

Résumé

Le *docking* moléculaire consiste à comprendre comment deux molécules s'assemblent pour former un complexe de molécules. C'est un problème complexe pour lequel les algorithmes existants permettent seulement d'obtenir des solutions approximatives.

Récemment, des systèmes collaboratifs ont émergé pour tenter de résoudre ce problème de manière plus fine. Dans ce mémoire, nous allons plus loin dans la collaboration avec un environnement de manipulation moléculaire synchrone et colocalisé. L'objectif est de favoriser la communication pour profiter de la distribution des charges de travail et du partage de connaissances.

Dans cette optique, la plateforme Shaddock a été développée à l'aide de modules de visualisation et de simulation moléculaire largement utilisés par les biologistes. Elle immerge les utilisateurs dans une simulation moléculaire en temps-réel et permet l'interaction avec des interfaces haptiques.

Dans un premier temps, nous étudions différentes configurations de travail collaboratif étroitement couplé à travers trois expérimentations. L'objectif est d'identifier les contraintes d'une telle configuration de travail et de caractériser les stratégies adoptées par les utilisateurs. Il en ressort que la communication, génératrice de conflits, est un point essentiel de la collaboration.

Dans un second temps, des outils basés sur le retour haptique ont été développés pour améliorer la communication. Une dernière expérimentation, faisant intervenir des biologistes, montre la pertinence de la communication haptique pour améliorer la collaboration.

Ce travail de thèse propose de nouvelles méthodes de travail pour le *docking* moléculaire. De plus, nous montrons la pertinence de la modalité haptique dans l'amélioration de la communication entre utilisateurs.

Mots-clefs – *docking* moléculaire – communication haptique – collaboration étroite – interaction haptique

