

Thèse en Informatique

Jean SIMARD

Interactions haptiques collaboratives pour la manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

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

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

Martin DUPOND (examineur) Directeur de recherche au CNRS-LIMSI

Table des matières

Table des matières	iii
Table des figures	vii
Liste des tableaux	ix
I Introduction	1
1 Le sujet	3
1.1 État de l’art	3
1.2 Contexte	3
1.2.1 L’amarrage moléculaire	3
Bibliographie	6
2 SHADDOCK – Système collaboratif pour la manipulation de molécules	7
2.1 Plates-formes collaboratives existantes	7
2.1.1 Architecture du système	8
2.1.2 Vue partagée	9
2.2 Simulation moléculaire en temps-réel	10
2.2.1 Les besoins	10
2.2.2 Les outils existants	11
2.3 Interaction avec la simulation moléculaire	15
2.3.1 Les besoins	15

Table des matières

2.3.2	Interaction par interface haptique	15
2.4	Nouveaux outils pour l'interaction	17
2.4.1	Amélioration de la sélection	17
2.4.2	Déformation par groupe d'atomes	18
2.4.3	Outil de désignation et attraction	19
	Bibliographie	21
 II Étude du travail collaboratif		25
3	La recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire	27
3.1	Introduction	28
3.2	Présentation	28
3.2.1	Objectifs	28
3.2.2	Hypothèses	28
3.3	Dispositif expérimental et matériel	29
3.4	Méthode	30
3.4.1	Sujets	30
3.4.2	Variables	30
3.4.3	Tâche	33
3.4.4	Procédure	35
3.5	Résultats	37
3.5.1	Amélioration des performances en binôme	37
3.5.2	Stratégies de travail	41
3.5.3	Résultats qualitatifs	47
3.6	Synthèse	49
3.6.1	Résumé des résultats	49
3.6.2	Perspectives	50
	Bibliographie	52

4	La manipulation collaborative	53
4.1	Présentation	53
4.1.1	Objectifs	53
4.1.2	Hypothèses	54
4.2	Dispositif expérimental et matériel	55
4.3	Méthode	55
4.3.1	Sujets	55
4.3.2	Variables	56
4.3.3	Tâche	58
4.3.4	Procédure	62
	Bibliographie	63
5	Les dynamiques de groupe	65
III	Propositions pour le travail collaboratif	67
6	Travail collaboratif assisté par haptique	69
6.1	Présentation	69
6.1.1	Objectifs	69
6.1.2	Hypothèses	70
6.2	Dispositif expérimental et matériel	70
6.3	Méthode	71
6.3.1	Sujets	71
6.3.2	Variables	71
6.3.3	Tâche	73
6.3.4	Procédure	74
	Bibliographie	76
IV	Synthèse	77
7	Conclusion et perspectives	79

Table des matières

Glossaire	81
Acronymes	83

Table des figures

1.1	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes	5
2.1	Schéma de la plate-forme SHADDOCK	8
2.2	Illustration des représentations de molécules sur VMD (<i>Visual Molecular Dynamics</i>)	12
2.3	Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL	16
2.4	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés . .	18
2.5	Les quatre étapes de la désignation	19
3.1	Illustration du dispositif expérimental	29
3.2	Schéma des phases de la communication verbale	32
3.3	Répartition des résidus sur les molécules	36
3.4	Temps de complétion par résidu	38
3.5	Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu	39
3.6	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu	39
3.7	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})	41
3.8	Affinité entre les sujets pour chaque binôme	42
3.9	Temps de complétion entre les sujets pour chaque binôme . . .	42
3.10	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme	43
3.11	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection des sujets pour chaque binôme	43
3.12	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme	44

Table des figures

3.13	Couplage physique et structure entre les résidus	46
4.1	Illustration du dispositif expérimental	55
4.2	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible . .	59
6.1	Illustration du dispositif expérimental	70

Liste des tableaux

3.1	Liste des résidus recherchés	34
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>	35
3.3	Synthèse de la procédure expérimentale	38
4.1	Paramètres de complexité des tâches	61
4.2	Synthèse de la procédure expérimentale	62
6.1	Synthèse de la procédure expérimentale	75

Liste des tableaux

Liste des *À faire*

(Section 6.2.0.0) 3 ou 4	70
(Section 6.2.0.0) Images à compléter	70
(Section 6.3.1.0) Nombre de sujets	71
(Section 6.3.2.0) Le questionnaire	72
(Section 6.3.3.0) Deux configurations possibles	73
(Section 6.3.4.0) à déterminer	74
(Section 6.3.4.0) Dix minutes	74

Liste des *À faire*

Première partie

Introduction

Chapitre 1

Le sujet

Sommaire

1.1	État de l’art	3
1.2	Contexte	3
1.2.1	L’amarrage moléculaire	3
	Bibliographie	6

1.1 État de l’art

1.2 Contexte

1.2.1 L’amarrage moléculaire

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

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

Niveau intra-moléculaire Cette déformation au niveau moléculaire fait suite à la déformation inter-moléculaire. L'amarrage de ces deux molécules (ou plus) introduit de nombreuses interfaces qui doivent être optimisées en fonction de critères variés (la complémentarité des surfaces, les forces électrostatiques, les forces de VAN DERWAALS [MÜLLER 1994], *etc.*).

Niveau atomique Cette déformation très fine va chercher à optimiser la position des atomes au niveau de l'interface. L'intérêt de cette étape sera portée sur plusieurs types d'interaction (les ponts hydrogènes, les zones hydrophobiques et hydrophylles, les ponts salins, *etc.*).

Pour chacun de ces différents niveaux, le processus de manipulation est similaire et peut être séparé en sous-tâches (voir figure 1.1 page ci-contre) :

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

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

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

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

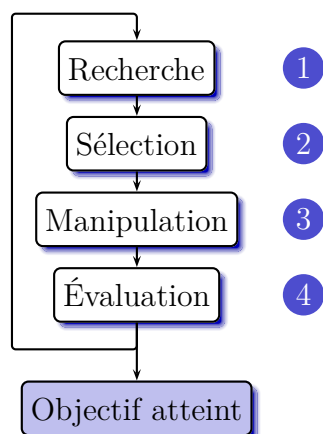


Figure 1.1 – Processus de déformation moléculaire en quatre étapes

Bibliographie

MÜLLER, Paul (1994). « Glossary of terms used in physical organic chemistry ». Anglais. Dans *Pure and applied chemistry* 66.5, pages 1077–1184 (cf. page 4).

Chapitre 2

SHADDOCK – Système collaboratif pour la manipulation de molécules

Sommaire

2.1	Plates-formes collaboratives existantes	7
2.1.1	Architecture du système	8
2.1.2	Vue partagée	9
2.2	Simulation moléculaire en temps-réel	10
2.2.1	Les besoins	10
2.2.2	Les outils existants	11
2.3	Interaction avec la simulation moléculaire	15
2.3.1	Les besoins	15
2.3.2	Interaction par interface haptique	15
2.4	Nouveaux outils pour l'interaction	17
2.4.1	Amélioration de la sélection	17
2.4.2	Déformation par groupe d'atomes	18
2.4.3	Outil de désignation et attraction	19
	Bibliographie	21

2.1 Plates-formes collaboratives existantes

SHADDOCK est le nom de l'Environnement Virtuel Collaboratif (EVC) développé dans le cadre de cette thèse. Les EVCs existants sont nombreux mais

aucun ne convient à nos besoins. Plusieurs choix d’architectures ont été nécessaires et sont exposés dans cette section. Une vue schématique de la plateforme SHADDOCK est détaillée sur la figure 2.1. Les différents éléments de ce schéma seront expliqués dans les sections qui vont suivre. La section 2.1.1 tranchera sur la question de l’architecture pair-à-pair comparée à l’architecture client/serveur. Ensuite, la gestion d’une vue partagée est abordée dans la section 2.1.2 page suivante.

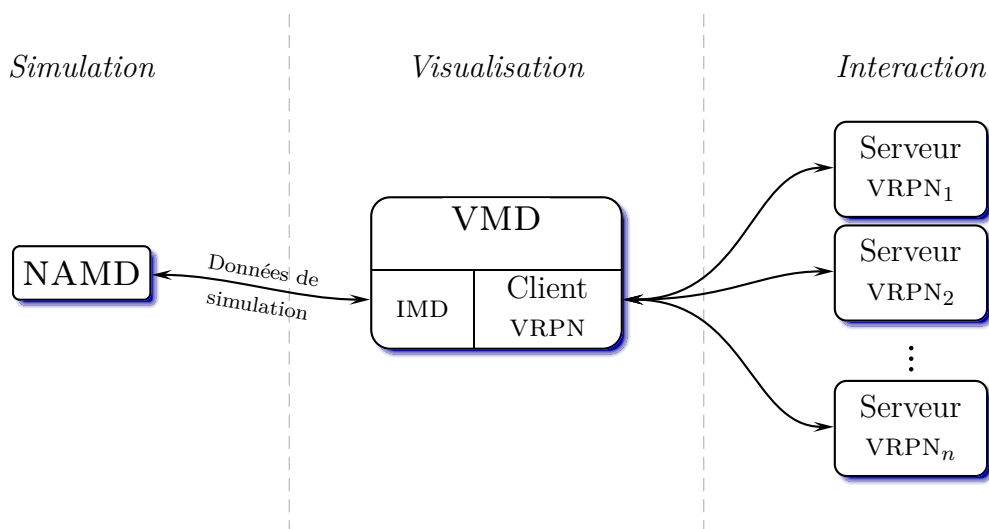


Figure 2.1 – Schéma de la plate-forme SHADDOCK

2.1.1 Architecture du système

Deux types d’architectures sont possibles pour les EVCS : client/serveur ou pair-à-pair. Parmi les architectures pair-à-pair, IGLESIAS et al. [2008] propose une tâche d’assemblage collaboratif assisté par l’haptique. J. KIM et al. [2004] étudie le déplacement collaboratif d’une boîte également assisté par l’haptique. Aucune des deux plate-formes proposées ne souffre d’instabilités notables dans le rendu haptique. Dans les EVCS, l’architecture pair-à-pair permet un rendu haptique relativement stable puisque chaque nœud du système gère sa propre simulation et n’est pas lié au latence voire au coupure du réseau.

Cependant, des travaux proposent également des architectures client/serveur avec des interactions haptiques. P. HUANG et al. [2010] propose une interaction haptique client/serveur pour la manipulation d’un jeu de construction par blocs. NORMAN et HAMZA-LUP [2010] s’intéresse particulièrement aux

influences du réseau sur les interactions visuo-haptiques. L'avantage d'une architecture client/serveur est la cohérence de la simulation entre les différents nœuds du système. En effet, seul le serveur effectue la simulation et ensuite distribue les données de simulation aux différents nœuds.

MARSH et al. [2006] propose une comparaison de ces deux types d'architectures et en vient à la conclusion que l'architecture pair-à-pair est la plus performante en terme de latence. En effet, l'architecture pair-à-pair permet un lien direct entre tous les nœuds du système. Dans le cas d'une architecture client/serveur, le serveur sert toujours d'intermédiaire ce qui augmente le nombre de rebonds des paquets réseaux.

Cependant, les systèmes pair-à-pair sont adaptés pour les environnements virtuels statiques ou faiblement dynamiques. En effet, des latences ou des coupures du réseau introduisent des erreurs de synchronisation entre les simulations ayant pour conséquence une divergence des résultats de simulation entre les différents nœuds. L'architecture client/serveur, bien que moins performante en terme de latence, permettra de conserver une cohérence de la simulation. La simulation est effectuée sur un serveur et les données de simulation sont transmises à tous les nœuds de l'EVC. Ce type d'architecture est très adapté pour les environnements virtuels dynamiques.

Étant donné les besoins en simulation, la plate-forme SHADDOCK est une architecture client/serveur.

2.1.2 Vue partagée

Dans un EVC, un point important est la disponibilité de la vue. Elle peut être soit privée pour chaque utilisateur, soit partagée par tous les utilisateurs.

L'un des premiers travaux sur la collaboration haptique est fourni par BASDOGAN et al. [2000] dans lequel deux utilisateurs placés dans deux pièces différentes doivent effectuer une tâche nécessitant de la synchronisation. OLIVEIRA et al. [2002] propose un EVC intégrant chaque utilisateur comme un avatar dans l'environnement virtuel. Dans les deux cas, chaque utilisateur n'a conscience des autres utilisateurs que par l'intermédiaire de l'EVC. La communication est alors restreinte aux modalités autorisées (strictement haptique et partiellement visuelle dans ces deux cas). L'impossibilité de communiquer oralement peut devenir un frein dans la collaboration.

Être conscient des faits et gestes des autres utilisateurs dans un EVC a prouvé son efficacité. SALLNÄS [2010] a beaucoup travaillé sur l'apport de l'haptique sur la conscience périphérique. Elle montre à plusieurs reprises l'intérêt d'être

conscients des faits et gestes des autres utilisateurs ainsi que de l'état de l'environnement. CASERA et al. [2006] privilégie une vue publique à tous les utilisateurs pour améliorer la conscience périphérique. Enfin, TANG et al. [2006] a exploré la collaboration sur une table tactile : tous les utilisateurs évoluent autour de la même table tactile et possède donc une conscience accrue des faits et gestes de chacun.

SHADDOCK doit permettre la collaboration sur des tâches complexes. L'objectif est d'obtenir une collaboration la plus complète possible afin d'exploiter au maximum le potentiel de chaque utilisateur présent. C'est pourquoi SHADDOCK propose une vue publique permettant à tous les utilisateurs de se trouver au même endroit pour effectuer les tâches demandées. Ils ont ainsi la possibilité de communiquer librement. La vue publique est assurée par un vidéoprojecteur projetant la vue sur un grand écran en face des utilisateurs. Les utilisateurs sont disposés de front face à l'écran.

2.2 Simulation moléculaire en temps-réel

La plate-forme SHADDOCK permet de visualiser des simulations moléculaires en temps-réel. Dans cette section, nous commençons par identifier les besoins en terme de simulation dans la section 2.2.1 puis par exposer les solutions logicielles retenues dans la section 2.2.2 page suivante.

2.2.1 Les besoins

SHADDOCK permet d'effectuer la visualisation des molécules. La visualisation est un processus complexe qui nécessite des rendus variés et complets. En effet, devant le nombre important d'informations disponibles concernant une molécule, il est primordial d'avoir un rendu graphique de molécules clair et complet sans être surchargé. Cette tâche est effectuée par le logiciel VMD (voir section 2.2.2 page ci-contre).

Ensuite, SHADDOCK simule un environnement moléculaire. Un logiciel de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce logiciel puisse interagir avec VMD. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation (par exemple, fixer certains atomes). NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*) est le parfait candidat (voir section 2.2.2 page 14).

Cependant, NAMD n'est pas conçu pour effectuer des simulations en temps-réel. Pour proposer une interaction aux utilisateurs, il est nécessaire d'avoir accès à une simulation interactive et en temps-réel. La solution à ce problème

vient avec IMD (*Interactive Molecular Dynamics*) développé par l'*Institut für Theoretische und Angewandte Physik* (ITAP) et présenté en section 2.2.2 page 14.

2.2.2 Les outils existants

Trois outils permettent de fournir une simulation en temps-réel de molécules : VMD pour la visualisation, NAMD pour la simulation et IMD pour la simulation en temps-réel. Ces trois outils sont présentés dans les sections suivantes.

VMD (*Visual Molecular Dynamics*)

Les outils de visualisation moléculaire disponibles sont relativement nombreux. Parmi les plus populaires, on peut citer PyMOL [SCHRÖDINGER 2010], 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 [SOURCEFORGE.NET 2006] 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 complet pour fournir des rendus graphiques de molécules très complets. Cependant, PyMOL ne permet pas l'affichage de simulations temps-réel ni la manipulation interactive de molécules.

VMD possède également une large gamme de rendus graphiques. Contrairement à PyMOL, VMD est adapté pour le rendu graphique en temps-réel de données de simulation. Il permet également la manipulation interactive de molécules. Les fonctionnalités de VMD sont nombreuses et seulement certaines ont été utilisées dans le cadre des expérimentations qui vont suivre. Elles sont exposées dans les paragraphes suivants.

Les rendus graphiques La possibilité d'avoir accès à des rendus graphiques divers et complets est primordiale pour la visualisation moléculaire. La complexité des molécules, le nombre important d'atomes, les nombreuses meta-informations, les structures particulières nécessitent d'avoir à sa disposition des moyens évolués et variés pour afficher une molécule. Quatre représentations différentes (voir figure 2.2 page suivante) ont été utilisées sur la plate-forme SHADDOCK :

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 importants mais on peut modifier la taille des sphères et des cylindres (voir figure 2.2a);

Licorice représente tous les liens entre les atomes par des cylindres, sans représenter les atomes; la taille des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.2b);

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 2.2c);

HBonds affiche les potentielles liaisons hydrogène sous forme de traits en pointillés; les seuils d'affichage ainsi que les paramètres de la ligne en pointillés (couleur, largeur, etc.) sont modifiables (voir figure 2.2d).

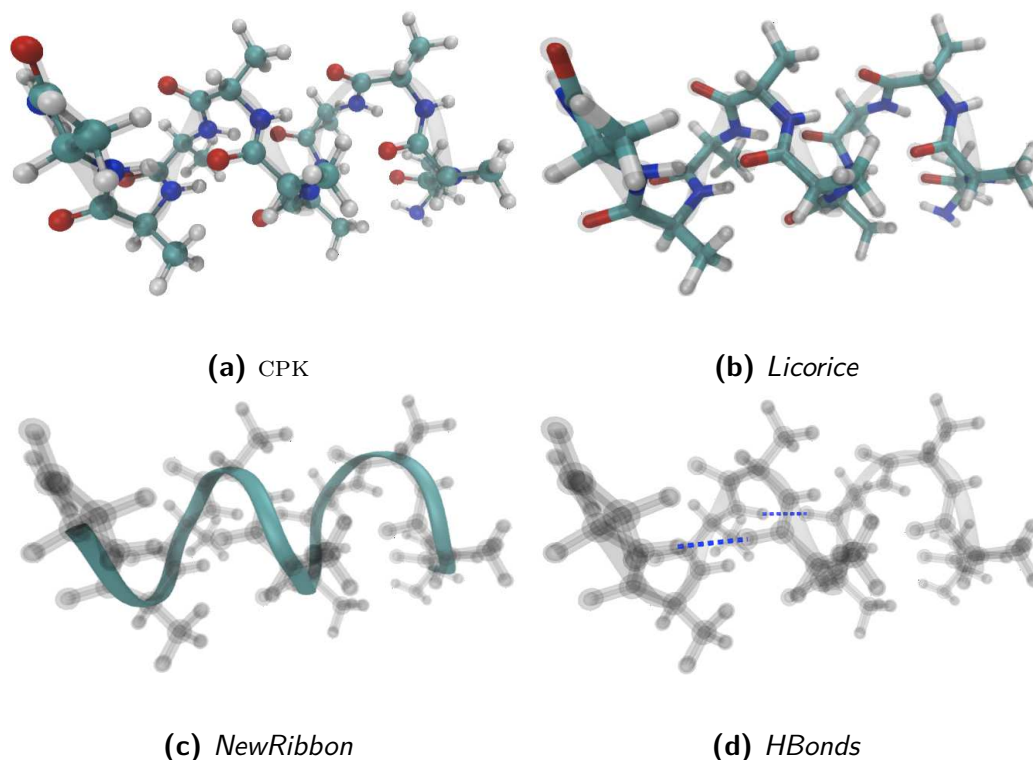


Figure 2.2 – Illustration des représentations de molécules sur VMD

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 :

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

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

Les outils de manipulation La manipulation des molécules est nécessaire sur la plate-forme SHADDOCK. **VMD** dispose déjà de différents outils permettant d'effectuer différentes manipulation sur les molécules.

Par défaut et sans configuration, la souris permet d'orienter la scène sur trois degrés de liberté (DDLs) afin d'observer la molécule sous différents angles.

Il est également possible d'utiliser une souris 3D, automatiquement détectée lorsqu'elle est branchée sur l'ordinateur. Une souris 3D permet de translater et d'orienter la scène. La souris 3D SpaceNavigator® est utilisée dans le cadre de certaines de nos expérimentations.

Enfin, des outils spécifiques sont disponibles par l'intermédiaire d'une connexion avec VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) (voir section 2.3.2 page 16). Ces outils sont liés à des périphériques externes (des interfaces PHANTOM Omni® dans notre cas). Les outils disponibles par défaut dans **VMD** ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 27) et sont :

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 à la simulation).

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 page 17.

La génération automatique de fichier de simulation La simulation nécessite de nombreuses informations dont l'ensemble des liaisons entre atomes, des angles simples, des angles diédraux et des angles de torsion. La simple

description des atomes et de leurs positions (fichier PDB) couplée aux résultats de CHARMM [BROOKS et al. 1983] permet de générer les fichiers nécessaires à la simulation. VMD fournit tous les outils permettant de générer ce fichier nécessaire à la simulation (fichier PSF) par l'intermédiaire d'une extension : *Automatic PSF builder*.

NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*)

Les deux logiciels de simulation principaux existants sont NAMD [PHILLIPS et al. 2005] et GROMACS [BERENDSEN et al. 1995]. Bien que GROMACS soit plus performant que NAMD, surtout dans les dernières versions [HESS et al. 2008] qui offre des performances jusqu'à quatre fois plus rapide que NAMD. Cependant, NAMD est développé par la même université que VMD et l'interaction entre les deux logiciels est donc extrêmement facilitée. De plus, les petites molécules que nous utiliserons lors de nos simulations ne nécessitent pas des performances exceptionnelles. Enfin, NAMD peut être aisément connecté à VMD dans le cadre d'une simulation interactive (voir section 2.2.2) contrairement à GROMACS. C'est pourquoi le logiciel NAMD a été retenu pour notre plate-forme.

Une des fonctionnalités de NAMD utilisée est la possibilité de *fixer* des atomes. En effet, la fixation d'atomes permet d'exclure partiellement certains atomes durant la simulation. 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 est nécessaire pour simuler un point d'ancrage de la molécule dans l'environnement virtuel. Sans ce point d'ancrage, la molécule pourrait dériver et sortir de l'espace de travail des utilisateurs sans possibilité de récupération.

IMD (*Interactive Molecular Dynamics*)

Les logiciels de simulation ne sont pas développés pour des simulations interactives en temps-réel. Cependant, l'ITAP a développé le protocole IMD permettant d'utiliser NAMD couplé à VMD pour des simulations interactives en temps-réel [STADLER et al. 1997]. L'extension *IMD connect* permet de connecter rapidement le logiciel VMD avec la simulation de NAMD.

Cependant, entre le début du développement de notre plate-forme en 2008 et aujourd'hui, une nouvelle solution plus générique a été développée au sein de l'Institut de Biologie Physico-Chimie (IBPC). En effet, MDDRIVER [DE-LALANDE et al. 2009] est un petit logiciel permettant d'utiliser le protocole IMD avec l'autre logiciel de simulation GROMACS. Il se présente sous

la forme d'une interface permettant de choisir le logiciel de simulation ainsi que le logiciel de visualisation. Il permet également de connecter plusieurs logiciels de visualisation à une même simulation. Cependant, cette nouvelle solution n'a pas encore été implémentée dans notre plate-forme mais c'est une amélioration technique qui sera effectuée dans les prochaines versions de la plate-forme.

2.3 Interaction avec la simulation moléculaire

La plate-forme SHADDOCK implémente également un moyen d'interagir avec cette simulation en temps-réel. Les besoins particuliers pour la manipulation sont présentés dans la section 2.3.1 puis les solutions logicielles dans la section 2.3.2.

2.3.1 Les besoins

Afin de pouvoir modifier la simulation en temps-réel, il faut pouvoir manipuler des éléments de la molécule. Il faut donc être capable de sélectionner les atomes puis de leur appliquer une force. L'environnement virtuel est en 3D et il paraît donc nécessaire d'avoir un périphérique de manipulation en 3D. Cette manipulation sera effectuée par le PHANTOM Omni® (voir section 2.3.2).

De plus, SHADDOCK est un EVC : il doit pouvoir accueillir plusieurs utilisateurs. La connexion de plusieurs périphériques apporte des contraintes matérielles et logicielles. Une architecture sous forme client/serveur sera assurée grâce au logiciel VRPN (voir section 2.3.2 page suivante).

2.3.2 Interaction par interface haptique

PHANTOM Omni® et OPENHAPTICS™

Une plate-forme de simulation interactive en temps-réel nécessite des outils d'interaction. Parmi les périphériques d'interaction existants, il faut choisir un périphérique permettant au minimum six DDLs en entrée et au minimum trois DDLs en retour haptique. En effet, l'outil *grab* nécessite six DDLs en entrée et l'outil *tug* nécessite trois DDLs en entrée et trois DDLs en retour haptique. L'interface PHANTOM Omni® [MASSIE et SALISBURY 1994] de

l'entreprise SENSABLE répond aux attentes de la plate-forme SHADDOCK (voir figure 2.3).



Figure 2.3 – Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL

À l'origine, les interfaces haptiques de SENSABLE étaient programmables à l'aide de l'interface de programmation (API) GHOST [SENSABLE 2002]. Le travail de ITKOWITZ et al. [2005] a permis de fournir une nouvelle API plus facile à utiliser : OPENHAPTICS™. C'est à partir de cette API que les interfaces haptiques sont utilisées sur SHADDOCK.

VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*)

VMD offre un moyen simple et relativement universel de connecter un périphérique. En effet, il gère les connexions de périphériques par l'intermédiaire de VRPN [TAYLOR II et al. 2001]. VRPN fonctionne sous la forme d'une architecture client/serveur où VMD est l'application cliente. L'interface haptique est connectée physiquement à un autre ordinateur (le même ordinateur le cas échéant) et un serveur VRPN communique avec cette interface. C'est seulement par l'intermédiaire de VRPN et à travers le réseau *Ethernet* que VMD va percevoir les mouvements de l'interface haptique et lui envoyer les efforts à fournir. La compilation de VRPN en tant que serveur de PHANTOM Omni® sous le système d'exploitation LINUX (UBUNTU v10.04) a demandé quelques modifications dans le code. Ces modifications ont été soumises au développeur de VRPN qui les a intégrées dans les dernières versions.

L'avantage de cette architecture est la possibilité d'ajouter autant de serveurs et donc autant d'interfaces haptiques que voulu. Cependant, cela suppose également d'avoir autant d'ordinateurs que de serveurs ce qui complique une

logistique complexe. On pourra noter que la chaleur dégagée par l'ensemble de ces machines additionnée à celle du vidéo-projecteur provoque des conditions d'expérimentation rapidement désagréables. C'est pourquoi aucune des expérimentations proposées ne durait plus de 30 mn ou, le cas échéant, une pause est effectuée au bout de 30 mn afin d'aérer la salle d'expérimentation.

2.4 Nouveaux outils pour l'interaction

Durant les différentes études présentées dans la [partie II page 27](#), les analyses et les remarques d'utilisateurs ont permis d'améliorer les outils d'interaction et d'en proposer de nouveaux. Le développement de ces nouveaux outils a nécessité une modification du programme VMD par extension des outils déjà existants. Des fonctionnalités ont été ajoutées et sont présentées dans les sections suivantes.

2.4.1 Amélioration de la sélection

Durant le processus de recherche et de sélection, les utilisateurs ont souvent évoqué le besoin de connaître en continu leur position et de savoir à priori l'élément qui va être sélectionné. Pour que les utilisateurs connaissent à chaque instant l'élément qui peut être sélectionné, une information visuelle met en surbrillance l'élément pointé à chaque instant. La mise en surbrillance est un agrandissement en transparence de l'élément pointé. La couleur de cette mise en surbrillance est de la même couleur que le curseur de l'utilisateur.

Cependant, lorsque seul un atome est mis en surbrillance, il peut être difficile de l'apercevoir. En effet, le nombre important d'atomes d'une molécule peut surcharger le rendu graphique. C'est pourquoi, l'ensemble du résidu auquel appartient l'atome pointé est également mis en surbrillance. Seul l'atome pointé est agrandi.

Une fois l'élément pointé, l'utilisateur peut sélectionner l'élément. Lorsque les utilisateurs sélectionnent l'élément, la surbrillance passera de la transparence à l'opacité. Une illustration des effets visuels relatifs au pointage et à la sélection est affichée sur la [figure 2.4 page suivante](#).

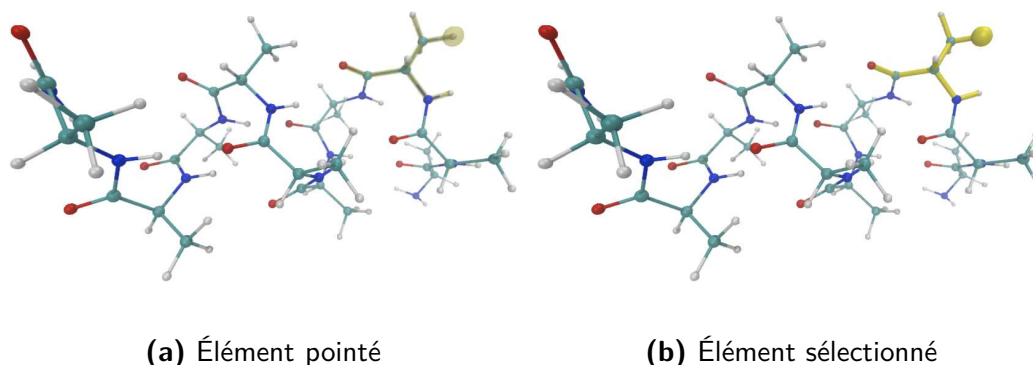


Figure 2.4 – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

2.4.2 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.

Tout d'abord, la déformation d'une molécule atome par atome est un processus très fastidieux. Il serait plus efficace de déplacer un groupe d'atomes en une seule fois.

De plus, l'application d'un effort sur un atome provoque l'étirement de la molécule. Au repos, la molécule est dans état relativement stable. Déplacer un atome perturbe cet état de stabilité. De plus, certains atomes sont fortement liés et les éloigner peut perturber grandement l'état de stabilité. Il est donc préférable de déplacer tous ces atomes liés en une seule manipulation.

C'est pourquoi un outil appliquant un effort à un groupe d'atomes permet de déplacer un bloc d'atomes tout en conservant une certaine stabilité. Les groupes d'atomes dignes d'intérêt sont les résidus (une vingtaine d'atomes), les hélices- α ou feuillets- β (une vingtaine de résidus) et les molécules. Cependant, *VMD* n'est pas capable de fournir l'information sémantique regroupant les atomes en hélices- α ou en feuillets- β . La fonctionnalité de l'outil *tug* a donc été étendue aux résidus et aux molécules.

Cependant, appliquer le même effort à l'ensemble des atomes de la molécule produit un effort total très important. Si l'effort total est trop important, les perturbations envoyées à la simulation sont trop importantes et produisent des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation. Il est donc nécessaire de diviser l'intensité des forces proportionnellement au nombre d'atomes sélectionnés.

2.4.3 Outil de désignation et attraction

Un aspect récurrent constaté durant les expérimentations est la nécessité de désigner un élément de la molécule. Parfois les utilisateurs éprouvent le besoin de désigner mais la plupart du temps, ce sont les enregistrement audio qui ont permis d'identifier ce besoin.

L'outil de désignation a été conçu pour répondre à un processus en quatre étapes :

- Recherche d'une cible (voir figure 2.5a) ;
- Désignation d'une cible (voir figure 2.5b) ;
- Acceptation d'une cible (voir figure 2.5c) ;
- Sélection d'une cible (voir figure 2.5d).

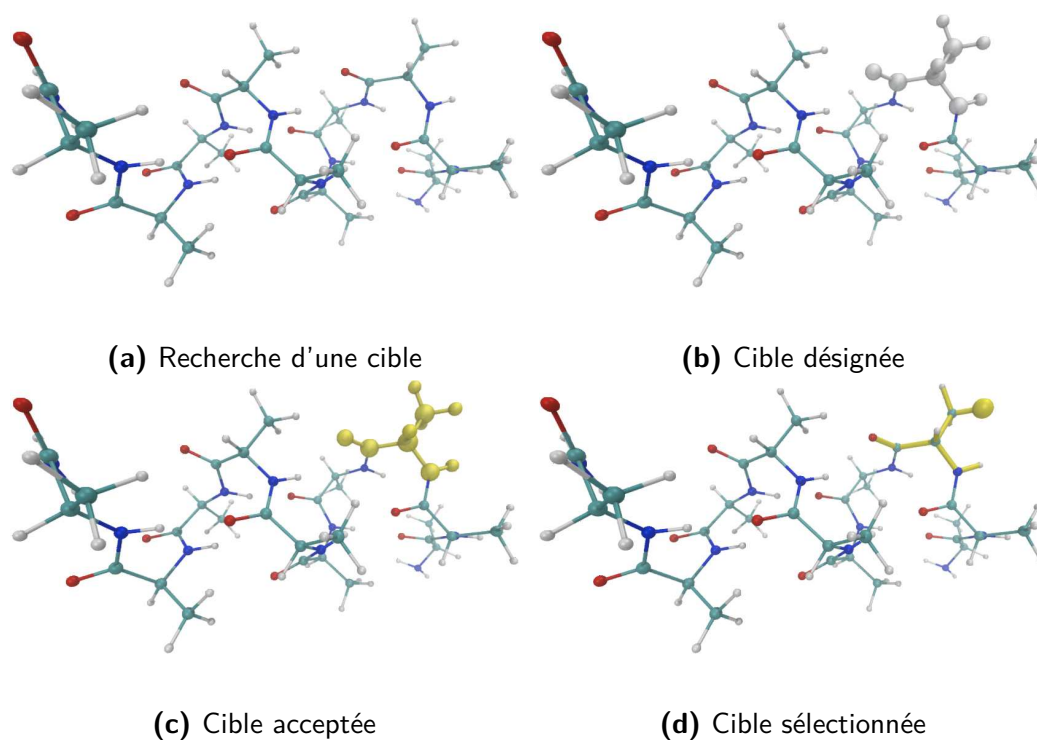


Figure 2.5 – Les quatre étapes de la désignation

L' étape a consiste pour un utilisateur \mathcal{A} à rechercher une cible à désigner. La recherche de cette cible répondra au besoin d'obtenir de l'aide d'un utilisateur \mathcal{B} .

L' étape b consiste pour l'utilisateur \mathcal{A} à désigner la cible identifiée. La cible est alors mise en surbrillance de façon à être vue des autres utilisateurs.

L' étape c page précédente fait intervenir l'utilisateur \mathcal{B} . L'utilisateur \mathcal{B} peut 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. Tant qu'elle n'est pas acceptée, la *résidu* reste en surbrillance jusqu'à ce que la requête soit accepté ou modifiée.

L' étape d page précédente est la dernière étape. 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.

Parallèlement à ces quatre étapes, des aides haptiques ont été ajoutées pour la dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 69). Pour l' étape b page précédente, des vibrations sont générées sur tous les utilisateurs concernés par la désignation. De plus, dès l'instant qu'un utilisateur a accepté la désignation (voir étape c page précédente), il est guidé de façon haptique vers la cible. La vibration chez tous les autres utilisateurs est arrêtée.

Bibliographie

- BASDOGAN, Cagatay, 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 (cf. page 9).
- 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. page 14).
- 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 14).
- CASERA, Steve, Hans-Heinrich NÄGELI et Peter KROPF (août 2006). « Improving usability of collaborative scientific visualization systems ». Anglais. Dans *Proceedings of Visualization, Imaging, and Image Processing*. Tome 541, pages 180–186 (cf. page 10).
- 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. page 14).
- 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. page 14).
- HUANG, Pingguo, Yutaka ISHIBASHI, Norishige FUKUSHIMA et Shinji SUGAWARA (oct. 2010). « Interactivity improvement of group synchronization control in collaborative haptic play with building blocks ». Anglais. Dans *Proceedings of the 9th Annual Workshop on Network and Systems Support for Games*. NetGames '10 2. Piscataway, NJ, USA : IEEE Press, pages 1–6 (cf. page 8).
- 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. page 11).

- 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 8).
- ITKOWITZ, Brandon, Josh HANDLEY et Weihang ZHU (mar. 2005). « The OpenHaptics™ toolkit : a library for adding 3D™ navigation and haptics to graphics applications ». Anglais. Dans *Proceedings of the first joint eurohaptics conference and symposium on haptic interfaces for virtual environment and teleoperator systems*. WHC '05. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 590–591 (cf. page 16).
- 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 8).
- 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 9).
- MASSIE, Thomas H. et Kenneth J. SALISBURY (nov. 1994). « PHANToM haptic interface : a device for probing virtual objects ». Anglais. Dans *Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems*. Tome 55. 1. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, United States, pages 295–300 (cf. page 15).
- 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 8).
- OLIVEIRA, Jauvane C. de, XiaoJun SHEN et Nicolas D. GEORGANAS (nov. 2002). « Collaborative virtual environment for industrial training and e-commerce ». Anglais. Dans *Virtual reality technologies for future telecommunications systems*. Sous la direction d'Algirdas PAKSTAS et Ryoichi KOMIYA. San Francisco, CA, USA : Willey, pages 79–102 (cf. page 9).

- PETTERSEN, Eric F., Thomas D. GODDARD, Conrad C. HUANG, Gregory S. COUCH, Daniel M. GREENBLATT, Elaine C. MENG et Thomas E. FERRIN (oct. 2004). « UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 25.13, pages 1605–1612 (cf. page 11).
- 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. page 14).
- SALLNÄS, Eva-Lotta (juil. 2010). « Haptic feedback increases perceived social presence ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 international conference on Haptics - generating and perceiving tangible sensations : Part II*. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, pages 178–185 (cf. page 9).
- 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 11).
- SCHRÖDINGER, LLC, éditeur (août 2010). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 03/06/2011) (cf. page 11).
- SENSABLE, Technologies Incorporated® (avr. 2002). *GHOST® software developer's toolkit programmer's guide*. Anglais. 4.0. SensAble Technologies Incorporated® (cf. page 16).
- SOURCEFORGE.NET, éditeur (août 2006). *Jmol : an open-source Java viewer for chemical structures in 3D*. Anglais. URL : <http://www.jmol.org/> (visité le 03/06/2011) (cf. page 11).
- 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. page 14).
- TANG, Anthony, Melanie TORY, Barry PO, Petra NEUMANN et Sheelagh CARPENDALE (avr. 2006). « Collaborative coupling over tabletop displays ». Anglais. Dans *Proceedings of the SIGCHI conference on Human Factors in computing systems*. New York, NY, USA : ACM, pages 1181–1190 (cf. page 10).

Bibliographie

TAYLOR II, Russell M., Thomas C. HUDSON, Adam SEEGER, Hans WEBER, Jeffrey JULIANO et Aron T. HELSER (nov. 2001). « VRPN : a device-independent, network-transparent VR peripheral system ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Virtual Reality Software and Technology 2001. New York, NY, USA : ACM, pages 55–61 (cf. page 16).

Deuxième partie

Étude du travail collaboratif

Chapitre 3

La recherche collaborative de résidus en simulation moléculaire

Sommaire

3.1	Introduction	28
3.2	Présentation	28
3.2.1	Objectifs	28
3.2.2	Hypothèses	28
3.3	Dispositif expérimental et matériel	29
3.4	Méthode	30
3.4.1	Sujets	30
3.4.2	Variables	30
3.4.3	Tâche	33
3.4.4	Procédure	35
3.5	Résultats	37
3.5.1	Amélioration des performances en binôme	37
3.5.2	Stratégies de travail	41
3.5.3	Résultats qualitatifs	47
3.6	Synthèse	49
3.6.1	Résumé des résultats	49
3.6.2	Perspectives	50
	Bibliographie	52

3.1 Introduction

3.2 PrÃsentation

3.2.1 Objectifs

Dans cette premiÃre expÃrimentation, nous proposons d'Ãtudier les deux premiÃres des quatre sous-tÃches ÃlÃmentaires (voir section 1.2.1 page 3) : la *recherche* et la *sÃlection*. Ces sous-tÃches sont cruciales car elles ont un impact important sur les sous-tÃches suivantes que sont la *dÃformation* et la *manipulation*. Les difficultÃs liÃes Ã la complexitÃ de l'environnement virtuel molÃculaire seront ÃtudiÃes Ã travers cette Ãtude.

Cette premiÃre expÃrimentation a pour objectif principal de comparer un monÃme et un binÃme. Plusieurs facteurs seront ÃtudiÃs lors de cette comparaison.

Le premier facteur concerne les performances. Les performances reprÃsentent Ã la fois le temps total pour rÃaliser la tÃche mais aussi les ressources mises en place pour accÃder Ã ce rÃsultat. Un binÃme sera-t-il plus performant qu'un monÃme ?

Le second facteur concerne les mÃthodes et les stratÃgies de travail. C'est principalement l'Ãvolution de ces stratÃgies au sein des binÃmes qui focalisera notre attention. Le travail en binÃme permettra de mettre en avant diffÃrentes stratÃgies de travail discriminÃes en fonction de la communication, des espaces de travail, de la rÃpartition des tÃches, *etc.*

Enfin, il est nÃcessaire de valider la plate-forme de manipulation proposÃe. Pour cela, l'Ãvaluation sera principalement confiÃe aux sujets qui noteront la plate-forme. L'objectif est ici de vÃrifier la pertinence de la plate-forme mais aussi d'en amÃliorer les points faibles.

3.2.2 HypothÃses

(\mathcal{H}_1) **AmÃlioration des performances en binÃme** La premiÃre hypothÃse est une amÃlioration des performances des binÃmes face aux performances des monÃmes. L'Ãvaluation des performances sera principalement le temps de rÃalisation de la tÃche.

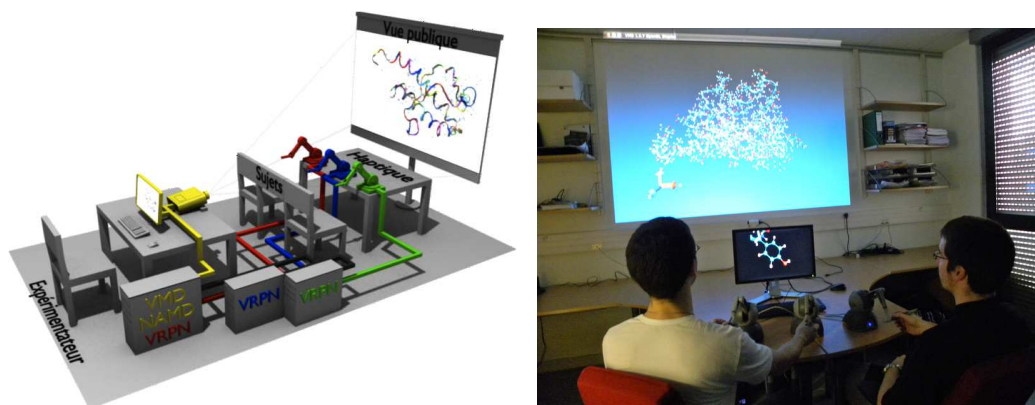
(\mathcal{H}_2) **Stratégies variables en fonction des binômes** Cette second hypothèse concerne uniquement les binômes et suppose que les stratégies adoptées seront différentes en fonction des binômes. Cette différence sera liée aux différentes personnalités et aux différentes affinités au sein du binôme. L'identification des différentes stratégies permettra des les évaluer et de trouver celles qui donnent les meilleurs résultats.

(\mathcal{H}_3) **Les sujets préfèrent le travail en binôme** La troisième hypothèse est de l'ordre du qualitatif. Elle s'intéresse aux conditions de travail en binôme. L'hypothèse est basée sur l'effet stimulant de travailler à plusieurs mais aussi sur l'intérêt de la collaboration sur des tâches répétitives. Il est cependant important que chaque sujet au sein du binôme se considère utile à la réalisation de la tâche.

3.3 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 3.1. L'EVC propose une visualisation partagée sur grand écran (vue publique à tous les utilisateurs) à l'aide d'un vidéoprojecteur. Le ou les sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

- un interface haptique de manipulation *grab* ;
- deux interfaces haptiques de déformation *tug*.



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

Figure 3.1 – Illustration du dispositif expérimental

Les sujets ont la possibilité de communiquer entre eux sans restriction. Pour les monômes, le sujet a à sa disposition un outil de manipulation *grab* et

un outil de d formation *tug* qu'il peut utiliser librement. Pour les bin mes, chaque sujet se voit attribuer un outil de d formation *tug*. L'outil de manipulation *grab* est attribu    un seul des deux sujets apr s une n gociation au sein du bin me. Le sujet choisi pour g rer l'outil de manipulation *grab* le sera pour toute la dur e de l'exp rimentation.

Un micro de bureau est plac  en face des sujets afin de capter toutes les communications orales. L'enregistrement, r alis    l'aide du logiciel Audacity, d bute   la fin de la phase d'apprentissage jusqu'  la fin de l'exp rimentation. Un d coupage par t che est r alis  en post-traitement.

Pour les d tails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de d formation, se reporter au [chapitre 2 page 7](#).

3.4 M thode

3.4.1 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une distribution d' ge de $\mu = 27.8$, $\sigma = 7.2$ ont particip    cette exp rimentation. Ils ont tous  t  recrut s au sein du laboratoire Laboratoire pour l'Informatique, la M canique et les Sciences de l'Ing nieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

- linguistique et traitement automatique de la parole ;
- r alit  virtuelle et syst me immersifs ;
- audio-acoustique.

Ils ont tous le fran ais comme langue principale. Aucun participant n'a de d fici nce visuelle (ou corrig e le cas  ch ant), de d fici nce audio ou de d fici nce moteur du haut du corps. Les sujets ne sont pas r mun r s pour l'exp rimentation.

Chaque participant est compl tement na f concernant les d tails de l'exp rimentation. Une explication d taill e de la proc dure exp rimentale leur est donn e au commencement de l'exp rimentation mais en omettant l'objectif de l' tude.

3.4.2 Variables

Variables ind pendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-population. (\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 ce qui fait deux fois plus de monômes que de binômes.

(\mathcal{V}_{i2}) **Résidu recherché** La seconde variable indépendante est une variable intra-population. (\mathcal{V}_{i2}) concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans deux molécules (voir table 3.1 page 34).

Variables dépendantes

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

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

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

(\mathcal{V}_{d2}) **La distance entre les espaces de travail** Cette distance est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux présents durant l'expérimentation. Elle est mesurée dans le monde réel mais peut être convertie dans l'environnement virtuel (à l'échelle de la molécule). Cette distance est de l'ordre du centimètre.

(\mathcal{V}_{d3}) **Les communications verbales** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pour chaque tâche de l'expérimentation. Ces mesures différencie la phase de recherche et la phase de sélection (voir (\mathcal{V}_{d1})) comme indiqué plus précisément sur la figure 3.2 page suivante.

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

1. Les sujets ne se connaissent pas ;

Chapitre 3. La recherche collaborative de main](indexentry :tkey ("glo-Residu"
 "\\glossaryentryfieldglo-Residu\\glsnamefontrÃlsiduGroupe d'atomes
 constituant un des blocs ÃllÃlmentaires d'une molÃlcule\\relax ")) :locref
 "32" :attr "glsnumberformat") rÃsidus en simulation molÃculaire

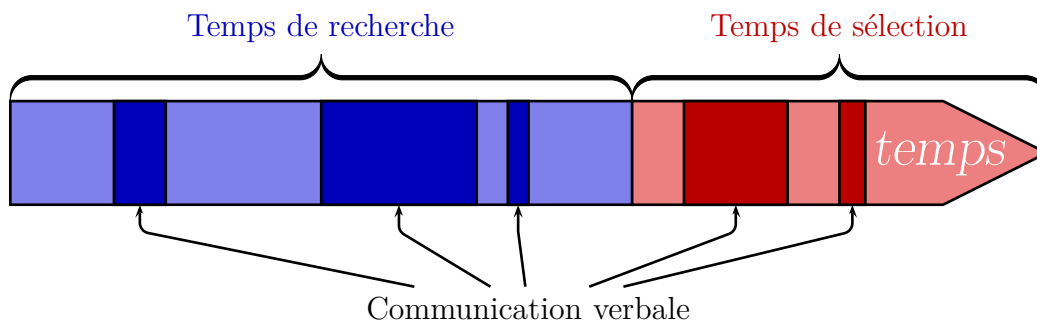


Figure 3.2 – Schéma des phases de la communication verbale

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 dans ensemble, sont dans le même bureau ;
5. Les sujets sont amis proches.

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

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

1. Dans quelle configuration vous êtes-vous senti le plus efficace : *seul* ou *en collaboratif* (choisissez 1 pour *seul* et 5 pour *en collaboratif*) ?
2. Avez-vous eu le sentiment de travailler en collaboration (par opposition au travail seul) ?
3. Pensez-vous avoir une position de meneur dans la configuration collaborative ?
4. Vous êtes vous senti utile dans la configuration collaborative (par opposition à pénalisant) ?
5. Comment évalueriez-vous votre taux de communication...
 - verbale ?
 - gestuelle ?
 - virtuelle ?
6. Avez-vous trouvé les différents effets visuels intuitifs ?
7. Avez-vous trouvé les différents effets visuels confortables ?
8. Avez-vous trouvé les interactions intuitives ?

9. Avez-vous trouvé les interactions confortables ?

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

3.4.3 Tâche

La tâche proposée est la recherche et la sélection dans un EVC sur des molécules complexes. Les motifs à rechercher dans les structures moléculaires sont les résidus de la table 3.1 page suivante. Une fois le résidu trouvé, les sujets doivent le sélectionner puis l'extraire hors de la sphère virtuelle englobant la molécule. Les sujets possèdent deux outils pour trouver, sélectionner puis extraire ces motifs :

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

La première molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH et al. 2002] a pour identifiant PDB 1L2Y sur *Protein DataBase*¹. La seconde molécule nommée Prion [CHRISTEN et al. 2009] avec l'identifiant PDB 2KFL. Cinq résidus à chercher sont présents sur chaque molécule (voir figure 3.3 page 36) et chacun présente différents niveaux de complexité. Les critères de complexité, résumés pour chaque résidu dans la table 3.2 page 35, sont les suivants :

Position La position du résidu peut se trouver sur le pourtour de la molécule (position *externe*) ou à l'intérieur, au milieu de l'amas d'atomes que constitue la molécule (position *interne*). Un résidu en position externe ne nécessite pas de déformer la molécule pour le trouver et l'atteindre contrairement à un résidu en position interne qui sera plus complexe d'accès.

Forme La forme du résidu influe énormément sur la complexité de la recherche. On distingue trois formes différentes :

Chaîne Une chaîne d'atomes (la plupart du temps carbonés) avec des atomes d'hydrogène de part et d'autres.

Cycle Une chaîne d'atomes de carbone ou d'azote qui boucle sur elle-même.

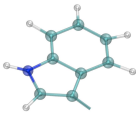

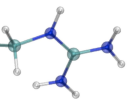
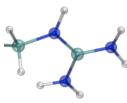
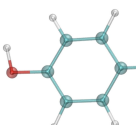
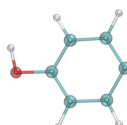
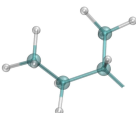
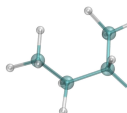
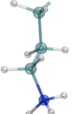
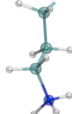
1. <http://www.pdb.org/>

Chapitre 3. La recherche collaborative de main](indexentry :tkey ("glo-Residu"
 "\\glossaryentryfieldglo-Residu\\glsnamefontrÃlsiduGroupe d'atomes
 constituant un des blocs ÃllÃlmentaires d'une molÃlcule\\relax ")) :locref
 "34" :attr "glsnumberformat") r sidus en simulation mol culaire

Table 3.1 – Liste des r sidus recherch s

(a) Residus sur la mol cule TRP-CAGE

(b) Residus sur la mol cule Prion

R�sidu	Image	R�sidu	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})	

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

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

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. De par leur similarité, ils vont mobiliser les capacités de recherche des sujets sur des résidus ressemblants mais incorrects.

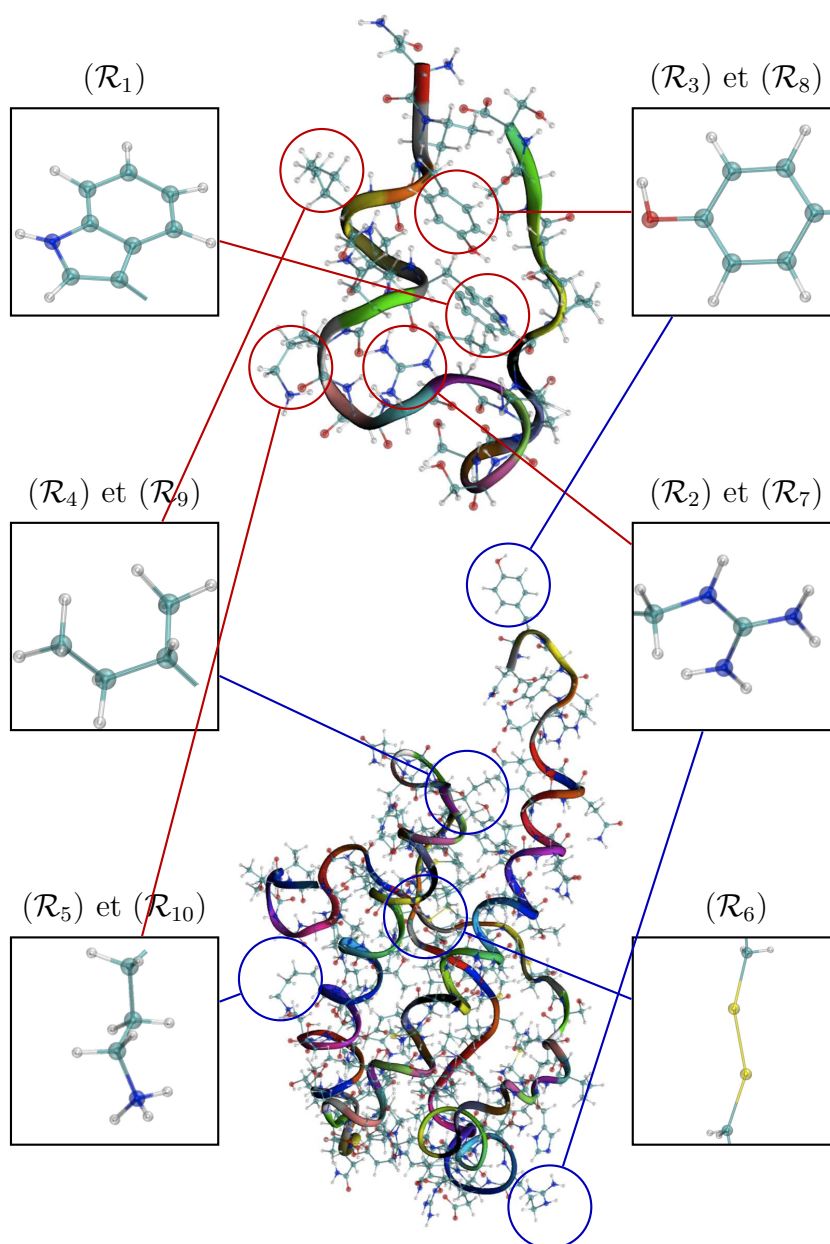
Table 3.2 – Paramètres de complexité des résidus – Carbone en *cyan*, Azote en *bleu*, Oxygène en *rouge* et Soufre en *jaune*

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

3.4.4 Procédure

Pour débiter cette expérimentation, les sujets sont confrontés à un exemple sur la molécule TRP-ZIPPER [CHRISTEN et al. 2009] ayant pour identifiant PDB 2KFL. Pendant la phase d’apprentissage, les outils sont introduits et expliqués un par un. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l’expérimentateur.

Figure 3.3 – R partition des r s s s sur les mol cules



Dès que la phase d'apprentissage est terminée, l'enregistrement audio démarre. Un premier résidu est affiché et les sujets peuvent débiter la recherche. Lorsque le résidu a été trouvé, sélectionné puis extrait, le système s'arrête. Un second résidu est affiché et ainsi de suite pour les dix résidus.

L'ensemble des résidus est proposé dans un ordre différent pour chaque monôme ou binôme. Les sujets sont tenus d'effectuer l'ensemble des dix résidus deux fois, en monôme et en binôme. Les configurations monôme et binôme sont également alternées suivant les groupes selon les trois combinaisons possibles suivantes :

1. Le sujet \mathcal{A} , puis le sujet \mathcal{B} , puis le binôme \mathcal{AB} ;
2. Le sujet \mathcal{A} , puis le binôme \mathcal{AB} , puis le sujet \mathcal{B} ;
3. Le binôme \mathcal{AB} , puis le sujet \mathcal{A} , puis le sujet \mathcal{B} .

Lorsque les sujets ont réalisé toutes les tâches dans les deux configurations possibles (monôme et binôme), ils sont soumis au questionnaire. Chaque sujet est tenu de répondre au questionnaire seul, sans communiquer avec les autres sujets.

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 3.3 page suivante.

3.5 Résultats

Cette section va présenter tous les résultats 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'homoscedasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée à l'aide d'un test de FRIEDMAN [1940], adapté pour les variables intra-population non-paramétriques.

3.5.1 Amélioration des performances en binôme

La figure 3.4 page suivante présente le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) de chaque résidu (\mathcal{V}_{i2}). L'analyse montre qu'il y a un effet significatif des résidus (\mathcal{V}_{i2}) sur le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 124.2$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) obtiennent des temps de complétion significativement plus longs que les autres résidus.

Chapitre 3. La recherche collaborative de main](indexentry :tkey ("glo-Residu"
 "\\glossaryentryfieldglo-Residu\\glsnamefontrÃlsiduGroupe d'atomes
 constituant un des blocs ÃllÃlmentaires d'une molÃlcule\\relax ")) :locref
 "38" :attr "glsnumberformat") rÃsidos en simulation molÃculaire

Table 3.3 – Synthèse de la procédure expérimentale

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

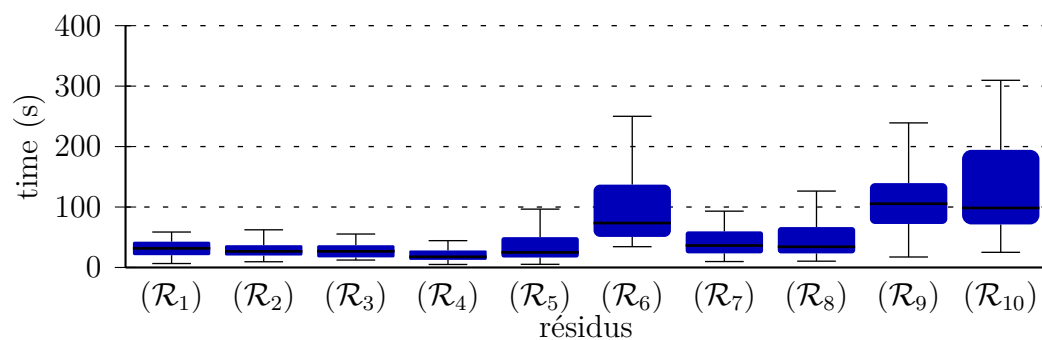


Figure 3.4 – Temps de complétion par résidu

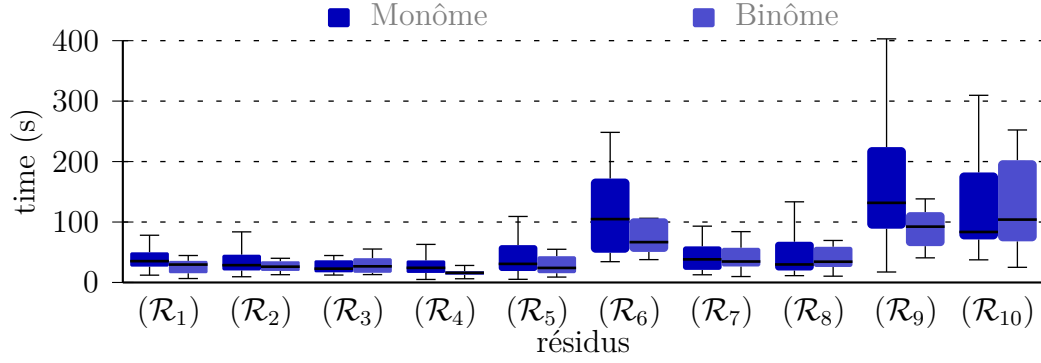


Figure 3.5 – Temps de complétion comparés (monôme ou binôme) par résidu

La figure 3.5 présente les temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) de chaque résidu (\mathcal{V}_{i2}) en fonction du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}). L'analyse ne montre pas d'effet significatif du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 5.1$, $df = 1$, $p = 0.024$). Cependant, en se limitant au groupe de trois résidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) identifiés précédemment comme significativement plus longs à trouver et extraire, on montre un effet significatif du nombre de participants (\mathcal{V}_{i1}) sur le temps de complétion (\mathcal{V}_{d1}) ($\chi^2 = 8.1$, $df = 1$, $p = 0.004$).

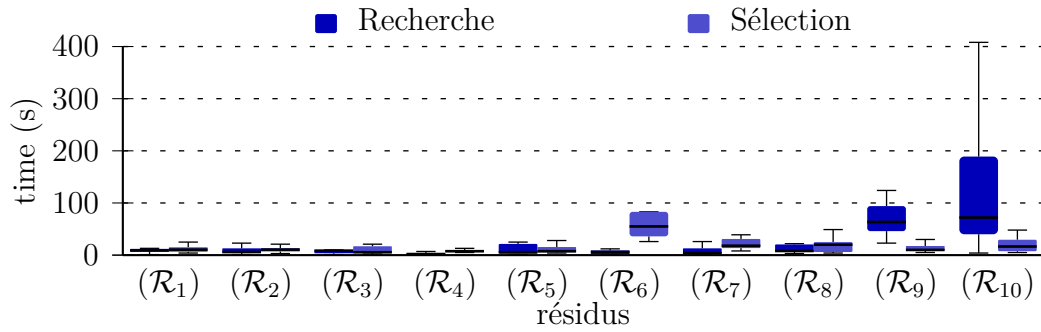


Figure 3.6 – Temps de recherche et de sélection comparés par résidu

La figure 3.6 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 ($\chi^2 = 42.3$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) obtiennent des temps de recherche significativement plus longs que les autres résidus. L'analyse montre également un effet significatif des résidus (\mathcal{V}_{i2}) sur les temps de sélection ($\chi^2 = 37$, $df = 9$, $p \ll 0.05$). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une cor-

rection de HOLM [1979] permet de dÃterminer que le rÃsidu (\mathcal{R}_6) obtient un temps de sÃlection significativement plus long que les autres rÃsidus.

La molÃcule TRP-CAGE prÃsente un nombre de rÃsidus Ã examiner relativement limitÃ. Les sujets construisent rapidement une carte mentale de la molÃcule afin de trouver rapidement les rÃsidus recherchÃs. De plus, les faibles contraintes physiques de la molÃcule la rendent facile Ã dÃformer. Cela facilite la recherche des rÃsidus qui sont en position interne Ã la molÃcule et qui nÃcessite une dÃformation. Tous ces facteurs rendent les tÃches de recherche et de sÃlection peu complexes sur la molÃcule TRP-CAGE.

La molÃcule Prion possÃde un nombre de rÃsidus beaucoup plus important. La construction complÃte d'une carte mentale est trÃs complexe, d'autant plus que les sujets ne sont confrontÃs Ã la molÃcule que dix fois (cinq fois en monÃme et cinq fois en binÃme). Les sujets adoptent diffÃrentes stratÃgies suivant les rÃsidus. Tout d'abord, ils dÃbutent par une recherche exploratoire qui permet de dÃcouvrir tous les rÃsidus en position externe Ã la molÃcule ((\mathcal{R}_7) et (\mathcal{R}_8)). Ensuite, lorsque cette premiÃre phase d'exploration ne permet pas d'achever la tÃche de recherche, les sujets dÃforment la molÃcule afin d'accÃder aux rÃsidus en position interne ((\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})).

Le travail en binÃme n'amÃliore pas les performances sur la tÃche par rapport au travail en monÃme bien que la p -value soit seulement trÃs lÃgÃrement au-dessus du seuil. Cependant, une Ãvaluation de l'ensemble des rÃsidus proposÃs a permis d'identifier des tÃches de complexitÃs variables : les rÃsidus (\mathcal{R}_6), (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) apparaissent comme significativement plus complexes que les autres rÃsidus. Sur ce groupe de rÃsidus, les binÃmes obtiennent une amÃlioration significative des performances par rapport aux monÃmes ce qui confirme notre hypothÃse (\mathcal{H}_1) sur les tÃches complexes.

Comme dÃveloppÃ dans la procÃdure expÃrimentale, le temps de complÃtion de la tÃche peut Ãtre sÃparÃ en deux parties : le temps de recherche et le temps de sÃlection (voir figure 3.2 page 32). Les rÃsidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) se distinguent par un temps de recherche significativement plus important que les autres rÃsidus. En effet, ce sont les deux rÃsidus qui possÃdent des similaritÃs avec d'autres rÃsidus Ãgalement prÃsents dans la molÃcule (voir table 3.2 page 35). Ã cause de ces similaritÃs, l'œil des sujets est continuellement attirÃ vers ces rÃsidus similaires et une perte de temps significative se fait ressentir dans la phase de recherche.

En contre-partie, le rÃsidu (\mathcal{R}_6) se distingue par un temps de sÃlection significativement plus important que les autres rÃsidus. Ce rÃsidu possÃde deux atomes de Soufre de couleur jaune ce qui les rends trÃs distinguables malgrÃ le nombre importants d'atomes de la molÃcules. Le temps de recherche s'en

trouve extrêmement réduit. Cependant, ce résidu est positionné au centre de la molécule. La sélection nécessite de *déplier* en grande partie la molécule afin de pouvoir l'atteindre et le sélectionner.

L'analyse met en évidence trois configurations concernant l'allocation du temps pour achever la tâche :

Recherche et sélection Cette configuration se constitue d'un temps identique alloué à la recherche et à la sélection. Ces résidus sont ceux qui ne présentent pas de réelle complexité (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.

Prédominance de la recherche Cette configuration alloue un temps relativement important à la recherche de l'objectif. Une fois le résidu identifié, les sujets peuvent accéder et sélectionner rapidement l'objectif. Les résidus (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10}) sont concernés. Le travail collaboratif améliore les performances grâce au caractère très parallélisable de la phase de recherche.

Prédominance de la sélection Cette configuration alloue un temps relativement important à la sélection de l'objectif. Le résidu est rapidement localisé mais il est difficile d'y accéder directement. Une phase de déformation est nécessaire pour le sélectionner. Le résidu (\mathcal{R}_6) est concerné. Le travail collaboratif améliore les performances grâce à la multiplication des ressources allouées pour la déformation.

3.5.2 Stratégies de travail

Dans cette section, les données concernent exclusivement les binômes. Elles sont utilisées afin d'étudier les différentes stratégies adoptées.

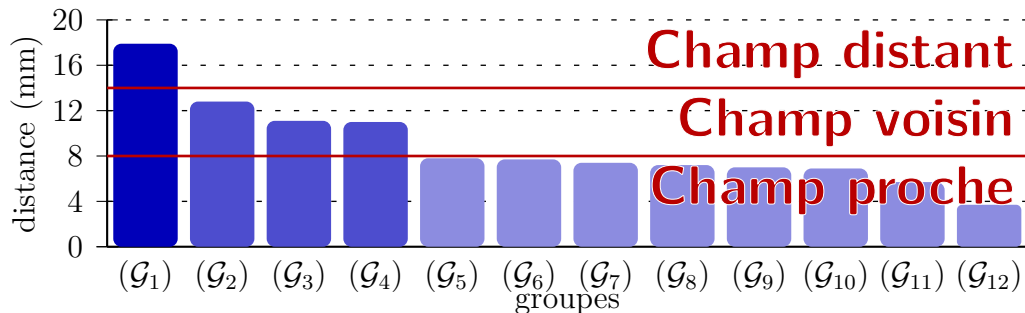


Figure 3.7 – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus (\mathcal{R}_6) , (\mathcal{R}_9) et (\mathcal{R}_{10})

La figure 3.7 page prÃcÃdente prÃsente la distance moyenne entre les espaces de travail (\mathcal{V}_{d2}) de chaque binÃme. Les binÃmes peuvent Ãtre classÃs en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.

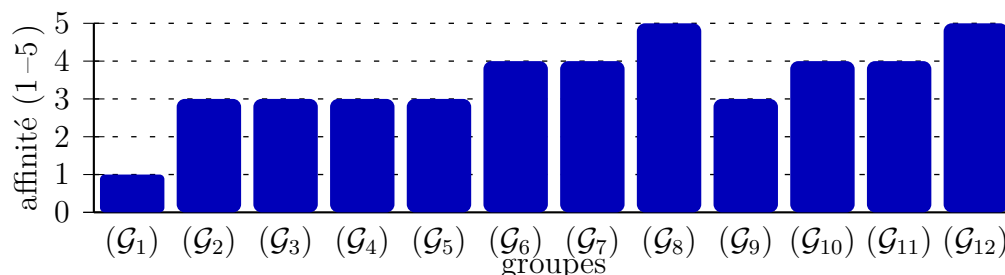


Figure 3.8 – AffinitÃ entre les sujets pour chaque binÃme

La figure 3.8 prÃsente les affinitÃs (\mathcal{V}_{d4}) de chaque binÃme. Les notes, comprises entre un et cinq, montre que les binÃmes choisis ont des affinitÃs relativement variÃes.

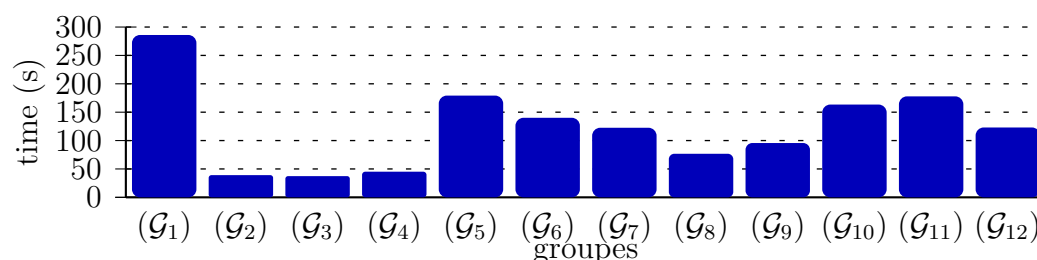


Figure 3.9 – Temps de complÃtion entre les sujets pour chaque binÃme

La figure 3.9 prÃsente les temps de complÃtion (\mathcal{V}_{d1}) de chaque binÃme. Le temps de complÃtion de (\mathcal{G}_1) est particuliÃrement important (plus d'une fois et demi les autres groupes les plus longs). Ã l'opposÃ, on note que (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) obtiennent des temps extrÃmement bas.

La figure 3.10 page suivante prÃsente les temps de communication verbale (\mathcal{V}_{d3}) de chaque binÃme. (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) ont des temps de communication verbale infÃrieurs Ã 20s. Ã l'opposÃ, (\mathcal{G}_1), (\mathcal{G}_5) et (\mathcal{G}_{11}) ont des temps de communication verbale qui approche les 60s.

La figure 3.11 page ci-contre prÃsente les pourcentages de temps de communication verbale durant la phase de recherche et durant la phase de sÃlection de chaque binÃme. Le pourcentage reprÃsente le rapport du temps de communication verbale durant la phase recherche ou de sÃlection rapportÃ respectivement au temps total de la phase de recherche ou de sÃlection. Les binÃmes (\mathcal{G}_1) Ã (\mathcal{G}_4) ainsi que (\mathcal{G}_9) communiquent plus durant la phase de

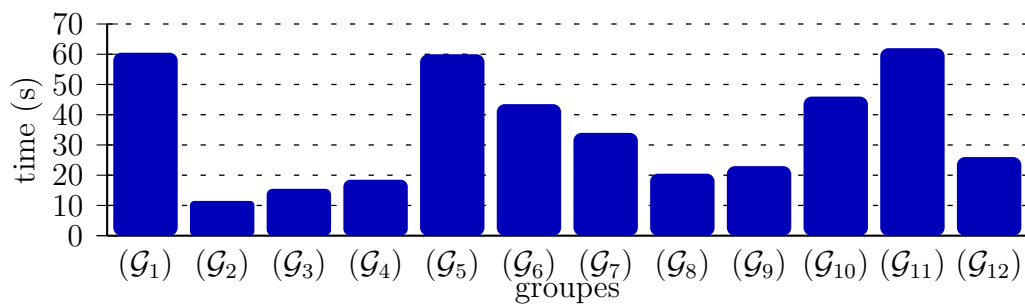


Figure 3.10 – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

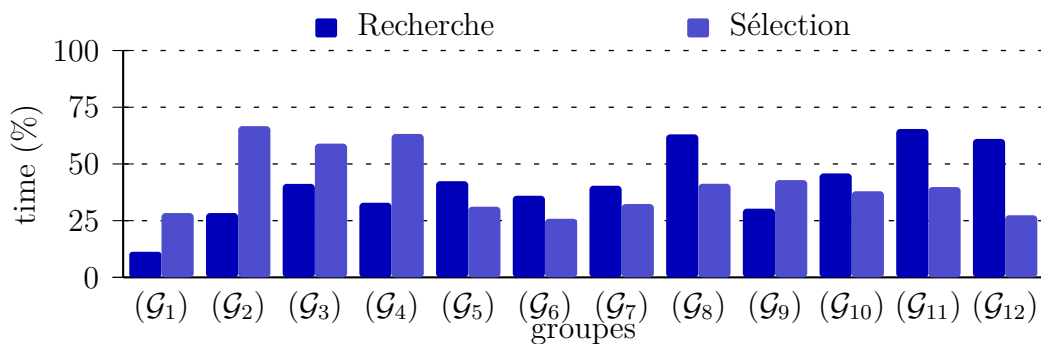


Figure 3.11 – Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection des sujets pour chaque binôme

sÃlection. Les binÃmes (\mathcal{G}_5) Ã (\mathcal{G}_8) et (\mathcal{G}_{10}) Ã (\mathcal{G}_{12}) communiquent plus durant la phase de recherche. Notons Ãgalement que (\mathcal{G}_1) communique assez peu par rapport aux autres binÃmes.

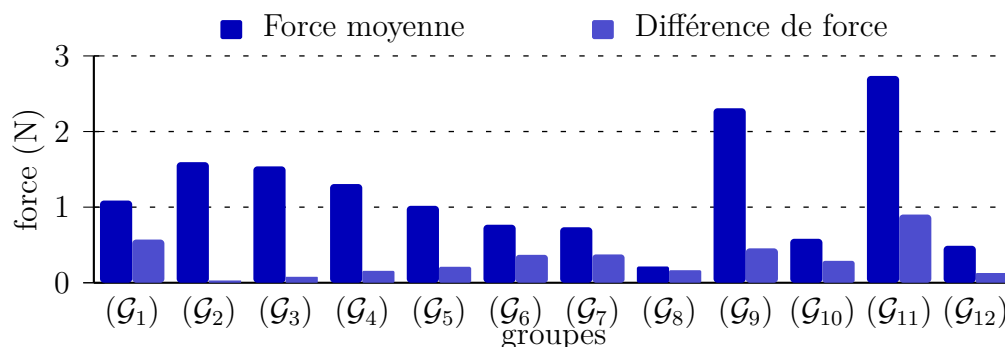


Figure 3.12 – Force moyenne et diffÃrence de force entre les sujets pour chaque binÃme

La figure 3.12 reprÃsente la force moyenne et la diffÃrence de force entre les sujets. La force moyenne est la moyenne des forces moyennes des deux sujets. La diffÃrence de force est la diffÃrence des forces moyennes des deux sujets. (\mathcal{G}_9) et (\mathcal{G}_{11}) apporte un effort moyen trÃs important par rapport aux autres binÃmes. (\mathcal{G}_2), (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4) apporte un effort moyen important Ãgalement tout en ayant une diffÃrence de force quasiment nulle entre les deux membres du binÃme.

Les distances moyennes entre les espaces de travail, donnÃes dans le rÃfÃrentiel du monde rÃel, sont comprises entre 3 mm et 18 mm. Ces distances mÃnent Ã trois diffÃrents types de stratÃgies :

Champ proche pour les distances infÃrieures Ã 8 mm ;

Champ voisin pour les distances comprises entre 8 mm et 14 mm ;

Champ distant pour les distances supÃrieures Ã 14 mm.

Ces diffÃrentes stratÃgies, qui confirme notre hypothÃse (\mathcal{H}_2), sont caractÃrisÃes de faÃon prÃcise dans les sections suivantes.

Champ proche

Les interactions en champs proches, infÃrieure Ã 8 mm, correspondent, dans l'environnement virtuel, Ã des distances infÃrieures Ã 10 Å ce qui est environ l'envergure d'un rÃsidu². 8 binÃmes sur 12 sont concernÃs par cette catÃgo-

2. Å dÃsigne l'ÃngstrÃm qui est une unitÃ de mesure telle que $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$

rie (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})). Ces binômes travaillent en collaboration étroite.

Sur la figure 3.8 page 42, tous les binômes manipulant en collaboration étroite ont de fortes affinités ($\mu = 4$) : ce sont des collègues proches ou des amis. D'après la figure 3.9 page 42, ces binômes obtiennent des temps de complétion de la tâche relativement moyens comparés aux autres stratégies de travail. Cela se traduit également par une communication relativement moyenne comme affiché sur la figure 3.10 page 43.

En observant plus précisément les temps de communication verbale sur la figure 3.11 page 43, les binômes de ce groupe passent plus de temps à communiquer dans la phase de recherche que dans la phase de sélection (excepté pour (\mathcal{G}_9)). Ces résultats tendent à prouver les difficultés du travail en champ proche liées aux nombreux conflits durant la phase de recherche.

La figure 3.12 page ci-contre montre des disparités entre les binômes concernant la force moyenne. Des observations durant l'expérimentation ont permis de déterminer deux stratégies différentes :

Contrôle redondant où les deux sujets effectuent la même action pour obtenir un meilleur contrôle sur les structures manipulées ;

Guidage gestuel où un des deux sujets indique à son partenaire la déformation à effectuer ou la position à atteindre.

Ces deux stratégies impliquent une communication étroite entre les sujets afin de coordonner au mieux les actions.

Cependant, les différences importantes de forces appliquées (voir figure 3.12 page précédente) ou l'analyse des communications verbales montre des conflits importants au sein des binômes. En effet, la grande complexité des tâches considérées couplé à une mauvaise conscience de l'environnement et de son partenaire mène à une mauvaise coordination et à des inter-référencements inexacts. Les communications verbales révèlent de nombreuses incompréhensions dans l'inter-référencement (« Pas dans cette direction », « Pas ici mais ici », « C'est juste derrière », *etc.*). Ces conflits et incompréhensions limitent les performances du binôme.

Champ voisin

Les interactions en champ voisin, comprises entre 8 mm et 14 mm, correspondent, dans l'environnement virtuel, à des distances de l'ordre de résidus voisins (entre 10 Å et 20 Å). 3 binômes sur 12 sont concernés par cette catégorie (binômes (\mathcal{G}_2) , (\mathcal{G}_3) et (\mathcal{G}_4)). Ces binômes travaillent en collaboration

relativement  troite sur des r s dus voisins. Les r s dus voisins sont d pendants physiquement ou structurellement comme indiqu  sur la figure 3.13.

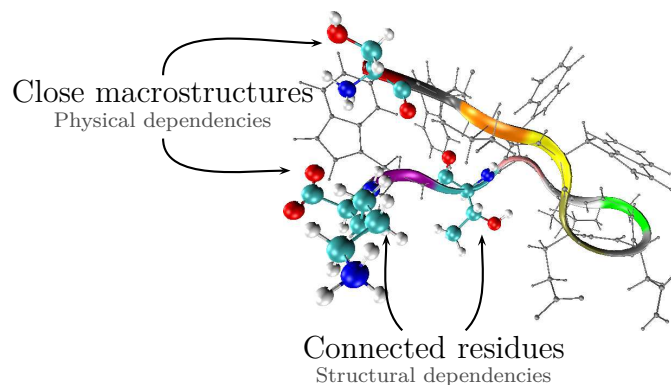


Figure 3.13 – Couplage physique et structure entre les r s dus

Sur la figure 3.8 page 42, tous les bin mes manipulant en collaboration moyennement coupl es ont des affinit s moyennes ($\mu = 3$) : ce sont des coll gues. D'apr s la figure 3.9 page 42, ces bin mes obtiennent de tr s bonnes performances sur les temps de compl tion de la t che. De plus, la figure 3.10 page 43 montre une communication verbale assez limit e. La manipulation en champ voisin permet d' tre continuellement conscient des actions du partenaire ce qui  vite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des r s dus diff rents ce qui limite les conflits d'interactions qui interviennent en champ proche.

La figure 3.11 page 43 montre que la strat gie compl mentaire de travail en champ voisin est plus performante dans la phase de recherche.

La figure 3.12 page 44 illustre une bonne r partition des efforts entre les deux membres du bin me. En effet, la force moyenne est assez  lev e par rapport   la plupart des autres bin mes ce qui montre qu'aucun des deux sujets n'est moins actif (ce qui entra nerait une force moyenne moins  lev e). La diff rence des forces moyennes quasi-nulle entre les deux sujets confirme ce r sultat. Ceci peut s'expliquer par une bonne coordination pendant laquelle les deux membres du bin me vont effectuer des actions compl mentaires mais de m me intensit . La strat gie adopt e peut  tre d finie de la fa on suivante :

Manipulation compl mentaire o  les deux sujets sont attentifs aux actions de leur partenaire afin d'avoir un meilleur contr le du processus de d formation par une synchronisation am lior e.

L'analyse des communication verbales concerne beaucoup les phases de synchronisation (« Maintenant, prends  a », « peux-tu m'aider ici ? », « Bien ! »,

etc.). Les performances des binômes travaillant en champ voisin sont relativement élevées bien que quelques conflits similaires à ceux rencontrés en champs proches soient présents bien que plus limités en nombre.

Champ distant

Les interactions en champ voisin, supérieures à 14 mm, correspondent, 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 42) : les membres ne se connaissent presque pas. De plus, le binôme obtient de très mauvaises performances en ce qui concerne le temps de complétion de la tâche comme le montre la figure 3.9 page 42. La figure 3.10 page 43 montre que le temps de communication verbale est assez important. Cependant, le temps de complétion étant nettement plus important, le taux de communication verbale est beaucoup plus faible que les autres groupes (voir figure 3.11 page 43). En effet, les membres du binôme travaillant à distance, leurs interactions sont peu nombreuses ce qui implique peu de gestion de conflits et donc peu de communication verbale. La figure 3.11 page 43 montre également que ce binôme communique plus dans les phases de sélection que dans les phases de recherche. En effet, les phases de sélection ont tendance à force la collaboration étroite et favorise ainsi les conflits.

La figure 3.12 page 44 illustre un effort moyen moins élevé que les binômes manipulant en champ voisin. De plus, on constate une forte disparité entre les deux membres du binôme. Ces observations montrent encore une fois la faible collaboration.

Chaque sujet manipulant en champ distant définit chacun sa propre stratégie et son propre espace de travail. Les interactions sont limitées au maximum. Cette configuration réduit considérablement les conflits d'interaction ainsi que la communication. Cependant, elle nuit beaucoup aux performances du groupe dans son ensemble.

3.5.3 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 efficacit  de chacun durant la t che. La seconde partie a pour but d' valuer la plate-forme. Toutes les notes sont comprises entre un et cinq ( chelle de LIKERT [1932]   cinq niveaux).

 valuation de la collaboration

Les r sultats du questionnaire montre qu'une majorit  des sujets de cette exp rimentation ont pr f r  et appr ci  la r alisation de la t che en configuration collaborative ($\mu = 4.6$, $\sigma = 0.5$). De plus, le sentiment d'effectuer une t che en collaboration est fort. L'hypoth se (\mathcal{H}_3) est confirm e par les sujets qui pr f rent la configuration collaborative   la configuration seule. Ceci valide   la fois la pertinence de la plate-forme mais  galement la pertinence des travaux de recherche sur le travail collaboratif.

Durant ce travail collaboratif, chaque sujet consid re qu'il a effectivement contribu    la r alisation de la t che ($\mu = 4.1$, $\sigma = 0.9$). Cependant, les sujets ne consid rent qu'ils se soient impos s en meneur ou en suiveur ($\mu = 3$, $\sigma = 0.5$). En effet, des questions suppl mentaires ont permis de mettre en  vidence que chaque sujet a tendance   surestimer le r le du partenaire ($\approx 70\%$).

L'estime du partenaire est important dans le travail collaboratif. En effet, la collaboration m ne   une confiance mutuelle concernant la qualit  du travail effectu  par le partenaire, n cessaire   toute collaboration. Tout sujet n'ayant aucune estime pour le partenaire passerait son temps   v rifier le travail d j  effectu  par le partenaire et entra nerait une perte significative des performances g n rales du groupe. De plus, chaque sujet se consid re utile pour la r alisation de la t che. Le cas contraire aurait pour effet qu'un des participants s'isole de lui-m me, soustrayant ainsi son potentiel de l'action collaborative.

Concernant la communication, les participants estiment que le principal canal de communication a  t  verbal ($\mu = 4.5$, $\sigma = 0.6$) et, dans une proportion plus faible mais tout de m me importante, virtuel ($\mu = 3.5$, $\sigma = 0.8$). En ce qui concerne la communication gestuelle, ils la consid rent comme quasiment inexistante ($\mu = 1.5$, $\sigma = 1$).

La communication gestuelle n'est pas ou peu utilis e pour plusieurs raisons. La principale raison est la difficult  de communiquer par geste lorsque les mains sont occup es   la manipulation. Deuxi mement, les sujets ont rapidement adopt  le canal virtuel qui est plus pr cis dans les t ches de d signation qui constituent la plupart des besoins de communication. La communication

verbale reste le canal principal de communication : c'est le canal le plus naturel pour communiquer. Cependant, il vient aussi en soutien du canal virtuel. En effet, aucun outil visuel ou haptique n'a été fourni pour effectuer des tâches de désignation et le canal virtuel seul serait incapable de remplir seul cette mission.

Évaluation du système

L'évaluation du système en terme d'intuitivité comme en terme de confort est relativement satisfaisante. En effet, en ce qui concerne l'intuitivité des graphismes et effets visuels, les participants les trouve accessibles ($\mu = 3.8$, $\sigma = 0.8$). Il est en va de même en ce qui concerne l'intuitivité des interactions avec le système ($\mu = 3.9$, $\sigma = 0.8$). Pour le confort, le visuel ($\mu = 3.7$, $\sigma = 0.7$) et les interactions ($\mu = 3.7$, $\sigma = 0.8$) jouissent d'une évaluation similaire.

Là encore, les sujets valident l'hypothèse (\mathcal{H}_3). La plate-forme est relativement bien évaluée. Il semble cependant nécessaire d'apporter encore des améliorations afin de répondre au mieux aux attentes des utilisateurs.

Ces résultats sont cependant à nuancer. Les écart-types sont relativement élevés ce qui veut dire qu'il y a de fortes disparités dans ces notations entre les différents sujets : certains sujets se sont déclarés plutôt insatisfaits concernant le confort (visuel : 2, interaction : 2). De plus, les outils proposés durant 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.

3.6 Synthèse

3.6.1 Résumé des résultats

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

La collaboration a prouvé son intérêt, notamment sur les tâches les plus complexes. La complexité d'une tâche est relativement difficile à établir. Le nombre d'atomes (et donc le nombre de résidus) joue un rôle important

dans cette complexité : l'environnement virtuel devient surchargé et difficile à appréhender. Un autre facteur de complexité est l'amplitude des contraintes physiques qui interviennent dans la molécule.

En observant et en analysant les différentes stratégies de travail, il ressort que le travail en champ proche comme le travail en champ distant ne sont pas des stratégies très performantes. En effet, le nombre de conflits en champ proche augmente significativement ; en champ distant, tout l'intérêt du travail collaboratif est perdu. Le travail en champ voisin constitue un juste milieu performant.

Enfin, il paraît nécessaire d'avoir de bonnes relations avec ces partenaires afin d'apporter à la fois, une communication saine et un respect mutuel du travail effectué. Cependant, les résultats montrent de façon évidente que tout déséquilibre dans le groupe mène à des performances dégradées.

3.6.2 Perspectives

Basés sur les résultats précédents, certaines perspectives assez évidentes s'imposent et ont guidé les expérimentations qui suivent. Tout d'abord, il semble nécessaire de proposer des tâches suffisamment complexes pour pouvoir étudier plus en détail le travail collaboratif. Ceci se traduit soit par des tâches à fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 53) ou par la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 65).

Les différentes stratégies observées ont permis de mettre en évidence l'intérêt du travail en champ voisin. Les propositions d'outils visuo-haptiques devront tenir compte de ce paramètre : ils devront encourager le travail rapproché en fournissant une assistance en champ voisin tout en maintenant une distance minimum afin de limiter les conflits liés au travail en champ proche.

L'évaluation qualitative par questionnaire apporte également de nombreuses réponses intéressantes. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant un élément primordial de la communication : le canal virtuel est important. À l'aide d'observations durant les phases expérimentales, ce canal de communication est principalement exploité pour des actions de désignation. Fournir des outils spécifiquement conçus pour la désignation devient une nécessité.

Enfin, ces évaluations qualitatives ont permis de valider l'EVC proposé. Des améliorations sont cependant nécessaires en ce qui concerne le rendu visuel et les interactions. De nombreux sujets ont par exemple demandé une mise en surbrillance du résidu survolé. Une assistance haptique pour la sélection est également une des améliorations possibles. Ces améliorations ne sont pas

implémentées dans les deux expérimentations suivantes pour ne pas alourdir les outils et ainsi ne pas biaiser l'étude. Cependant, ils sont implémentés pour la dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 69).

Bibliographie

- 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. page 37).
- 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 ». Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. pages 33, 35).
- 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. page 37).
- HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 37, 39, 40).
- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 32, 48).
- 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 37, 39).
- 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 33).
- 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. page 37).

Chapitre 4

La manipulation collaborative

Sommaire

4.1	Présentation	53
4.1.1	Objectifs	53
4.1.2	Hypothèses	54
4.2	Dispositif expérimental et matériel	55
4.3	Méthode	55
4.3.1	Sujets	55
4.3.2	Variables	56
4.3.3	Tâche	58
4.3.4	Procédure	62
	Bibliographie	63

4.1 Présentation

4.1.1 Objectifs

Après avoir traité la sous-tâche élémentaire de *recherche*, la seconde expérimentation traitera des sous-tâches élémentaires de *sélection* et de *déformation* (voir section 1.2.1 page 3). Ces sous-tâches introduisent des actions qui nécessitent une grande synchronisation et permet de stimuler les collaborations étroites. La précédente expérimentation (voir chapitre 3 page 27) a souligné l'avantage de la collaboration sur des tâches nécessitant un couplage fort. Les tâches proposées dans cette expérimentation sont élaborées pour stimuler les interactions entre les sujets.

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

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

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

Le troisième facteur concerne l'apprentissage. En effet, quelque soit l'application et l'expérimentation proposée à des sujets, un phénomène d'apprentissage peut être observé. Cette expérimentation compare l'évolution de l'apprentissage entre les configurations collaboratives et **bimanuelle**.

4.1.2 Hypothèses

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

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

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

4.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 4.1. Comme pour la première expérimentation (voir section 3.3 page 29), l'EVC propose une visualisation partagée (vue publique) à l'aide d'un vidéoprojecteur sur un grand écran. Le ou les sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

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

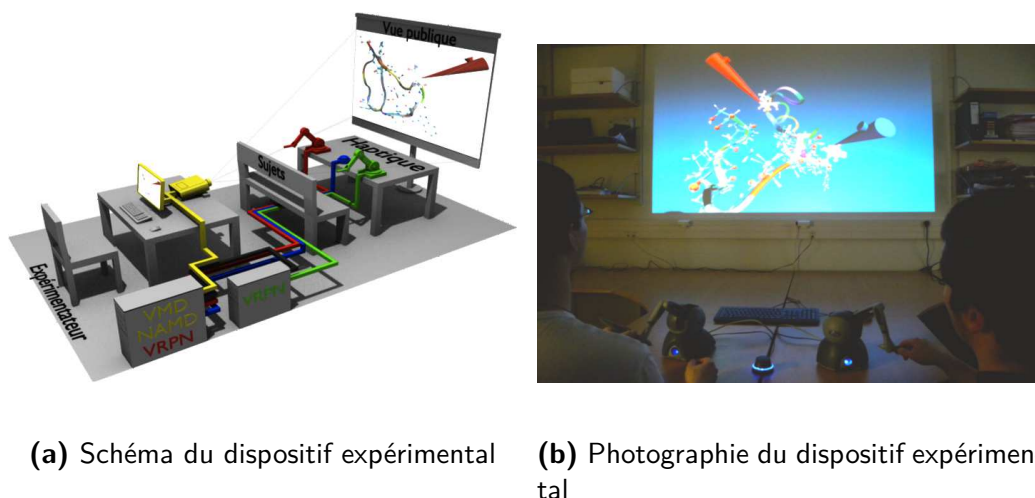


Figure 4.1 – Illustration du dispositif expérimental

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

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au chapitre 2 page 7.

4.3 Méthode

4.3.1 Sujets

36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de $\mu = 25.9$ ($\sigma = 4.70$) ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au

sein du laboratoire CNRS–LIMSI et sont chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

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

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

4.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable inter-population, c’est-à-dire que les sujets sont expérimentés dans une seule modalité de cette variable. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». Les sujets seuls et les sujets en couples ont à leur disposition deux outils haptiques de déformation et un outil haptique de manipulation. Pour les binômes, seulement un des deux sujets est désigné pour l’utilisation exclusive de la souris 3D. 12 monômes et 12 binômes sont testés.

(\mathcal{V}_{i2}) **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-population. Deux molécules de complexités différentes sont testées. Deux tâches de déformation sur chacune de molécules sont proposées : une déformation au niveau inter-moléculaire et une déformation au niveau intra-moléculaire.

(\mathcal{V}_{i3}) **Le niveau d’apprentissage** La troisième variable indépendante est une variable intra-population. Tous les sujets seront confrontés trois fois à la même tâche afin de voir l’effet de l’apprentissage en monôme et en binôme.

Variables dépendantes

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

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

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

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

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

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

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

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

1. Vous êtes-vous senti efficace ?
2. Comment évalueriez-vous votre taux de communication...
 - verbale ?

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

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

4.3.3 Tâche

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

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

Description de la tâche

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

Lorsqu'un sujet sélectionne un atome ou un résidu, ce dernier est mis en surbrillance. De plus, l'atome ou le résidu correspondant sur la molécule cible est affiché afin de connaître la position finale de la sélection courante. La figure 4.2 page ci-contre illustre ces différents effets graphiques.

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, des scores sont affichés en temps-réel (voir figure 4.2 page suivante). Le premier score est le score

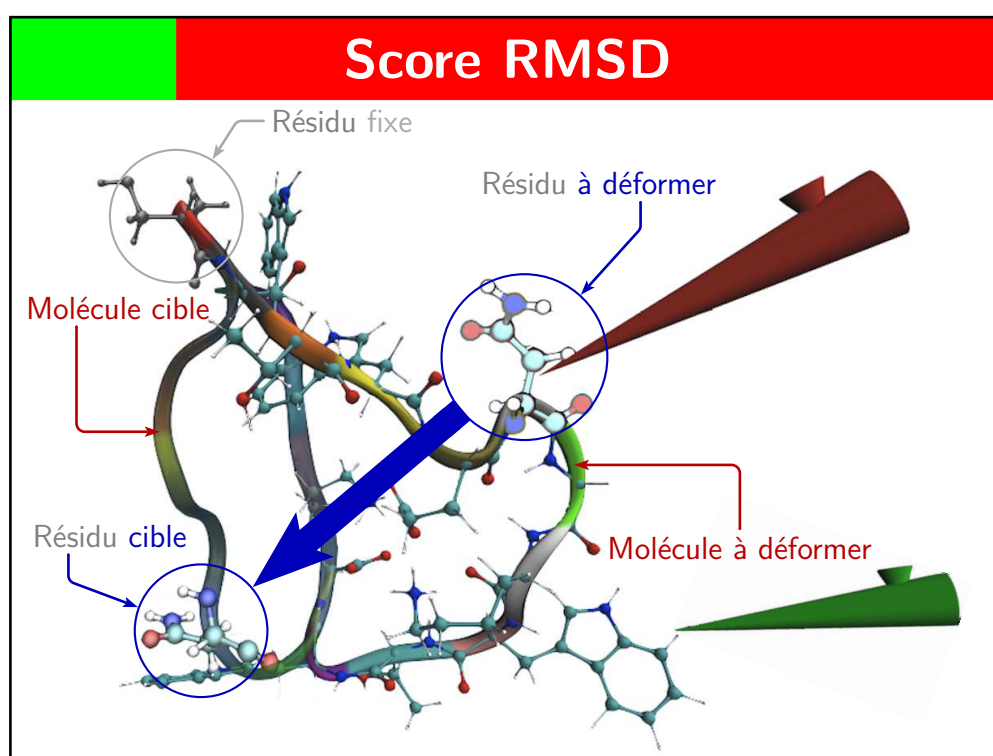


Figure 4.2 – Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible

Root Mean Square Deviation (RMSD) qui permet de mesurer la différence entre deux déformations d’une même molécule en calculant la différence entre chaque paire d’atomes (voir équation 4.1).

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

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

La description des tâches

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

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

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

Tâche 2A Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l’échelle intra-moléculaire. Seulement trois résidus sont laissés libres tandis que tous les autres sont fixés. Les contraintes physiques de cette tâche sont relativement faibles. Cependant, la difficulté de cette tâche réside dans la recherche des résidus à déformer qui ne sont pas aisés à trouver.

Tâche 2B Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l’échelle intra-moléculaire. Seulement six résidus sont laissés libres tandis que les autres sont fixés. La déformation requise demande une

grande dépense d'énergie. En effet, la molécule proposée se trouve dans une sorte de puit de potentiel (un *minima* local) et l'objectif est d'atteindre un autre puit de potentiel (un autre *minima* local). L'énergie nécessaire pour passer d'un puit à l'autre est relativement importante, à tel point qu'un seul outil de déformation n'est pas suffisant. La manipulation synchrone de deux résidus est la seule solution pour atteindre l'objectif.

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

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

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

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

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

Table 4.1 – Paramètres de complexité des tâches

	Tâche 1A	Tâche 1B	Tâche 2A	Tâche 2B
Nombre d'atomes	218	304	218	304
résidu libre	11	19	3	7
Cassure	1	2	0	1
Champ de force	Moyen	Moyen	Faible	Fort

Les outils disponibles

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

4.3.4 Procédure

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

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 4.2.

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		
Variable in-dépendantes	(\mathcal{V}_{i1}) Nombre de sujets		
	(\mathcal{V}_{i2}) Complexité de la tâche		
	(\mathcal{V}_{i3}) Niveau d'apprentissage		
Variable dépendantes	(\mathcal{V}_{d1}) Temps de complétion		
	(\mathcal{V}_{d2}) Nombre de sélections		
	(\mathcal{V}_{d3}) Distance passive entre les espaces de travail		
	(\mathcal{V}_{d4}) Distance active entre les espaces de travail		
	(\mathcal{V}_{d5}) Réponses qualitatives		
Condition (\mathcal{C}_1)	Condition (\mathcal{C}_2)	Condition (\mathcal{C}_3)	Condition (\mathcal{C}_4)
Bimanuel $(N = 1)$	Bimanuel $(N = 1)$	Collaboratif $(N = 2)$	Collaboratif $(N = 2)$
Tâche 1A	Tâche 1B	Tâche 1A	Tâche 1B
Tâche 1B	Tâche 1A	Tâche 1B	Tâche 1A
Tâche 2A	Tâche 2B	Tâche 2A	Tâche 2B
Tâche 2B	Tâche 2A	Tâche 2B	Tâche 2A

Bibliographie

- 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. pages 60, 62).
- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 57).
- 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 60).

Bibliographie

Chapitre 5

Les dynamiques de groupe

Troisième partie

Propositions pour le travail collaboratif

Chapitre 6

Travail collaboratif assisté par haptique

Sommaire

6.1	Présentation	69
6.1.1	Objectifs	69
6.1.2	Hypothèses	70
6.2	Dispositif expérimental et matériel	70
6.3	Méthode	71
6.3.1	Sujets	71
6.3.2	Variables	71
6.3.3	Tâche	73
6.3.4	Procédure	74
	Bibliographie	76

6.1 Présentation

6.1.1 Objectifs

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

Le principal facteur observé sera les performances du groupe. Les performances regardées seront le temps mis pour achever la tâche mais également la qualité de la solution trouvée. En effet, la qualité de la solution est une variable non-négligeable dans le cadre d'une tâche d'amarrage moléculaire.

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

6.1.2 Hypothèses

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

6.2 Dispositif expérimental et matériel

L'EVC utilisé est illustré sur la figure 6.1. L'EVC propose une visualisation partagée sur grand écran (vue publique à tous les utilisateurs) à l'aide d'un vidéoprojecteur. Les **3 ou 4** sujets font face à l'écran avec à leur disposition :

- une interface d'orientation de la scène ;
- une interface haptique de manipulation de la molécule ;
- une interface haptique pour la coordination ;
- deux interfaces haptiques de déformation *tug*.

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

Figure 6.1 – Illustration du dispositif expérimental

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

3 ou 4
Quelle configuration
choisissons nous ?

Images à compléter
Il va falloir créer la
scène Blender corres-
pondante et faire des
photos du dispositif ex-
périmental

Pour les détails techniques concernant la plate-forme et les outils de manipulation et de déformation, se reporter au chapitre 2 page 7.

6.3 Méthode

6.3.1 Sujets

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

Nombre de sujets
Remplir toutes les informations statistiques concernant les sujets

Ils ont été recrutés au sein du laboratoire IBPC et sont chercheurs en biologie moléculaire. Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni de déficience audio.

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

6.3.2 Variables

Variables indépendantes

(\mathcal{V}_{i1}) Présence de l'assistance La première variable indépendante est une variable intra-population, c'est-à-dire que tous les sujets sont expérimentés dans toutes les modalités de cette variable. (\mathcal{V}_{i1}) possède deux valeurs possibles : « sans assistance » ou « avec assistance ». L'assistance est l'aide haptique ajouté aux différents outils de manipulation, de désignation et de déformation afin d'améliorer l'interaction et la communication entre les sujets pendant la tâche.

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

Variables dépendantes

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

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

(\mathcal{V}_{d3}) **Les communications verbales et gestuelles** L'enregistrement vidéo permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. Elle permet également d'observer les phases de communication gestuelle. Les communications gestuelles sont les mouvements physiques des sujets destinés à donner une information à un ou plusieurs autres sujets.

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

Le questionnaire
Écrire le questionnaire
soumis au sujets

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

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

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

6.3.3 Tâche

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

Description de la tâche

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

Afin de réaliser la tâche, différentes mesures sont disponibles en temps-réel pour les sujets. La première de ces mesures est le score RMSD qui est décrit dans la section 4.3.3 page 58. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par NAMD.

Le premier complexe de molécules proposé, couramment nommé NUSE:NUSG [BURMANN et al. 2010], a pour identifiant PDB 2KVQ. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1294 atomes et 929 atomes.

Les outils disponibles

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

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

- un outil haptique attaché virtuellement à la molécule permettant de déplacer la molécule ;

Deux configurations possibles

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

- un SpaceNavigator® permettant d’orienter la molécule.
- De plus, le *coordinateur* aura à sa disposition un outil de désignation complexe permettant de :
- afficher ou masquer les résidus en fonction de leur intérêt pour la tâche en cours de réalisation ;
 - désigner un résidu nécessitant une manipulation par les *opérateurs*.

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

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

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

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

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

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

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

6.3.4 Procédure

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

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

à déterminer

Il faudra trouver une molécule d’apprentissage

Dix minutes

C’est une proposition de temps mais il faudra peut-être adapter en fonction des tests alphas

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

Un résumé du protocole expérimental est exprimé dans la table 6.1.

Table 6.1 – Synthèse de la procédure expérimentale

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

Bibliographie

- BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010). « A NUSE:NUSG complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 73).
- LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. page 72).

Quatrième partie

Synthèse

Chapitre 7

Conclusion et perspectives

Glossaire

amarrage moléculaire

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe stable. iii, 3, 69, 73, 81

bimanuel

Qui se fait avec les deux mains. 53, 54, 62

binôme

Groupe constitué de 2 personnes. iv, vii, 27–32, 37, 40–42, 44–47, 49, 53–57, 61, 62, 72

curseur

Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 81

docking moléculaire

Voir amarrage moléculaire. 3

effecteur terminal

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. 31, 57, 72

homoscedasticité

Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 37

monôme

Groupe constitué d'une unique personne. vii, 28–30, 37, 40, 49, 53–57

résidu

Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. iv, vii, ix, 4, 12, 13, 17–20, 27, 31, 33, 35, 37, 39–41, 44–47, 49, 50, 57, 58, 60, 61, 72, 74

variable dépendante

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, tra-

jectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépendantes. 70, 81

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. 30, 31, 56, 71, 81

variable inter-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 56

variable intra-population

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 30, 31, 37, 56, 71

Acronymes

API

API vient de l'anglais *Application Programming Interface* et désigne une interface avec un programme informatique. 16

DDL

Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre. vii, 13, 15

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. 7–9, 15, 29, 33, 50, 54, 58, 70, 73

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. 14, 71

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]. 7, 10, 11, 14, 83

ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel `IMD`. 10, 14

CNRS–LIMSI

Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 30, 55

NAMD

Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS et al. 2005]. 7, 10, 11, 14, 73, 83

Acronymes

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. 58, 73

VMD

Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY et al. 1996]. vii, 7, 10–14, 16–18, 83

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]. 7, 13, 15, 16