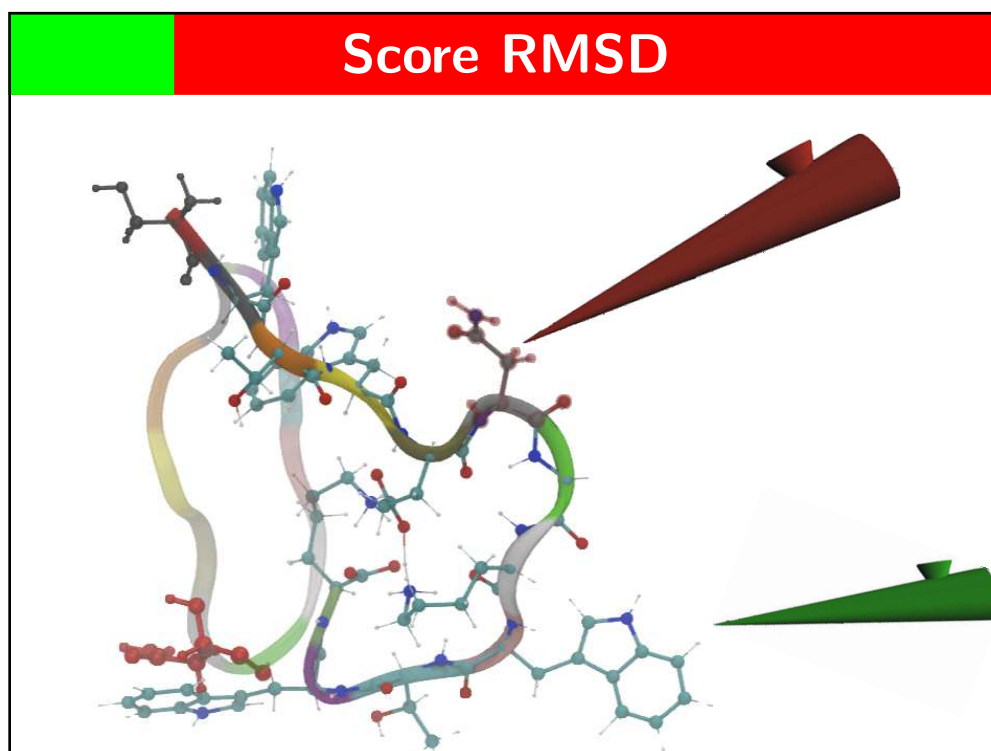


Figure 4.1 – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

Les scénarios se distinguent par différents critères de complexité :

Niveau de déformation Deux niveaux de déformation sont proposés : inter-moléculaire et intra-moléculaire (voir section 1.2.2 page 6) ;

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

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

Cassure Elles représentent les jointures entre les structures secondaires, formant des courbures prononcées difficiles à maintenir en place ;

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

Basé sur ces définitions, quatre scénarios sont proposés dont les critères de complexité sont résumés dans la table 4.1 page 87 :

Scénario 1A Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle inter-moléculaire. Un résidu à l'extrémité de la chaîne carbonée¹ est fixé afin d'*ancrer* la molécule dans la scène virtuelle et éviter que la molécule sorte du champ de vision. Les onze autres résidus de cette molécule sont libres de mouvement ce qui en fait une molécule assez flexible avec un champ de force à contrainte moyenne. La forme général de la molécule peut être comparée à un **V** : la chaîne de résidus de la molécule contient une cassure. La difficulté de ce scénario réside dans la nécessité de maintenir les résidus déjà placés pendant que le reste de la molécule est déformée.

Scénario 1B Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l'échelle inter-moléculaire. Comme le scénario 1A, elle contient un résidu fixe à une extrémité. Les dix-neuf autres résidus sont libres de mouvement ce qui en fait une molécule assez flexible avec un champ de force moyennement contraint. La forme général de la molécule peut être comparée à un **W** : la chaîne de résidus de la molécule contient deux cassures. Ce scénario est plus difficile que le scénario 1A car le nombre d'atomes à placer est plus élevé et qu'il est nécessaire de maintenir en place deux cassures.

Scénario 2A Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle intra-moléculaire. Seulement trois résidus sont laissés libres et les autres résidus sont fixés. Le champ de force au sein de la zone de déformation pour cette molécule est très faible et aucune cassure n'est à former. Cependant, la difficulté de ce scénario réside dans la précision de la déformation nécessaire. En effet, plutôt que de modifier la position des résidus, ce scénario nécessite la modification de l'orientation d'un résidu avec une précision accrue dans la sélection et la déformation des atomes.

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

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

Table 4.1 – Paramètres de complexité des tâches

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

4.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation, basée sur le dispositif expérimental présenté dans le chapitre A page 201, a subi quelques modifications qui seront détaillées dans les sections suivantes. Un résumé de la méthode expérimentale se trouve dans la table 4.2 page 92 qu'on pourra retrouver de manière détaillée dans la section B.2 page 211.

Matériel utilisé

Pour cette seconde expérimentation, une unique modification a été effectuée par rapport à la plateforme de base présentée dans la section A.1 page 202. L'outil *grab* qui était assuré par un PHANTOM Omni® et permettant d'orienter la molécule a été remplacé par une souris 3D SpaceNavigator®. Cette souris ne nécessite pas d'ordinateur supplémentaire et peut être connectée directement à la machine principale sur laquelle VMD est exécuté. Elle est placée sur la table entre les deux sujets et chaque sujet peut l'utiliser comme il le souhaite : nous créons ainsi artificiellement un point de conflit pour l'accès à cet outil. L'objectif est de stimuler les interactions.

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

Visualisation et représentation

Dans cette seconde expérimentation, quatre scénarios sont proposés et présentés dans la section 4.3.1 page 84. Les rendus graphiques de base sont utilisés pour afficher les molécules correspondantes (voir section A.2.2 page 203).

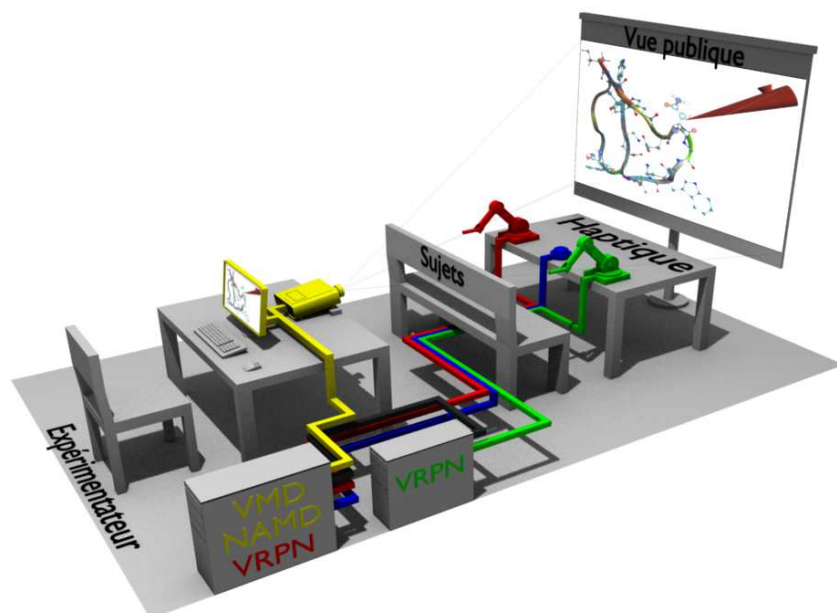


Figure 4.2 – Schéma du dispositif expérimental

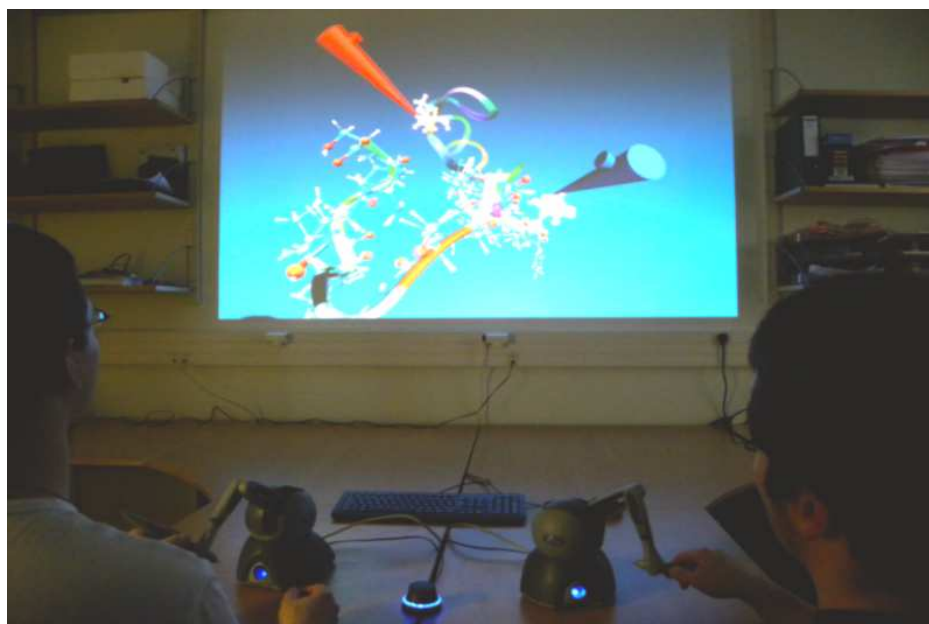


Figure 4.3 – Photographie du dispositif expérimental

Cependant, les sujets doivent également avoir accès aux informations concernant l'objectif : la molécule dans son état stable. Cette molécule est affichée avec un rendu *NewRibbon* transparent et les atomes ne sont pas affichés. Cet affichage très synthétique permet de ne pas surcharger la scène. La figure 4.4, la figure 4.5 page suivante, la figure 4.6 page suivante et la figure 4.7 page 91 représentent respectivement les scénarios 1A, 1B, 2A et 2B tels qu'ils sont affichés pour la réalisation de la tâche.

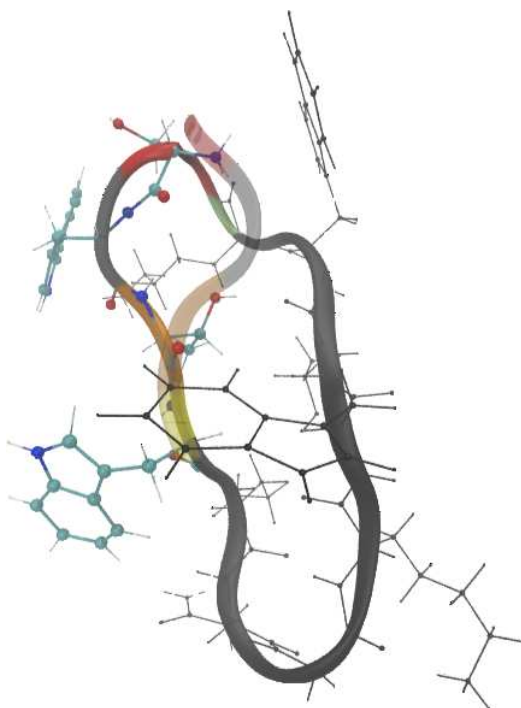


Figure 4.4 – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A

Pour finir, afin d'aider les sujets à trouver l'emplacement final du résidu sélectionné, un affichage du résidu correspondant est effectué sur la molécule stable. Ce résidu est représenté par un rendu CPK coloré de la couleur du curseur du sujet concerné comme on peut le voir sur la figure 4.8 page 93.

Outils de manipulation

Suite à la première expérimentation, nous avons remis en cause la présence de l'outil d'orientation de la molécule. En effet, bien que nécessaire dans certains cas, certains sujets n'ont pas réussi à s'approprier rapidement l'outil *grab*.

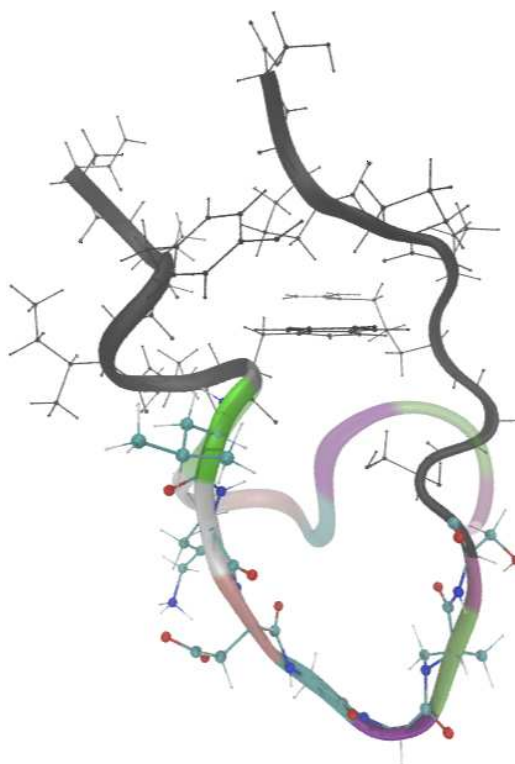


Figure 4.5 – Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B

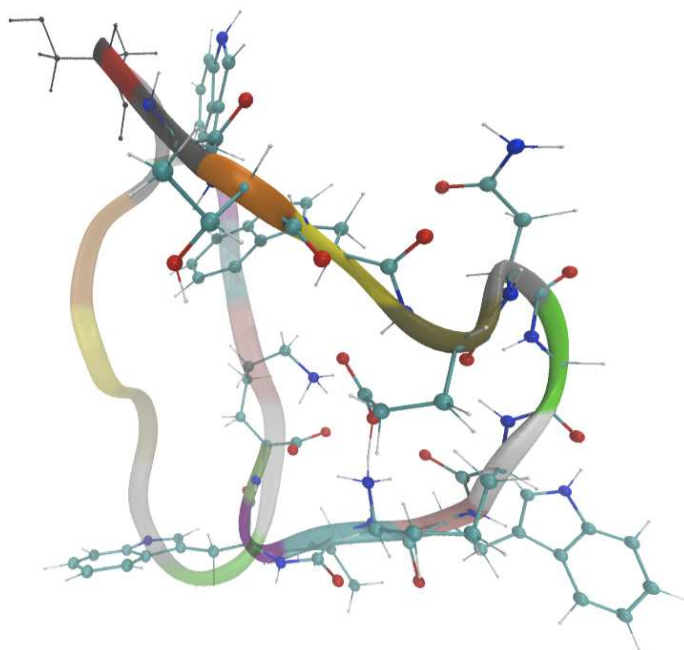


Figure 4.6 – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A

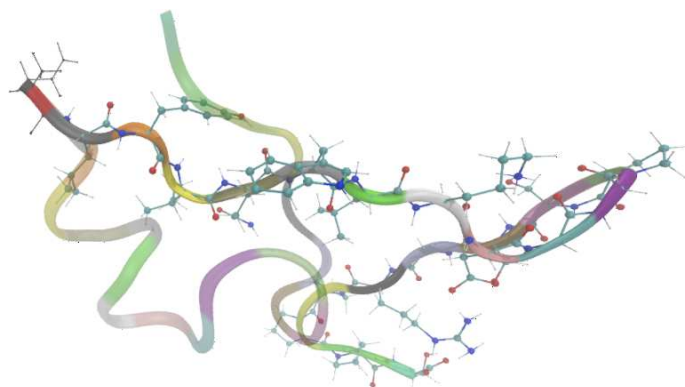


Figure 4.7 – Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B

Un bio-informaticien nous a suggéré l'utilisation d'une souris 3D, outil plus approprié pour l'orientation d'une molécule. En effet, les contraintes mécaniques de l'interface haptique provoquait une problématique d'interaction connue sous le nom de débrayage [DOMINJON 2006]. La souris 3D ne souffre pas d'une telle contrainte mécanique.

Cet outil permettant de différencier facilement les translations et les rotations, nous avons choisi de ne conserver que les DDLs en rotation. Cela évite que les sujets puisse sortir la molécule de l'écran tout en conservant la possibilité de l'observer sous tous les points de vue.

Les binômes étant dans une configuration monomanuelle, ils peuvent accéder à l'outil d'orientation de la molécule sans relâcher l'outil de déformation ; ce n'est pas le cas des monômes en configuration bimanuelle. Afin de compenser ce désavantage et de conserver une équité entre les monômes et les binômes, une déformation ne peut pas être effectuée lorsque l'outil d'orientation est utilisé ; toutes les sélections en cours sont désactivées.

4.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette seconde étude concernant la déformation de molécules complexes en configuration collaborative. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant, un test de BROWN et FORSYTHE [1974] permet de confirmer l'homoscedasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée avec différents tests statistiques suivant les cas :

- test de FRIEDMAN [1940] pour les variables intra-sujets non-paramétriques ;

Table 4.2 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation d'une molécule		
Hypothèses	\mathcal{H}_1 Amélioration des performances en binôme \mathcal{H}_2 binômes plus performants sur les tâches complexes \mathcal{H}_3 Apprentissage plus performant en binôme \mathcal{H}_4 Les sujets préfèrent le travail en collaboration		
Variables indépendantes	\mathcal{V}_{i1} Nombre de sujets \mathcal{V}_{i2} Complexité de la tâche \mathcal{V}_{i3} Niveau d'apprentissage		
Variables dépendantes	\mathcal{V}_{d1} Temps de réalisation \mathcal{V}_{d2} Nombre de sélections \mathcal{V}_{d3} Distance passive entre les espaces de travail \mathcal{V}_{d4} Distance active entre les espaces de travail \mathcal{V}_{d5} Vitesse moyenne \mathcal{V}_{d6} Réponses qualitatives		
Conditions $\mathcal{C}_1\text{--}\mathcal{C}_3$	Conditions $\mathcal{C}_4\text{--}\mathcal{C}_6$	Conditions $\mathcal{C}_7\text{--}\mathcal{C}_9$	Conditions $\mathcal{C}_{10}\text{--}\mathcal{C}_{12}$
1 sujet Bimanuel	1 sujet Bimanuel	2 sujets Monomanuel	2 sujets Monomanuel
Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B
Scénario 1B	Scénario 1A	Scénario 1B	Scénario 1A
Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B
Scénario 2B	Scénario 2A	Scénario 2B	Scénario 2A

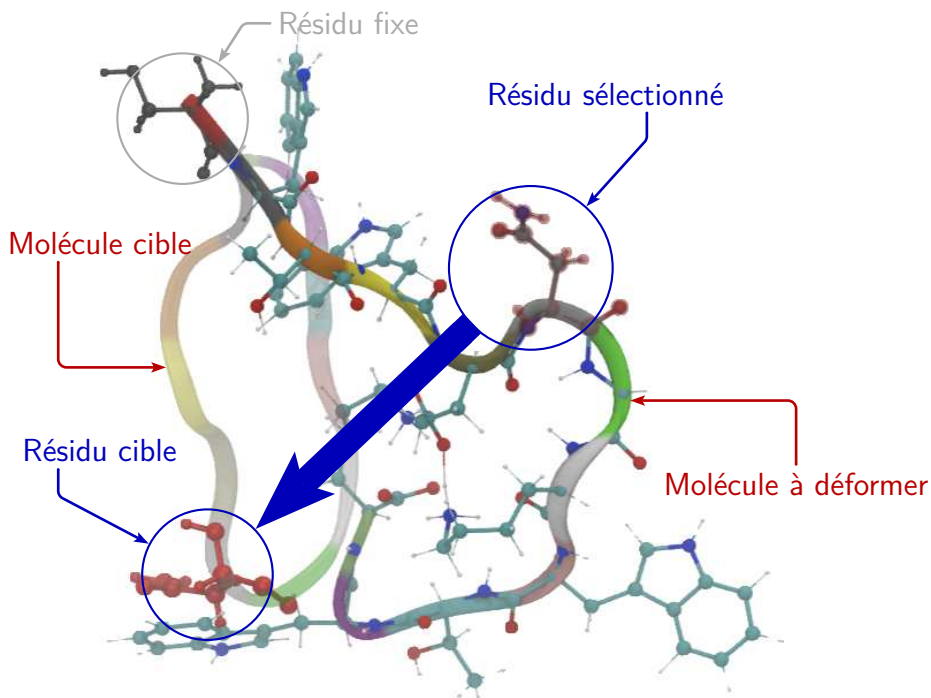


Figure 4.8 – Illustration des rendus pour l'affichage de la molécule

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

4.4.1 Amélioration des performances en binôme

Données et statistiques

La figure 4.9 page suivante présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 4.9$, $df = 1$, $p = 0.027$) avec une diminution de -11.7% .

La figure 4.10 page suivante présente la distance passive \mathcal{V}_{d3} et active \mathcal{V}_{d4} entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la distance passive \mathcal{V}_{d3} ($\chi^2 = 2.8$, $df = 1$, $p = 0.092$). Cependant, l'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la distance active \mathcal{V}_{d4} ($\chi^2 = 21.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 37% .

On peut également comparer les distances passive et active en fonction du

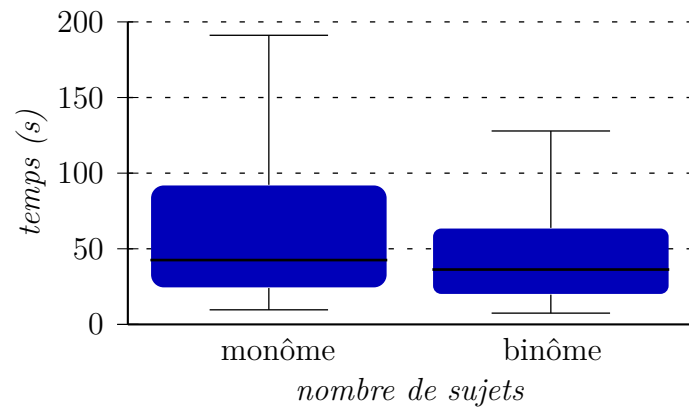


Figure 4.9 – Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets

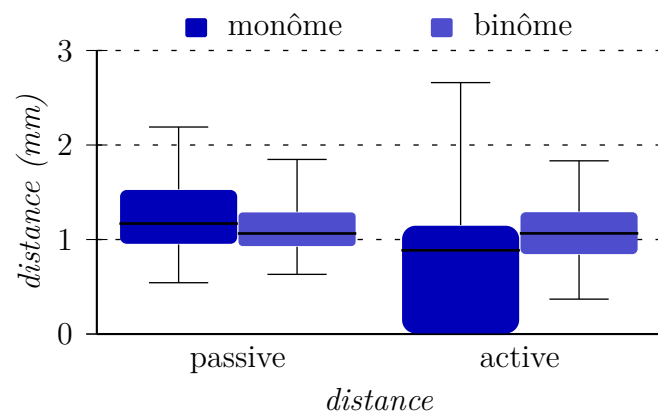


Figure 4.10 – Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets

nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il y a un effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un *monôme* ($\chi^2 = 42.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une différence de -36.6% . Par contre, l'analyse ne montre pas d'effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un *binôme* ($\chi^2 = 2.5$, $df = 1$, $p = 0.114$).

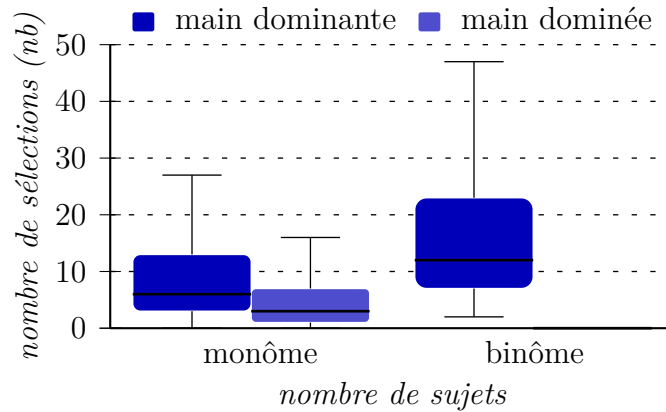


Figure 4.11 – Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonction du nombre de sujets

La figure 4.11 présente le nombre de sélections par main dominante/dominée \mathcal{V}_{d2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . Les *binômes* n'utilisant que leur main dominante, il n'y a pas de résultat pour la main dominée ; le résultat utilisé est donc la somme des sélections par main dominante des membres du *binôme*. On constate un déséquilibre du nombre de sélections entre la main dominante et la main dominée pour les *monômes*. En comparant la somme des mains dominée et dominante des *monômes* avec le nombre de sélections total des *binômes*, l'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre total de sélections \mathcal{V}_{d2} ($\chi^2 = 6.3$, $df = 1$, $p = 0.012$) avec une augmentation de 37.6% .

Le nombre de sélections pour la main dominante comptabilise les sélections des deux sujets du *binôme* contrairement aux *monômes* : ceci explique le nombre plus élevé de sélections en *binômes*. Cependant, si on compare le nombre moyen de sélections par sujet seulement pour la main dominante, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} ($\chi^2 = 0$, $df = 1$, $p = 0.912$).

La figure 4.12 page suivante présente la vitesse moyenne des effecteurs terminaux \mathcal{V}_{d5} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} ($\chi^2 = 122.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 56.6% . L'analyse montre un

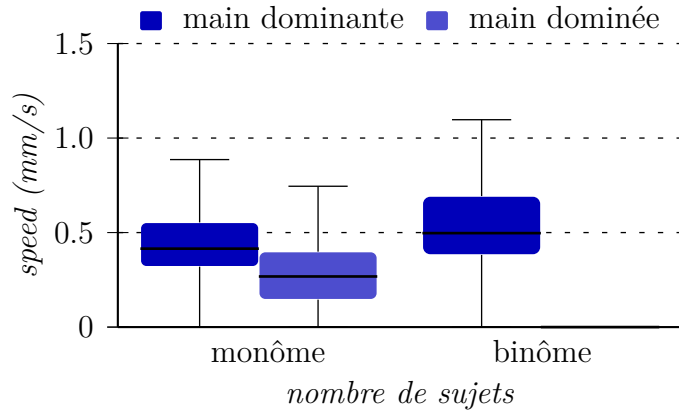


Figure 4.12 – Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets

déséquilibre de vitesse entre la main dominante et dominée des *monômes* avec un effet significatif ($\chi^2 = 51.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) pour une différence de -40.4% . L'analyse montre également un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} de la main dominante ($\chi^2 = 23$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 25% .

Analyse et discussion

Le premier résultat sur la figure 4.9 page 94 nous permet de confirmer notre hypothèse \mathcal{H}_1 : les *binômes* sont plus performants que les *monômes*. La suite de l'analyse va mettre en avant les paramètres qui amènent un gain de performances ainsi que les scénarios les plus adaptés à la configuration de travail collaborative.

Pour commencer, les distances moyennes entre les effecteurs terminaux nous permettent de constater un déséquilibre de performances entre les *monômes* et les *binômes* (voir figure 4.10 page 94). En effet, la distance passive entre les effecteurs terminaux est plus importante pour les *monômes* que pour les *binômes*. Cependant, la distance active montre un effet inverse. En effet, la manipulation bimanuelle (pour les *monômes*) constitue une charge de travail importante. Le sujet doit alors être capable de gérer deux effecteurs terminaux simultanément. Cette configuration a amené la plupart des sujets en *monôme* à utiliser un seul effecteur terminal en laissant le second sur le côté afin que le curseur ne gêne pas à l'écran. La main dominée n'est utilisée que dans les cas où le sujet estime que c'est absolument nécessaire pour achever la tâche. Le second outil de déformation étant placé sur le côté de l'écran,

la mesure de distance passive mesurée n'est pas représentative de l'espace de travail où le sujet est actif.

La distance active permet d'éviter ce biais de mesure. En effet, cette mesure ne prend en compte que les phases d'activité d'un effecteur terminal. On constate alors que les binômes couvrent un plus grand espace de travail (voir figure 4.10 page 94). Les monômes couvrent un espace de travail plus restreint car ils ne peuvent pas focaliser visuellement sur plusieurs zone de travail simultanément. Par conséquent, les deux effecteurs terminaux se trouvent toujours proche de la zone de manipulation, dans la zone de focus visuel du sujet.

La figure 4.11 page 95 confirme ce déséquilibre. En effet, on constate un nombre total de sélections plus grand pour les binômes (19.4 sélections) que pour les monômes (14.1 sélections). Là encore, le sujet effectuant la tâche en monôme n'exploite pas pleinement les deux outils en sa possession : la charge de travail est trop importante. En effet, la Théorie des Ressources Multiples (TRM), proposée par WICKENS [1984], considère que la gestion de plusieurs ressources pour la même modalité est impossible. Cependant, les analyses statistiques montre que l'outil utilisé par la main dominante obtient un taux d'utilisation identique entre les monômes et les binômes. Les binômes en configuration monomanuelle répartissent correctement la charge de travail entre les deux ressources disponibles ce qui n'est pas le cas des monômes.

Cependant, on constate tout de même que l'outil utilisé par la main dominante n'est pas tout à fait aussi performant chez les monômes que chez les binômes. En effet, l'analyse montre une différence significative sur la mesure de la vitesse. La configuration bimanuelle provoque une séquentialité dans les actions du sujet : il manipule avec un outil, puis avec l'autre mais rarement les deux en même temps. Cette séquentialité a pour effet des pauses régulières pour chaque outil ce qui explique une vitesse moyenne moins élevée.

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

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

Données et statistiques

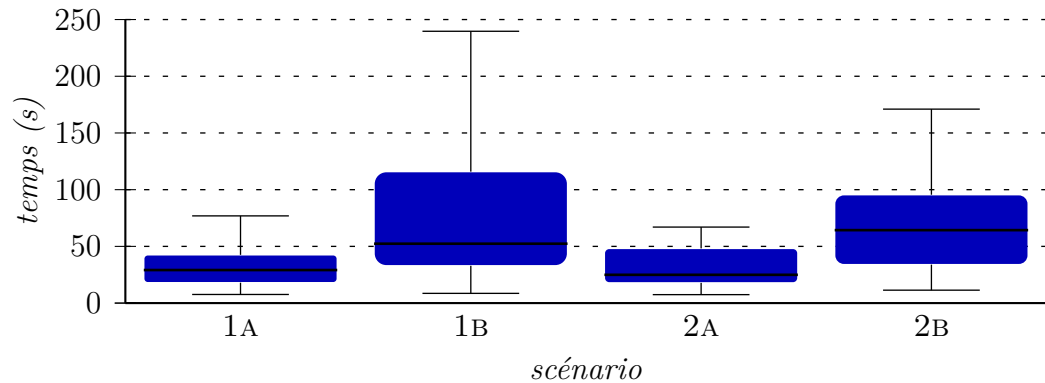


Figure 4.13 – Temps de réalisation des scénarios

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

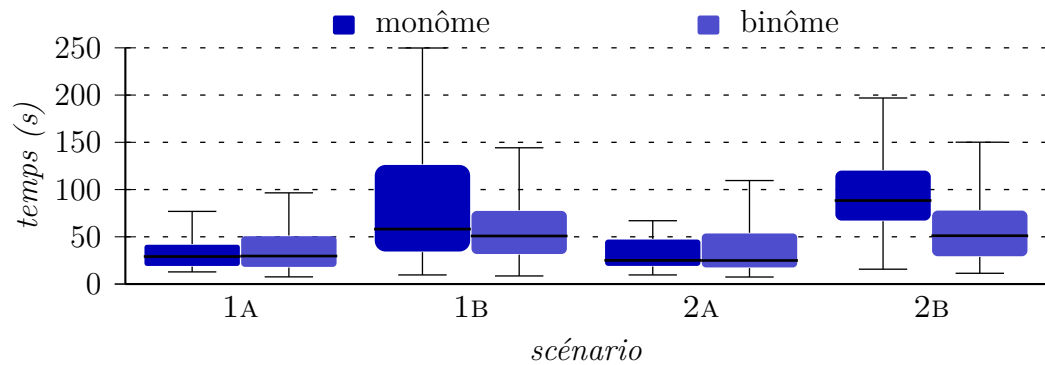


Figure 4.14 – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets

La figure 4.14 présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} des différents scénarios \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . En regroupant les scénarios par

classe de complexité, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.713$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 10.4$, $df = 1$, $p = 0.001$) avec une diminution de -18.4% .

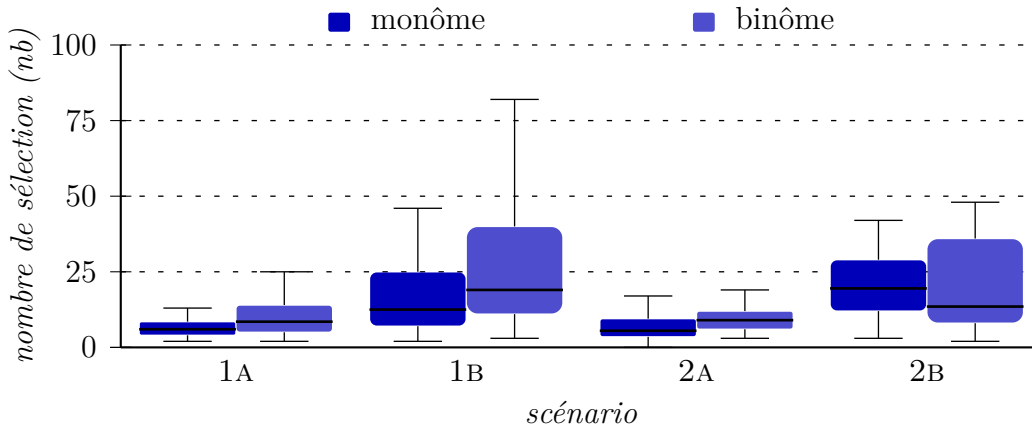
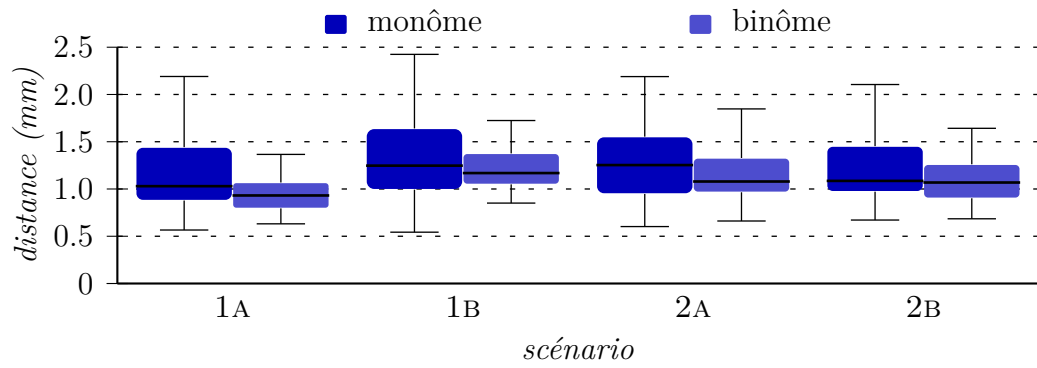


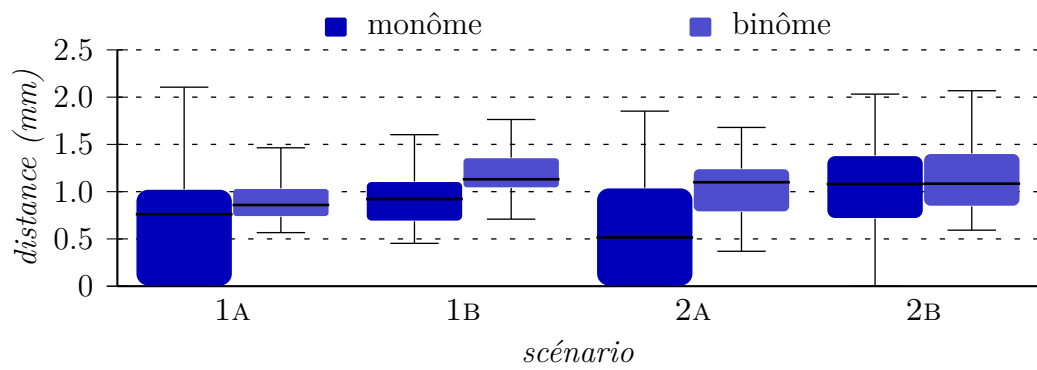
Figure 4.15 – Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets

La figure 4.15 présente le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} des différents scénarios \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 11.5$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 62.2% . Cependant, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 0.4$, $df = 1$, $p = 0.504$).

La figure 4.16 page suivante présente les distances passives \mathcal{V}_{d3} et actives \mathcal{V}_{d4} des différents scénarios \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la distance passive \mathcal{V}_{d3} pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 6.3$, $df = 1$, $p = 0.012$) avec une diminution de -13.8% mais pas d'effet significatif sur les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 1.6$, $df = 1$, $p = 0.207$). Cependant, on constate un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la distance active \mathcal{V}_{d4} pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 17.3$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 57.9% ainsi que sur les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 9.7$, $df = 1$, $p = 0.002$) avec une augmentation de 23.6% .



(a) Distance passive



(b) Distance active

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

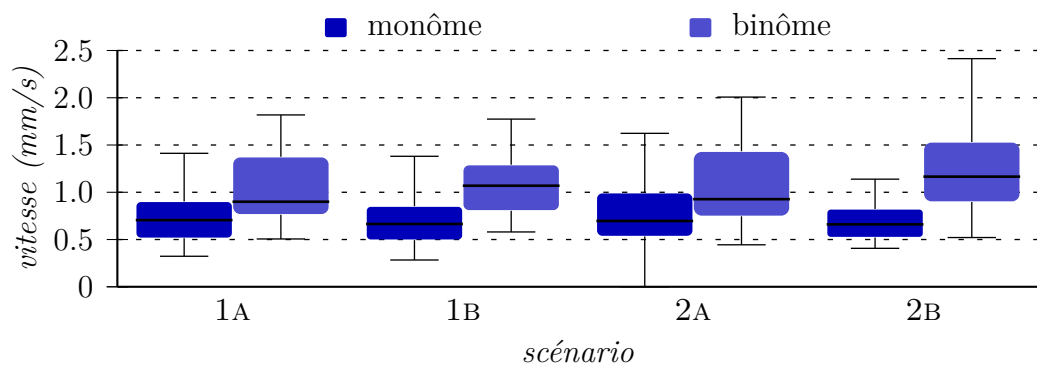


Figure 4.17 – Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets

La figure 4.17 page ci-contre présente la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} des différents scénarios \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} pour les scénarios 1A et 2A ($\chi^2 = 32.2$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 44.8 %. De même, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} pour les scénarios 1B et 2B ($\chi^2 = 72.5$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) avec une augmentation de 69.2 %.

Analyse et discussion

L'analyse du temps de réalisation des différentes tâches ainsi que la table 4.1 page 87 nous permet de classer ces tâches par niveau de complexité : les scénarios 1A et 2A sont relativement simples alors que les scénarios 1B et 2B sont complexes. En effet, les scénarios 1A et 2A concernent la molécule TRP-ZIPPER contenant peu d'atomes et de résidus à déformer. Par contre, les scénarios 1B et 2B, dont le nombre d'atomes et de résidus libres est plus important, est constitué de champ de force à fortes contraintes physiques et nécessité la formation de plusieurs cassures.

En observant les différences de performances entre les monômes et les binômes sur la figure 4.14 page 98, on constate que la configuration collaborative n'amélioré ses performances que dans le cas des tâches complexes. Ces tâches ont la particularité de nécessiter une coordination entre les deux outils de déformation. En effet, en observant la figure 4.16a page précédente, l'analyse de la distance active montre une différence significative entre les monômes et les binômes pour les scénarios simples.

Selon les résultats de la section précédente (voir section 4.4.1 page 93), les monômes ont tendance à délaisser le deuxième outil. L'outil délaissé augmente ainsi la valeur de la distance passive mesurée en étant mis à l'écart. En observant seulement les scénarios simples 1A et 2A, on constate que la distance passive des monômes est plus importante que celle des binômes. On en conclue que la complexité de ces scénarios n'oblige pas à effectuer une manipulation bimanuelle et que la tâche peut être achevée avec un seul outil. Il y a donc peu d'intérêt à effectuer ces tâches peu complexe en configuration collaborative puisqu'aucune amélioration significative des performances n'est constatée.

Pour les scénarios complexes, l'analyse ne montre pas de différence significative de la distance passive entre les monômes et les binômes. Pour ces scénarios, l'utilisation du deuxième outil est nécessaire et malgré la charge

de travail importante que cela représente pour les monômes, la tâche est réalisée à l'aide des deux outils (configuration bimanuelle). La configuration monomanuelle adoptée dans ce cas par les binômes permet de meilleures performances (voir figure 4.14 page 98) pour une distance active similaire (voir figure 4.16b page 100). En effet, l'espace de travail couvert par les monômes est identique à celui des binômes mais leur incapacité à traiter cette charge de travail supplémentaire les rend moins performants.

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

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

4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes

Données et statistiques

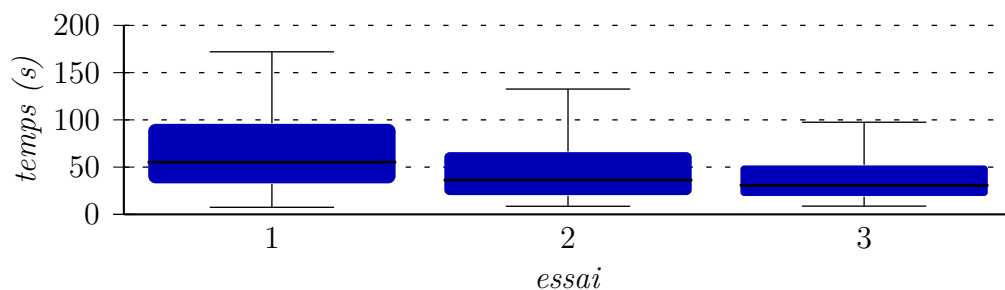


Figure 4.18 – Temps de réalisation de chaque essai

La figure 4.18 page précédente présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} des différents essais \mathcal{V}_{i3} . L'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 20.2$, $df = 2$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative entre le premier essai et le deuxième essai (diminution de -19%) ainsi qu'entre le deuxième essai et le troisième essai (diminution de -18.7%).

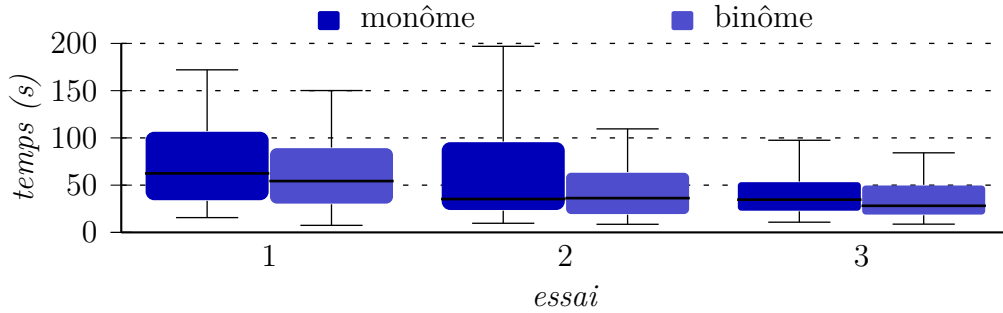


Figure 4.19 – Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

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

Cependant, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} pour les monômes ($\chi^2 = 7.1$, $df = 2$, $p = 0.028$) et pour les binômes ($\chi^2 = 19.8$, $df = 2$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative pour les monômes à partir de dernier essai avec une diminution de -23.9% alors que l'évolution est significative dès le deuxième essai pour les binômes avec une diminution de -24.6% .

La figure 4.20 page suivante présente le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} des différents essais \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour le premier essai ($\chi^2 = 3.3$, $df = 1$, $p = 0.068$) ou le troisième essai ($\chi^2 = 0.1$, $df = 1$, $p = 0.715$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour le deuxième essai ($\chi^2 = 3.8$, $df = 1$, $p = 0.05$) supérieur de 29.7% .

De plus, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du numéro de

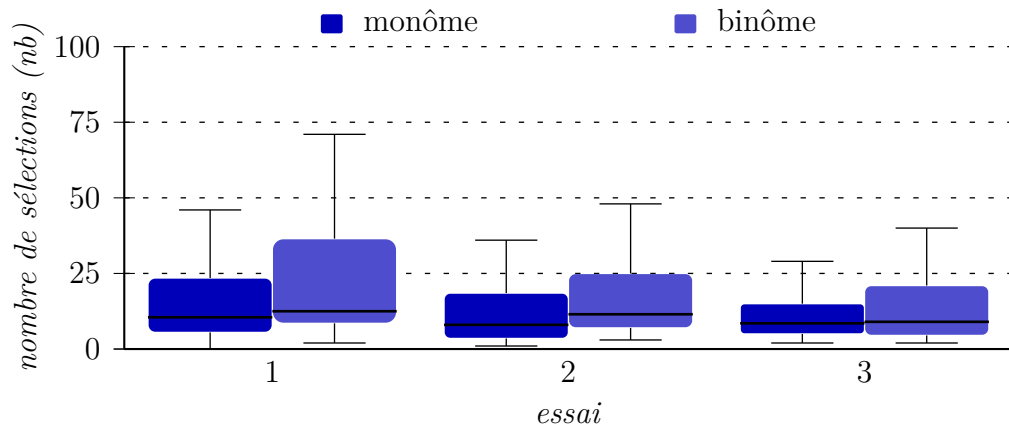


Figure 4.20 – Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets

l'essai \mathcal{V}_{i3} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour les monômes ($\chi^2 = 0.5$, $df = 2$, $p = 0.763$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d2} pour les binômes ($\chi^2 = 9.1$, $df = 2$, $p = 0.011$). Le test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une diminution significative du nombre de sélections pour les binômes entre le premier et le dernier essai avec une diminution de -33.3% .

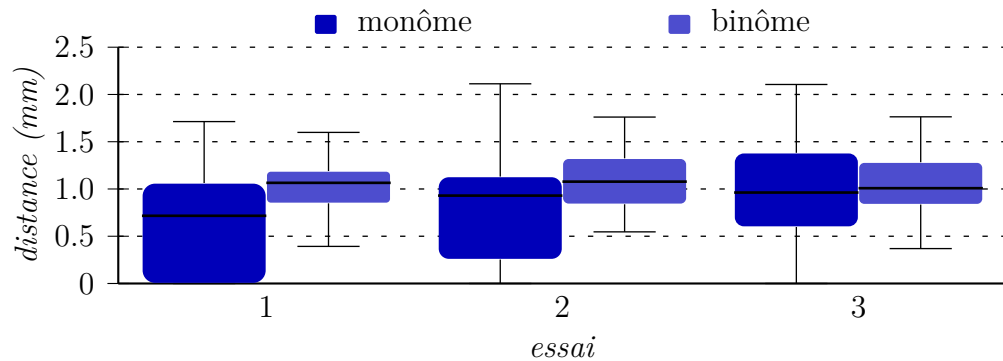


Figure 4.21 – Distance active entre les effecteurs terminaux pour chaque essai en fonction du nombre de sujets

La figure 4.21 présente la distance active \mathcal{V}_{d4} des différents essais \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . Étant donné le biais de mesure décrit dans la section 4.4.1 page 93, la distance passive n'a pas été prise en considération. L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la distance

active \mathcal{V}_{d4} pour le premier essai ($\chi^2 = 21.4$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) supérieur de 74.7 % et pour le deuxième essai ($\chi^2 = 8.5$, $df = 1$, $p = 0.004$) supérieur de 32.7 % mais pas pour le troisième essai ($\chi^2 = 0.8$, $df = 1$, $p = 0.362$).

De plus, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur la distance active \mathcal{V}_{d4} pour les binômes ($\chi^2 = 2.6$, $df = 2$, $p = 0.275$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur la distance active \mathcal{V}_{d4} pour les monômes ($\chi^2 = 7.3$, $df = 2$, $p = 0.025$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une augmentation significative de 50.9 % entre le premier essai et le troisième essai.

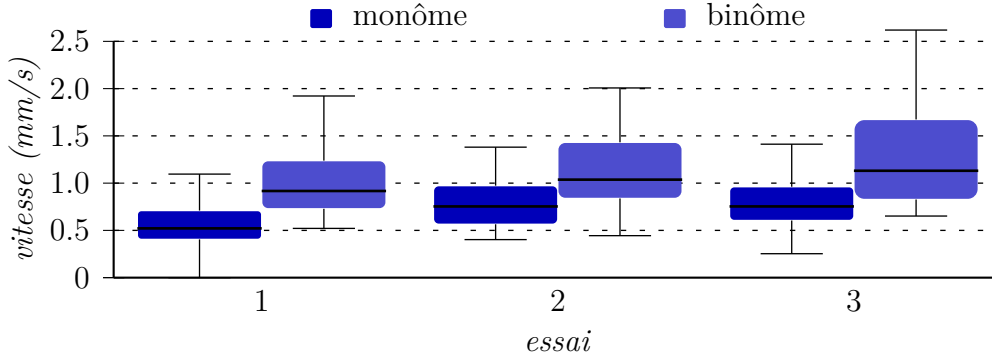


Figure 4.22 – Vitesse moyenne pour chaque essai en fonction du nombre de sujets

La figure 4.22 présente la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} des différents essais \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} pour le premier essai ($\chi^2 = 50$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) supérieur de 77.6 %, le second essai ($\chi^2 = 25.6$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) supérieur de 41.5 % et le troisième essai ($\chi^2 = 33.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) supérieur de 55.8 %.

De plus, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai \mathcal{V}_{i3} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d5} pour les monômes ($\chi^2 = 40.5$, $df = 2$, $p \ll 0.05$) et les binômes ($\chi^2 = 9$, $df = 2$, $p = 0.011$). Le test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre dans chaque cas (monôme et binôme) une augmentation significative après le premier essai (augmentation de 43.6 % pour les monômes et de 14.4 % pour les binômes).

Analyse et discussion

L'observation des temps de réalisation de la tâche (voir figure 4.18 page 102) nous permet de caractériser un apprentissage réel sur l'ensemble des trois réalisations de la tâche. Le détail de l'apprentissage en fonction du nombre de sujets sur la figure 4.19 page 103 apporte cependant un point important : les binômes améliorent plus rapidement leurs performances que les monômes. En effet, on constate une amélioration significative des performances dès le second essai dans le cas des binômes alors que ce n'est que sur le dernier essai que les monômes montrent une évolution. L'amélioration plus rapide des performances chez les binômes suggère un apprentissage plus efficace de la tâche, des outils ou de la molécule².

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

On observe clairement l'apprentissage progressif du deuxième outil mis à disposition des monômes dans la figure 4.21 page 104. Alors que l'espace de travail des binômes reste stable sur l'ensemble des essais, celui des monômes s'étend au-fur-et-à-mesure des essais jusqu'à atteindre une valeur similaire à celle des binômes. En effet, seul l'apprentissage permet de s'affranchir en partie de la charge de travail importante que représente la manipulation bimanuelle [WICKENS 1984] : avec l'apprentissage, les monômes sont capables de gérer un espace de travail de plus en plus grand. Le potentiel du deuxième outil n'est pas ignoré et est utilisé (avec la main dominée) comme un moyen de fixer un résidu déjà placé pendant que l'autre outil déforme. Ceci permet de déformer une partie de la molécule tout en conservant la stabilité de la partie déjà déformée.

En ce qui concerne les vitesses moyennes, les monômes comme les binômes s'améliorent en manipulant de plus en plus rapidement. Cependant, les binômes restent nettement plus rapides que les monômes. Cette donnée est à

2. On observe une amélioration des performances par apprentissage mais rien ne permet de distinguer sur quels notions de l'expérimentation l'apprentissage a lieu.

mettre en corrélation avec l'évolution des temps de réalisation : plus les sujets déforment rapidement, plus la tâche est réalisée rapidement..

Dans cette section, nous avons mis en évidence les améliorations en terme d'apprentissage pour les configurations collaboratives sans distinguer les notions sur lesquelles s'appliquait l'apprentissage (molécule, outils, tâche, *etc.*). En effet, les binômes atteignent des performances optimales dès le second essai tandis que les monômes ont besoin de plus d'apprentissage pour converger vers de bonnes performances. La capacité des binômes à communiquer, échanger et conseiller permet de mutualiser l'apprentissage et de l'accélérer. De plus, un binôme peut bénéficier des connaissances spécifiques ou de l'expérience d'un des membres du binôme et ainsi, la mutualisation des aptitudes de chacun crée une dynamique de groupe. La configuration bimanuelle offre une alternative de manipulation aux monômes avec une surcharge de travail importante : l'apprentissage est plus long.

4.4.4 Résultats qualitatifs

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

La majorité des sujets travaillant en binôme se sont trouvés utiles dans cette tâche de collaboration ($\mu = 3.1$, $\sigma = 0.8$)³. Ce résultat élevé permet de vérifier que les sujets ne se sentent pas écartés et participent activement à la réalisation de la tâche. La collaboration peut se traduire soit par une participation active à la déformation, soit par une participation plutôt passive (échanges verbaux, conseils, remarques, *etc.*). Dans un cas comme dans l'autre, les sujets ne sont pas isolés ce qui permet d'éviter les phénomènes de paresse sociale.

Le sentiment d'avoir été meneur durant la réalisation de la tâche est relativement neutre ($\mu = 2$, $\sigma = 0.6$). Cependant, cette question semble avoir été posée de manière incorrecte. En effet, les sujets ne souhaitent pas prétendre avoir été meneur ou chef des opérations par modestie. Paradoxalement, ils ne souhaitent pas non plus avouer avoir été dirigé par quelqu'un d'autre par fierté. D'ailleurs, on observe un écart-type relativement bas concernant cette note ce qui signifie que la majorité des sujets ont répondu de façon neutre.

L'évaluation de la communication confirme ce qui a été observé dans la précédente expérimentation (voir section 3.4.3 page 76). Tout d'abord, l'importance de la communication verbale a été mise en avant ($\mu = 2.4$, $\sigma = 1.2$).

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

Par opposition, les sujets ont considéré qu'ils ne communiquaient pas par le virtuel ($\mu = 0.9$, $\sigma = 1$) et encore moins par la gestuelle ($\mu = 0.3$, $\sigma = 0.6$).

La communication verbale étant la plus naturelle, il n'est pas étonnant d'obtenir de tels scores. La communication gestuelle est difficile étant donné que les sujets sont déjà en train de manipuler avec leurs mains. De plus, leur vision se focalise principalement sur le déroulement de la tâche à l'écran mais pas sur le partenaire ce qui laisse peu de place à la communication gestuelle.

Pour finir, l'expérimentation ne proposant aucun outil permettant d'exploiter la modalité de communication virtuelle, cela explique probablement le faible taux d'investissement dans les communications par le virtuel. La dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 135) propose des outils de désignation qui vont permettre d'exploiter le potentiel de ce canal de communication.

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

4.5 Conclusion

4.5.1 Résumé des résultats

Dans cette seconde expérimentation, nous avons comparé et étudié les performances de *monômes* et de *binômes*, possédant un nombre de ressources identiques, sur une tâche de déformation. De plus, nous avons cherché à observer l'apport de la configuration collaborative sur l'apprentissage.

Il a été montré qu'avec un nombre de ressources déterminé (un outil d'orientation et deux outils de déformation dans notre cas), il est préférable de répartir les ressources sur plusieurs sujets. Cette répartition des ressources permet une meilleure distribution des charges de travail. En effet, la charge

de travail est trop importante pour un utilisateur seul. La configuration collaborative, bien que souffrant de conflits de coordination, obtient tout de même des meilleures performances.

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

Le troisième résultat important concerne l'apprentissage. Nous avons montré que le travail en collaboration a une influence sur l'évolution de l'apprentissage. L'apprentissage semble être catalysé par la communication et les échanges entre les sujets.

4.5.2 Synthèse et perspectives

Nous avons vu les avantages d'une configuration collaborative sur les binômes. L'étape suivante sera l'étude du travail collaboratif sur des groupes de plus de deux sujets. Ceci devrait permettre d'augmenter encore le potentiel du groupe pour la gestion de charges de travail importantes.

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

Cette deuxième expérimentation a également permis de remettre en cause la pertinence d'une manipulation en configuration bimanuelle. D'après les analyses, la charge de travail qu'apporte la gestion d'un deuxième outil de déformation est trop importante ; l'outil de déformation est relativement complexe à appréhender. Il ne faut donc pas exclure la possibilité d'obtenir des performances acceptables en fournissant un outil simple et un outil complexe pour une manipulation bimanuelle. Nous verrons que la configuration de la dernière étude (voir chapitre 6 page 135) propose une configuration bimanuelle avec un outil simple de déplacement et un outil plus complexe de désignation.

Le questionnaire nous a également permis de mettre en avant les lacunes en ce qui concerne l'utilisation de la modalité virtuelle. La dernière expérimentation sera l'occasion d'introduire des outils adaptés afin de permettre l'utilisation efficace de cette modalité pour la communication.

La dynamique de groupe

Sommaire

5.1	Introduction	112
5.2	Collaboration de groupe	112
5.2.1	Travaux existants	112
5.2.2	Objectifs	114
5.3	Présentation de l'expérimentation	115
5.3.1	Description de la tâche	115
5.3.2	Spécificités du protocole expérimental	116
5.4	Résultats	120
5.4.1	Amélioration des performances	120
5.4.2	Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration	124
5.4.3	Définition d'un meneur	128
5.5	Conclusion	131
5.5.1	Résumé des résultats	131
5.5.2	Synthèse et perspectives	132

5.1 Introduction

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

Ce chapitre constitue notre première étude sur le travail collaboratif avec des groupes d'utilisateurs¹. Au regard des travaux existants, une dynamique de groupe devrait émerger. Cependant, notre contexte de travail est différent des précédents travaux sur le sujet : nous nous intéressons aux collaborations étroitement couplées. C'est dans ce contexte que nous allons observer les dynamiques de groupe qui émergent. Nous nous plaçons de nouveau dans un contexte de déformation moléculaire qui fournit un environnement d'étude propice aux collaboration étroitement couplée. De plus, nous souhaitons tester l'utilité du *brainstorming*² qui d'après A. F. OSBORN [1963], améliore les performances de groupe.

5.2 Collaboration de groupe

5.2.1 Travaux existants

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5.2.2 Objectifs

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

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

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

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

performances globales du groupe. De plus, si l'hypothèse précédente se vérifie, le *brainstorming* devrait permettre d'identifier plus rapidement le ou les meneurs du groupe.

5.3 Présentation de l'expérimentation

5.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules dans un EVC. L'objectif est de rendre une molécule complexe conforme à une molécule modèle. Dans cette expérimentation, la molécule TRP-CAGE est utilisée pour la phase d'entraînement. Des molécules plus complexes (Prion et Ubiquitin) sont utilisées pour les scénarios de déformation collaborative. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 203.

Le mécanisme de sélection et d'affichage est strictement identique à la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 87). De la même façon, le système d'évaluation basé sur le score RMSD est identique. On pourra trouver la description de ces éléments dans la section 4.3.1 page 84.

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

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

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

5.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Le dispositif expérimental utilisé, basé sur celui présenté dans le chapitre A page 201, a été adapté pour les besoins de l'expérimentation. Les modifications sont présentées dans les sections qui vont suivre. Le protocole expérimental est détaillé dans la section B.3 page 214 avec un résumé dans la table 5.1 page 119.

Matériel utilisé

Cette expérimentation se focalise sur le travail de groupe et en particulier, sur les quadrinômes. Il est nécessaire d'ajouter deux outils de déformation supplémentaires à la plateforme (voir section A.1 page 202). Deux PHANTOM Omni® supplémentaires sont posés sur la table, devant les sujets, de manière à ce que chacun puisse avoir accès à une interface haptique. Un serveur VRPN exécuté par des machines de faible puissance est ajouté pour chaque nouvel PHANTOM Omni®.

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

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

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

Visualisation et représentation

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

5.3. Présentation de l'expérimentation

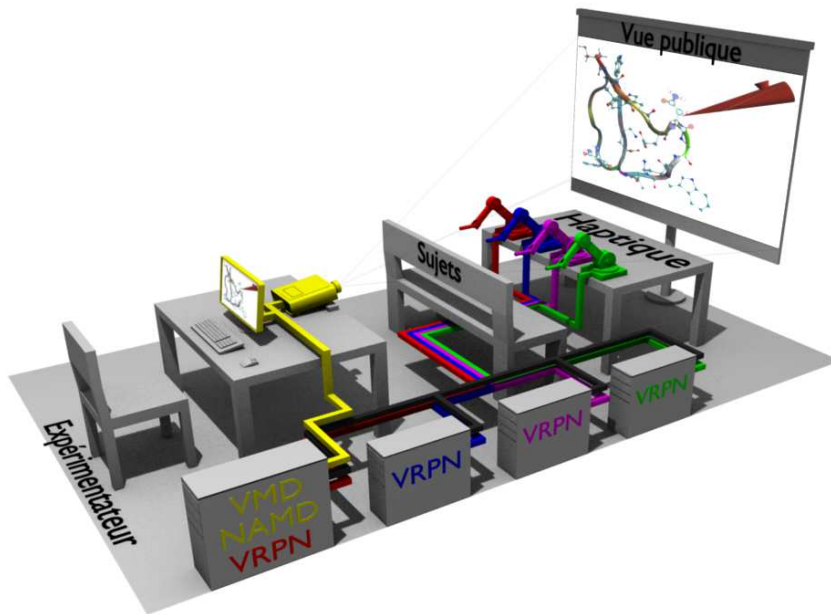


Figure 5.1 – Schéma du dispositif expérimental



Figure 5.2 – Photographie du dispositif expérimental

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

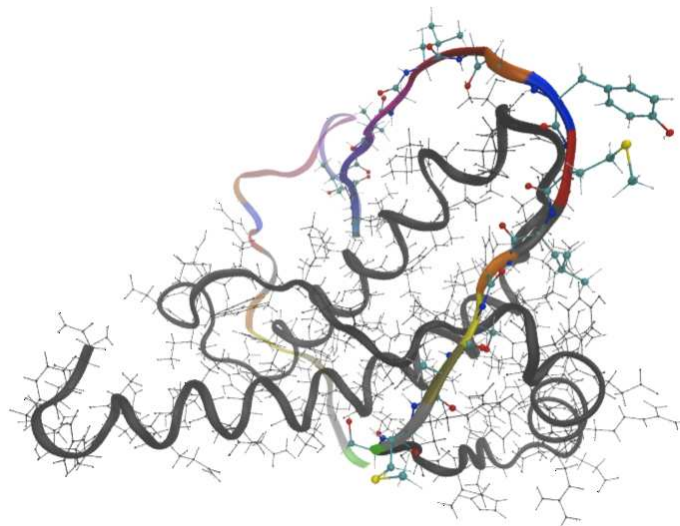
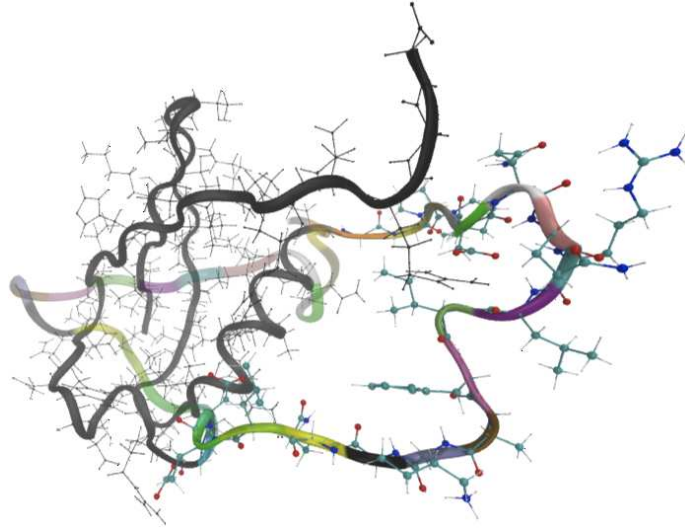


Figure 5.3 – Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1

Outils de manipulation

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

En ce qui concerne les outils de déformation, ce sont exactement les mêmes que dans la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 89). Chaque résidu qu'un sujet sélectionne est mis en surbrillance à la fois sur la molécule déformable et sur la molécule modèle.

**Figure 5.4** – Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2**Table 5.1** – Synthèse de la procédure expérimentale

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

5.4 Résultats

5.4.1 Amélioration des performances

Données et tests statistiques

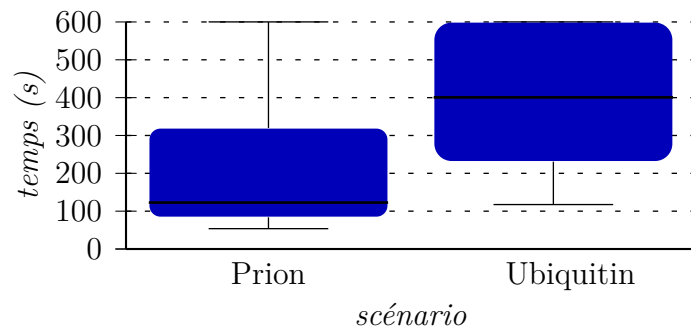


Figure 5.5 – Temps de réalisation des scénarios

La figure 5.5 présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} de chaque scénario \mathcal{V}_{i2} . L'analyse montre un effet significatif des scénarios \mathcal{V}_{i2} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 33.3$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) supérieur de 95.4 %.

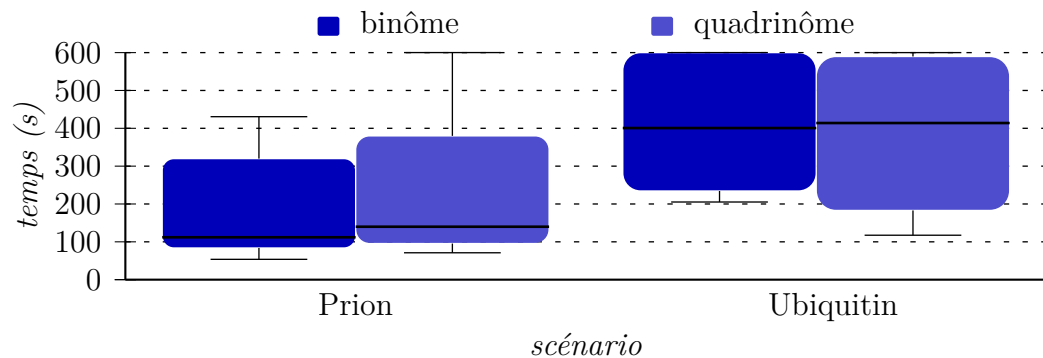


Figure 5.6 – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

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

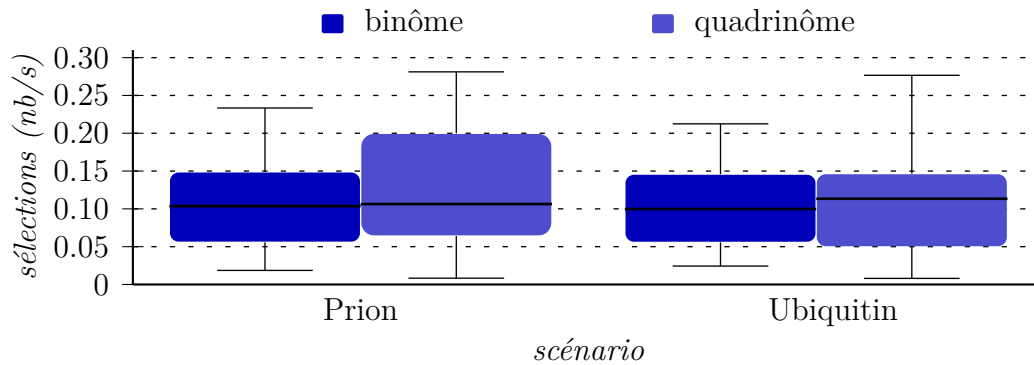


Figure 5.7 – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants

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

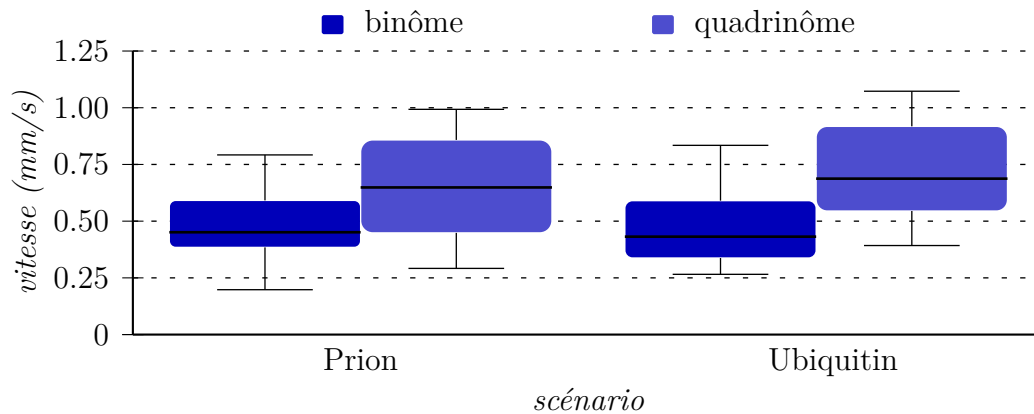


Figure 5.8 – Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.8 présente la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d3} de chaque scénario \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d3} de la molécule Prion ($\chi^2 = 4.5$, $df = 1$, $p = 0.034$) supérieur de 27.6 %. De la même façon, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur la vitesse moyenne \mathcal{V}_{d3} de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 8$, $df = 1$, $p = 0.005$) supérieur de 46.9 %.

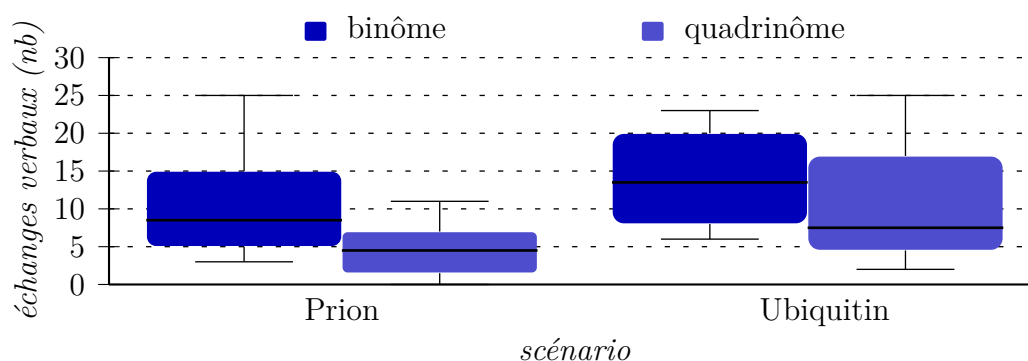


Figure 5.9 – Nombre d’échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants

La figure 5.9 présente le nombre d’échanges verbaux \mathcal{V}_{d5} de chaque scénario \mathcal{V}_{i2} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L’analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre d’échanges verbaux \mathcal{V}_{d5} de la molécule Prion ($\chi^2 = 11.8$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) inférieur de -54.5% . De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} sur le nombre d’échanges verbaux \mathcal{V}_{d5} de la molécule Ubiquitin ($\chi^2 = 4.3$, $df = 1$, $p = 0.039$) inférieur de -12% .

Analyse et discussion

Les deux tâches proposées sont de natures très différentes. Malgré l’apprentissage, la figure 5.5 page 120 montre que la molécule Ubiquitin a été la plus longue à réaliser : la tâche collaborative étroitement couplée est plus complexe que la tâche faiblement couplée. Pourtant, les molécules n’ont pas été alternées lors de la procédure expérimentale (voir section B.3.4 page 217) : c’est toujours la molécule Prion qui a été présentée en premier aux sujets. De plus, de nombreux groupes ont atteint la limite de 10 mn lors de la réalisation du scénario 2 (Ubiquitin). Nous pouvons en déduire que la collaboration étroitement couplée est plus complexe à appréhender par les sujets.

L’étude précédente présentée dans le chapitre 3 page 53 a montré que les performances sont meilleures lorsque les ressources disponibles (outils de manipulation) sont partagées entre plusieurs utilisateurs. Cependant, cette étude compare deux configurations collaboratives. On constate d’après la figure 5.6 page 120 que les quadrinômes obtiennent des performances identiques aux binômes, indépendamment du scénario. D’ailleurs, les binômes et les quadrinômes ont également effectué des fréquences de sélections similaires ce qui confirme ce résultat (voir figure 5.7 page précédente).

Pourtant, la figure 5.8 page 121 montre des différences significatives entre les binômes et les quadrinômes concernant la vitesse moyenne des effecteurs terminaux. L'étude exposée par ROETHLISBERGER *et al.* [1939] a mis en évidence le phénomène de facilitation sociale : les utilisateurs se motivent entre eux pour réaliser la tâche. Ceci permet aux quadrinômes d'obtenir une activité intense avec peu de phases de relâchement durant la réalisation de la tâche. La vitesse moyenne est ainsi augmentée de manière significative chez les quadrinômes.

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

Il semble que la différence entre un binôme et un groupe restreint influe sur la manière de communiquer. À partir d'observations effectuées durant la phase expérimentale, nous avons pu constater que certains sujets se montraient relativement silencieux, même en situation de conflit de coordination. Nous verrons dans la section 5.4.3 page 128 que la présence d'un meneur dans un groupe perturbe la communication verbale au sein d'un groupe. En l'occurrence, le meneur a tendance à monopoliser la parole et à gérer les conflits de coordination.

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

5.4.2 Utilité du *brainstorming* pour la collaboration

Données et tests statistiques

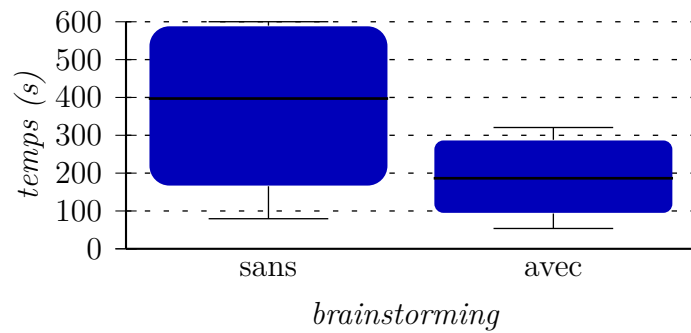


Figure 5.10 – Temps de réalisation avec ou sans *brainstorming*

La figure 5.10 présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} . L'analyse montre un effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} ($\chi^2 = 11.2$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) inférieur de -36.6% .

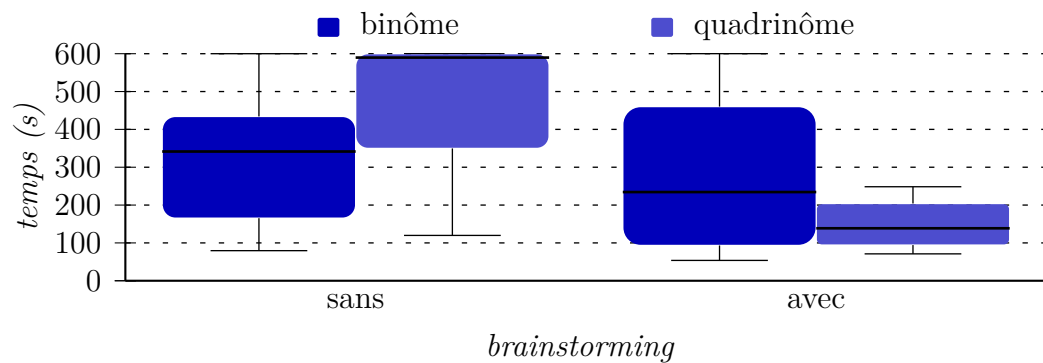


Figure 5.11 – Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

La figure 5.11 présente le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} pour les groupes avec ou sans *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} des binômes ($\chi^2 = 0.9$, $df = 1$, $p = 0.333$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur le temps de réalisation \mathcal{V}_{d1} des quadrinômes ($\chi^2 = 13.1$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) inférieur de -68.6% .

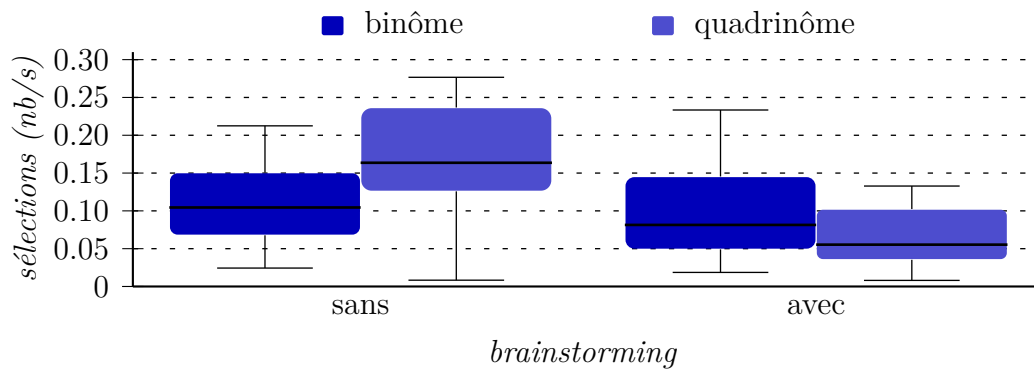


Figure 5.12 – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

La figure 5.12 présente la fréquence de sélection \mathcal{V}_{d2} pour les groupes avec ou sans *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur la fréquence de sélection \mathcal{V}_{d2} des binômes ($\chi^2 = 1.2$, $df = 1$, $p = 0.265$). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur la fréquence de sélection \mathcal{V}_{d2} des quadrinômes ($\chi^2 = 11$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) inférieur de -54.5% .

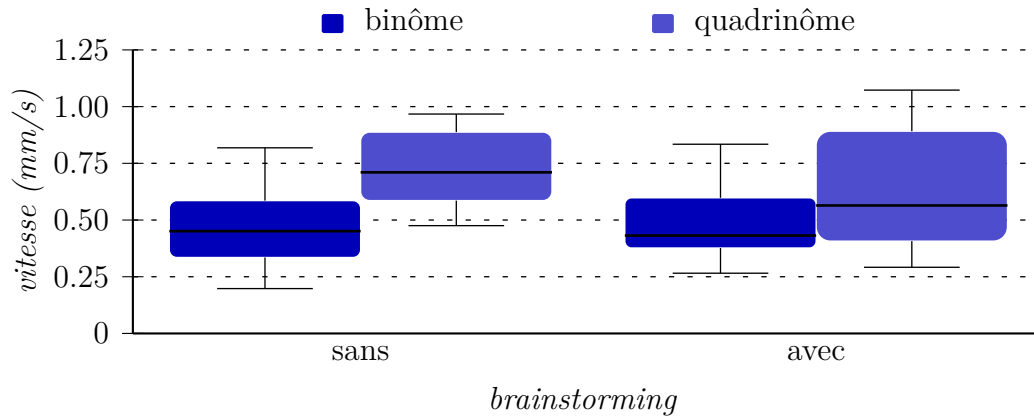


Figure 5.13 – Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

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

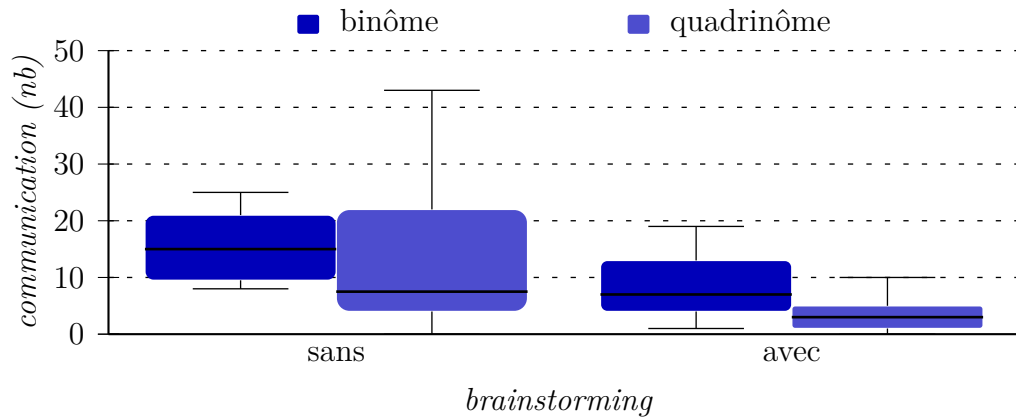


Figure 5.14 – Nombre d’ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

La figure 5.14 présente le nombre d’ordres verbaux \mathcal{V}_{d5} pour les groupes avec ou sans *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} en fonction du nombre de sujets \mathcal{V}_{i1} . L’analyse montre un effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur le nombre d’ordres verbaux \mathcal{V}_{d5} des binômes ($\chi^2 = 12.9$, $df = 1$, $p \ll 0.05$) inférieur de -46.8% . De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du *brainstorming* \mathcal{V}_{i3} sur le nombre d’ordres verbaux \mathcal{V}_{d5} des quadrinômes ($\chi^2 = 4.1$, $df = 1$, $p = 0.042$) inférieur de -75% .

Analyse et discussion

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

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

Cependant, la figure 5.11 page 124 et la figure 5.12 page précédente montrent que le *brainstorming* est seulement bénéfique pour les quadrinômes. En effet, les binômes n’obtiennent aucune évolution significative des performances avec ou sans *brainstorming*. De même, la figure 5.13 page précédente montre que la vitesse moyenne de l’effecteur terminal des binômes n’évolue pas. La configuration bimanuelle est certainement la raison de cette vitesse inférieure.

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

Cependant, la figure 5.11 page 124 et la figure 5.12 page 125 mettent en évidence l'amélioration des performances pour les quadrinômes. Nous avons vu dans la section 5.4.1 page 120 que les quadrinômes éprouvent des difficultés dans la résolution des conflits de coordination. D'après les figures observées, le *brainstorming* permet l'élaboration d'une stratégie et la définition des rôles de chacun des sujets. L'élaboration d'une stratégie réduit de façon importante le nombre de conflits de coordination pendant la réalisation de la tâche et ainsi améliore les performances. De plus, la mise en place de rôles pour chacun des sujets avant le début de la tâche permet de distribuer la tâche ou de l'organiser le cas échéant et ainsi d'éviter le phénomène de paresse sociale ce qui rejoint les conclusions faites par LATANÉ *et al.* [1979] sur l'identification des rôles.

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

De plus, la période de *brainstorming* permet de partitionner le temps de réflexion et le temps de manipulation. En effet, l'analyse des communications verbales permet de constater que les groupes n'ayant pas eu de période de *brainstorming* (C_1 et C_3) tentent tout de même d'élaborer une stratégie de travail. Cependant, la manipulation crée une charge de travail importante. Les capacités de travail des sujets sont alors partagées entre la manipulation

et l'élaboration d'une stratégie. Les sujets ne sont pas pleinement attentifs à l'élaboration de la stratégie et peuvent en plus ne pas être attentifs en même temps que leurs collègues. La réflexion sur la meilleure stratégie à choisir n'est donc pas optimale.

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

5.4.3 Définition d'un meneur

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

Données et statistiques

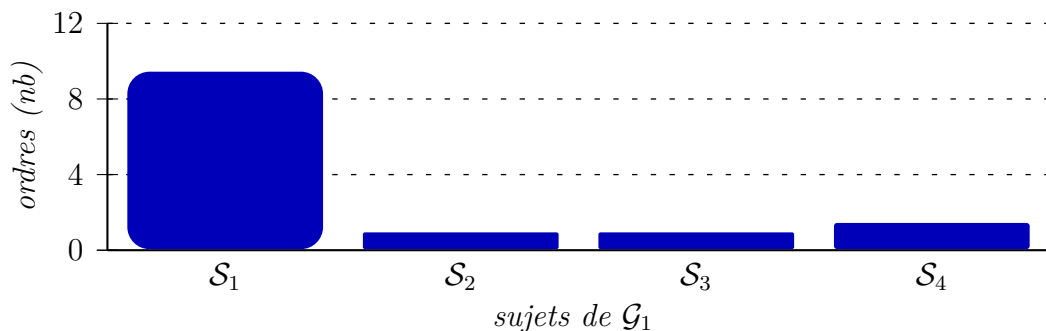


Figure 5.15 – Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de \mathcal{G}_1

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

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

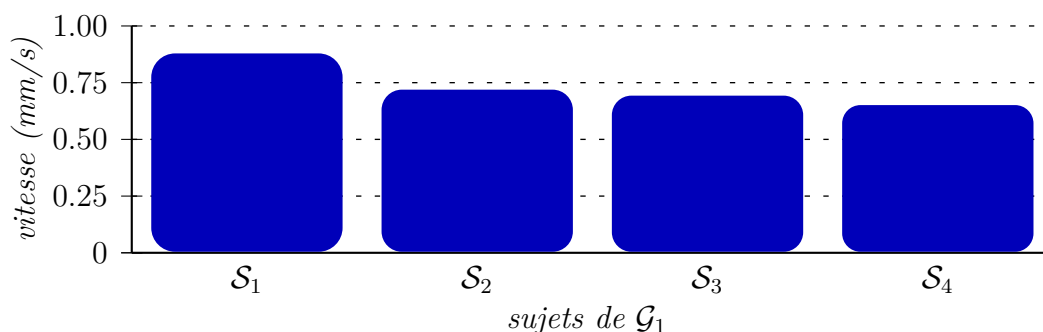


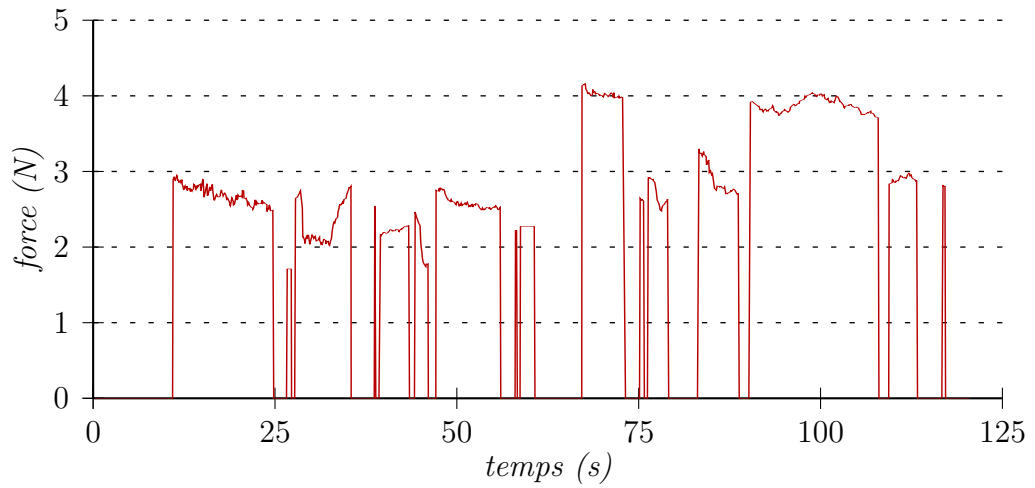
Figure 5.16 – Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de \mathcal{G}_1

La figure 5.17 page suivante présente les profils de force \mathcal{V}_{d4} des sujets S_1 et S_2 du groupe \mathcal{G}_1 . Chaque période où la force est maintenue représente une sélection (voir figure 5.17b page suivante). On constate un profil très chaotique pour le sujet S_1 avec un grand nombre de sélections (11 sélections). Par opposition, le profil du sujet S_2 est très peu chaotique avec un petit nombre de sélections (4 sélections > 10 s). De plus, les efforts maximaux produits par le sujet S_2 sont plus importants que ceux du S_1 (5 N pour S_2 contre 4 N pour S_1).

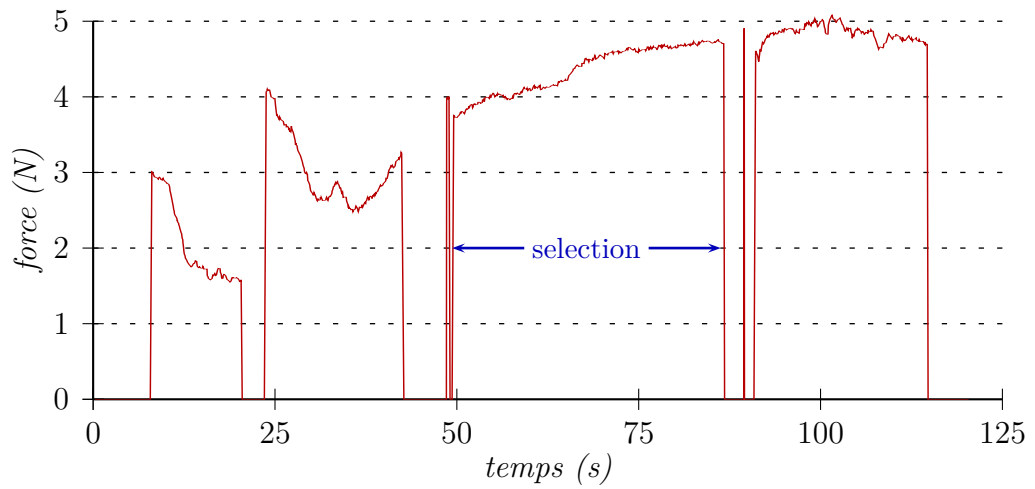
Analyse et discussion

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

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



(a) Profil de force de S_1



(b) Profil de force de S_2

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

Par opposition, les suiveurs n'explorent pas l'environnement. En effet, la figure 5.17b page ci-contre montre un nombre de sélections peu élevées mais des sélections maintenues sur une longue période de temps. Le suiveur accepte un ordre du meneur et effectue la déformation jusqu'à atteindre l'objectif fixé. Les manipulations des suiveurs sont plutôt lentes car les déformations nécessitent de la précision dans la manipulation. De plus, l'effort déployé est plus important car toute l'attention du suiveur est portée sur la déformation. Le meneur ne déploie pas autant d'effort car il n'effectue pas les déformations.

Pour conclure cette section, le meneur a un rôle crucial dans la dynamique du groupe. C'est lui qui va définir et répartir les tâches : il élabore la stratégie du groupe. Cette répartition permet à chaque sujet de se faire attribuer une tâche bien identifiée. L'identification des rôles est nécessaire pour obtenir de bonnes performances et éviter le phénomène de paresse sociale (voir section 5.4.2 page 124). Cependant, le meneur doit être accepté par les autres membres afin d'obtenir une bonne harmonie dans le groupe.

5.5 Conclusion

5.5.1 Résumé des résultats

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

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

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

De plus, ce *brainstorming* permet de faire émerger les rôles rapidement au sein de cette structure informelle. L'émergence d'un meneur est nécessaire pour organiser le groupe, diviser le travail et répartir les tâches. D'un autre côté, les suiveurs acceptent la présence de ce meneur et l'assistent dans la réalisation de la tâche. Le meneur va se distinguer par une exploration plus large et plus rapide de l'environnement afin d'avoir une vision globale de la tâche à réaliser. Les suiveurs effectuent plutôt des déformations longues et locales.

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

5.5.2 Synthèse et perspectives

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

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

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

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

La majorité de ces outils seront implémentés dans la dernière version de la plateforme afin d'effectuer une expérimentation avec des experts de la déformation moléculaire. Ces outils seront évalués à la fois en terme d'amélioration sur les performances mais également en terme d'utilisabilité. Le chapitre 6 page 135 décrit ces nouveaux outils et l'ensemble de l'expérimentation.

Travail collaboratif assisté par haptique

Sommaire

6.1	Introduction	136
6.2	Assistance haptique pour la communication	136
6.2.1	Travaux existants	136
6.2.2	Objectifs	137
6.3	Présentation de l'expérimentation	138
6.3.1	Description de la tâche	138
6.3.2	Spécificités du protocole expérimental	139
6.4	Résultats	144
6.4.1	Amélioration des performances	144
6.4.2	Amélioration de la communication	149
6.4.3	Évaluation qualitative	153
6.5	Conclusion	156
6.5.1	Résumé des résultats	156
6.5.2	Synthèse et perspectives	157

6.1 Introduction

Cette dernière expérimentation a pour objectif d'introduire et de valider des outils de communication haptique dans le cadre d'une tâche de *docking* moléculaire. Sur la base des précédentes expérimentations, nous avons constaté que la communication est un point essentiel de la collaboration. Nous souhaitons proposer des outils haptiques pour améliorer les interactions et la communication entre les manipulateurs. Ce chapitre a pour but de tester et d'évaluer ces outils dans un contexte de déformation moléculaire.

De plus, ce dernier chapitre sera l'occasion de confronter la plateforme Shaddock à des experts en biologie moléculaire. En effet, il est nécessaire pour cette dernière étape d'avoir l'avis de spécialistes pour évaluer l'utilisabilité de la plateforme et confirmer la validité de ce processus de travail.

6.2 Assistance haptique pour la communication

6.2.1 Travaux existants

Le concept de communication haptique a été initié par les travaux de SALLNÄS *et al.* [2000] avec une expérimentation sur la manipulation synchrone de cube au sein d'un environnement virtuel. Chaque utilisateur dispose d'un outil haptique lui permettant d'exercer une pression sur un cube virtuel ; deux utilisateurs peuvent alors soulever un cube en exerçant une pression de chaque côté du cube. Sur le même principe de manipulation synchrone, BAŞDOĞAN *et al.* [2000] proposent de déplacer un anneau autour d'un fil avec pour objectif de ne pas toucher le fil. Dans les deux études, les résultats montrent l'utilisation de l'haptique permet des améliorations significatives de la collaboration entre les partenaires.

Sur la base de ces résultats, OAKLEY *et al.* [2001] propose un environnement en 2D pour la création de diagrammes UML. Il fournit aux utilisateurs différents outils haptiques permettant d'interagir avec le partenaire :

- ressentir le curseur du partenaire avec la possibilité de le pousser ;
- attraper et guider le curseur du partenaire vers une position choisie ;
- activer à distance un guidage du partenaire vers son propre curseur ;
- activer à distance un guidage de son propre curseur vers celui de son partenaire ;
- ressentir une viscosité plus importante par la proximité du curseur du partenaire.

Dans la continuité de OAKLEY *et al.* [2001], MOLL et SALLNÄS [2009] expérimentent des outils haptiques similaires dans un environnement virtuel de construction par bloc en 3D. Ces deux dernières études prouvent que la communication entre deux partenaires par l'intermédiaire de la modalité haptique est possible. D'ailleurs, MOLL et SALLNÄS [2009] mettent en évidence l'utilité des retours haptiques pour la désignation de cible en environnement virtuel.

Le terme *communication haptique* a pris tout son sens avec les premières tentatives de *langages haptiques*. Tout d'abord, CHANG *et al.* [2002] proposent d'augmenter l'information d'une communication par *talkies-walkies* avec différents types de vibrations. Puis, ENRIQUEZ *et al.* [2006] crée une liste de phonèmes haptiques permettant la communication. Il constate cependant qu'une telle solution nécessite un fort apprentissage (≈ 45 mn) pour une utilisation persistente. CHAN *et al.* [2008] utilise également des mots haptiques pour aider et assister la prise de contrôle d'un système lors de la réalisation d'une tâche collaborative.

Récemment, ULLAH [2011] s'est intéressé aux influences de la communication haptique sur le sentiment de présence et sur la conscience périphérique (voir ?? page ??). Tout d'abord avec des travaux sur la manipulation collaborative d'un bras articulé en environnement virtuel, il montre une amélioration de la conscience périphérique [NAUD *et al.* 2009]. Puis, c'est avec une tâche de déplacement d'objet virtuel coordonné (une cheville à déplacer dans un trou) que ULLAH *et al.* [2010] montre une amélioration significative du sentiment de présence et de la conscience périphérique.

6.2.2 Objectifs

Les trois précédentes expérimentations nous ont permis de constater un des points critiques de la collaboration synchrone colocalisée : la communication entre les acteurs. Dans cette quatrième et dernière expérimentation, nous proposons des outils haptiques pour assister la communication entre les partenaires et les testons dans le cadre d'une tâche de déformation collaborative de molécule.

MOLL et SALLNÄS [2009] a montré la pertinence de la modalité haptique pour la communication et en particulier pour le processus de désignation. Nous souhaitons tester les bénéfices d'un outil de désignation haptique sur les performances globales de réalisation de la tâche et sur la communication entre les sujets.

De plus, cette quatrième et dernière expérimentation menée dans le cadre de cette thèse est l'occasion de confronter la plateforme et les méthodes de travail proposées à des experts susceptibles d'utiliser un tel environnement de travail. C'est pourquoi une partie des sujets évalués sera constituée de biologistes œuvrant dans le domaine de la biologie moléculaire et sensibilisés aux plateformes d'interaction avec les molécules. Ces sujets permettront d'obtenir des avis pertinents sur l'utilité des outils proposés et des propositions d'évolutions.

6.3 Présentation de l'expérimentation

6.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules et de complexes de molécules dans un EVC. L'objectif est de la rendre le plus conforme possible au modèle.

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

Cinq molécules sont utilisées dans le cadre de cette expérimentation dont trois exclusivement réservées pour l'entraînement. Chaque molécule est présentée dans la section A.2.1 page 203. L'affichage des molécules est identique à celui de la troisième expérimentation présenté dans la section 5.3.2 page 116 : la molécule déformable est représentée en CPK et *NewRibbon* alors que la molécule cible est en *NewRibbon* transparent. Les cinq molécules sont utilisés pour les différents scénarios décrits ci-dessous.

Entraînement 1 Le premier entraînement est destiné à familiariser les sujets avec l'outil de désignation. Cet entraînement se déroule sur la molécule TRP-CAGE. La tâche est volontairement peu complexe et est surtout destinée à permettre aux sujets d'intégrer les étapes du processus de désignation (voir section 2.4.3 page 51).

Entraînement 2 La seconde phase d'entraînement s'effectue sur la molécule Prion qui est de taille plus importante. C'est dans cette phase qu'on introduit les outils de communication haptique pour les phases de désignation. Cet entraînement permet de continuer l'assimilation du processus de désignation sur une tâche plus complexe tout en introduisant l'assistance haptique.

Entraînement 3 La dernière phase d'entraînement s'adresse au coordinateur puisqu'elle introduit l'outil de manipulation qui jusqu'à présent n'a pas été utilisé. La molécule TRP-ZIPPER, de petite taille, a été choisie et est solidaire de l'outil de manipulation. Cette phase d'entraînement permet de découvrir l'ensemble des outils proposés au sein d'un même scénario.

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

Scénario 2 La seconde tâche consiste à reconstituer le complexe de molécules NUSE:NUSG. La molécule NUSG est laissée complètement libre de mouvement (pas d'atome fixes) et doit être amarrée à la molécule NUSE : c'est une tâche de *docking* moléculaire simplifiée. On distingue deux phases dans cette tâche ; il faut approcher la molécule NUSG puis affiner l'amarrage par une déformation interne de NUSG. Tous les outils (désignation, déformation, orientation et manipulation) sont activés dans ce scénario ; la molécule NUSG est solidaire de l'outil de manipulation et l'ensemble des atomes de la chaîne carbonée principale de la molécule NUSE sont fixes afin d'éviter que cette dernière ne dérive.

Afin de pouvoir réaliser la tâche demandée, les sujets disposent de deux informations calculées en temps-réel. Une première mesure est le score `RMSD`, déjà décrit dans la section 4.3.1 page 84. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par `NAMD` et représentant la synthèse des énergies électriques et des énergies de VAN DER WAALS.

6.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Les sections suivantes décrivent l'ensemble des modifications apportées à la plateforme de base (voir chapitre A page 201) et principalement aux outils d'interaction. La méthode expérimentale est exposée dans la section B.4 page 218. Un résumé de cette méthode se trouve dans la table 6.1 page 144.

Matériel utilisé

Dans cette quatrième et dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils destinés à améliorer les interactions entre les membres d'un

trinôme. Les deux opérateurs auront à leur disposition deux outils de déformation adaptés pour le processus de désignation (voir section 6.3.2 page suivante) matérialisés par des PHANTOM Omni®. Le coordinateur aura à sa disposition trois outils dont deux basés sont des interfaces haptiques : une souris USB pour l'outil d'orientation, un PHANTOM Omni® pour l'outil de désignation et un PHANTOM Desktop® pour l'outil de manipulation. Chaque interface haptique est liée à un serveur VRPN.

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

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

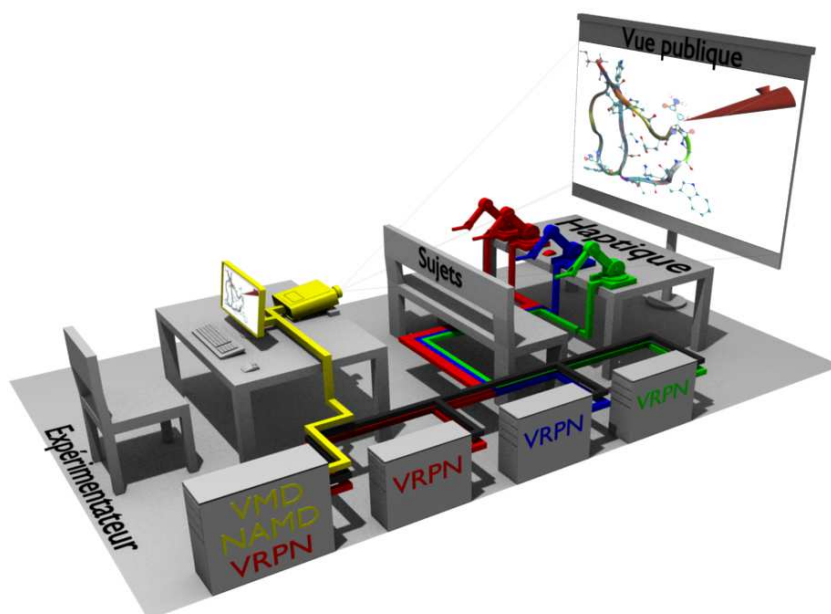


Figure 6.1 – Schéma du dispositif expérimental

Visualisation et représentation

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

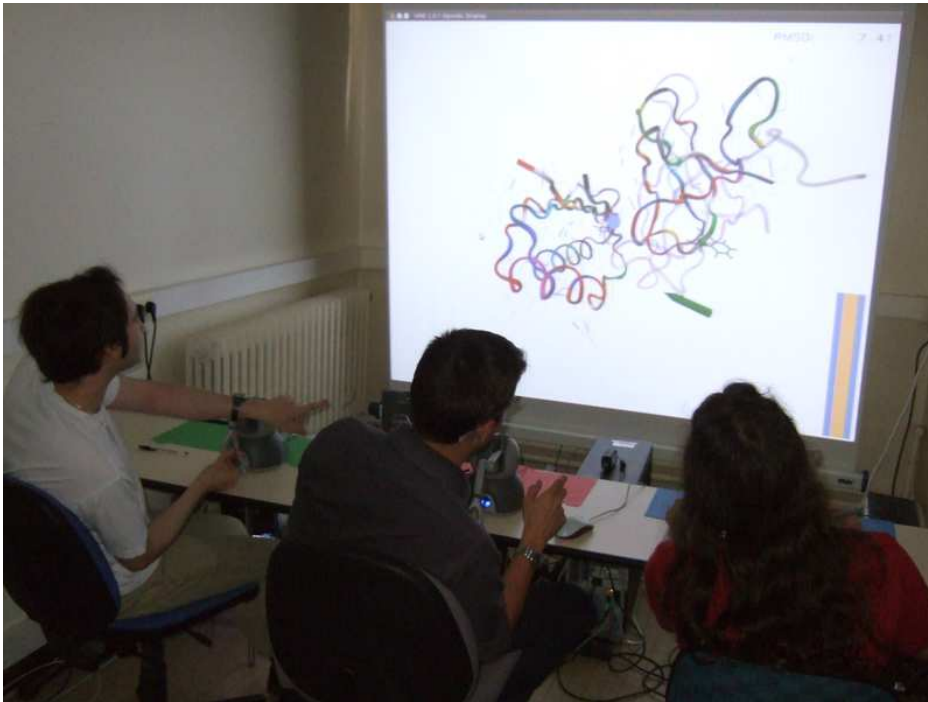


Figure 6.2 – Photographie du dispositif expérimental

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

Outils d'interaction

Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont l'outil d'orientation, l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation par molécule que nous nommerons outil de manipulation. Ces outils sont décrits dans la section 2.4.3 page 49.

Outil de désignation Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur

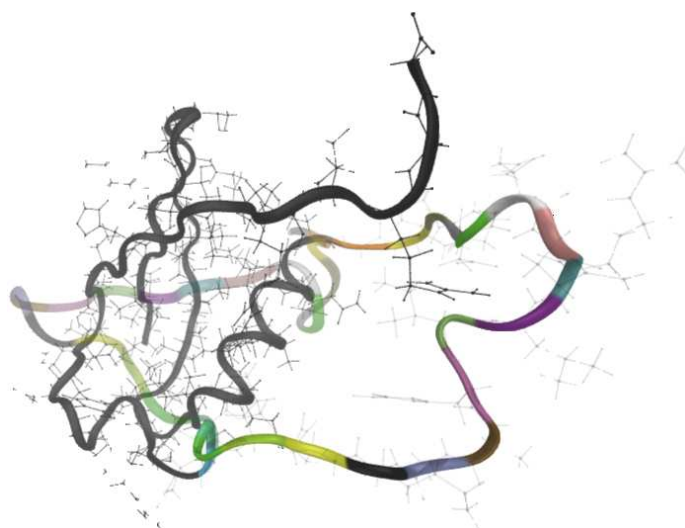


Figure 6.3 – Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1

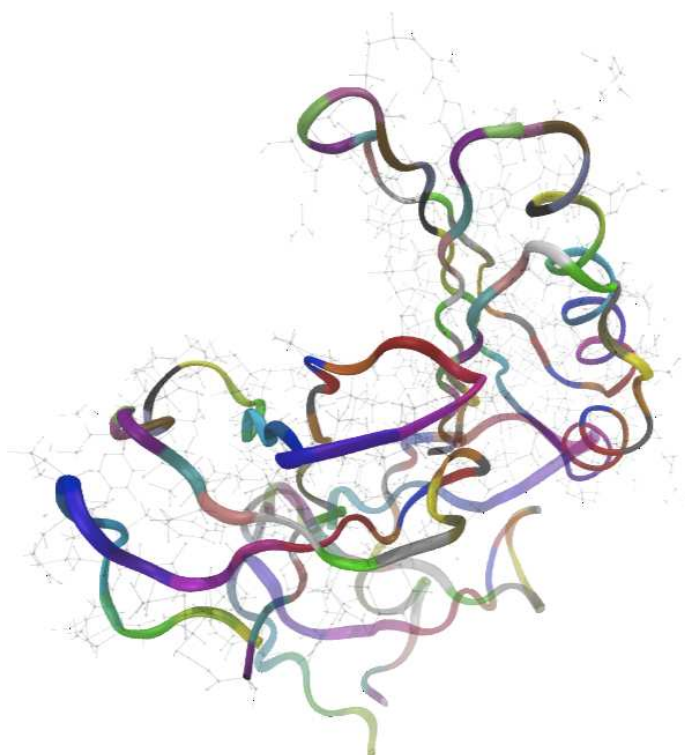


Figure 6.4 – Représentation de la molécule NusE:NusG pour le scénario 2

désigne une cible. L'arrêt de la vibration informe le coordinateur que la désignation vient d'être acceptée par un opérateur. Tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

Outil de déformation Un outil de déformation par atome est fourni aux deux opérateurs. Le coordinateur indique qu'une nouvelle désignation a été effectuée en émettant une vibration chez les opérateurs. Il est à noter que si les opérateurs sont en train de déformer la molécule, ils ne ressentent pas la vibration mais dès qu'ils relâchent leur sélection, la vibration leur indique qu'une requête est en cours. Les opérateurs ont la possibilité d'accepter ou non la désignation. Lorsque un opérateur accepte la désignation, les vibrations du coordinateur et des opérateurs s'arrêtent. L'opérateur qui a accepté est alors attiré vers la cible à déformer. De plus, sa prochaine déformation lui permettra la déformation d'un résidu ce qui est un gain de potentiel de déformation substantiel. L'objectif de cette augmentation des capacités est de stimuler l'envie d'interagir avec le coordinateur.

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

Outil d'orientation Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. Cet outil, générateur de conflits de coordination, a été de nouveau mis à disposition après avoir été enlevé de la troisième expérimentation. Il s'est avéré, lors de la précédente expérimentation, que les sujets sont en demande de cet outil pour certaines situations. La souris associée à cet outil constitue le troisième périphérique destiné au coordinateur. En surchargeant le coordinateur avec un troisième outil, l'objectif est que la souris soit utilisée seulement lorsque c'est réellement nécessaire. En effet, la modification de l'orientation peut perturber les manipulations en cours effectuées par les opérateurs. La souris 3D utilisée dans la seconde expérimentation a été remplacée par une souris USB plus traditionnelle

car c'est un périphérique connu de tous les sujets qui ne nécessite pas d'apprentissage.

Table 6.1 – Synthèse de la procédure expérimentale

Tâche	Déformation de molécule ou de complexe de molécule		
Hypothèses	\mathcal{H}_1	Performances améliorées par l'assistance haptique	
	\mathcal{H}_2	L'assistance haptique améliore la communication	
	\mathcal{H}_3	La plateforme est appréciée des experts	
Variables indépendantes	\mathcal{V}_{i1}	Présence de l'assistance	
	\mathcal{V}_{i2}	Molécules à déformer	
Variables dépendantes	\mathcal{V}_{d1}	Score RMSD minimum	
	\mathcal{V}_{d2}	Temps du score RMSD minimum	
	\mathcal{V}_{d3}	Nombre de sélections	
	\mathcal{V}_{d4}	Temps moyen d'une sélection	
	\mathcal{V}_{d5}	Temps moyen pour accepter une cible	
	\mathcal{V}_{d6}	Temps moyen pour atteindre une cible acceptée	
	\mathcal{V}_{d7}	Nombre de désignations acceptées	
	\mathcal{V}_{d8}	Vitesse moyenne	
	\mathcal{V}_{d9}	Temps des communication verbale par sujet	
	\mathcal{V}_{d10}	Questionnaire d'utilisabilité et sur la conscience	
Condition \mathcal{C}_1	Condition \mathcal{C}_2	Condition \mathcal{C}_3	Condition \mathcal{C}_4
Sans assistance	Avec assistance	Sans assistance	Avec assistance
Ubiquitin	Ubiquitin	NusE:NusG	NusE:NusG

6.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette quatrième étude. Les données, qui sont appareillées et en faible nombre, ont été confrontées au test des rangs signés de WILCOXON [1945].

6.4.1 Amélioration des performances

Données et tests statistiques

La figure 6.5 page suivante présente le score RMSD minimum atteint \mathcal{V}_{d1} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il

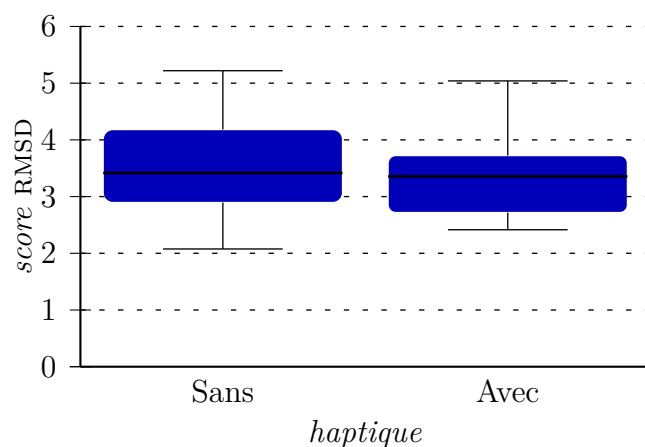


Figure 6.5 – Score RMSD minimum atteint avec et sans haptique

n'y a pas d'effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur le score RMSD minimum atteint \mathcal{V}_{d1} ($W = 87$, $p = 0.348$).

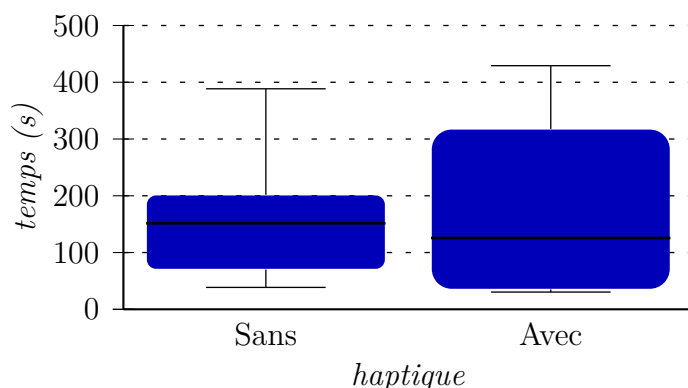


Figure 6.6 – Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique

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

La figure 6.7 page suivante présente le temps du score RMSD minimum atteint \mathcal{V}_{d2} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} et des scénarios \mathcal{V}_{i2} . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur le temps du score RMSD minimum atteint \mathcal{V}_{d2} pour la molécule Ubiquitin ($W = 13$, $p = 0.547$). L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur le temps du score RMSD minimum atteint \mathcal{V}_{d2}

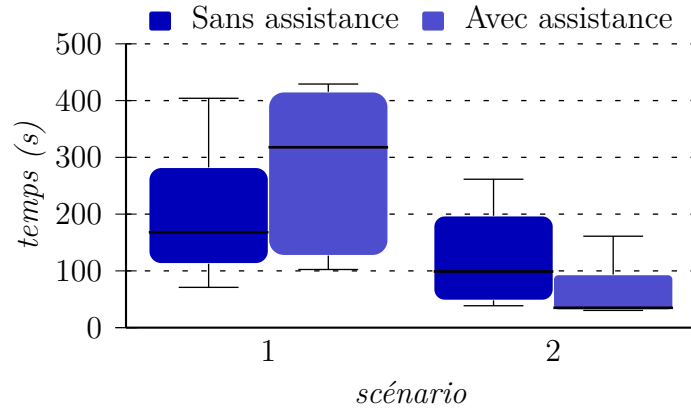


Figure 6.7 – Temps pour atteindre le score RMSD minimum avec et sans haptique pour chaque scénario

pour le complexe de molécules NusE:NusG ($W = 36$, $p = 0.008$) inférieur de -48.3% .

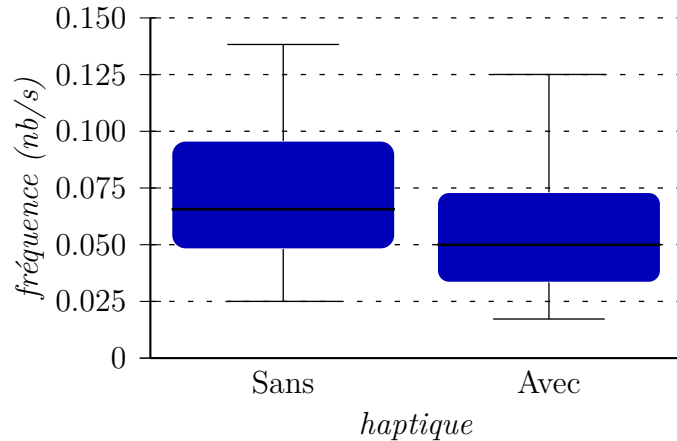


Figure 6.8 – Nombre de sélections par seconde effectuées par un opérateur pour la déformation avec et sans haptique

La figure 6.8 présente le nombre de sélections par seconde effectuées par les opérateurs pour une déformation \mathcal{V}_{d3} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur le nombre de sélections \mathcal{V}_{d3} ($W = 401$, $p = 0.009$) inférieur de -12.8% .

La figure 6.9 page suivante présente le temps moyen d'une sélection effectuée par un opérateur pour une déformation \mathcal{V}_{d4} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance

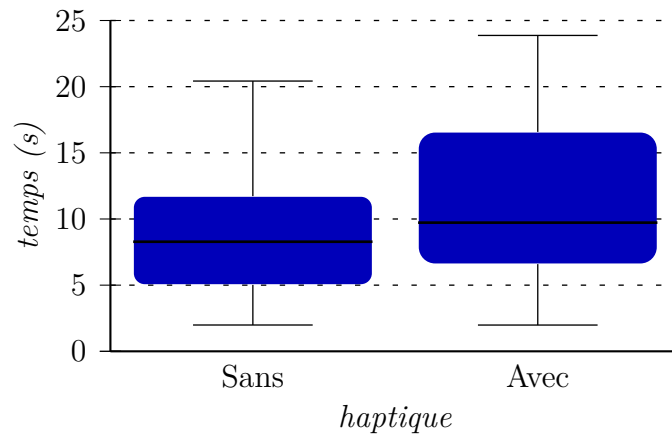


Figure 6.9 – Temps moyen d'une sélection effectuée par un opérateur pour la déformation avec et sans haptique

haptique \mathcal{V}_{i1} sur le temps moyen d'une sélection \mathcal{V}_{d4} ($W = 140$, $p = 0.019$) supérieur de 28.1 %.

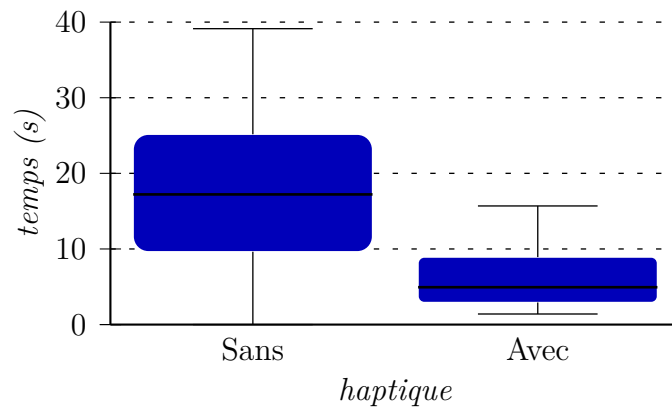


Figure 6.10 – Temps moyen pour atteindre une cible désignée lors d'une désignation avec et sans haptique

La figure 6.10 présente le temps moyen mis par un opérateur pour atteindre une cible acceptée lors du processus de désignation \mathcal{V}_{d6} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur ce temps moyen \mathcal{V}_{d6} ($W = 473$, $p \ll 0.05$) inférieur de -64.3 %.

Analyse et discussion

En observant le meilleur score $RMSD$ obtenu par les participants avec et sans haptique, on constate qu'il n'y a pas d'amélioration significative des performances (voir figure 6.5 page 145). L'assistance haptique proposée ne semble pas permettre d'améliorer la collaboration entre les sujets et ne confirme pas l'hypothèse \mathcal{H}_1 . D'ailleurs, la figure 6.6 page 145 montre que le temps mis pour atteindre ce score ne s'est également pas amélioré.

Cependant, une analyse segmentée en fonction des scénarios montre que les outils d'assistance haptique permettent une amélioration sur le complexe de molécules NUS:E:NUSG (scénario 2) mais pas sur la molécule Ubiquitin (scénario 1). Le complexe de molécules NUS:E:NUSG est la tâche la plus complexe à réaliser notamment à cause du nombre importants de résidus à déformer. D'ailleurs, les annotations vidéos ont permis de constater à plusieurs reprises une sorte d'abandon face à la complexité de cette tâche : « On ne fera pas mieux », « On n'arrivera jamais à améliorer le score », « Cette molécule est trop difficile », *etc.* Confrontés à ces difficultés, les sujets ont été plus performants lorsqu'ils étaient assistés par les outils d'assistance haptique.

Le coordinateur est le seul sujet qui ne peut pas effectuer de déformation. Il se consacre alors à l'évaluation des meilleures stratégies pour la réalisation de la tâche. Grâce aux outils d'assistance haptique mis à sa disposition, il peut communiquer plus facilement et plus rapidement ces directives comme expliqué dans la section 6.4.2 page suivante. Ces outils permettent d'augmenter l'attention des opérateurs qui vont effectuer moins d'actions solitaires. Une action solitaire est une action que l'opérateur décide, sans concertation avec les autres membres du groupe et potentiellement, en désaccord avec la stratégie globale adoptée par ses partenaires. Ces actions peuvent ainsi être improductives et éventuellement interrompues par une requête du coordinateur. Elles sont en général relativement brèves dans le temps par rapport aux actions proposées et désignées par le coordinateur.

La figure 6.8 page 146 et la figure 6.9 page précédente montrent que ces actions solitaires diminuent avec la présence des outils d'assistance haptique. En effet, on constate sur la figure 6.8 page 146 que la fréquence des sélections effectuées par les opérateurs diminue avec la présence d'une assistance haptique. Cependant, cette diminution peut être due à deux raisons différentes. Soit les opérateurs ont une tendance à moins travailler ce qui diminue la fréquence totale ; soit ils effectuent des déformations plus longues ce qui diminue le nombre de déformations sur le temps total. La figure 6.9 page précédente montre que la présence des outils d'assistance haptique allonge la durée des sélections ce qui nous permet de déduire que les opérateurs produisent des

déformations plus longues dans le temps. Les outils haptiques proposés ont eu pour effet de diminuer le nombre d'actions solitaires.

La réduction de ces actions solitaires permet de mieux respecter la stratégie commune dirigée par le coordinateur. Les séquences de sélection et donc de déformation sont alors plus longues et moins nombreuses. D'ailleurs, la figure 6.10 page 147 montre que les opérateurs sont plus rapides à atteindre la cible désignée avec l'assistance haptique ce qui leur permet de passer plus de temps à déformer mais moins de temps à chercher des tâches à réaliser.

Nous avons vu que les outils d'assistance haptique pour la désignation aident le coordinateur à imposer une stratégie commune ce qui a pour effet d'améliorer les performances du groupe sur les tâches les plus complexes. L'hypothèse \mathcal{H}_1 est confirmée pour la tâche la plus complexe. Il semble que quelque soit la stratégie, le travail collaboratif sera plus efficace si tous les membres du groupe sont en accord avec la stratégie à suivre.

6.4.2 Amélioration de la communication

Données et tests statistiques

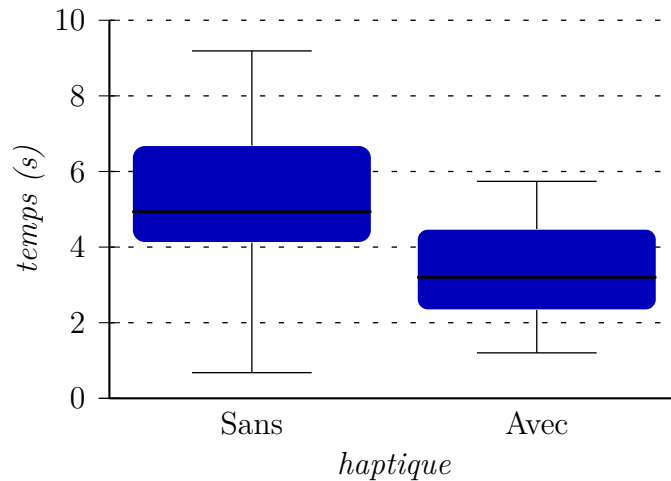


Figure 6.11 – Temps moyen d'acceptation d'une désignation avec et sans haptique

La figure 6.11 présente le temps moyen mis par un opérateur pour accepter une désignation \mathcal{V}_{d5} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur ce temps moyen \mathcal{V}_{d5} ($W = 404$, $p = 0.008$) inférieur de -51.5% .

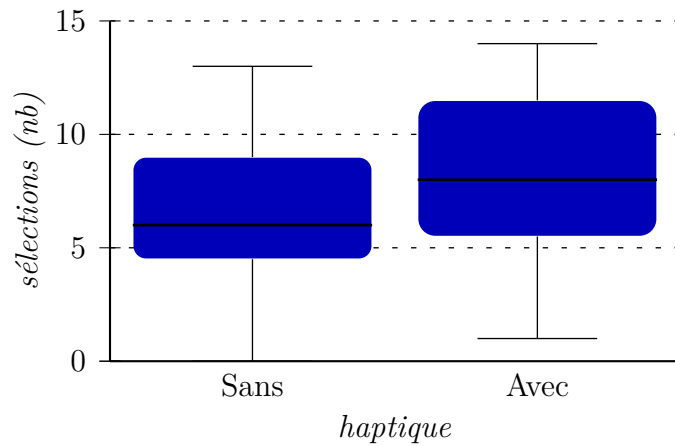


Figure 6.12 – Nombre de désignations acceptées au cours du processus de désignation avec et sans haptique

La figure 6.12 présente le nombre de désignations acceptées au cours du processus de désignation \mathcal{V}_{d7} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur ce nombre de sélections \mathcal{V}_{d7} ($W = 93.5$, $p = 0.004$) supérieur de 25.7%.

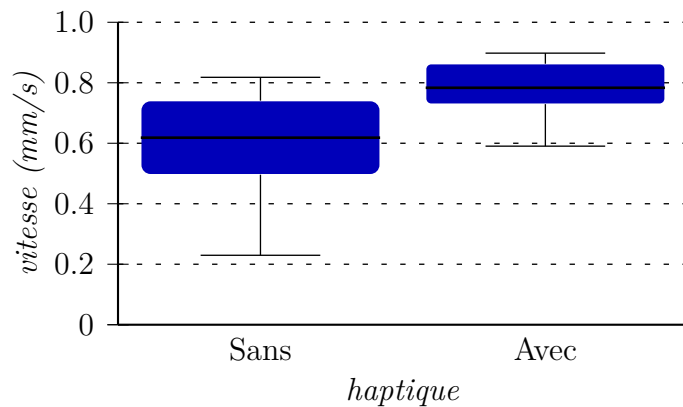


Figure 6.13 – Vitesse moyenne du coordinateur avec et sans haptique

La figure 6.13 présente la vitesse moyenne du coordinateur \mathcal{V}_{d8} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre un effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur ce nombre de sélections \mathcal{V}_{d8} ($W = 15$, $p = 0.004$) supérieur de 25.7%.

La figure 6.14 page ci-contre présente le temps de parole des sujets \mathcal{V}_{d10} en fonction de la présence de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} . L'analyse montre qu'il

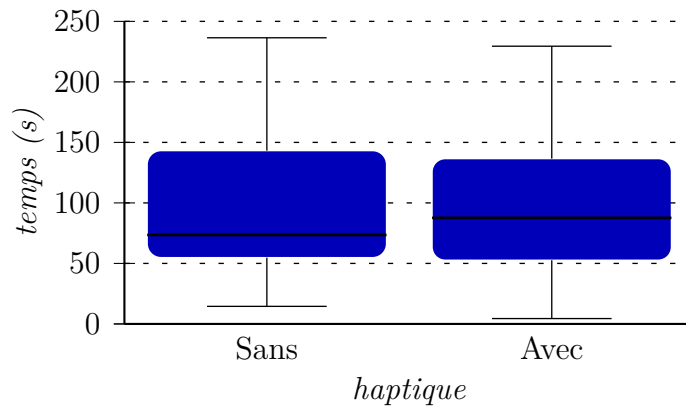


Figure 6.14 – Temps de parole des sujets avec et sans haptique

n'y a pas d'effet significatif de l'assistance haptique \mathcal{V}_{i1} sur le temps de parole \mathcal{V}_{d10} ($W = 871$, $p = 0.554$).

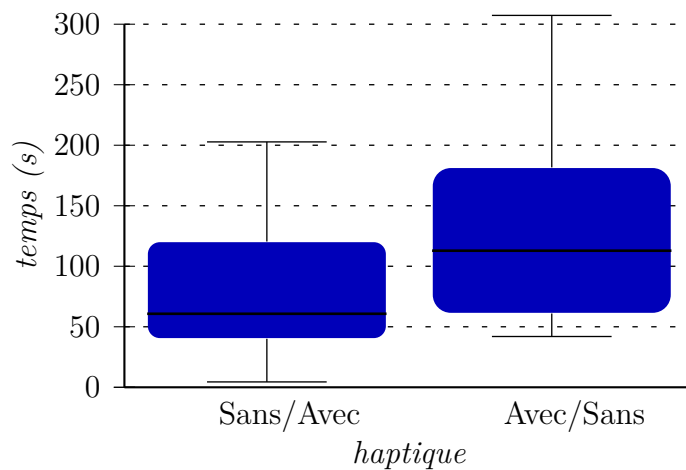


Figure 6.15 – Temps de parole des sujets en fonction de l'ordre de passage de l'assistance haptique

La figure 6.15 présente le temps de parole des sujets \mathcal{V}_{d4} en fonction de l'ordre de passage de l'assistance haptique. L'analyse montre un effet significatif de l'ordre de passage de l'assistance haptique sur le temps de parole \mathcal{V}_{d4} ($W = 849$, $p \ll 0.05$) avec une différence de 81.4 %.

Analyse et discussion

Durant le processus de désignation, deux solutions différentes sont proposées aux opérateurs pour les prévenir qu'une nouvelle désignation vient d'être

effectuée ; une première solution exclusivement visuelle ; une seconde solution visuo-haptique. Pour des désignations exclusivement visuelles, les opérateurs répondent à la désignation soit parce qu'ils ont vu une nouvelle cible en surbrillance, soit parce que le coordinateur leur a communiqué la présence d'une nouvelle cible. Dans le premier cas, le temps de réponse de l'opérateur pour accepter la désignation va dépendre du degré d'attention de celui-ci et de la visibilité de la cible (cible masquée par des atomes ou cible trop éloignée du champ de vision). Dans le second cas, c'est le temps utilisé pour les échanges verbaux et la qualité des explications qui va déterminer le temps de réponse. Dans un cas comme dans l'autre, il faut que l'opérateur soit attentif concernant toute nouvelle désignation ce qui réduit son attention pour les autres événements (conscience périphérique).

La figure 6.11 page 149 nous montre que l'utilisation d'un retour haptique au sein de ce processus de désignation améliore considérablement le temps de réponse. En effet, l'outil d'assistance haptique va signaler directement aux opérateurs qu'une désignation vient d'être effectuée par le coordinateur. Ce moyen de communication permet d'obtenir une réactivité qui ne dépend plus ni du degré d'attention de l'opérateur, ni des interventions verbales du coordinateur. Cela permet de réduire la charge de travail des opérateurs et du coordinateur qu'ils peuvent consacrer à autre chose.

L'avantage de l'utilisation d'un retour haptique dans ce cas est la possibilité d'informer seulement le ou les sujets concernés par l'information. En utilisant des effets visuels, l'affichage partagé n'aurait pas permis de restreindre l'information aux sujets concernés.

De plus, l'amélioration de la communication permet d'améliorer la coordination de la stratégie. En effet, une meilleure perception des désignations permet aux opérateurs d'être plus réactifs à la stratégie du coordinateur (voir figure 6.12 page 150). De plus, leur charge de travail étant allégée par l'assistance haptique, ils sont plus aptes à comprendre la stratégie du coordinateur et à en proposer des améliorations pertinentes.

Étant donné que les opérateurs sont plus rapides à répondre aux désignations, le coordinateur est libéré plus rapidement de chaque requête qu'il crée. Cela lui permet de se consacrer rapidement à la prochaine désignation qu'il effectuera. Cette routine plus rapidement effectuée permet au coordinateur d'avoir un meilleur rendement et de ne pas laisser les opérateurs sans occupation. On constate cette amélioration de rendement par une vitesse moyenne du coordinateur augmentée comme le montre la figure 6.13 page 150.

Pourtant, la figure 6.14 page précédente ne montre pas d'évolution du temps de parole lié à la présence ou à l'absence d'une assistance haptique. L'assis-

tance haptique ne semble pas remplacer les canaux de communication oraux mais semble seulement les remplacer. Cependant, la figure 6.15 page 151 montre que l'ordre de passage a une influence forte sur la communication verbale. En effet, les sujets qui commencent par l'utilisation des outils haptiques produisent significativement plus d'échanges verbaux que les sujets qui commencent sans assistance haptique.

En ce qui concerne les sujets qui commencent sans assistance haptique, ils éprouvent dès le début le besoin de communiquer verbalement puisque qu'aucun autre moyen de communication ou d'assistance à la communication n'est mis à leur disposition. Lorsque dans un second temps, on ajoute un outil haptique de communication, l'apprentissage leur permet de savoir comment utiliser cet outil haptique afin de remplacer certaines phases de communication verbales.

Par opposition, les sujets qui commencent par l'utilisation des outils haptiques n'ont pas eu l'expérience nécessaire pour optimiser l'utilisation de l'assistance haptique par rapport aux échanges verbaux. De plus, lorsque dans la seconde phase de l'expérimentation, on leur enlève un outil de communication, ils doivent redéfinir les méthodes de travail et compensent naturellement ce manque par une augmentation du temps de parole.

On constate dans cette section que les outils d'assistance à la communication remplissent leur rôle en améliorant l'efficacité et la qualité de la communication. Ceci nous permet de valider l'hypothèse \mathcal{H}_2 . En effet, en améliorant la qualité de l'information – signaler directement aux opérateurs qu'une désignation est en cours – le temps mis par un opérateur pour être opérationnel sur cette désignation est réduit et l'efficacité globale du processus de désignation est augmentée. De plus, l'utilisation de ces outils haptiques se substitue en partie aux échanges verbaux ce qui rend les canaux de communication verbaux et haptiques complémentaires.

6.4.3 Évaluation qualitative

Questionnaire d'utilisabilité

Cette dernière expérimentation a été l'occasion d'évaluer l'utilisabilité de la plateforme Shaddock à l'aide du score SUS (*System Usability Scale*) décrit dans la section C.3.1 page 237. L'évaluation par l'ensemble des utilisateurs fournit une note relativement peu élevée ($\mu = 51.1$, $\sigma = 16.8$)¹. Cependant,

1. Pour rappel, les tests d'utilisabilité SUS fournissent des notes comprises entre 0 et 100.

si on restreint ce score aux sujets biologistes, le score augmente ($\mu = 61.2$, $\sigma = 16.7$). La plateforme n'est pas encore suffisante dans l'état actuel selon les utilisateurs. En se basant sur les travaux de BANGOR *et al.* [2009], on peut évaluer notre plateforme comme « OK » ce qui signifie qu'elle se trouve en-dessous de la moyenne globale d'utilisabilité du score d'évaluation SUS mais qu'elle reste une application utilisable. L'hypothèse \mathcal{H}_3 est donc partiellement validé avec ces résultats sont mitigés.

Il faut noter que la difficulté de la tâche a amplifié le principal défaut de la plateforme : la visualisation. En effet, la quasi-totalité des utilisateurs se sont plaint d'une grande difficulté à percevoir la dimension de profondeur dans l'environnement virtuel ce qui engendre une contrainte importante pour la réussite de la tâche. Plusieurs utilisateurs ont évoqué le besoin d'avoir un système de visualisation en 3D stéréoscopique.

La présence de biologistes dans le panel de sujets a également permis de relever plusieurs remarques et conseils pour des développements futurs. En particulier, ils auraient souhaité pouvoir stabiliser un résidu dans sa position finale ou encore pouvoir déformer des structures moléculaires de taille plus importante que les résidus tels que les hélices- α et les feuillets- β . Cependant, ce dernier point a été abordé dans la section 2.4.3 page 50.

Questionnaire sur la conscience périphérique

Les utilisateurs pensent être relativement conscients des actions de leurs partenaires puisqu'ils estiment comprendre les requêtes et consignes de leurs collègues rapidement ($\mu = 2.3$, $\sigma = 0.6$) et qu'ils considèrent être conscients à chaque instant de la position des autres collaborateurs ($\mu = 2.2$, $\sigma = 0.8$)². D'ailleurs, ils pensent que leurs partenaires font de même puisqu'ils n'éprouvent pas le besoin de se signaler ($\mu = 0.8$, $\sigma = 0.7$). La communication nécessaire à la conscience périphérique semble être à sens unique : chaque utilisateur va chercher les informations dont il a besoin pour connaître la position et les agissements de ces partenaires mais il ne cherche pas à signaler ses propres actions. La conscience périphérique repose essentiellement sur les dispositifs de la plateforme, à savoir les affichages visuels et les outils de communication haptique lorsqu'ils sont disponibles.

Cependant, il y a tout de même un cas pour lequel les utilisateurs éprouvent le besoin de se signaler : l'acceptation d'une requête ou d'une consigne ($\mu = 2.3$, $\sigma = 0.8$). Pourtant, les sujets participent à la conscience périphérique

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

collective malgré eux sans le faire ressortir dans le questionnaire. En effet, les annotations vidéos ont permis de relever, à plusieurs reprises, le besoin d'informer les partenaires sur l'état actuel de l'environnement virtuel. Par exemple, le coordinateur indique oralement une cible qu'il a désigné mais qu'un opérateur n'aurait pas vu, ou encore un opérateur peut signaler au coordinateur un résidu ayant besoin d'être rapidement déplacé.

Les sujets sont acteurs de la conscience périphérique en commentant verbalement l'environnement virtuel mais ils ne cherchent pas à être particulièrement visibles et remarqués dans cet environnement. Ils souhaitent surtout que les actions qu'ils réalisent soient clarifiées en cas d'incompréhension ou de litige. Dans ce cas, l'assistance haptique qui leur est proposée ne semble être d'aucune aide. En effet, un test de WILCOXON [1945] montre qu'il n'y a aucun effet significatif des outils de communication haptique sur :

- la compréhension rapide des actions effectuées par les collègues ($W = 18.5$, $p = 0.669$) ;
- le besoin de se signaler ($W = 59$, $p = 0.236$) ;
- le signalement lors de l'acceptation d'une consigne ($W = 27$, $p = 0.109$).

Cependant, on note que les sujets estiment que les consignes peuvent plus souvent se passer d'une communication verbale lorsque les outils de communication haptique sont présents ($\mu = 1.6$, $\sigma = 0.7$). Un test de WILCOXON [1945] montre un résultat assez proche du seuil de significativité ($W = 39$, $p = 0.068$). Les outils d'assistance haptique ont été développés afin de communiquer plus rapidement et sur différentes modalités sensorielles lors de la soumission d'une désignation. Les utilisateurs font ressortir à travers le questionnaire, de façon modérée, une meilleure communication avec assistance haptique ($\mu = 1.8$, $\sigma = 0.7$) que sans assistance haptique ($\mu = 1.5$, $\sigma = 0.7$). Ce résultat mitigé peut s'expliquer par le fait que toutes les consignes ne sont pas assistées par des retours haptiques : seules les consignes de désignation sont assistées.

De plus, le rôle de l'assistance haptique s'est montré particulièrement utile dans la conscience de la position des autres utilisateurs ($W = 23.5$, $p = 0.039$). En effet, les sujets ont estimé connaître les zones de travail des partenaires de manière modérée sans assistance haptique ($\mu = 2$, $\sigma = 0.8$) alors que la présence de retours haptiques semble améliorer cette perception ($\mu = 2.5$, $\sigma = 0.7$). Pourtant, les outils d'assistance haptique n'indique en rien la position mais plutôt le statut des partenaires (en cours d'acceptation, en cours de déformation, *etc.*). Ce résultat nous permet de supposer que certains statuts fournissent une information suffisante pour ne pas avoir besoin de connaître la position. De cette manière, les sujets ont une conscience adaptée à la situation mais suffisante.

6.5 Conclusion

6.5.1 Résumé des résultats

Cette expérimentation avait pour objectif d'évaluer de nouveaux outils de communication entre les membres d'un groupe sur une tâche collaborative étroitement couplée. De plus, nous avons pu confronter la plateforme Shaddock à des bio-informaticiens, ayant une expertise dans le domaine du *docking* moléculaire.

Il ressort de cette expérimentation que les outils d'assistance à la communication permettent d'améliorer significativement la communication entre les membres du groupe avec pour conséquence une amélioration des performances, notamment dans les tâches les plus complexes. L'utilisation de l'haptique à bon escient permet de diminuer les temps de réponse lors des communications tout en adressant les informations à transmettre directement aux membres concernés. De plus, la distribution de cette communication sur différentes modalités permet de distribuer la charge de travail pour chaque utilisateur.

Les questionnaires d'utilisabilité ont également permis de montrer que la plateforme souffre d'un défaut important : la visualisation, notamment les problèmes liés à la perception de la profondeur. Cependant, un système de visualisation stéréoscopique devrait permettre de résoudre en grande partie ce problème. Pour les autres aspects de la plateforme, les biologistes se sont principalement montrés enthousiastes. Cependant, ils ont suggéré différents outils qui, selon leur propre expérience, seraient nécessaires à une utilisation plus pertinente de cette plateforme. En particulier, ils ont émis le désir de pouvoir bloquer la position des atomes après les avoir déplacés dans une position finale. Le second outil dont ils auraient aimé disposer est la déformation de blocs tels que les hélices- α ou les feuillets- β . Un tel outil a été discuté dans la section 2.4.3 page 50 mais les contraintes de manipulation d'un tel ensemble d'atomes entraînerait des modifications importantes sur les métaphores de manipulation. Globalement, la plateforme a séduit les utilisateurs mais a montré quelques faiblesses importantes qui la rende encore trop instable dans l'état actuel.

Avec le questionnaire portant sur la conscience périphérique, on constate qu'une grande partie de cette conscience repose exclusivement sur les outils fournis par la plateforme, à savoir les retours visuels et les retours haptiques lorsqu'ils sont disponibles. En ce sens, l'haptique est pertinent puisqu'il permet d'améliorer les performances en augmentant la conscience périphérique.

6.5.2 Synthèse et perspectives

Cette dernière expérimentation nous a permis de mettre en avant la pertinence de la communication haptique dans le cadre d'une tâche synchrone co-localisée de collaboration étroite. L'outil haptique proposé ne concerne que le processus de désignation mais d'autres aspects de la communication peuvent être explorés. On peut se reporter aux travaux de OAKLEY *et al.* [2001] qui propose des idées intéressantes sur le sujet. Notons par exemple la possibilité de ressentir le curseur de ses partenaires, métaphores qui devrait permettre d'améliorer encore la conscience périphérique. La possibilité d'*attraper* un curseur puis de le *tirer* vers une cible peut également se montrer pertinente.

En ce qui concerne les améliorations de la plateforme Shaddock, de nombreuses propositions ont été suggérées par les bio-informaticiens. Quelques-unes seront intégrées dans un futur proche, d'autres nécessite une réflexion plus approfondie sur la pertinence et sur la faisabilité. Quoiqu'il en soit, devant l'enthousiasme général des sujets pour cette expérimentation relativement longue (≈ 75 mn), Shaddock semble fournir les bases suffisantes pour une plateforme consistante de déformation interactive de molécules en temps-réel.

Conclusion et perspectives

Bibliographie

[ABAGYAN et TOTROV 1994]

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

[ABAGYAN *et al.* 1994]

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

[ALLPORT 1924]

ALLPORT, Floyd H. (1924). *Social psychology*. Anglais. Boston, MA, USA : Houghton Mifflin (cf. pages 20, 21).

[ALTHOFF *et al.* 2007a]

ALTHOFF, Klaus-Dieter, Meike REICHLE, Kerstin BACH, Alexandre HANFT et Regis NEWO (déc. 2007a). « Agent based maintenance for modularised case bases in collaborative multi-expert systems ». Anglais. Dans *Proceedings of Artificial Intelligence, 12th UK Workshop on Case-Based Reasoning*. AI, pages 7–18 (cf. page 32).

[ALTHOFF *et al.* 2007b]

ALTHOFF, Klaus-Dieter, Kerstin BACH, Jan-Oliver DEUTSCH, Alexandre HANFT, Jens MÄNZ, Thomas MÜLLER, Regis NEWO, Meike REICHLE, Martin SCHAAF et Karl-Heinz WEIS (sept. 2007b). « Collaborative Multi-Expert-Systems – Realizing knowledge-product-lines with case factories and distributed learning systems ». Anglais. Dans *Proceedings on the 3rd Workshop on Knowledge Engineering and Software Engineering (KESE 2007)*. Sous la direction de Joachim BAUMEISTER et Dietmar SEIPEL. KESE. Osnabrück (cf. page 32).

[JMOL 2011]

JMOL. JMOL : *an open-source Java viewer for chemical structures in 3D*. Anglais. Sourceforge.net. URL : <http://www.jmol.org/> (visité le 3 juin 2011) (cf. page 44).

[ARUNAN *et al.* 2011]

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

[BACH *et al.* 2010]

BACH, Kerstin, Meike REICHLE et Klaus-Dieter ALTHOFF (2010). Anglais. Dans BICHINDARITZ, Isabelle, Lakhmi C. JAIN, Sachin VAIDYA et Ashlesha JAIN. *Computational intelligence in healthcare 4 : advanced methodologies*. Tome 4. Studies in Computational Intelligence. Springer. Chapitre 9. ISBN : 978-3642144639 (cf. page 32).

[BAKER *et al.* 1999]

BAKER, Michael, Tia HANSEN, Richard JOINER et David R. TRAUM (jan. 1999). « The role of grounding in collaborative learning tasks ». Anglais. Dans DILLENBOURG, Pierre. *Collaborative learning : cognitive and computational approaches*. 2^e édition. Advances in learning and instruction series. Elsevier Science / Pergamon. Chapitre 3, pages 129–147. ISBN : 978-0080430737 (cf. page 29).

[BALES 1950]

BALES, Robert F. (1950). *Interaction process analysis : a method for the study of small groups*. Anglais. Addison-Wesley (cf. pages 112–114, 129, 215).

[BANDURA 1986]

BANDURA, Albert (1986). *Social foundations of thought and action : a social cognitive theory*. Anglais. Prentice-Hall series in social learning theory. Prentice-Hall. ISBN : 0-13-815614-X (cf. page 17).

[BANGOR *et al.* 2009]

BANGOR, Aaron, Philipp KORTUM et James MILLER (mai 2009). « Determining what individual SUS scores mean : adding an adjective rating scale ». Anglais. Dans *Journal of Usability Studies* 4.3, pages 114–123 (cf. page 154).

[BARBIČ et D. L. JAMES 2007]

BARBIČ, Jernej et Doug L. JAMES (août 2007). « Time-critical distributed contact for 6-DoF haptic rendering of adaptively sampled reduced deformable models ». Anglais. Dans *Eurographics Symposium on Computer Animation*. SIGGRAPH. San Diego, CA, USA : Eurographics Association, pages 171–180. ISBN : 978-1-59593-624-4 (cf. page 32).

[BAŞDOĞAN *et al.* 2000]

BAŞDOĞAN, Çağatay, Chih-Hao HO, Mandayam A. SRINIVASAN et Mel SLATER (déc. 2000). « An experimental study on the role of touch in shared virtual environments ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.4, pages 443–460. ISSN : 1073-0516 (cf. page 136).

[BATTER et BROOKS JR. 1972]

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

[BAUGH *et al.* 2011]

BAUGH, Evan H., Sergey LYSKOV, Brian D. WEITZNER et Jeffrey J. GRAY (août 2011). « Real-time PyMOL visualization for Rosetta and PyRosetta ». Anglais. Dans *PLoS ONE* 6.8, e21931 (cf. page 44).

[BERENDSEN *et al.* 1995]

BERENDSEN, Herman J. C., David van der SPOEL et Rudy van DRUNEN (sept. 1995). « GROMACS : a message-passing parallel molecular dynamics implementation ». Anglais. Dans *Computer Physics Communications* 91.1–3, pages 43–56 (cf. pages 10, 46).

[BERGMAN *et al.* 1993]

BERGMAN, Lawrence D., Jane S. RICHARDSON, David C. RICHARDSON et Frederick P. BROOKS Jr. (1993). « VIEW - an exploratory molecular visualization system with user-definable interaction sequences ». Anglais. Dans *Proceedings of the 20th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. SIGGRAPH. Anaheim, CA : ACM, pages 117–126. ISBN : 0-89791-601-8 (cf. pages 9, 10).

[BETBEDER et TCHOUNIKINE 2004]

BETBEDER, Marie-Laure et Pierre TCHOUNIKINE (jan. 2004). « Modélisation et perception de l'activité dans l'environnement Symba ». Dans *Actes de RFIA'04*. Toulouse, France, pages 1217–1225 (cf. page 26).

[BLALOCK et SMITH 1984]

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

[BOLOPION *et al.* 2009]

BOLOPION, Aude, Barthélemy CAGNEAU, Stéphane REDON et Stéphane RÉGNIER (oct. 2009). « Haptic feedback for molecular simulation ». Anglais. Dans *Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*. Saint-Louis, MO, USA, pages 237–242 (cf. page 12).

[BOURNE *et al.* 1998]

BOURNE, Philip E., Mike GRIBSKOV, G. JOHNSON, John L. MORELAND et Helge WEISSIG (jan. 1998). « A prototype Molecular Interactive Collaborative Environment (MICE) ». Anglais. Dans *Proceedings of the Pacific symposium on biocomputing*. Sous la direction de Russ B. ALTMAN, A. Keith DUNKER, Lauwrence HUNTER et Teri E. KLEIN. Maui, HI, USA, pages 118–129 (cf. page 13).

[BOWMAN 1999]

BOWMAN, Douglas A. (juin 1999). « Interaction techniques for common tasks in immersive virtual environments : design, evaluation, and application ». Anglais. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia Institute of Technology (cf. pages 35, 61).

[BROOKE 1996]

BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall MCCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. pages 198, 218, 220, 231).

[B. R. BROOKS *et al.* 1983]

BROOKS, Bernard R., Robert E. BRUCCOLERI, Barry D. OLAFSON, David J. STATES, Sundaramoorthi SWAMINATHAN et Martin KARPLUS (avr. 1983). « CHARMM : a program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 4.2, pages 187–217 (cf. page 48).

[BROOKS JR. *et al.* 1990]

BROOKS JR., Frederick P., Ouh-Young MING, James J. BATTER et Jerome P. KILPATRICK (1990). « Project GROPEHaptic displays for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 17th annual confe-*

rence on Computer graphics and interactive techniques. Dallas, TX, USA : ACM, pages 177–185. ISBN : 0-89791-344-2 (cf. page 10).

[BROWN et FORSYTHE 1974]

BROWN, Morton B. et Alan B. and FORSYTHE (juin 1974). « Robust tests for equality of variances ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 69.346, pages 364–367 (cf. pages 63, 91).

[BRUCE 2006]

BRUCE, Kyle (2006). « Henry S. Dennison, Elton Mayo, and human relations historiography ». Anglais. Dans *Management and Organizational History* 1.2, pages 177–199 (cf. page 113).

[BUISINE *et al.* 2011]

BUISINE, Stéphanie, Guillaume BESACIER, Améziiane AOUSSAT et Frédéric VERNIER (2011). « How do interactive tabletop systems influence collaboration ? » Anglais. Dans *Computers in Human Behavior*. En cours d'impression. ISSN : 0747-5632. DOI : [10.1016/j.chb.2011.08.010](https://doi.org/10.1016/j.chb.2011.08.010) (cf. pages 24, 32).

[BURMANN *et al.* 2010]

BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010). « A NUSE complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 203).

[CAHOUR et PENTIMALLI 2005]

CAHOUR, Béatrice et Barbara PENTIMALLI (avr. 2005). « Conscience périphérique et travail coopératif dans un café-restaurant ». Dans *Activités* 2.1, pages 23–47 (cf. page 26).

[CASE *et al.* 2005]

CASE, David A., Thomas E. CHEATHAM, Tom DARDEN, Holger GOHLKE, Ray LUO, Kenneth M. MERZ, Alexey ONUFRIEV, Carlos SIMMERLING, Bing WANG et Robert J. WOODS (déc. 2005). « The Amber biomolecular simulation programs ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 26.16, pages 1668–1688. ISSN : 1096-987X (cf. page 46).

[CASHER et RZEPA 1995]

CASHER, Omer et Henry S. RZEPA (mai 1995). « A chemical laboratory using explorer EyeChem and the common client interface ». Anglais. Dans *SIGGRAPH Computer Graphics* 29.2, pages 52–54. ISSN : 0097-8930 (cf. page 13).

[CASTRO 1994]

CASTRO, John M. de (sept. 1994). « Family and friends produce greater social facilitation of food intake than other companions ». Anglais. Dans *Physiology & Behavior* 56.3, pages 445–455. ISSN : 0031-9384 (cf. page 21).

[CHAN *et al.* 2008]

CHAN, Andrew, Karon MACLEAN et Joanna MCGRENERE (mai 2008). « Designing haptic icons to support collaborative turn-taking ». Anglais. Dans *International Journal Human-Computer Studies* 66, pages 333–355 (cf. page 137).

[CHANG *et al.* 2002]

CHANG, Angela, Sile O'MODHRAIN, Rob JACOB, Eric GUNTHER et Hiroshi ISHII (juin 2002). « ComTouch : design of a vibrotactile communication device ». Anglais. Dans *Proceedings of the 4th conference on Designing interactive systems : processes, practices, methods, and techniques*. DIS. London, England : ACM, pages 312–320. ISBN : 1-58113-515-7 (cf. page 137).

[CHASTINE 2007]

CHASTINE, Jeffrey W. (2007). « On inter-referential awareness in collaborative augmented reality ». Anglais. Adviser-Zhu, Ying. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia State University. ISBN : 978-0-549-19185-8 (cf. pages 27, 33).

[CHASTINE *et al.* 2006]

CHASTINE, Jeffrey W., Ying ZHU et Jon A. PRESTON (nov. 2006). « A framework for inter-referential awareness in collaborative environments ». Anglais. Dans *International Conference on Collaborative Computing : Networking, Applications and Worksharing*, page 30 (cf. page 27).

[CHASTINE *et al.* 2005]

CHASTINE, Jeffrey W., Jeremy C. BROOKS, Ying ZHU, G. Scott OWEN, Robert W. HARRISON et Irene T. WEBER (2005). « AMMP-Vis : a collaborative virtual environment for molecular modeling ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Monterey, CA, USA : ACM, pages 8–15. ISBN : 1-59593-098-1 (cf. pages 15, 16, 27).

[CHASTINE *et al.* 2007]

CHASTINE, Jeffrey W., Kristine NAGEL, Ying ZHU et Luca YEARSOVICH (mai 2007). « Understanding the design space of referencing in collaborative augmented reality environments ». Anglais. Dans *Proceedings of*

Graphics Interface. GI. Montréal, Canada : ACM, pages 207–214. ISBN : 978-1-56881-337-0 (cf. pages 27, 28).

[CHASTINE *et al.* 2008]

CHASTINE, Jeffrey W., Kristine NAGEL, Ying ZHU et Mary HUDACHEK-BUSWELL (mar. 2008). « Studies on the effectiveness of virtual pointers in collaborative augmented reality ». Anglais. Dans *Proceedings of the IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 117–124. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. page 27).

[CHAVENT *et al.* 2011]

CHAVENT, Matthieu, Antoine VANEL, Alex TEK, Bruno LEVY, Sophie ROBERT, Bruno RAFFIN et Marc BAADEN (oct. 2011). « GPU-accelerated atom and dynamic bond visualization using hyperballs : a unified algorithm for balls, sticks, and hyperboloids ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 32.13, pages 2924–2935. ISSN : 1096-987X (cf. page 203).

[CHIDAMBARAM et TUNG 2005]

CHIDAMBARAM, Laku et Lai Lai TUNG (juin 2005). « Is out of sight, out of mind ? An empirical study of social loafing in technology-supported groups ». Anglais. Dans *Information Systems Research* 16.2, pages 149–168 (cf. pages 24, 25).

[CHRISTEN *et al.* 2009]

CHRISTEN, Barbara, Simone HORNE-MANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar wallaby (*macropus eugenii*) shows that the β 2- α 2 loop is modulated by long-range sequence effects ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 203).

[CHURCH *et al.* 1977]

CHURCH, George M., Joel L. SUSSMAN et Sung-Hou KIM (avr. 1977). « Secondary structural complementarity between DNA and proteins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences* 74.4, pages 1458–1462 (cf. page 6).

[A. CLARK 1998]

CLARK, Andy (mar. 1998). *Being there : putting brain, body, and world together again*. Anglais. Bradford Books. Cambridge, Mass. : MIT Press. ISBN : 978-0262531566 (cf. page 18).

[A. CLARK 2001]

— (mar. 2001). « Reasons, robots and the extended mind ». Anglais. Dans *Mind and Language* 16.2, pages 121–145 (cf. page 18).

[Herbert H. CLARK et SCHAEFER 1989]

CLARK, Herbert H. et Edward F. SCHAEFER (avr. 1989). « Contributing to discourse ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 13.2, pages 259–294. ISSN : 1551-6709 (cf. page 28).

[Herbet H. CLARK et BRENNAN 1991]

CLARK, Herbet H. et Susan E. BRENNAN (1991). « Grounding in communication ». Anglais. Dans. *Perspectives on socially shared cognition*. Sous la direction de Lauren B. RESNICK, John M. LEVINE et Stephanie B. TEASLEY. American Psychological Association. Chapitre 7, pages 127–149 (cf. pages 28, 32).

[COCHRAN *et al.* 2001]

COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVASNIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric β -hairpins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. page 203).

[COCKBURN et WEIR 1999]

COCKBURN, Andy et Philip WEIR (sept. 1999). « An investigation of groupware support for collaborative awareness through distortion-oriented views ». Anglais. Dans *International Journal of Human Computer Interaction* 11.3, pages 231–255 (cf. page 26).

[CONEIN 2004]

CONEIN, Bernard (juil. 2004). « Cognition distribuée, groupe social et technologie cognitive ». Dans *Réseaux* 2.124, pages 53–79 (cf. page 17).

[CUMMINGS *et al.* 1995]

CUMMINGS, Maxwell D., Trevor N. HART et Randy J. READ (mai 1995). « Monte Carlo docking with ubiquitin ». Anglais. Dans *Protein Science* 4.5, pages 885–899. ISSN : 1469-896X (cf. page 9).

[DAUNAY *et al.* 2007]

DAUNAY, Bruno, Alain MICAELLI et Stéphane RÉGNIER (avr. 2007). « 6 DoF haptic feedback for molecular docking using wave variables ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Robotics and Automation*. ICRA, pages 840–845. ISBN : 1-4244-0601-3 (cf. page 12).

[DAUNAY et RÉGNIER 2009]

DAUNAY, Bruno et Stéphane RÉGNIER (2009). « Stable six degrees of freedom haptic feedback for flexible ligand-protein docking ». Anglais. Dans *Computer Aided Design* 41.12, pages 886–895. ISSN : 0010-4485 (cf. pages 12–14).

[DAVIES *et al.* 2005]

DAVIES, R. Andrew, Nigel W. JOHN, John N. MACDONALD et Keith H. HUGHES (mar. 2005). « Visualization of molecular quantum dynamics : a molecular visualization tool with integrated Web3D and haptics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 10th international conference on 3D Web technology*. Web3D. Bangor, United Kingdom : ACM, pages 143–150. ISBN : 1-59593-012-4 (cf. pages 10, 11).

[DELALANDE *et al.* 2009]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAADEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. pages 12, 47, 82).

[DELALANDE *et al.* 2010]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Benoist LAURENT, Marc GUÉROULT, Brigitte HARTMANN et Marc BAADEN (jan. 2010). « Multi-resolution approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device ». Anglais. Dans *Pacific Symposium on Biocomputing*, pages 205–215 (cf. pages 12, 13, 56, 82).

[DELANO 2002]

DELANO, Warren L. (2002). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org> (visité le 25 sept. 2011) (cf. page 9).

[DEWAN et H. SHEN 1998]

DEWAN, Prasun et HongHai SHEN (mar. 1998). « Controlling access in multiuser interfaces ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 5.1, pages 34–62. ISSN : 1073-0516 (cf. page 31).

[DIEHL et STROEBE 1987]

DIEHL, Michael et Wolfgang STROEBE (1987). « Productivity loss in brainstorming groups : toward the solution of a riddle ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 53.3, pages 497–509. ISSN : 0022-3514 (cf. page 113).

[DILLENBOURG *et al.* 1996]

DILLENBOURG, Pierre, David R. TRAUM et Daniel SCHNEIDER (sept. 1996). « Grounding in multi-modal task-oriented collaboration ». Anglais. Dans *Proceedings of the European Conference on Artificial Intelligence in Education*, pages 401–407 (cf. page 29).

[DINDO *et al.* 2009]

DINDO, Marietta, Andrew WHITEN et Frans B. M. de WAAL (mai 2009). « Social facilitation of exploratory foraging behavior in capuchin monkeys (*Cebus apella*) ». Anglais. Dans *American Journal of Primatology* 71.5, pages 419–426. ISSN : 1098-2345 (cf. page 21).

[DIX 1997]

DIX, Alan (1997). « Challenges for cooperative work on the web : an analytical approach ». Anglais. Dans *Computer Supported Cooperative Work* 6.2-3, pages 135–156. ISSN : 0925-9724 (cf. page 29).

[DIX *et al.* 2003]

DIX, Alan, Janet E. FINLAY, Gregory D. ABOWD et Russel BEALE (déc. 2003). *Human-computer interaction*. Anglais. 3^e édition. Pearson/Prentice-Hall. ISBN : 978-0130461094 (cf. page 30).

[DOMINJON 2006]

DOMINJON, Lionel (avr. 2006). « Contribution à l'étude des techniques d'interaction 3D pour la manipulation d'objets avec retour haptique en environnement virtuel à échelle humaine ». Thèse de doctorat. Laval, France : École doctorale d'Angers (cf. page 91).

[DOURISH et BELLOTTI 1992]

DOURISH, Paul et Victoria BELLOTTI (oct. 1992). « Awareness and coordination in shared workspaces ». Anglais. Dans *Proceedings of the 1992 ACM conference on Computer-Supported Cooperative Work*. CSCW. Toronto, Ontario, Canada : ACM, pages 107–114. ISBN : 0-89791-542-9 (cf. page 25).

[DOVE *et al.* 2005]

DOVE, Martin D., Emilio ARTACHO, Toby O. H. WHITE, Richard P. BRUIN, Matt G. TUCKER, Peter MURRAY-RUST, Rob J. ALLAN, Kerstin KLEESE VAN DAM, William SMITH, Rik P. TYER, Ilian T. TODOROV, Wolfgang EMMERICH, Clovis CHAPMAN, Steve C. PARKER, Arnaud MARMIER, Vassil ALEXANDROV, Gareth J. LEWIS, Mehmood S. HASAN, Ashish THANDAVAN, Kate WRIGHT, C. Richard A. CATLOW, Marc BLANCHARD, Nora H. de LEEUW, ZhiMei DU, David G. PRICE, John BRODHOLT et Maria ALFREDSSON (sept. 2005). « The eMinerals project : developing the concept of the virtual organisation to support collaborative work on molecular-scale environmental simulations ». Anglais. Dans *Proceedings on All Hands 2005*. Sous la direction de Simon J. COX et David W. WALKER. Nottingham, United-Kingdom, pages 1058–1065. ISBN : 1-904425-53-4 (cf. pages 14, 15).

[DREES *et al.* 1996]

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

[DREES *et al.* 1998]

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

[ELLIS *et al.* 1991]

ELLIS, Clarence A., Simon J. GIBBS et Gail REIN (jan. 1991). « Groupware : some issues and experiences ». Dans *Communication on ACM* 34.1, pages 39–58 (cf. pages 38, 40).

[ENRIQUEZ *et al.* 2006]

ENRIQUEZ, Mario, Karon MACLEAN et Christian CHITA (nov. 2006). « Haptic phonemes : basic building blocks of haptic communication ». Anglais. Dans *Proceedings of the 8th international conference on Multimodal interfaces*. Banff, Alberta, Canada : ACM, pages 302–309. ISBN : 1-59593-541-X (cf. page 137).

[EWING *et al.* 2001]

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

[FÉREY *et al.* 2008]

FÉREY, Nicolas, Guillaume BOUYER, Christine MARTIN, Patrick BOURDOT, Julien NELSON et Jean-Marie BURKHARDT (mar. 2008). « User needs analysis to design a 3D multimodal protein-docking interface ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2008 IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 125–132. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. pages 56, 82).

[FISCHER et BEENSCH 1894]

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

[FOUSHEE et HELMREICH 1987]

FOUSHEE, H. Clayton et Robert L. HELMREICH (1987). « Group interaction and flight crew performance ». Anglais. Dans *Human factors in modern aviation*. Sous la direction d'Earl L. WIENER et David C. NAGEL, pages 189–227 (cf. pages 17, 19).

[FRIEDMAN 1940]

FRIEDMAN, Milton (mar. 1940). « A comparison of alternative tests of significance for the problem of m rankings ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 11.1, pages 86–92 (cf. pages 63, 91).

[FRIESNER *et al.* 2004]

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

[FUCHS *et al.* 2006]

FUCHS, Philippe, David AMARANTI, Malika AUVRAY, Mohamed BENALI-KOUDJA, Alain BERTHOZ, Éric BERTON, Jean BLOUIN, Simon BOUISSET, Christophe BOURDIN, Jean-Marie BURKHARDT, Luca LATINI CORAZZINI, Gabriel M. GAUTHIER, Édouard GENTAZ, Marie-Dominique GIRAUDO, Moustapha HAFEZ, Yvette HATWELL, Bernard HENNION, Daniel MESTRE, Franck MULTON, Jean-Paul PAPIN, Patrick PÉRUCH, Guillaume RAO, Nicolas TSINGOS, Jean-Louis VERCHER et Olivier WARUSFEL (mar. 2006). *Traité de la réalité virtuelle*. Sous la direction de Philippe FUCHS. 3^e édition. Tome 1. Laval, France : Presses de l'École des Mines de Paris (cf. pages 35, 198).

[GAUTIER *et al.* 2008]

GAUTIER, Mathieu, Claude ANDRIOT et Pierre EHANNO (juin 2008). « 6DoF haptic cooperative virtual prototyping over high latency networks ». Anglais. Dans *Haptics : Perception, Devices and Scenarios*. Sous la direction de Manuel FERRE. Tome 5024. Lecture Notes in Computer Science. Madrid, Espagne : Springer Berlin / Heidelberg, pages 876–885 (cf. page 32).

[GEORGE 1990]

GEORGE, Jennifer M. (avr. 1990). « Personality, Affect, and Behavior in Groups ». Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 75.2, pages 107–116. ISSN : 0021-9010 (cf. page 17).

[GEORGE et L. R. JAMES 1993]

GEORGE, Jennifer M. et Lawrence R. JAMES (oct. 1993). « Personality, affect, and behavior in groups revisited : comment on aggregation, levels of analysis, and a recent application of within and between analysis ». Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 78.5, pages 798–804. ISSN : 0021-9010 (cf. page 17).

[GIBSON 1977]

GIBSON, James J. (avr. 1977). « Perceiving, acting, and knowing : towards an ecological psychology ». Anglais. Dans SHAW, R., J. BRANSFORD et University of MINNESOTA. CENTER FOR RESEARCH IN HUMAN LEARNING. *Perceiving, acting, and knowing : toward an ecological psychology*. Sous la direction de Robert E. SHAW et John D. BRANSFORD. Hoboken, NJ, USA : Lawrence Erlbaum Associates. Chapitre 8, pages 127–143. ISBN : 978-0470990148 (cf. page 19).

[GIBSON 1979]

— (1979). *The ecological approach to visual perception*. Anglais. Boston : Houghton Mifflin. ISBN : 978-0395270493 (cf. page 19).

[GORLATCH et al. 2009]

GORLATCH, Sergei, Jens MÜLLER-IDEN, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER, Hamido FUJITA et Yutaka FUNYU (avr. 2009). « Clayworks : toward user-oriented software for collaborative modeling and simulation ». Anglais. Dans *Knowledge-Based Systems* 22.3, pages 209–215 (cf. page 83).

[GRASSET 2004]

GRASSET, Raphaël (avr. 2004). « Environnement de réalité augmentée 3D coopératif : approche colocalisée sur table ». Thèse de doctorat. Université Joseph Fourier (cf. page 30).

[GRASSET et GASCUEL 2002]

GRASSET, Raphaël et Jean-Dominique GASCUEL (juil. 2002). « MARE : Multiuser Augmented Reality Environment on real table setup ». Anglais. Dans *29th International Conference on Computer Graphics and Interactive Techniques*. SIGGRAPH. San Antonio, Texas, Etats-Unis : ACM, pages 213–213 (cf. page 32).

[GROSDIDIER 2007]

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

[GRÜNWALD 2008]

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

[GUTWIN et GREENBERG 2000]

GUTWIN, Carl et Saul GREENBERG (juin 2000). « The mechanics of collaboration : developing low cost usability evaluation methods for shared workspaces ». Anglais. Dans *Proceedings of the 9th IEEE International Workshops on Enabling Technologies : Infrastructure for Collaborative Enterprises*. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 98–103. ISBN : 0-7695-0798-0 (cf. page 30).

[GUTWIN et al. 1996]

GUTWIN, Carl, Saul GREENBERG et Mark ROSEMAN (août 1996). « Workspace awareness in real-time distributed groupware : framework, widgets, and evaluation ». Anglais. Dans *Proceedings of HCI on People and Computers XI*. London, UK : Springer-Verlag, pages 281–298. ISBN : 3-540-76069-5 (cf. page 26).

[HAAN et al. 2002]

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

[HALGREN et al. 2004]

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

[S. G. HARKINS et SZYMANSKI 1988]

HARKINS, Stephen G. et Kate SZYMANSKI (juil. 1988). « Social loafing and self-evaluation with an objective standard ». Anglais. Dans *Journal of Experimental Social Psychology* 24.4, pages 354–365. ISSN : 0022-1031 (cf. page 24).

[HART et READ 1992]

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

[HASENKNOPF 2005]

HASENKNOPF, Bernold (nov. 2005). « Polyoxométallates fonctionnalisés : de l'assemblage supramoléculaire vers les nanobiotechnologies ». Habilitation à Diriger des Recherches. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (cf. page 5).

[HERTZUM 2008]

HERTZUM, Morten (mar. 2008). « Collaborative information seeking : The combined activity of information seeking and collaborative grounding ». Anglais. Dans *Information Processing and Management* 44.2, pages 957–962. ISSN : 0306-4573 (cf. page 29).

[HERTZUM 2010]

— (nov. 2010). « Breakdowns in collaborative information seeking : A study of the medication process ». Anglais. Dans *Information Processing and Management* 46.6, pages 646–655. ISSN : 0306-4573 (cf. page 29).

[HESS *et al.* 2008]

HESS, Berk, Carsten KUTZNER, David van der SPOEL et Erik LINDAHL (nov. 2008). « GROMACS 4 : algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation ». Anglais. Dans *Journal of chemical theory and computation* 4.3, pages 435–447 (cf. pages 10, 46).

[HOLLAN *et al.* 2000]

HOLLAN, James, Edwin L. HUTCHINS et David KIRSH (juin 2000). « Distributed cognition : toward a new foundation for human-computer interaction research ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.2, pages 174–196. ISSN : 1073-0516 (cf. page 17).

[HOLM 1979]

HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 65, 67, 98, 103–105).

[HOU et SOURINA 2010]

HOU, XiYuan et Olga SOURINA (2010). « Haptic rendering algorithm for biomolecular docking with torque force ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 International Conference on Cyberworlds*. CW. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 25–31. ISBN : 978-0-7695-4215-7 (cf. pages 12, 13).

[P. HUANG *et al.* 2010]

HUANG, Pingguo, Yutaka ISHIBASHI, Norishige FUKUSHIMA et Shinji SUGAWARA (oct. 2010). « Interactivity improvement of group synchronization control in collaborative haptic play with building blocks ». Anglais.

- Dans *Proceedings of the 9th Annual Workshop on Network and Systems Support for Games*. NetGames 2. Piscataway, NJ, USA : IEEE Press, pages 1–6 (cf. page 42).
- [S. HUGHES et LEWIS 2002]
HUGHES, Stephen et Michael LEWIS (sept. 2002). « Attentive interaction techniques for searching virtual environments ». Anglais. Dans *Proceedings of the Human Factors and Ergonomics Society Annual Meeting* 46.26, pages 2159–2163 (cf. page 54).
- [HUITEMA et LIERE 2000]
HUITEMA, Henk et Robert van LIERE (oct. 2000). « Interactive visualization of protein dynamics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 11th IEEE Visualization Conference*. VIS. Salt Lake City, UT, USA : IEEE Computer Society, pages 465–468. ISBN : 0-7803-6478-3 (cf. page 9).
- [HUMPHREY *et al.* 1996]
HUMPHREY, William F., Andrew DALKE et Klaus SCHULTEN (fév. 1996). « VMD : Visual Molecular Dynamics ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics* 14.1, pages 33–38 (cf. pages 9, 44, 198).
- [HUTCHINS 1995]
HUTCHINS, Edwin L. (juil. 1995). « How a cockpit remembers its speeds ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 19.3, pages 265–288. ISSN : 1551-6709 (cf. page 18).
- [HUTCHINS 1996]
— (sept. 1996). *Cognition in the wild*. Anglais. 2^e édition. Cambridge : MIT Press. ISBN : 0262581469 (cf. page 18).
- [IGLESIAS *et al.* 2008]
IGLESIAS, Rosa, Sara CASADO, Teresa GUTIÉRREZ, Alejandro GARCÍA-ALONSO, Wai YU et Alan MARSHALL (jan. 2008). « Simultaneous remote haptic collaboration for assembling tasks ». Anglais. Dans *Multimedia Systems*. Tome 13. 4. Springer, Heidelberg, Germany, pages 263–274 (cf. page 42).
- [INGHAM *et al.* 1974]
INGHAM, Alan G., George LEVINGER, James GRAVES et Vaughn PECKHAM (juil. 1974). « The Ringelmann effect : studies of group size and group performance ». Anglais. Dans *Journal of Experimental Social Psychology* 10.4, pages 371–384. ISSN : 0022-1031 (cf. page 23).

[JIANG *et al.* 2003]

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

[JONES *et al.* 1997]

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

[JUNUZOVIC et DEWAN 2009]

JUNUZOVIC, Sasa et Prasun DEWAN (nov. 2009). « Serial vs. concurrent scheduling of transmission and processing tasks in collaborative systems ». Anglais. Dans *Collaborative Computing : Networking, Applications and Worksharing*. Sous la direction d’Elisa BERTINO, James B. D. JOSHI, Ozgur AKAN, Paolo BELLAVISTA, Jiannong CAO, Falko DRESSLER, Domenico FERRARI, Mario GERLA, Hisashi KOBAYASHI, Sergio PALAZZO, Sartaj SAHNI, Xuemin (Sherman) SHEN, Mircea STAN, Jia XIAOHUA, Albert ZOMAYA et Geoffrey COULSON. Tome 10. Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering 3. Orlando, FL, USA : Springer Berlin Heidelberg, pages 746–759. ISBN : 978-3-642-03354-4 (cf. page 30).

[KARAU et K. D. WILLIAMS 1993]

KARAU, Steven J. et Kipling D. WILLIAMS (oct. 1993). « Social loafing : a meta-analytic review and theoretical integration ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 65.4, pages 681–706. ISSN : 0022-3514 (cf. pages 23, 24).

[KERR et BRUUN 1981]

KERR, Norbert L. et Steven E. BRUUN (juin 1981). « Ringelmann revisited : alternative explanations for the social loafing effect ». Anglais. Dans *Personality and Social Psychology Bulletin* 7.2, pages 224–231 (cf. page 23).

[KESSLER *et al.* 1999]

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

[J.-I. KIM *et al.* 2004]

KIM, Jee-In, SungJun PARK, YoungJin CHOI et SeunHo JUNG (juil. 2004). « Development of a gesture-based molecular visualization tool based on virtual reality for molecular docking ». Anglais. Dans *Bulletin of the Korean Chemical Society* 25.10, pages 1571–1574. ISSN : 0253-2964 (cf. pages 10, 14).

[J. KIM *et al.* 2004]

KIM, Jung, Hyun KIM, Boon K. TAY, Manivannan MUNIYANDI, Mandayam A. SRINIVASAN, Joel JORDAN, Jesper MORTENSEN, Manuel OLIVEIRA et Mel SLATER (juin 2004). « Transatlantic touch : a study of haptic collaboration over long distance ». Anglais. Dans *Presence : Teleoperators and Virtual Environments* 13.3, pages 328–337 (cf. page 42).

[KIRSH 1999]

KIRSH, David (1999). « Distributed cognition, coordination and environment design ». Dans *Proceedings of the European Cognitive Science Society*, pages 1–11 (cf. page 19).

[KLOSOWSKI *et al.* 2002]

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

[KNAUF 2010]

KNAUF, Audrey (mai 2010). *Les dispositifs d'intelligence économique : compétences et fonctions utiles à leur pilotage*. Intelligence économique. L'Harmattan. ISBN : 9782296119321 (cf. page 17).

[KOUTEK *et al.* 2002]

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

[KRAUT 2003]

KRAUT, Robert E. (2003). « Applying social psychological theory to the problems of group work ». Anglais. Dans *HCI models theories and frameworks : toward a multidisciplinary science*. Sous la direction de John M. CARROLL. San Francisco, CA, USA : Morgan Kaufmann. Chapitre 12, pages 325–356 (cf. page 24).

[KRAVITZ et B. MARTIN 1986]

KRAVITZ, David A. et Barbara MARTIN (mai 1986). « Ringelmann rediscovered : the original article ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 50.5, pages 936–941. ISSN : 0022-3514 (cf. pages 22, 23).

[KŘENEK et al. 1999]

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

[KRIZ et al. 2003]

KRIZ, Ronald D., Diana FARKAS, Andrew A. RAY, John KELSO et Raymond E. FLANERY JR. (mar. 2003). « Visual interpretation and analysis of HPC nanostructure models using shared virtual environments ». Anglais. Dans *Proceedings of High Performance Computing : Grand Challenges in Computer Simulations*. San Diego, CA, USA : The Society for Modeling et Simulation International, pages 127–135 (cf. page 15).

[KRUSKAL et WALLIS 1952]

KRUSKAL, William H. et W. Allen WALLIS (déc. 1952). « Use of ranks in one-criterion variance analysis ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 47.260, pages 583–621 (cf. page 93).

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

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

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

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

[LATANÉ et al. 1979]

LATANÉ, Bibb, Kipling WILLIAMS et Stephen HARKINS (juin 1979). « Many hands make light the work : the causes and consequences of social loafing ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 37.6, pages 822–832. URL : <http://content.apa.org/journals/psp/37/6/822> (cf. pages 23, 113, 127, 128).

[LEACH *et al.* 2006]

LEACH, Andrew R., Brian K. SHOICHET et Catherine E. PEISHOFF (oct. 2006). « Prediction of protein-ligand interactions. Docking and scoring : successes and gaps ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 49.20, pages 5851–5855. ISSN : 1522-2667 (cf. page 7).

[Y.-G. LEE et LYONS 2004]

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

[LENNARD-JONES 1924a]

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

[LENNARD-JONES 1924b]

— (oct. 1924b). « On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas ». Anglais. Dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106.738, pages 463–477. ISSN : 09501207 (cf. page 11).

[LEVINE *et al.* 1997]

LEVINE, David, Michael FACELLO, Philip HALLSTROM, Gregory REEDER, Brian WALENZ et Fred STEVENS (avr. 1997). « STALK : an interactive system for virtual molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE Computer in Sciences and Engineering* 4.2, pages 55–65. ISSN : 1070-9924 (cf. pages 11, 55, 82).

[LIKERT 1932]

LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 224, 230, 231, 237).

[LOEFFLER et WINN 2009a]

LOEFFLER, Hannes H. et Martyn D. WINN (sept. 2009a). *Large biomolecular simulation on HPC platforms 1 : experiences with AMBER, Gromacs and NAMD*. Anglais. Rapport technique. Science et Technology Facilities Council (cf. page 46).

[LOEFFLER et WINN 2009b]

— (sept. 2009b). *Large biomolecular simulation on HPC platforms 2 : DL_POLY, Gromacs, LAMMPS and NAMD*. Anglais. Rapport technique. Science et Technology Facilities Council (cf. page 46).

[MANN et WHITNEY 1947]

MANN, Henry Berthold et Donald Ransom WHITNEY (mar. 1947). « On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 65, 67, 98, 103–105).

[MARSH *et al.* 2006]

MARSH, James, Mashhuda GLENCROSS, Steve PETTIFER et Roger HUBBOLD (mai 2006). « A network architecture supporting consistent rich behavior in collaborative interactive applications ». Anglais. Dans *IEEE Transactions on visualization and computer graphics* 12.3, pages 405–416 (cf. page 42).

[MA 2007]

MA, WenJun (déc. 2007). « AMMP-EXTN : a user privacy and collaboration control framework for a multi-user collaboratory virtual reality system ». Anglais. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia State University (cf. page 15).

[MA *et al.* 2007]

MA, WenJun, Ying ZHU, Robert W. HARRISON et G. Scott OWEN (mar. 2007). « AMMP-EXTN : managing user privacy and cooperation demand in a collaborative molecule modeling virtual system ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference*. Los Alamitos, CA, USA : IEEE Computer Society, pages 301–302. ISBN : 1-4244-0905-5 (cf. page 15).

[MAYER 1903]

MAYER, August (1903). « Über Einzel- und Gesamtleistung des Schulkindes : Ein Beitrag zur experimentellen Pädagogik ». Allemand. Thèse de doctorat. Leipzig, German : Université de Zürich (cf. page 20).

[MCCOY *et al.* 1997]

MCCOY, Airlie J., V. CHANDANA EPA et Peter M. COLMAN (mai 1997). « Electrostatic complementarity at protein/protein interfaces ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 268.2, pages 570–584. ISSN : 0022-2836 (cf. page 6).

[MEAGHER et CARLSON 2004]

MEAGHER, Kristin L. et Heather A. CARLSON (oct. 2004). « Incorporating protein flexibility in structure-based drug discovery : using HIV-1 protease as a test case ». Anglais. Dans *Journal of the American Chemical Society* 126.41, pages 13276–13281 (cf. page 8).

[MEUMANN 1904]

MEUMANN, Ernst (1904). *Haus und Schularbeit : Experimente an Kindern Der Volksschule*. Allemand. Kessinger Publishing, LLC. ISBN : 9781161193947 (cf. page 20).

[MOEDE 1927]

MOEDE, Walther (1927). « Die Richtlinien der Leistungs-Psychologie ». Allemand. Dans *Industrielle Psychotechnik* 4, pages 193–209 (cf. page 22).

[MOLL et SALLNÄS 2009]

MOLL, Jonas et Eva-Lotta SALLNÄS (sept. 2009). « Communicative functions of haptic feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of the 4th International Conference on Haptic and Audio Interaction Design*. HAID. Dresden, Germany : Springer-Verlag, pages 1–10. ISBN : 978-3-642-04075-7 (cf. page 137).

[G. M. MORRIS *et al.* 1998]

MORRIS, Garrett M., David S. GOODSSELL, Robert S. HALLIDAY, Ruth HUEY, William E. HART, Richard K. BELEW et Arthur J. OLSON (nov. 1998). « Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and an empirical binding free energy function ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 19.14, pages 1639–1662. ISSN : 1096-987X (cf. page 9).

[M. R. MORRIS 2007]

MORRIS, Meredith Ringel (avr. 2007). « Interfaces for collaborative exploratory web search : motivations and directions for multi-user designs ». Anglais. Dans *Workshop on Exploratory Search and HCI : Designing and Evaluating Interfaces to Support Exploratory Search Interaction*. Sous la direction de Ryan W. WHITE, Steven M. DRUCKER, Gary MARCHIONINI, Marti HEARST et Monica M. C. SCHRAEFEL. SIGCHI/ESI. ACM, pages 9–12 (cf. page 54).

[MUGNY *et al.* 1995]

MUGNY, Gabriel, Jean-Léon BEAUVOIS et Dominique OBERLÉ (1995). *Relations humaines, groupes et influence sociale*. La psychologie sociale. Presses universitaires de Grenoble (cf. page 112).

[J. MÜLLER *et al.* 2006]

MÜLLER, Jens, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER et Sergei GORLATCH (déc. 2006). « Clayworks : a system for collaborative real-time modeling and high-performance simulation ». Anglais. Dans *Second IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing*. e-Science, page 104 (cf. page 83).

[P. MÜLLER 1994]

MÜLLER, Paul (1994). « Glossary of terms used in physical organic chemistry ». Anglais. Dans *Pure and applied chemistry* 66.5, pages 1077–1184 (cf. page 7).

[NAUD *et al.* 2009]

NAUD, Michael, Sehat ULLAH, Paul RICHARD, Samir OTMANE et Malik MALLEM (déc. 2009). « Effect of tactile feedback and viewpoint on task performance in a collaborative virtual environment ». Anglais. Dans *Proceedings of Joint Virtual Reality Conference*. Sous la direction de Michitaka HIROSE, Dieter SCHMALSTIEG, Chadwick A. WINGRAVE et Kunihiro NISHIMURA. EGVE. Lyon, France, pages 19–20 (cf. page 137).

[NEIDIGH *et al.* 2002]

NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 203).

[D. A. NORMAN 1988]

NORMAN, Donald A. (mai 1988). *The psychology of everyday things*. Anglais. New York : Basic Books. ISBN : 978-0385267748 (cf. page 19).

[D. A. NORMAN 1991]

— (juin 1991). *Designing interaction : psychology at the human-computer interface*. Anglais. Sous la direction de John M. CARROLL. New York, NY, USA : Cambridge University Press. ISBN : 0-521-40056-2 (cf. page 19).

[D. A. NORMAN 1999]

— (mai 1999). « Affordance, conventions, and design ». Anglais. Dans *Interactions* 6.3, pages 38–43. ISSN : 1072-5520 (cf. page 19).

[J. NORMAN et HAMZA-LUP 2010]

NORMAN, Jonathan et Felix G. HAMZA-LUP (avr. 2010). « Challenges in the deployment of visuo-haptic virtual environments on the internet ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 Second International Conference on Computer and Network Technology*. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 33–37 (cf. page 42).

[NURISSE 2010]

NURISSE, Alessandra (mai 2010). « Études in silico des interactions protéines-carbohydrates ». Thèse de doctorat. Université Joseph-Fourier - Grenoble I (cf. page 4).

[OAKLEY *et al.* 2001]

OAKLEY, Ian, Stephen A. BREWSTER et Philip D. GRAY (jan. 2001). « Can you feel the force ? An investigation of haptic collaboration in shared editors ». Anglais. Dans *Proceedings of EuroHaptics*. Sous la direction de Chris BABER, M. FAINT, Steven WALL et Alan M. WING, pages 54–59 (cf. pages 136, 137, 157).

[OBEYSEKARE *et al.* 1996]

OBEYSEKARE, Upul, Chas WILLIAMS, Jim DURBIN, Larry ROSENBLUM, Robert ROSENBERG, Fernando GRINSTEIN, Ravi RAMAMURTHI, Alexandra LANDSBERG et William SANDBERG (oct. 1996). « Virtual workbench - a non-immersive virtual environment for visualizing and interacting with 3D objects for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 7th conference on Visualization '96*. VIS. San Francisco, California, USA : IEEE Computer Society Press, pages 345–359. ISBN : 0-89791-864-9 (cf. page 55).

[A. F. OSBORN 1963]

OSBORN, Alex Faickney (1963). *Applied imagination : principles and procedures of creative problem-solving*. Anglais. Scribner (cf. pages 112, 113).

[ÖSTERBERG *et al.* 2002]

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

[OUH-YOUNG *et al.* 1988]

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

[PARK *et al.* 2006]

PARK, SungJun, Jun LEE et Jee-In KIM (nov. 2006). « A collaborative virtual reality environment for molecular modeling ». Anglais. Dans *Lecture notes in computer science* 4282. Sous la direction de ZhiGeng PAN, Adrian CHEOK, Michael HALLER, Rynson W. H. LAU, Hideo SAITO et RongHua LIANG, pages 324–333 (cf. page 14).

[PATEL *et al.* 1999]

PATEL, Vimla L., David R. KAUFMAN, Vanessa G. ALLEN, Edward H. SHORTLIFFE, James J. CIMINO et Robert A. GREENES (sept. 1999). « Toward a framework for computer-mediated collaborative design in medical informatics ». Anglais. Dans *Methods of Information in Medicine* 38.3, pages 158–176. ISSN : 0026-1270 (cf. page 19).

[PATEL *et al.* 2000]

PATEL, Vimla L., Kayla N. CYTRYN, Edward H. SHORTLIFFE et Charles SAFRAN (juin 2000). « The collaborative health care team : the role of individual and group expertise ». Anglais. Dans *Teaching and Learning in Medicine* 12.3, pages 117–132 (cf. page 19).

[PAVLOVIĆ *et al.* 1996]

PAVLOVIĆ, Vladimir I., Rajeev SHARMA et Thomas S. HUANG (oct. 1996). « Gestural interface to a visual computing environment for molecular biologists ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Automatic Face and Gesture Recognition*, page 30 (cf. page 55).

[PETERLÍK 2009]

PETERLÍK, Igor (jan. 2009). « Haptic interaction with non-linear deformable objects ». Anglais. Thèse de doctorat. Brno, Czech Republic : The Faculty of Informatics, Masaryk University (cf. page 82).

[PETTERSEN *et al.* 2004]

PETTERSEN, Eric F., Thomas D. GODDARD, Conrad C. HUANG, Gregory S. COUCH, Daniel M. GREENBLATT, Elaine C. MENG et Thomas E. FERRIN (oct. 2004). « UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 25.13, pages 1605–1612 (cf. pages 14, 44).

[PHILLIPS *et al.* 2005]

PHILLIPS, James C., Rosemary BRAUN, Wei WANG, James GUMBART, Emad TAJKHORSHID, Elizabeth VILLA, Christophe CHIPOT, Robert D. SKEEL, Laxmikant KALÉ et Klaus SCHULTEN (mai 2005). « Scalable molecular dynamics with NAMD ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 26.16, pages 1781–1802 (cf. pages 46, 198).

[PICKENS et GOLOVCHINSKY 2007]

PICKENS, Jeremy et Gene GOLOVCHINSKY (oct. 2007). « Collaborative exploratory search ». Anglais. Dans *Workshop on Human-Computer Interaction and Information Retrieval*. Sous la direction de Michael BERNSTEIN et Robin STEWART. Massachusetts Institute of Technology, Computer Science et Artificial Intelligence Laboratory, pages 21–22 (cf. page 54).

[POLYS *et al.* 2004]

POLYS, Nicholas F., Chris NORTH, Douglas A. BOWMAN, Andrew RAY, Maxim MOLDENHAUER et Chetan DANDEKAR (jan. 2004). « Snap2Diverse : coordinating information visualizations and virtual environments ». Anglais. Dans *Visualization and data analysis* 5295.1, pages 189–200. ISSN : 0277786X (cf. page 55).

[POOLE et HOLLINGSHEAD 2005]

POOLE, Marshall Scott et Andrea B. HOLLINGSHEAD (2005). *Theories of small groups : interdisciplinary perspectives*. Anglais. Sage. ISBN : 9780761930761 (cf. page 113).

[RAREY *et al.* 1997]

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

[RAREY *et al.* 1999]

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

[REDON *et al.* 2005]

REDON, Stéphane, Nico GALOPPO et Ming C. LIN (juil. 2005). « Adaptive dynamics of articulated bodies ». Anglais. Dans *ACM Transactions on Graphics*. SIGGRAPH 24.3, pages 936–945 (cf. page 12).

[RINGELMANN 1913]

RINGELMANN, Maximilien (1913). « Recherches sur les moteurs animés : Travail de l’homme ». Dans *Annales de l’Institut National Argonomique*. Sous la direction de Jean-Baptiste BAILLIÈRE. Tome 12. 2. Librairie Agricole De La Maison Rustique, pages 1–40 (cf. pages 22, 23, 113, 194).

[ROETHLISBERGER *et al.* 1939]

ROETHLISBERGER, Fritz J., William J. DICKSON et Harold A. WRIGHT (nov. 1939). *Management and the worker*. Anglais. Cambridge, Mass : Harvard University Press (cf. pages 21, 112, 113, 123).

[ROSCELLE et TEASLEY 1995]

ROSCELLE, Jeremy et Stephanie D. TEASLEY (1995). « The construction of shared knowledge in collaborative problem solving ». Anglais. Dans *Computer-Supported Collaborative Learning*. Sous la direction de Claire O’MALLEY. Berlin : Springer, pages 69–97 (cf. page 16).

[ROSSI *et al.* 2007]

ROSSI, Romain, Mathieu ISORCE, Sandy MORIN, Julien FLOCARD, Karthik ARUMUGAM, Serge CROUZY, Michel VIVAUDOU et Stéphane REDON (juil. 2007). « Adaptive torsion-angle quasi-statics : a general simulation method with applications to protein structure analysis and design ». Anglais. Dans *Bioinformatics* 23.13, pages i408–i417 (cf. pages 12, 82).

[SALLNÄS *et al.* 2000]

SALLNÄS, Eva-Lotta, Kirsten RASMUS-GRÖHN et Calle SJÖSTRÖM (déc. 2000). « Supporting presence in collaborative environments by haptic force feedback ». Anglais. Dans *ACM Transaction on Computer-Human Interaction* 7.4, pages 461–476. ISSN : 1073-0516 (cf. pages 48, 136).

[SAYLE et MILNER-WHITE 1995]

SAYLE, Roger A. et E. James MILNER-WHITE (sept. 1995). « RASMOL : biomolecular graphics for all ». Anglais. Dans *Trends in biochemical sciences* 20.9, pages 374–376 (cf. page 44).

[SCHERMERHORN *et al.* 2009]

SCHERMERHORN, John, James G. HUNT, Richard N. OSBORN et Mary UHL-BIEN (jan. 2009). *Organizational behavior*. Anglais. 11^e édition. John Wiley & Sons, Inc. ISBN : 978-0470294413 (cf. page 22).

[SCHULZ-GASCH et STAHL 2004]

SCHULZ-GASCH, Tanja et Martin STAHL (déc. 2004). « Scoring functions for protein-ligand interactions : a critical perspective ». Anglais. Dans *Drug Discovery Today : Technologies* 1.3, pages 231–239. ISSN : 1740-6749 (cf. page 7).

[SEASHORE 1899]

SEASHORE, Carl E. (mai 1899). « The dynamogenic factors in pacemaking and competition ». Anglais. Dans *Psychological Review* 6.3, pages 336–338. ISSN : 0033-295X. DOI : [10.1037/h0069301](https://doi.org/10.1037/h0069301) (cf. page 20).

[SHAPIRO et WILK 1965]

SHAPIRO, Samuel S. et Martin B. WILK (déc. 1965). « An analysis of variance test for normality (complete samples) ». Anglais. Dans *Biometrika* 52.3/4, pages 591–611 (cf. pages 63, 91).

[W. SHEN *et al.* 2006]

SHEN, WeiMing, YongMin ZHONG, Bijan SHIRINZADEH, XiaoBu YUAN, Gursel ALICI et Julian SMITH (2006). « A cellular neural network for deformable object modelling ». Anglais. Dans *Information Technology for Balanced Manufacturing Systems*. Tome 220. IFIP International Federation for Information Processing. Springer Boston, pages 329–336 (cf. page 82).

[STADLER *et al.* 1997]

STADLER, Jörg, Ralf MIKULLA et Hans-Rainer TREBIN (juin 1997). « IMD : a software package for molecular dynamics studies on parallel computers ». Anglais. Dans *International Journal of Modern Physics* 8.5, pages 1131–1140 (cf. pages 47, 82, 197).

[STEINER 1972]

STEINER, Ivan Dale (sept. 1972). *Group process and productivity*. Anglais. Social psychology. New York : Academic Press, Inc. ISBN : 978-0012663509 (cf. page 23).

[STONE *et al.* 2010]

STONE, John, Axel KOHLMAYER, Kirby VANDIVORT et Klaus SCHULTEN (déc. 2010). « Immersive molecular visualization and interactive modeling with commodity hardware ». Anglais. Dans *Advances in Visual Computing*. Sous la direction de George BEBIS, Richard BOYLE, Bahram PARVIN, Darko KORACIN, Ronald CHUNG, Riad HAMMOUD, Muhammad HUSSAIN, Tan KAR-HAN, Roger CRAWFIS, Daniel THALMANN, David KAO et Lisa AVILA. Tome 6454. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin / Heidelberg, pages 382–393. ISBN : 978-3-642-17273-1 (cf. page 13).

[STRAUSS 2002]

STRAUSS, Bernd (juil. 2002). « Social facilitation in motor tasks : a review of research and theory ». Anglais. Dans *Psychology of Sport and Exercise* 3.3, pages 237–256. ISSN : 1469-0292. DOI : [10.1016/S1469-0292\(01\)00019-X](https://doi.org/10.1016/S1469-0292(01)00019-X) (cf. page 20).

[SUBAŞI 2006]

SUBAŞI, Erk (juin 2006). « Rigid molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Thèse de doctorat. Koç University (cf. page 11).

[SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006]

SUBAŞI, Erk et Çağatay BAŞDOĞAN (juin 2006). « A new approach to molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of Eurohaptics*, pages 141–145 (cf. page 11).

[SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2008]

— (fév. 2008). « A new haptic interaction and visualization approach for rigid molecular docking in virtual environments ». Anglais. Dans *Presence : Teleoper. Virtual Environ.* 17.1, pages 73–90. ISSN : 1054-7460 (cf. page 11).

[SUBVERSION 2011]

SUBVERSION. APACHE SUBVERSION : *Enterprise-class centralized version control for the masses*. Anglais. Apache Software Foundation. URL : <http://subversion.apache.org/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 32).

[SULEIMAN et WATSON 2008]

SULEIMAN, James et Richard WATSON (nov. 2008). « Social loafing in technology-supported teams ». Anglais. Dans *Computer Supported Cooperative Work*. CSCW 17.4. 10.1007/s10606-008-9075-6, pages 291–309. ISSN : 0925-9724 (cf. pages 23, 24).

[SÜMENGİN et al. 2007]

SÜMENGİN, Selçuk, Mustafa Tolga EREN, Serhat YESİLYURT et Selim BALCISOY (2007). « Real-time deformable objects for collaborative virtual environments ». Anglais. Dans *International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications*. GRAPP (AS/IE), pages 121–128 (cf. page 83).

[SU et LOFTIN 2001]

SU, Simon et R. Bowen LOFTIN (déc. 2001). « A shared virtual environment for exploring and designing molecules ». Anglais. Dans *Communications of the ACM* 44.12, pages 57–58. ISSN : 0001-0782 (cf. page 15).

[SU et al. 2000]

SU, Simon, R. Bowen LOFTIN, David T. CHEN, Yung-Chin FANG et Ching-Yao LIN (oct. 2000). « Distributed collaborative virtual environment : PaulingWorld ». Anglais. Dans *Proceedings of the 10th International Conference on Artificial Reality and Telexistence*. ICAT. Taipei, Taiwan (cf. page 15).

[SZYMANSKI et S. G. HARKINS 1987]

SZYMANSKI, Kate et Stephen G. HARKINS (nov. 1987). « Social loafing and self-evaluation with a social standard ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 53.5, pages 891–897. ISSN : 0022-3514 (cf. page 24).

[TANG et al. 2010]

TANG, ZiYing, GuoDong RONG, XiaoHu GUO et Balakrishnan PRABHAKARAN (mar. 2010). « Streaming 3D shape deformations in collaborative virtual environment ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference*. Waltham, MA, USA, pages 183–186 (cf. page 83).

[TATE *et al.* 2001]

TATE, John G., John L. MORELAND et Philip E. BOURNE (août 2001). « Design and implementation of a collaborative molecular graphics environment ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 19.3–4, pages 280–287. ISSN : 1093-3263 (cf. page 14).

[TAYLOR II *et al.* 2001]

TAYLOR II, Russell M., Thomas C. HUDSON, Adam SEEGER, Hans WEBER, Jeffrey JULIANO et Aron T. HELSER (nov. 2001). « VRPN : a device-independent, network-transparent VR peripheral system ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Virtual Reality Software and Technology. New York, NY, USA : ACM, pages 55–61 (cf. pages 43, 198).

[PYMOL 2011]

PYMOL. *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. Schrödinger, LLC. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 3 juin 2011) (cf. page 44).

[TRIPLETT 1898]

TRIPLETT, Norman (juil. 1898). « The dynamogenic factors in pace-making and competition ». Anglais. Dans *The American Journal of Psychology* 9.4, pages 507–533. ISSN : 00029556 (cf. page 20).

[TRIPLETT 1900]

— (juil. 1900). « The psychology of conjuring deceptions ». Anglais. Dans *The American journal of psychology* 11.4, pages 439–510 (cf. page 193).

[TUCKMAN 1965]

TUCKMAN, Bruce (juin 1965). « Developmental sequence in small groups ». Anglais. Dans *Psychological bulletin* 63.6, pages 384–399 (cf. page 113).

[ULLAH 2011]

ULLAH, Sehat (jan. 2011). « Multi-modal assistance for collaborative 3D interaction : study and analysis of performance in collaborative work ». Anglais. Thèse de doctorat. Université d'Évry (cf. page 137).

[ULLAH *et al.* 2010]

ULLAH, Sehat, Paul RICHARD, Samir OTMANE, Michael NAUD et Malik MALLEM (avr. 2010). « Haptic guides in cooperative virtual environments : design and human performance evaluation ». Anglais. Dans *IEEE Haptics Symposium*, pages 457–462 (cf. page 137).

[VIJAY-KUMAR *et al.* 1987]

VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987). « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. page 203).

[WEGHORST 2003]

WEGHORST, Suzanne (déc. 2003). « Augmented tangible molecular models ». Anglais. Dans *Proceedings of International Conference on Artificial Reality and Telexistence*. ICAT (cf. page 10).

[WEGNER 1987]

WEGNER, Daniel M. (1987). « Transactive memory : a contemporary analysis of the group mind ». Dans *Theories of group behavior*. Sous la direction de Brian MULLEN et George R. GOETHALS, pages 185–208 (cf. page 17).

[WERNERT et HANSON 1999]

WERNERT, Eric A. et Andrew J. HANSON (oct. 1999). « A framework for assisted exploration with collaboration ». Anglais. Dans *Proceedings of the conference on Visualization*. VIS. San Francisco, California, United States : IEEE Computer Society Press, pages 241–248. ISBN : 0-7803-5897-X (cf. page 54).

[WICKENS 1984]

WICKENS, Christopher D. (1984). « Processing resources in attention ». Anglais. Dans *Varieties of Attention*. Academic Press, pages 63–101 (cf. pages 97, 106, 198).

[WILCOXON 1945]

WILCOXON, Frank (déc. 1945). « Individual comparisons by ranking methods ». Anglais. Dans *Biometrics Bulletin* 1.6, pages 80–83. ISSN : 00994987 (cf. pages 144, 155).

[J. C. WOOD et M. C. WOOD 2004]

WOOD, John Cunningham et Michael C. WOOD (2004). *George Elton Mayo : critical evaluations in business and management*. Tome 1. Critical evaluations in business and management. Routledge. ISBN : 9780415323918 (cf. page 113).

[WOOLLEY *et al.* 2010]

WOOLLEY, Anita Williams, Christopher F. CHABRIS, Alex PENTLAND, Nada HASHMI et Thomas W. MALONE (oct. 2010). « Evidence for a collective intelligence factor in the performance of human groups ». Anglais. Dans *Science* 330.6004, pages 686–688 (cf. pages 34, 78).

[YAMMARINO et MARKHAM 1992]

YAMMARINO, Francis J. et Steven E. MARKHAM (avr. 1992). « On the application of within and between analysis : are absence and affect really group-based phenomena ? » Anglais. Dans *Journal of Applied Psychology* 77.2, pages 168–176. ISSN : 0021-9010 (cf. page 17).

[YERKES et DODSON 1908]

YERKES, Robert M. et John D. DODSON (nov. 1908). « The relation of strength of stimulus to rapidity of habit-formation ». Anglais. Dans *Journal of Comparative Neurology and Psychology* 18.5, pages 459–482. ISSN : 1550-7149 (cf. pages 21, 22).

[ZAJONC 1965]

ZAJONC, Robert B. (juil. 1965). « Social facilitation ». Anglais. Dans *Science* 149, pages 269–274 (cf. pages 21, 113, 114, 215).

[ZAJONC 1969]

— (avr. 1969). *Animal social psychology; a reader of experimental studies*. Anglais. Series in psychology. New York, NY, USA : Wiley. ISBN : 9780471981053 (cf. page 21).

[ZHANG 1997]

ZHANG, JiaJie (avr. 1997). « The nature of external representations in problem solving ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 21.2, pages 179–217. ISSN : 1551-6709 (cf. page 18).

[ZHANG 1998]

— (1998). « A distributed representation approach to group problem solving ». Anglais. Dans *Journal of the American Society for Information Science* 49.9, pages 801–809. ISSN : 1097-4571 (cf. page 19).

[ZHANG et D. A. NORMAN 1994]

ZHANG, JiaJie et Donald A. NORMAN (jan. 1994). « Representations in distributed cognitive tasks ». Anglais. Dans *Cognitive Science* 18.1, pages 87–122. ISSN : 0364-0213 (cf. page 18).

[ZHANG et PATEL 2006]

ZHANG, JiaJie et Vimla L. PATEL (2006). « Distributed cognition, representation, and affordance ». Anglais. Dans *Pragmatics & Cognition* 14.2, pages 333–341 (cf. page 18).

Glossaire

bimanuel

Qui se fait avec les deux mains. 83, 91, 96, 97, 101, 102, 106–109, 114, 116, 118, 126, 131

binôme

Groupe constitué de 2 personnes. iv, v, vii, x, 53, 63, 65, 67, 69–75, 77, 81, 83, 84, 91, 93, 95–99, 101–109, 112, 114, 116, 118, 120–127, 131, 206–212, 214, 215, 222, 227, 228

conflit de coordination

Conflit entre deux sujets qui peut survenir lorsque les deux sujets tente d'accéder ou de déformer un objet au même instant. 23, 72, 74, 75, 78, 102, 108, 114, 118, 123, 126, 127, 131, 132, 143

curseur

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 193

docking moléculaire

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe de molécules stable. iii, ix, xv, 3–9, 11–14, 16, 32, 34, 55, 82, 84, 136, 139, 156

effecteur terminal

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. xi, xii, 93, 95–97, 99, 104, 122, 126, 128, 207, 211, 214, 217, 218

facilitation sociale

En anglais *social facilitation* [TRIPLETT 1900], phénomène de groupe où les personnes fournissent plus d'efforts grâce à la présence de partenaires. 20–22, 24, 34, 84, 112, 113, 122, 123, 131

homoscedasticité

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 63, 91

meneur

En anglais *leader*, personne qui dirige un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est celui qui prend les décisions (voir aussi *suiveur*). v, 76, 107, 111, 114, 118, 123, 128, 129, 131, 132, 194, 213, 228

monomanuel

Qui se fait avec une main. 83, 91, 97, 101, 102, 108, 118, 131

monôme

Groupe constitué d'une unique personne. vii, x, 63, 65, 67, 76, 77, 83, 84, 91, 93, 95–99, 101–108, 206, 207, 209–212, 222, 227, 228

paresse sociale

En anglais *social loafing* [RINGELMANN 1913], phénomène de groupe où les personnes fournissent moins d'effort pour la réalisation d'une tâche que s'ils effectuaient la tâche seuls. 22–25, 31, 32, 34, 107, 113, 127, 128, 131

quadrinôme

Groupe constitué de 4 personnes. 116, 118, 120–128, 131, 212–215

réalité virtuelle

C'est une simulation informatique interactive qui immerge un ou plusieurs utilisateurs dans un environnement multimodal. 9

résidu

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. x, xiii, xv, 7, 35, 45, 46, 51, 52, 57, 60, 61, 63, 65, 67–69, 72–74, 78, 79, 85, 86, 89, 91, 101, 106, 115, 116, 118, 140, 143, 148, 154, 201, 207–209, 211, 218

structure informelle

Groupe de personnes sans structures ni hiérarchie. 129, 131, 218

suiveur

En anglais *follower*, personne qui se laisse diriger dans un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est une personne qui ne prend pas de décision (voir aussi *meneur*). 76, 128, 129, 131, 132, 193

trinôme

Groupe constitué de 3 personnes. 138, 139

variable dépendante

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 194

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. 214

variable inter-sujets

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 91, 211, 214

variable intra-sujets

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 63, 91, 207, 211, 214, 217

Acronymes

CUDA

Technologie permettant d'utiliser l'unité graphique d'un ordinateur pour effectuer des calculs à hautes performances. 38

DDL

Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre. ix, 11, 12, 48, 49, 55, 91

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. 41, 56, 78, 79, 82, 84, 115, 138, 200

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. 47, 216

ICM

Méthode de recherche dans un espace de solutions similaire à une descente de gradient. 7, 8

IMD

Programme permettant de connecter le logiciel de visualisation moléculaire `VMD` avec le logiciel de simulation `NAMD` pour une simulation interactive en temps-réel [STADLER *et al.* 1997]. 38, 47, 82, 195

ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel `IMD`. 47

CNRS–LIMSI

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. 206, 210, 213

NAMD

Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS *et al.* 2005]. 38, 46, 47, 51, 82, 139, 195, 200

PCV

Dans une application de réalité virtuelle, les activités d'un sujet peuvent toujours être décomposées en quatre comportements de base, appelés Primitive Comportementale Virtuelle (PCV), qui sont : observer, se déplacer, agir et communiquer [FUCHS *et al.* 2006]. 35, 54, 82, 112, 196

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. xii, 84, 115, 139, 144, 145, 147, 212, 215, 217, 219

SUS

Échelle de notation entre 0 et 100 proposée par BROOKE [1996] permettant d'évaluer l'utilisabilité d'un système. vii, 153, 218, 229, 234, 235

TRM

Cette théorie, élaborée par WICKENS [1984] (MRT pour *Multiple Resource Theory*), propose un modèle pour la gestion des charges de travail pour un humain. 97

UML

C'est un langage graphique de modélisation utilisé principalement en génie logiciel. x, 38, 136

VMD

Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY *et al.* 1996]. x, 9, 13, 38, 43–49, 55, 63, 87, 175, 195, 200, 201

VRPN

Logiciel permettant de connecter différents périphériques de réalité virtuelle à une même application sous forme d'une architecture client/serveur [TAYLOR II *et al.* 2001]. 38, 43, 49, 61, 116, 139, 200

Annexes

Dispositif expérimental

Sommaire

A.1	Matériel expérimental	202
A.2	Présentation des molécules	203
A.2.1	Liste des molécules	203
A.2.2	Représentation des molécules	203
A.3	Outils de manipulation	206

A.1 Matériel expérimental

Les expérimentations se basent sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 37. Dans cette section, nous allons présenter le matériel utilisé et sa disposition.

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

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

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

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

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

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

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

A.2 Présentation des molécules

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

A.2.1 Liste des molécules

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

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

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

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

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

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

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

A.2.2 Représentation des molécules

La représentation des molécules est un domaine de recherche à part entière toujours d'actualité [CHAVENT *et al.* 2011]. En effet, la complexité et l'abondance d'informations à visualiser nécessite des rendus graphiques avancés

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

et complémentaires. De plus, la quantité importante d'informations à représenter peut nécessiter une machine puissante afin de générer un rendu en temps-réel. Heureusement, VMD possède un moteur de rendu graphique avancé (voir section 2.3.1 page 44), aussi bien en terme de choix de rendu qu'en terme d'accélération graphique.

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

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

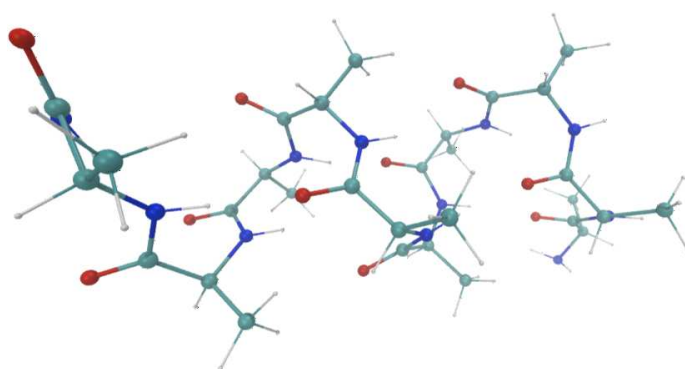


Figure A.1 – Représentation des atomes avec CPK

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

Pour finir, pour des raisons physiques d'interaction, certains atomes sont fixés au niveau de la simulation afin d'éviter des dérives de la molécule. Ces atomes

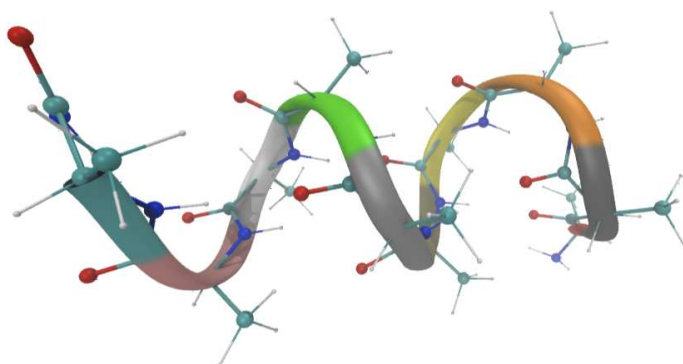


Figure A.2 – Représentation de la structure principale de la molécule avec *NewRibbon*

sont signalés visuellement par une représentation en gris (voir figure A.3 page ci-contre).

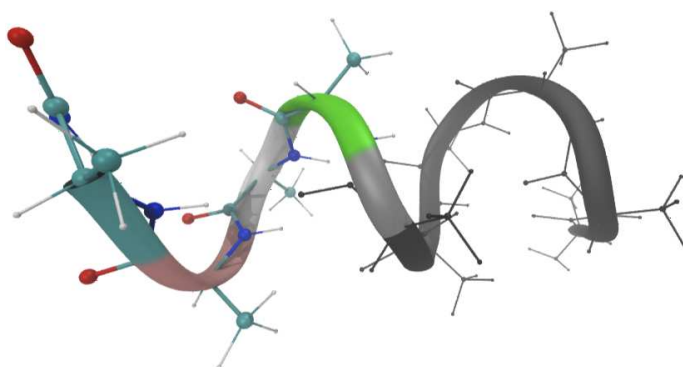


Figure A.3 – Représentation des atomes fixés en gris

A.3 Outils de manipulation

La plateforme de base propose deux interfaces haptiques. Ces deux interfaces haptiques sont utilisées comme interfaces de déformation de la molécule : des outils *tug*. Pour comprendre ce que sont des outils de déformation, on peut se reporter à la section 2.4.2 page 49. Au cours des trois premières expérimentations, seules quelques modifications du rendu visuel associés à ces outils sont effectués. Cependant, la quatrième expérimentation apporte des modifications plus lourdes de cet outil que ce soit au niveau visuel ou au niveau haptique. On pourra se reporter aux chapitres respectifs pour plus de détails.

De plus, un outil de manipulation et d'orientation de la molécule sera proposé sous différentes formes au cours des différentes expérimentations. Ce sera par l'intermédiaire d'un outil *grab* dans la première expérimentation (voir section 3.3.2 page 61), par une souris 3D dans la seconde (voir section 4.3.2 page 87) puis par une simple souris USB dans la dernière expérimentation (voir section 6.3.2 page 139).



Méthode expérimentale

Sommaire

B.1	Première expérimentation	208
B.1.1	Hypothèses	208
B.1.2	Sujets	208
B.1.3	Variables	209
B.1.4	Procédure	211
B.2	Seconde expérimentation	211
B.2.1	Hypothèses	211
B.2.2	Sujets	212
B.2.3	Variables	213
B.2.4	Procédure	214
B.3	Troisième expérimentation	214
B.3.1	Hypothèses	214
B.3.2	Sujets	215
B.3.3	Variables	216
B.3.4	Procédure	217
B.4	Quatrième expérimentation	218
B.4.1	Hypothèses	218
B.4.2	Sujets	218
B.4.3	Variables	219
B.4.4	Procédure	220

B.1 Première expérimentation

B.1.1 Hypothèses

Nous émettons plusieurs hypothèses concernant cette première expérimentation. Les hypothèses concernent les performances des binômes ainsi que leurs stratégies de travail. Nous souhaitons également recueillir les avis des sujets sur l'intérêt qu'ils portent à la collaboration ainsi que sur l'utilisabilité de la plateforme Shaddock.

\mathcal{H}_1 Amélioration des performances en binôme Nous émettons l'hypothèse que les performances des binômes seront meilleures que les performances des monômes grâce à la distribution des charges de travail. Les performances seront évaluées en terme de temps de réalisation de la tâche mais aussi en terme de ressources utilisées comme le nombre de sélections effectuées.

\mathcal{H}_2 Stratégies variables en fonction des binômes Nous émettons l'hypothèse que les binômes adopteront des stratégies de collaboration différentes en fonction des affinités entre les sujets et de leurs connaissances respectives. L'identification des différentes stratégies permettra d'identifier celles qui obtiennent les meilleures performances.

\mathcal{H}_3 Les sujets préfèrent le travail en binôme Nous émettons l'hypothèse que les sujets préfèrent le travail en collaboration grâce à l'aspect social que celui-ci implique.

\mathcal{H}_4 Bonne utilisabilité de la plateforme La dernière hypothèse que nous émettons est que notre plateforme est utilisable dans la forme sous laquelle elle est proposée (intuitivité, ergonomie, *etc.*). Cependant, nous souhaitons identifier les faiblesses à l'aide d'un questionnaire soumis aux sujets.

B.1.2 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une distribution d'âge de $\mu = 27.8$, $\sigma = 7.3$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs, assistants de recherche, étudiants en thèse ou stagiaires dans les domaines suivants :

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

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

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

B.1.3 Variables

Variables indépendantes

\mathcal{V}_{i1} **Nombre de sujets** C'est une variable intra-sujets. \mathcal{V}_{i1} possède deux valeurs possibles : « un sujet » (*c.f. monôme*) ou « deux sujets » (*c.f. binôme*). 24 monômes et 12 binômes ont été testés.

\mathcal{V}_{i2} **Résidu recherché** C'est une variable intra-sujets. \mathcal{V}_{i2} concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans deux molécules (voir table 3.1 page 58). Différents niveaux de complexité caractérisent chaque résidu (voir table 3.2 page 60).

Variables dépendantes

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

L'exploration C'est la phase pendant laquelle les sujets cherchent le résidu. Cette exploration peut se limiter à une exploration visuelle en orientant et en déplaçant la molécule. Elle peut aussi s'effectuer par la déformation de la molécule afin d'atteindre les résidu inaccessibles (derrière ou au centre de la molécule).

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

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

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

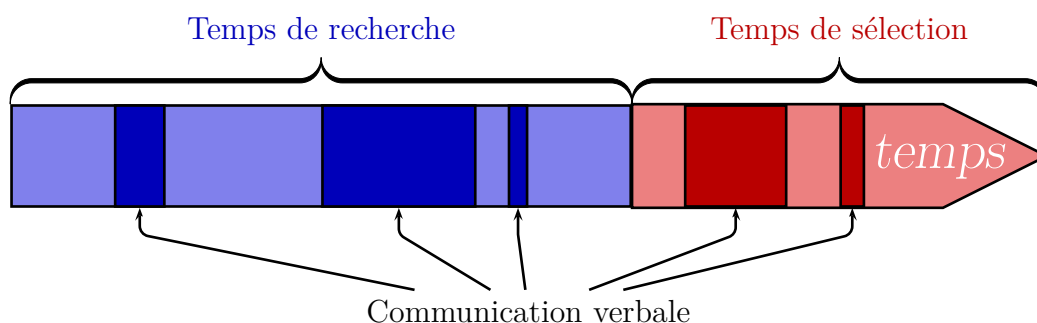


Figure B.1 – Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu

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

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

\mathcal{V}_{d5} **Force moyenne appliquée par les sujets** La force appliquée par chaque sujet sur les atomes pendant la simulation est mesurée en NEWTON. Une valeur moyenne de cette force est calculée pour être analysée.

\mathcal{V}_{d6} **Réponses au questionnaire** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Il est constitué de trois sections, avec une section supplémentaire pour les binômes (voir section C.1 page 224).

B.1.4 Procédure

L'expérimentation débute par une phase d'apprentissage avec la molécule TRP-ZIPPER. Un résidu est proposé et doit être identifier et extrait. L'apprentissage est destiné à familiariser les sujets avec la plateforme, les outils de manipulation et la tâche à réaliser. Cette phase dure maximum 5 mn. L'expérimentateur est disponible pour répondre aux questions des sujets.

Lorsque l'étape d'apprentissage est terminée, nous présentons aux sujets une série de 10 résidus selon la procédure suivante. Le premier résidu est affiché sur l'écran LCD et les sujets débutent la phase de recherche. Lorsque le résidu est identifié, sélectionné puis extrait hors de la molécule, l'application est arrêtée. Ensuite, un second résidu est affiché, l'application est de nouveau démarrée et ainsi de suite pour les 10 résidus à identifier. L'enregistrement audio est démarré à la fin de l'étape d'apprentissage.

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

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

Lorsque les sujets ont réalisé toutes les tâches dans les deux configurations possibles (monôme et binôme), un questionnaire leur est soumis. Chaque sujet répond au questionnaire de manière autonome, sans communication avec son partenaire.

B.2 Seconde expérimentation

B.2.1 Hypothèses

Les hypothèses de cette nouvelle étude sont en grande partie basée sur l'étude précédente. Nous souhaitons confirmer l'intérêt du travail collaboratif dans ce contexte de déformation moléculaire, notamment sur les tâches de forte complexité. De plus, cette expérimentation propose d'étudier l'apprentissage dans le travail collaboratif et d'en observer l'évolution.

\mathcal{H}_1 Amélioration des performances en binôme Nous émettons l’hypothèse que les performances des binômes seront meilleures que les performances des monômes sur cette tâche de déformation. Cette hypothèse est basée sur les conclusions obtenues dans la première étude.

\mathcal{H}_2 Meilleur gain de performances sur les tâches complexes Nous émettons l’hypothèse que plus la tâche est complexe et plus la configuration collaborative produira un gain significatif de performances par rapport à la configuration individuelle.

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

\mathcal{H}_4 Les sujets préfèrent le travail en collaboration Nous souhaitons évaluer auprès des utilisateurs l’intérêt vis-à-vis du travail collaboratif dans ce contexte de collaboration étroite, notre hypothèse étant que les utilisateurs préfèrent le travail en collaboration. Rappelons que les sujets ne sont pas passés que dans une des conditions (monôme ou binôme) ; leur évaluation est effectuée à l’aveugle.

B.2.2 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d’âge de $\mu = 25.9$, $\sigma = 4.8$ 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. Les sujets ne sont pas rémunérés pour l’expérimentation.

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

B.2.3 Variables

Variables indépendantes

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

\mathcal{V}_{i2} **Complexité de la tâche** C'est une variable intra-sujets. Quatre scénarios sont proposés, basés sur différents critères de complexité (voir section 4.3.1 page 84).

\mathcal{V}_{i3} **Le niveau d'apprentissage** C'est une variable intra-sujets. Tous les sujets sont confrontés trois fois à la même série de tâches (les scénarios 1A, 1B, 2A et 2B) sur trois jours successifs afin d'observer l'effet de l'apprentissage en monôme et en binôme.

Variables dépendantes

\mathcal{V}_{d1} **Temps de réalisation** C'est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre la conformation stable. Le temps est limité à 10 mn ; au-delà de cette limite, l'application est arrêtée

\mathcal{V}_{d2} **Nombre de sélections** C'est le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome ou un résidu est sélectionné par un des deux effecteur terminal.

\mathcal{V}_{d3} **Distance passive entre les espaces de travail** Durant chaque tâche, la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux est mesurée. Elle est de l'ordre du centimètre.

\mathcal{V}_{d4} **Distance active entre les espaces de travail** Basée sur la même mesure que \mathcal{V}_{d3} , elle n'est mesurée que lorsque les deux effecteurs terminaux sont en phase de sélection. Lorsqu'au moins un des deux effecteurs terminaux ne possède pas de sélection active, la distance n'est pas mesurée.

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

\mathcal{V}_{d6} **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets (différent pour les monômes et les binômes). Le questionnaire soumis aux sujets est présenté dans la section C.2 page 230.

B.2.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement pendant laquelle les sujets doivent déformer la molécule Prion vers son état stable (deux zones à déformer). Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

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

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

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

B.3 Troisième expérimentation

B.3.1 Hypothèses

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

\mathcal{H}_1 Amélioration des performances en quadrinôme Nous émettons l’hypothèse que les performances des quadrinômes seront meilleures que les performances des binômes. Cette hypothèse vient contredire les conclusions obtenue par ZAJONC [1965] concernant les tâches complexes. Cependant, notre contexte est différent puisqu’il concerne la collaboration étroite et nous pensons que dans ce contexte, il est nécessaire d’augmenter le nombre de sujets pour améliorer les performances, même sur une tâche complexe.

\mathcal{H}_2 Émergence de meneur dans le quadrinôme D’après BALES [1950], les groupes restreints voient émerger un voire deux meneurs, quelque soit la taille du groupe. Nous émettons l’hypothèse que l’émergence d’un meneur aura également lieu dans notre contexte de collaboration étroitement couplée.

\mathcal{H}_3 Le *brainstorming* structure le quadrinôme Dans cette nouvelle expérimentation, nous allons étudier la mise en place d’une période de réflexion, également appelée *brainstorming*, avant le début de la tâche. Nous émettons l’hypothèse que cette période de réflexion sera principalement utile pour les quadrinômes.

B.3.2 Sujets

16 sujets (4 femmes et 12 hommes) avec une moyenne d’âge de $\mu = 26.1$, $\sigma = 5.5$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont étudiants, chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

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

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l’expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est

donnée au commencement de l'expérimentation mais en omettant l'objectif de l'étude.

B.3.3 Variables

Variables indépendantes

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

\mathcal{V}_{i2} **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées et décrites dans la section 5.3.1 page 115.

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

Variables dépendantes

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

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

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

\mathcal{V}_{d4} **Force moyenne appliquée par les sujets** La force appliquée sur les atomes durant la simulation par les sujets est mesurée. C'est la force appliquée lorsqu'un atome est sélectionné. La mesure conservée est la valeur moyenne sur l'ensemble de la tâche réalisée.

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

Les observations pour indiquer aux autres sujets une intention d'action ou pour informer sur l'état actuel de l'environnement ;

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

B.3.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule TRP-CAGE. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Les sujets ayant déjà réalisé une expérience sur la plateforme, cette phase est effectuée pour se remémorer l'environnement et les outils. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontées au scénario 1. Puis dans un second temps, le scénario 2 leur est proposé. Pour chaque scénario, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil RMSD (voir section 4.3.1 page 84) désiré est atteint. L'ordre de ces deux scénarios n'est pas contre-balancé sur les différents groupes de sujets.

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

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

B.4 Quatrième expérimentation

B.4.1 Hypothèses

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

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

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

B.4.2 Sujets

24 sujets (1 femme et 23 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 27.4$, $\sigma = 3.8$ ont participé à cette expérimentation. Ils ont été recrutés au sein du CNRS-LIMSI et de l'IBPC ; ils sont étudiants, chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

Ils ont tous le français comme langue principale à l'exception d'un sujet néerlandais qui parle un français courant. 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. Cependant, tous les sujets sont familiers avec la plateforme Shaddock ou ont déjà eu l'occasion de manipuler des plateformes de manipulation

interactive de molécules. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation mais l'objectif de l'étude n'est pas révélé.

B.4.3 Variables

Variables indépendantes

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

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

Variables dépendantes

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

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

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

\mathcal{V}_{d4} **Temps moyen d'une sélection** C'est le temps moyen que dure une sélection effectuée par un opérateur. Il est calculé en fonction du nombre de sélections de cet opérateur et du temps total de la tâche.

\mathcal{V}_{d5} **Temps moyen pour accepter une cible** C'est le temps mesurée entre le moment où le coordinateur effectue une désignation et le moment où l'opérateur accepte la désignation.

\mathcal{V}_{d6} **Temps moyen pour atteindre une cible acceptée** Lorsqu'un cible est acceptée par un opérateur, cette mesure représente le temps que met l'opérateur pour atteindre et sélectionner le résidu désigné.

\mathcal{V}_{d7} **Nombre de désignations acceptées** Parmi toutes les désignations proposées par le coordinateur, cette mesure comptabilise seulement celles qui ont donné lieu à une acceptation et donc à une déformation.

\mathcal{V}_{d8} **Vitesse moyenne** Cette variable est une mesure de la vitesse moyenne de chaque effecteur terminal. Elle est calculée par intégration numérique des positions successives en fonction du temps.

\mathcal{V}_{d9} **Temps des communications verbales par sujet** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. De plus, la vidéo permet de mettre en relation les différentes phases de l'expérimentation (déformation, désignation, modification du point de vue de la scène, *etc.*) avec la quantité de temps de parole.

\mathcal{V}_{d10} **Questionnaire d'utilisabilité et sur la conscience** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Ce questionnaire est une traduction en français du questionnaire SUS proposé par BROOKE [1996]. La traduction soumise aux sujets est disponible dans la section C.3 page 231. Il nous permet d'obtenir un score d'utilisabilité de la plateforme compris entre 0 et 100. De plus, un questionnaire sur la conscience périphérique est proposé après chaque alternance de la variable indépendante \mathcal{V}_{d1} .

B.4.4 Procédure

La procédure expérimentale se déroule en neuf phases bien distinctes.

Phase 1 : répartition des rôles Pour commencer, avant de pénétrer dans la salle d'expérimentation, il est demandé aux sujets de choisir leurs rôles. Nous nous plaçons dans le cadre d'une *structure informelle* dans laquelle un des sujets sera le coordinateur et les deux autres seront les opérateurs. Les rôles sont expliqués de manière claire mais concise à ce stade de l'expérimentation. Chaque rôle est important et l'expérimentateur insiste sur ce point pour qu'aucun des rôles ne soit choisi par dépit. Puis les sujets sont amenés à se répartir les rôles entre eux. Une fois cette phase terminée, les sujets sont invités à pénétrer dans la salle d'expérimentation et à s'installer : le coordinateur se trouve au milieu et les opérateurs se trouvent de part et d'autre du coordinateur.

Phase 2 : présentation des outils Avant de commencer cette phase, l'enregistrement vidéo est activé. La seconde phase est une phase d'entraînement sur la molécule TRP-CAGE. Elle a pour objectif premier de présenter les outils de désignation et de déformation. De plus, les sujets sont amenés à se familiariser avec l'interface, la tâche à effectuer, les différentes informations visuelles ainsi que des moyens d'évaluation de leur travail.

Phase 3 : introduction de l'haptique Cette troisième phase est également une phase d'entraînement sur la molécule Prion. L'entraînement porte sur l'introduction des assistances haptiques (présentées dans la ?? page ??) sur les outils de désignation et de déformation. De plus, cette seconde molécule d'entraînement permet de familiariser les sujets avec une tâche de nature complexe.

Phase 4 : outil de manipulation Cette nouvelle phase d'entraînement sur la molécule TRP-ZIPPER est destinée à introduire l'outil de manipulation. C'est principalement le coordinateur qui s'entraîne durant cette phase.

Phase 5 : première étape d'évaluation Cette première étape d'évaluation concerne les deux scénarios à réaliser (scénario 1 et scénario 2) sur la molécule Ubiquitin et le complexe de molécules NUSE:NUSG. L'évaluation s'effectue en deux étapes, avec et sans assistance haptique. En fonction des groupes et afin de contrebalancer la variable \mathcal{V}_{11} , la première étape d'évaluation s'effectue avec ou sans haptique.

On présente le scénario 1 puis le scénario 2 toujours dans cet ordre. Pour le scénario 1, seuls les outils d'orientation, de désignation et de déformation sont présents. Tous les outils disponibles sont proposés pour le scénario 2.

Au début de chaque scénario, une période de 1 mn de *brainstorming* est laissée aux sujets pendant laquelle ils peuvent visualiser et explorer la molécule non soumise à la simulation. Ensuite, la phase de déformation est proposée. L'objectif est d'atteindre le score **RMSD** le plus petit possible dans un temps limité à 8 mn. Les sujets peuvent décider de s'arrêter avant les 8 mn s'ils estiment ne pas pouvoir obtenir un meilleur score.

Phase 6 : première partie du questionnaire Lorsque la première étape d'évaluation est terminée, une première partie du questionnaire est proposée aux sujets (voir section C.3 page 231). La section à remplir dépend du premier passage : avec ou sans assistance haptique. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

Phase 7 : deuxième étape d'évaluation La deuxième étape d'évaluation est identique à la première excepté pour la variable \mathcal{V}_{i1} . Si les sujets ont été confrontés à une assistance haptique dans la première étape, alors la seconde étape s'effectuera sans assistance haptique et réciproquement.

Durant cette deuxième étape, il n'y a pas de phase exploratoire étant donné que les sujets connaissent déjà la molécule. Seules les phases de déformations de 8 mn, Ubiquitin puis NUSE:NUSG, sont proposées.

Phase 8 : deuxième partie du questionnaire La seconde partie du questionnaire est similaire à la première partie (voir section C.3 page 231). Les mêmes questions sont abordées mais adaptées pour cette deuxième étape de l'évaluation. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

Phase 9 : questionnaire d'utilisabilité Pour terminer l'expérimentation, les sujets sont invités à remplir un questionnaire d'utilisabilité (voir section C.3 page 231). Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux. Des informations permettant de caractériser le sujet (âge, sexe, main dominante, *etc.*) sont également demandée à la fin du questionnaire. L'enregistrement vidéo est arrêté à la fin de cette phase.



Questionnaires

Sommaire

C.1	Première expérimentation	224
C.2	Seconde expérimentation	230
C.2.1	Questionnaire pour les monômes	230
C.2.2	Questionnaire pour les binômes	230
C.3	Quatrième expérimentation	231
C.3.1	Le questionnaire SUS	237

C.1 Première expérimentation

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



Ne pas remplir →

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

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

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

Et bien sûr, tous les commentaires sont les bienvenus.

1 Vous et votre manipulation

Date du jour – jj / mm / aaaa hh : mm

Nom –

Prénom –

Sexe – F M

Âge –

Main dominante – Gauche Droite

Langue maternelle –

1.1 Prise en main

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

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

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

Annexe C. Questionnaires

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

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

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

		Tâche						
		1	2	3	4	5		
Complexe							Simple	
Difficile							Facile	

Commentaires

1.2 Évaluation

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

		1	2	3	4	5		
Inefficace							Efficace	

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

		1	2	3	4	5		
Pas immergé							Immergé	

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Quel ont été vos moyens pour communiquer avec votre collaborateur ?

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

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

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

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

Commentaires

2 Votre collaborateur et sa manipulation

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

Nom –

Prénom –

2.1 Affinité

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

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

2.2 Évaluation

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Commentaires

Commentaires généraux

C.2 Seconde expérimentation

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

C.2.1 Questionnaire pour les monômes

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

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

C.2.2 Questionnaire pour les binômes

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

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

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

C.3 Quatrième expérimentation

Le questionnaire proposé durant la quatrième et dernière expérimentation contient une traduction en français du questionnaire SUS proposé par BROOKE [1996]. Une explication détaillée de ce questionnaire se trouve dans la section C.3.1 page 237. Le questionnaire est soumis sous un format papier et chaque utilisateur est invité à y répondre seul, sans l'aide de ces partenaires. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

Questionnaire

No

Ne pas remplir ↑

Merci d'avoir participé à cette expérimentation. Nous vous invitons maintenant à répondre à ce questionnaire afin de connaître vos impressions.

Ce questionnaire contient des affirmations. Lisez chacune d'elles attentivement. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion sur la feuille de réponse.

Fortement en Désaccord (FD) si l'affirmation est tout à fait fausse ou si vous êtes fortement en désaccord.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Désaccord (D) si l'affirmation est plutôt fausse ou si vous n'êtes pas d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Neutre (N) si l'affirmation est à peu près également vraie et fausse ou si vous n'arrivez pas à choisir ou si vous n'avez pas d'opinion par rapport à cette affirmation.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Accord (A) si l'affirmation est plutôt vraie ou si vous êtes d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Fortement en Accord (FA) si l'affirmation est tout à fait vraie ou si vous êtes fortement d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Répondez bien comme vous le pensez sans vous soucier des autres. Il n'y a pas de bonne ou de mauvaise réponse et vous n'avez pas besoin de compétence particulière pour remplir ce questionnaire. Le but de ce questionnaire sera atteint si vous exprimez vos opinions aussi exactement que possible.

1 Le système

Dans cette section, vous allez évaluer le système, la plate-forme et les outils que vous avez utilisés. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Je pense que j'aimerais utiliser ce système fréquemment.	FD	D	N	A	FA
J'ai trouvé le système inutilement complexe.	FD	D	N	A	FA
J'ai pensé que le système était facile à utiliser.	FD	D	N	A	FA
Je pense que j'aurais besoin de support technique pour être capable d'utiliser ce système.	FD	D	N	A	FA
J'ai trouvé que les différentes fonctionnalités ont été bien intégrées au système.	FD	D	N	A	FA
J'ai pensé qu'il y avait trop d'incohérence dans ce système.	FD	D	N	A	FA
J'imagine que la plupart des biologistes serait capable d'apprendre à utiliser ce système très rapidement.	FD	D	N	A	FA
J'ai trouvé le système très lourd à utiliser.	FD	D	N	A	FA
Je me suis senti(e) très confiant(e) en utilisant le système.	FD	D	N	A	FA
J'avais besoin d'apprendre beaucoup de choses avant de pouvoir utiliser ce système.	FD	D	N	A	FA

2 Sans haptique

Dans cette section, vous allez évaluer vos impressions pour les cas où aucun complément haptique n'était présent. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Mes partenaires comprennent rapidement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
Les informations visuelles sont utiles pour connaître les actions de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Lorsque je dois communiquer avec mes partenaires, j'utilise seulement les outils visuels .	FD	D	N	A	FA
Je comprends rapidement les actions que mes partenaires souhaitent que je réalise.	FD	D	N	A	FA
Mes partenaires sont attentifs à mes actions sans effort particulier de ma part.	FD	D	N	A	FA
Je dois me signaler explicitement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
J'interroge souvent mes partenaires pour connaître leurs actions.	FD	D	N	A	FA
J'utilise principalement ma voix pour communiquer avec mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je mets du temps à comprendre les consignes de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je dois explicitement indiquer mes actions pour que mes partenaires en soient avertis.	FD	D	N	A	FA

3 Avec haptique

Dans cette section, vous allez évaluer vos impressions pour les cas où les compléments haptiques étaient présents . Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Mes partenaires comprennent rapidement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
Les informations visuelles et haptiques sont utiles pour connaître les actions de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Lorsque je dois communiquer avec mes partenaires, j'utilise seulement les outils visuels et haptiques.	FD	D	N	A	FA
Je comprends rapidement les actions que mes partenaires souhaitent que je réalise.	FD	D	N	A	FA
Mes partenaires sont attentifs à mes actions sans effort particulier de ma part.	FD	D	N	A	FA
Je dois me signaler explicitement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
J'interroge souvent mes partenaires pour connaître leurs actions.	FD	D	N	A	FA
J'utilise principalement ma voix pour communiquer avec mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je mets du temps à comprendre les consignes de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je dois explicitement indiquer mes actions pour que mes partenaires en soient avertis.	FD	D	N	A	FA

4 Vous

Pour terminer, nous aurions besoin de disposer de quelques informations vous concernant. Nous vous rappelons que les données seront traitées de manière confidentielle.

Date du jour jj / mm / aaaa hh : mm

Nom

Prénom

Sexe F M

Âge

Main dominante Gauche Droite

Langue maternelle

Rôle Coordinateur Opérateur

Avez-vous déjà utilisé une interface haptique de type « bras articulé » ?

Aucune	Une à trois fois	Plus de trois fois
<input type="text"/>	<input type="text"/>	<input type="text"/>

Si vous avez des commentaires, n'hésitez pas à en faire part :

C.3.1 Le questionnaire SUS

Les questions

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

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

Évaluation du score SUS

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

Exemple de score SUS

Imaginons un questionnaire rempli de la façon suivante :

- Q1. réponse 5 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$
- Q2. réponse 4 \Rightarrow score $5 - 4 = 1$

Annexe C. Questionnaires

Q3. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$

Q4. réponse 1 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$

Q5. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$

Q6. réponse 3 \Rightarrow score $5 - 3 = 2$

Q7. réponse 2 \Rightarrow score $2 - 1 = 1$

Q8. réponse 4 \Rightarrow score $5 - 4 = 1$

Q9. réponse 5 \Rightarrow score $5 - 1 = 4$

Q10. réponse 2 \Rightarrow score $5 - 2 = 3$

Le score total peut maintenant être calculé.

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