

Thèse en Informatique

---

Jean SIMARD

<sup>5</sup> Interactions haptiques collaboratives pour la  
manipulation moléculaire

École Doctorale d'Informatique de Paris Sud

Thèse soutenue le 1<sup>er</sup> 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	ix
	Liste des tableaux	xiii
5	Résumé	xiii
	Abstract	xv
	Introduction	1
	<b>1 Étude bibliographique</b>	<b>3</b>
	1.1 Introduction . . . . .	4
10	1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire . . . . .	4
	1.2.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	4
	1.2.2 Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire . . . . .	6
	1.2.3 Le <i>docking</i> moléculaire en environnement virtuel . . . . .	9
	1.3 État de l’art . . . . .	13
15	1.4 Contexte . . . . .	14
	1.4.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	14
	Bibliographie . . . . .	17

## Table des matières

---

	<b>2 SHADDOCK – Manipulation collaborative de molécules</b>	<b>29</b>
	2.1 Introduction . . . . .	30
	2.2 Architecture matérielle et logicielle . . . . .	30
	2.2.1 L’interface haptique . . . . .	30
5	2.2.2 Configuration de travail collaboratif . . . . .	33
	2.2.3 Une architecture client/serveur . . . . .	34
	2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation . . . . .	36
	2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire . . . . .	37
	2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire . . . . .	39
10	2.4 Les outils d’interaction . . . . .	40
	2.4.1 Les outils existants . . . . .	40
	2.4.2 Les nouveaux outils d’interaction . . . . .	41
	Bibliographie . . . . .	45
	<b>3 Recherche collaborative de résidu sur une molécule</b>	<b>49</b>
15	3.1 Introduction . . . . .	50
	3.2 Recherche et sélection collaborative . . . . .	50
	3.2.1 Travaux existants . . . . .	50
	3.2.2 Objectifs . . . . .	52
	3.3 Présentation de l’expérimentation . . . . .	53
20	3.3.1 Description de la tâche . . . . .	53
	3.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	57
	3.4 Résultats . . . . .	60
	3.4.1 Amélioration des performances en binôme . . . . .	61
	3.4.2 Stratégies de travail . . . . .	65
25	3.4.3 Résultats qualitatifs . . . . .	72
	3.5 Synthèse . . . . .	74
	3.5.1 Résumé des résultats . . . . .	74
	3.5.2 Conclusion . . . . .	74
	Bibliographie . . . . .	76

	<b>4 Déformation collaborative de molécule</b>	<b>79</b>
	4.1 Introduction . . . . .	80
	4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel . . . . .	80
	4.2.1 Travaux existants . . . . .	80
5	4.2.2 Objectifs . . . . .	81
	4.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	82
	4.3.1 Description de la tâche . . . . .	82
	4.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	85
	4.4 Résultats . . . . .	90
10	4.4.1 Amélioration des performances en binôme . . . . .	92
	4.4.2 Évolution des performances en fonction de la complexité de la tâche . . . . .	97
	4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes . . . . .	102
	4.4.4 Résultats qualitatifs . . . . .	106
15	4.5 Synthèse . . . . .	108
	4.5.1 Résumé des résultats . . . . .	108
	4.5.2 Conclusion . . . . .	108
	Bibliographie . . . . .	110
	<b>5 La dynamique de groupe</b>	<b>113</b>
20	5.1 Introduction . . . . .	114
	5.2 Collaboration de groupe . . . . .	114
	5.2.1 Travaux existants . . . . .	114
	5.2.2 Objectifs . . . . .	116
	5.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	117
25	5.3.1 Description de la tâche . . . . .	117
	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	118
	5.4 Résultats . . . . .	122
	5.4.1 Amélioration des performances . . . . .	122
	5.4.2 Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration . . . . .	126
30	5.4.3 Définition d'un meneur . . . . .	130

## Table des matières

---

	5.5 Synthèse . . . . .	133
	5.5.1 Résumé des résultats . . . . .	133
	5.5.2 Conclusion . . . . .	134
	Bibliographie . . . . .	136
5	<b>6 Travail collaboratif assisté par haptique</b>	<b>139</b>
	6.1 Introduction . . . . .	140
	6.2 Assistance haptique pour la communication . . . . .	140
	6.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	140
	6.3.1 Description de la tâche . . . . .	140
10	6.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	143
	6.4 Résultats . . . . .	148
	6.5 Synthèse . . . . .	148
	6.5.1 Résumé des résultats . . . . .	148
	6.5.2 Conclusion . . . . .	148
15	Bibliographie . . . . .	149
	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>149</b>
	<b>Glossaire</b>	<b>153</b>
	<b>Acronymes</b>	<b>157</b>
	<b>Annexes</b>	<b>163</b>
20	<b>A Dispositif expérimental</b>	<b>163</b>
	A.1 Matériel expérimental . . . . .	164
	A.2 Présentation des molécules . . . . .	165
	A.2.1 Liste des molécules . . . . .	165
	A.2.2 Représentation des molécules . . . . .	165
25	A.3 Outils de manipulation . . . . .	168
	Bibliographie . . . . .	169

	<b>B Méthode expérimentale</b>	<b>171</b>
	B.1 Première expérimentation . . . . .	172
	B.1.1 Hypothèses . . . . .	172
	B.1.2 Sujets . . . . .	172
5	B.1.3 Variables . . . . .	173
	B.1.4 Procédure . . . . .	175
	B.2 Seconde expérimentation . . . . .	176
	B.2.1 Hypothèses . . . . .	176
	B.2.2 Sujets . . . . .	176
10	B.2.3 Variables . . . . .	177
	B.2.4 Procédure . . . . .	178
	B.3 Troisième expérimentation . . . . .	179
	B.3.1 Hypothèses . . . . .	179
	B.3.2 Sujets . . . . .	180
15	B.3.3 Variables . . . . .	180
	B.3.4 Procédure . . . . .	181
	B.4 Quatrième expérimentation . . . . .	182
	B.4.1 Hypothèses . . . . .	182
	B.4.2 Sujets . . . . .	183
20	B.4.3 Variables . . . . .	183
	B.4.4 Procédure . . . . .	184
	Bibliographie . . . . .	187
	<b>C Questionnaires</b>	<b>189</b>
	C.1 Première expérimentation . . . . .	190
25	C.2 Seconde expérimentation . . . . .	196
	C.2.1 Questionnaire pour les monômes . . . . .	196
	C.2.2 Questionnaire pour les binômes . . . . .	196
	C.3 Quatrième expérimentation . . . . .	197
	C.3.1 Le questionnaire SUS . . . . .	203
30	Bibliographie . . . . .	205

## Table des matières

---



# Table des figures

	1.1	Complexe de molécules assemblé à partir de deux molécules . . . . .	5
	1.2	Mesures pour l'évaluation du <i>docking</i> moléculaire . . . . .	6
	1.3	Illustration d'une molécule avec ces hélices- $\alpha$ et ces feuillets- $\beta$ . . . . .	8
5	1.4	Représentation avancée proposée par BERGMAN <i>et al.</i> [1993] . . . . .	10
	1.5	Visualisation multimodale proposée par DAVIES <i>et al.</i> [2005] . . . . .	11
	1.6	Potentiel de LENNARD-JONES [1924a] . . . . .	12
	1.7	<i>Docking</i> moléculaire rigide à l'aide d'une interface à cinq De- grés De Liberté (DDLs) [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006] . . . . .	13
10	1.8	<i>Docking</i> moléculaire rigide avec le VIRTUOSE <sup>TM</sup> 6D35-45 [DAU- NAY et RÉGNIER 2009] . . . . .	14
	1.9	Processus de déformation moléculaire en quatre étapes . . . . .	16
	2.1	Diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK . . . . .	31
	2.2	Diagramme de composant UML du nœud VMD . . . . .	32
15	2.3	Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL . . . . .	33
	2.4	Classification des tâches collaboratives selon ELLIS <i>et al.</i> [1991] . . . . .	34
	2.5	Illustration des représentations de molécules sur VMD ( <i>Visual Molecular Dynamics</i> ) . . . . .	38
	2.6	Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés . . . . .	42
20	2.7	Les quatre étapes de la désignation . . . . .	44
	3.1	Répartition des résidus sur les molécules . . . . .	56
	3.2	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	58
	3.3	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	58

## Table des figures

---

	3.4	Représentation de la molécule Prion pour l'expérimentation . . .	59
	3.5	Temps de réalisation par résidu . . . . .	61
	3.6	Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu	62
	3.7	Temps de recherche et de sélection comparés par résidu . . . .	62
5	3.8	Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus $\mathcal{R}_6$ , $\mathcal{R}_9$ et $\mathcal{R}_{10}$ . . . . .	65
	3.9	Affinité entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	66
	3.10	Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme . . .	66
10	3.11	Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	66
	3.12	Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection entre les sujets pour chaque binôme .	67
	3.13	Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme . . . . .	67
15	3.14	Couplage physique et structure entre les résidus . . . . .	70
	4.1	Affichage de la molécule à déformer et de la molécule cible . .	83
	4.2	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	87
	4.3	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	87
	4.4	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A	88
20	4.5	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 1B	89
	4.6	Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 2A	89
	4.7	Représentation de la molécule TRP-CAGE pour le scénario 2B	90
	4.8	Illustration des rendus pour l'affichage de la molécule . . . . .	92
	4.9	Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets . . . . .	93
25	4.10	Distance passive et active entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets . . . . .	93
	4.11	Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonc- tion du nombre de sujets . . . . .	94
30	4.12	Vitesse moyenne de la main dominante et dominée en fonction du nombre de sujets . . . . .	95
	4.13	Temps de réalisation des scénarios . . . . .	97

	4.14 Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets . . . . .	98
	4.15 Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	98
5	4.16 Distance passive et active entre les effecteurs terminaux sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	99
	4.17 Vitesse moyenne sur chaque scénario en fonction du nombre de sujets . . . . .	100
	4.18 Temps de réalisation de chaque essai . . . . .	102
10	4.19 Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	102
	4.20 Nombre de sélections de chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	103
15	4.21 Distance active entre les effecteurs terminaux pour chaque es- sai en fonction du nombre de sujets . . . . .	104
	4.22 Vitesse moyenne pour chaque essai en fonction du nombre de sujets . . . . .	104
	5.1 Schéma du dispositif expérimental . . . . .	119
	5.2 Photographie du dispositif expérimental . . . . .	119
20	5.3 Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1 . . . .	120
	5.4 Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2 . .	121
	5.5 Temps de réalisation des scénarios . . . . .	122
	5.6 Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	122
25	5.7 Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	123
	5.8 Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	123
30	5.9 Nombre d'échanges verbaux sur les scénarios en fonction du nombre de participants . . . . .	124
	5.10 Temps de réalisation avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	126
	5.11 Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	126

## Table des figures

---

	5.12	Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	127
	5.13	Vitesse moyenne sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	127
5	5.14	Nombre d'ordres verbaux sur les scénarios en fonction des groupes avec ou sans <i>brainstorming</i> . . . . .	128
	5.15	Nombre d'ordres donnés par chacun des sujets de $\mathcal{G}_1$ . . . . .	130
	5.16	Vitesse moyenne des effecteurs terminaux pour chacun des sujets de $\mathcal{G}_1$ . . . . .	131
10	5.17	Profil de force du groupe $\mathcal{G}_1$ sur la molécule Prion . . . . .	132
	6.1	Schéma du dispositif expérimental . . . . .	145
	6.2	Photographie du dispositif expérimental . . . . .	145
	6.3	Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 1 . . .	146
	6.4	Représentation de la molécule NUSG pour le scénario 2	146
15	A.1	Représentation des atomes avec CPK . . . . .	166
	A.2	Représentation de la structure principale de la molécule avec <i>NewRibbon</i> . . . . .	167
	A.3	Représentation des atomes fixés en gris . . . . .	167
20	B.1	Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu . . . . .	174

# Liste des tableaux

	1.1	Liste non-exhaustive de solutions logicielles de <i>docking</i> moléculaire . . . . .	9
	3.1	Liste des résidus recherchés . . . . .	54
5	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> . . . . .	55
	3.3	Synthèse de la méthode expérimentale . . . . .	60
	4.1	Paramètres de complexité des tâches . . . . .	85
	4.2	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	91
10	5.1	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	121
	6.1	Synthèse de la procédure expérimentale . . . . .	148

## Liste des tableaux

---

# Résumé

*<Background>*

*<Ma thèse>*

*<Développement de la plate-forme>*

<sup>5</sup> *<Études de cas>*

*<Proposition de solution>*

*<Synthèse et perspectives>*





# **Abstract**

## Abstract

---

# Introduction



# Étude bibliographique

## Sommaire

5	1.1 Introduction . . . . .	4
	1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire	4
	1.2.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	4
	1.2.2 Recherche de solutions de <i>docking</i> moléculaire . . .	6
	1.2.3 Le <i>docking</i> moléculaire en environnement virtuel .	9
10	1.3 État de l'art . . . . .	13
	1.4 Contexte . . . . .	14
	1.4.1 Le <i>docking</i> moléculaire . . . . .	14
15	Bibliographie . . . . .	17

## 1.1 Introduction

## 1.2 Contexte de travail : la modélisation moléculaire

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous allons nous intéresser à la modélisation moléculaire et plus précisément au *docking* moléculaire<sup>1</sup> qui fournit un environnement de travail complexe. Cette section présente le *docking* moléculaire puis expose les différentes solutions existantes pour traiter ce problème complexe.

### 1.2.1 Le *docking* moléculaire

Dans le domaine de la modélisation moléculaire, le *docking* moléculaire consiste à prédire la conformation optimale entre deux molécules afin de créer un complexe de molécules stable (voir figure 1.1 page ci-contre). FISCHER et BEENSCH [1894] illustrent le *docking* moléculaire avec le modèle « clef-serrure » décrit de la façon suivante.

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

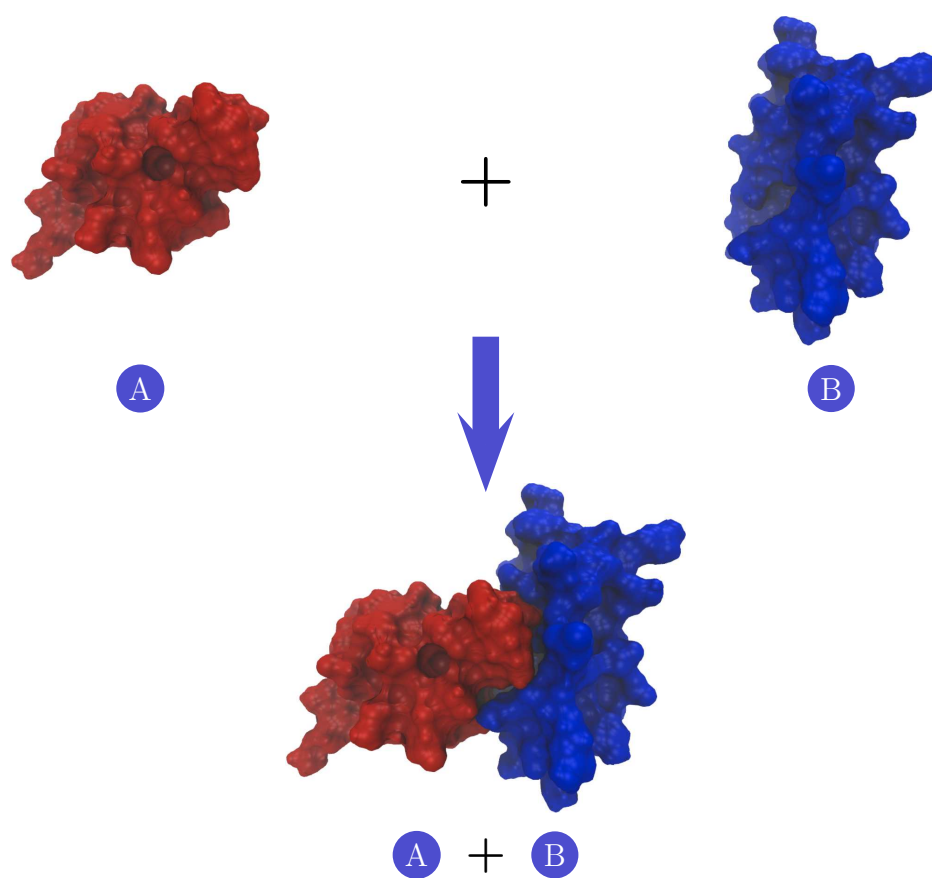
On trouve une traduction en français de cette citation dans [HASENKNOPF 2005].

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

La métaphore s'arrête ici. En effet, s'il suffit simplement de vérifier que la clef ouvre la serrure pour confirmer la correspondance entre les deux objets, l'évaluation d'un complexe de molécules est moins évidente. La stabilité d'un complexe de molécules est évaluée sur deux mesures : la complémentarité géométrique et la complémentarité chimique (voir figure 1.2 page 6). La complémentarité géométrique, parfois nommée complémentarité structurale [CHURCH *et al.* 1977], consiste à trouver la partie des profils de la molécule qui vont s'imbriquer, comme un puzzle en 3D. La figure 1.2a page 6 illustre

---

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



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

la complémentarité géométrique dans une représentation simplifiée en 2D. JIANG *et al.* [2003] consacre une publication à montrer l'importance de la complémentarité géométrique dans le *docking* moléculaire.

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



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

Le nombre de combinaisons géométriques et le nombre de contraintes chimiques font du *docking* moléculaire une tâche de recherche très complexe. Une exploration exhaustive n'est pas envisageable. La section suivante présente les différentes solutions logicielles existantes pour réaliser un *docking* moléculaire.

### 1.2.2 Recherche de solutions de *docking* moléculaire

La recherche de solutions de *docking* moléculaire consiste à trouver les sites de liaisons entre les molécules. Les algorithmes de recherche se basent principalement sur deux principes de base. Tout d'abord, l'algorithme doit être capable d'évaluer une conformation par un score de confiance. Puis, une heuristique est nécessaire afin de converger le plus efficacement possible vers des solutions valides.

SCHULZ-GASCH et STAHL [2004] ou encore LEACH *et al.* [2006] proposent un état de l'art sur les moyens d'évaluer un *docking* moléculaire. En général, les



algorithmes de recherche commencent par identifier les différents sites de liaisons potentiels seulement par complémentarité géométrique. Cette première évaluation permet de filtrer de nombreuses possibilités. Puis une évaluation chimique partielle ou complète est éventuellement effectuée par l'algorithme de recherche. Afin de trouver ces sites de liaison, différents types d'algorithmes ont été proposés.

JONES *et al.* [1997] utilisent les algorithmes génétiques sur le système GOLD pour chercher des conformations par complémentarité géométrique et complète la recherche par une évaluation des champs de forces. Puis MORRIS *et al.* [1998] propose une amélioration par des algorithmes génétiques lamarckistes avec le logiciel AutoDock ; c'est la solution de *docking* moléculaire la plus référencée actuellement [GROSDIDIER 2007]. ICMDocking s'oriente plutôt vers une méthode basée sur les ICMS (*Iterated Conditional Modes*) [ABAGYAN et TOTROV 1994 ; ABAGYAN *et al.* 1994]. Les solutions logicielles basées sur la méthode de MONTE-CARLO sont également étudiées avec les plate-forme Glide [FRIESNER *et al.* 2004 ; HALGREN *et al.* 2004] ou encore BoxSearch [CUMMINGS *et al.* 1995 ; HART et READ 1992]. Enfin, les outils FlexX [RAREY *et al.* 1997, 1999] ou encore DOCK [EWING *et al.* 2001], également très utilisés, tentent de reconstruire le ligand de manière incrémentale autour d'une base protéinique.

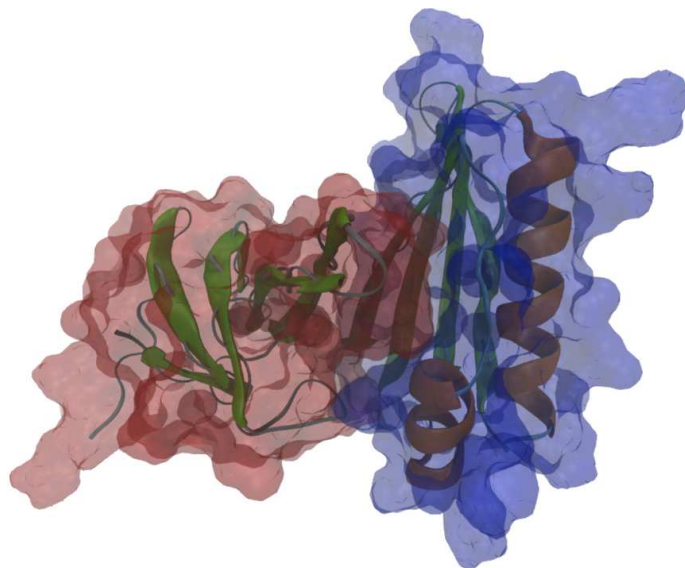
Les solutions sont nombreuses mais devant la complexité du problème, aucune de ces solutions logicielles ne semble fournir la solution ultime. De plus, les solutions présentées ci-dessus se basent seulement sur une approximation de l'environnement moléculaire : les molécules sont considérées comme des corps rigides. En effet, une molécule est constituée d'un ensemble d'atomes possédant chacun une mobilité par rapport à ces voisins : une molécule s'apparente plutôt à un corps flexible. La flexibilité d'une molécule peut être vue à différents niveaux de granularité, de l'atome (granularité la plus fine) aux molécules en passant par les hélices- $\alpha$  et feuillets- $\beta$  (granularité intermédiaire). On peut distinguer trois niveaux de flexibilité différentes :

**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 molécules 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 deux molécules (ou plus) introduit de nombreux sites de liaison qui doivent être optimisées en fonction de critères variés (la complémentarité géométrique, les forces électrostatiques, les forces de VAN DERWAALS [MÜLLER 1994],

*etc.*). La flexibilité s'organise alors autour de macro-structures telles que les hélices- $\alpha$  ou les feuillets- $\beta$  (voir figure 1.3).

**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.*).



**Figure 1.3** – Illustration d'une molécule avec ces hélices- $\alpha$  et ces feuillets- $\beta$

Afin de répondre à cette problématique supplémentaire de flexibilité, ÖSTERBERG *et al.* [2002] étendent les capacités de AutoDock. La granularité est augmentée en considérant le complexe de molécules sous forme de grille afin d'augmenter la vitesse d'évaluation de la configuration testée. MEAGHER et CARLSON [2004] proposent de simuler la flexibilité en testant plusieurs conformations différentes d'une même protéine. On trouve également les travaux de RADESTOCK *et al.* [2005] qui combinent les problématiques géométriques et chimiques pour trouver des solutions flexibles de *docking* moléculaire ou encore les travaux de KEIZERS *et al.* [2005] utilisant les moteurs de dynamique moléculaire. La complexité induite par la flexibilité rend impossible une exploration totale de l'espace des recherches. C'est pourquoi les logiciels présentés dans la table 1.1 page suivante évaluent plutôt des systèmes semi-flexibles par différentes solutions dont voici quelques exemples :

- Une des deux molécules voire seulement la chaîne carbonée est rendue rigide ;
- Utiliser différentes conformations d'une molécule sur des solutions de *docking* moléculaire rigide ;

## 1.2. Contexte de travail : la modélisation moléculaire

- Découper l’espace de recherche de manière plus grossière pour améliorer les performances de traitement.

La complexité liée à la flexibilité est telle qu’aucune solution logicielle ne semble être capable de traiter le *docking* moléculaire flexible de manière satisfaisante. Nous allons voir dans la prochaine section qu’une approche très différente du problème existe.

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

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

### 1.2.3 Le *docking* moléculaire en environnement virtuel

Cependant, malgré une communauté scientifique très active pour améliorer les solutions de *docking* moléculaire et se rapprocher au plus près de conditions biologiques réalistes, la complexité du problème rend la découverte de solutions difficile. Devant cette complexité, un nouveau type de solutions pour traiter le problème de *docking* moléculaire émerge. L’idée est de faire intervenir l’humain. En effet, bien que moins rapide pour traiter rapidement un grand nombre de données, un expert est capable de classer plus intelligemment les solutions pertinentes de celles qu’on peut rejeter immédiatement.

L’intervention d’un expert durant le processus de recherche est effectuée par l’immersion à l’aide de solutions de réalité virtuelle. GROPEHaptic est le premier projet concernant la manipulation moléculaire interactive [BROOKS JR.

*et al.* 1990 ; OUH-YOUNG *et al.* 1988] et déjà à l'époque, c'est le *docking* moléculaire qui intéresse. Pour l'interaction, ce sont des interfaces haptiques spécifiques qui sont proposées. Nous allons voir que la réalité virtuelle est beaucoup utilisée pour comprendre ou agir sur la visualisation et la déformation moléculaire.

Afin de pouvoir immerger les biologistes au sein d'un environnement virtuel, plusieurs verrous technologiques ont été étudiés. BERGMAN *et al.* [1993] explorent les structures moléculaires avec la plate-forme VIEW en proposant différentes représentations pour les molécules (voir figure 1.4). Quelques années plus tard, les premiers logiciels sont développés et distribués à large échelle comme VMD [HUMPHREY *et al.* 1996] ou PYMOL [DELANO 2002].



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

Cependant, les visualisations statiques ne suffisent pas à comprendre les interactions chimiques en action au sein d'une molécule. HUITEMA et LIERE [2000] fournissent une possibilité de visualiser des trajectoires d'atomes à propos de la dynamique de protéines. Puis KLOSOWSKI *et al.* [2002] franchissent une étape supplémentaire en proposant une visualisation temps-réel à l'aide du moteur de simulation GROMACS [BERENDSEN *et al.* 1995 ; HESS *et al.* 2008]. Enfin, afin d'améliorer l'exploration, KŘENEK *et al.* [1999] puis DAVIES *et al.* [2005] proposent une visualisation multimodale en ajoutant un retour haptique afin de percevoir les champs de forces (voir figure 1.5 page suivante).

En parallèle, les scientifiques s'intéressent également à la manipulation de molécules en temps-réel. La modélisation moléculaire assistée par ordinateur



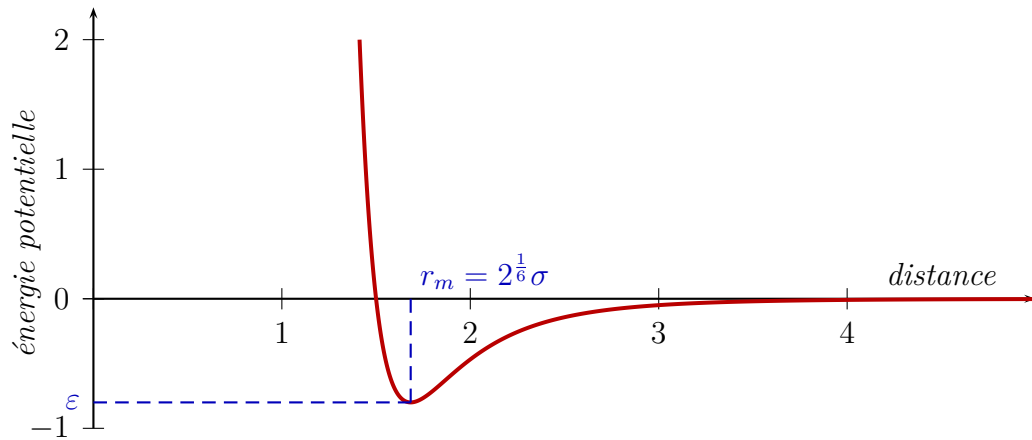
**Figure 1.5** – Visualisation multimodale proposée par DAVIES *et al.* [2005]

est proposée sur la plate-forme HIMM (*Highly Immersive Molecular Modeling*) [DREES *et al.* 1996 ; DREES *et al.* 1998]. Afin de manipuler plus intuitivement les molécules, WEGHORST [2003] introduit une interface tangible. Cependant, les biologistes cherchent à interagir virtuellement avec la dynamique des molécules afin de pouvoir s'affranchir de la difficulté de cette manipulation dans le monde réel. Les interactions proposées se font alors par traction des atomes [HAAN *et al.* 2002 ; KOUTEK *et al.* 2002]. Y.-G. LEE et LYONS [2004] calquent les interactions haptiques sur l'approximation du champ de force décrit dans [LENNARD-JONES 1924a,b] (voir équation 1.1), largement adopté par la communauté (voir figure 1.6 page suivante).

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

Enfin, la manipulation interactive avec la simulation d'une molécule flexible devient possible avec la plate-forme proposée par DELALANDE *et al.* [2009] à laquelle on ajoute la possibilité d'interagir avec une interface haptique [DELALANDE *et al.* 2010].

Ces solutions pour interagir avec les molécules sont en partie utilisées pour



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

- l'apprentissage de la dynamique moléculaire. Par exemple, SANKARANARAYANAN *et al.* [2003] proposent une plate-forme interactive avec des interfaces haptiques pour apprendre et comprendre les structures moléculaires. Puis WOLLACOTT et MERZ JR. [2007] s'intéressent à la compréhension des interactions chimiques avec la combinaison d'une interface haptique et de l'interface tangible proposée par WEGHORST [2003]. C'est avec le système *Chemical Force Feedback* (retour haptique des forces chimiques) que l'apprentissage du *docking* moléculaire par l'intermédiaire de la réalité virtuelle est abordée [BIVALL PERSSON 2008 ; BIVALL PERSSON *et al.* 2007].
- En effet, la discipline qui semble le plus intéresser les biologistes est le *docking* moléculaire. Très tôt, des projets de *docking* moléculaire voient le jour comme GROPEHaptic [BROOKS JR. *et al.* 1990 ; OUH-YOUNG *et al.* 1988] ou encore STALK [LEVINE *et al.* 1997]. Des chercheurs reconnus de la communauté haptique commencent à s'intéresser à cette problématique [SUBAŞI 2006 ; SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006, 2008]. LAI-YUEN et Y.-S. LEE [2005] proposent une interface haptique avec cinq DDLs afin d'effectuer du *docking* moléculaire rigide [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006] (voir figure 1.7 page ci-contre). Puis, à l'aide d'interfaces haptiques plus largement répandue comme le VIRTUOSE<sup>TM</sup> 6D35-45 (six DDLs), la manipulation [DAUNAY *et al.* 2007] puis le *docking* moléculaire [DAUNAY et RÉGNIER 2009] accompagné d'une évaluation temps-réel de l'énergie du système devient possible. Le *docking* moléculaire faisant intervenir des champs de force spécifiques, HOU et SOURINA [2010] proposent des modèles de forces haptiques adaptés.
- Les différentes briques permettant d'effectuer du *docking* moléculaire flexible interactif sont présentes. DELALANDE *et al.* [2010] nous offre la possibilité de manipuler des simulations réalistes en temps-réel. Puis DAUNAY et RÉ-





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

GNIER [2009] offrent la possibilité d'évaluer en temps-réel ces simulations. STONE *et al.* [2010] fournissent les interfaces nécessaires sur le logiciel VMD pour accéder à des solutions de réalité virtuelle. Des modèles de forces haptiques spécifiques au *docking* moléculaire sont développés [HOU et SOURINA 2010]. Pourtant, tous ces outils et solutions associés à la complexité que représente la réalisation d'une tâche de *docking* moléculaire semble difficilement accessible à un manipulateur seul.

## 1.3 État de l'art

La distinction entre travail coopératif et travail collaboratif est expliquée par ROSCHELLE et TEASLEY [1995].

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

traduit dans [KNAUF 2010] en français

Le travail coopératif implique une division du travail entre les participants, chaque participant étant responsable d'une partie du problème à résoudre. Dans la collaboration, les participants



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

s’engagent tous dans les mêmes tâches, en se coordonnant, afin de résoudre le problème ensemble.

Le travail collaboratif s’est développé rapidement avec l’informatique. On peut citer les outils de gestions de versions tels que GIT [2011], MERCURIAL [2011] ou encore SUBVERSION [2011] qui permettent la collaboration de plusieurs développeurs pour la création ou la modification de programmes informatiques. Puis Internet a donné naissance à des outils de collaboration tels que les *Wikis* [LEUF et CUNNINGHAM 2001 ; WAGNER 2004] avec le succès de WIKIPEDIA que l’on connaît. Cependant, ces deux exemples proposent une collaboration asynchrone où chaque acteur intervient derrière son prédécesseur pour ajouter, améliorer ou corriger une partie du travail. Aujourd’hui, les outils permettant la collaboration synchrone sont encore rares (systèmes de vidéoconférences, jeux vidéos en ligne).

## 1.4 Contexte

### 1.4.1 Le *docking* moléculaire

Le contexte de l’expérimentation est le *docking* moléculaire plus communément nommé *docking* moléculaire. Ce processus implique une analyse et une manipulation complexe reposant sur plusieurs expertises. Il est basé sur une



décomposition en trois niveaux de modélisation, traités du niveau le plus grossier au niveau le plus fin :

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

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

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

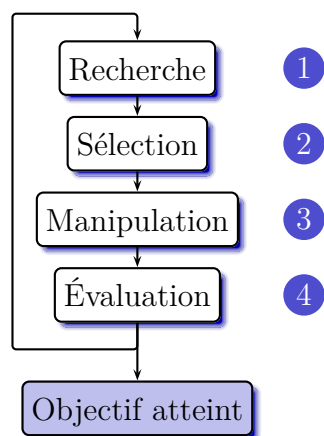
Pour chacun de ces différents niveaux, le processus de manipulation est similaire et peut être séparé en tâches élémentaires (voir figure 1.9 page suivante) :

**Recherche** Cette tâche concerne l'identification et la recherche d'une cible (atome, résidu, hélices- $\alpha$ , feuillets- $\beta$ , *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 1.9** – Processus de déformation moléculaire en quatre étapes

## Bibliographie

[ABAGYAN et TOTROV 1994]

ABAGYAN, Ruben et Maxim TOTROV (jan. 1994). « Biased probability Monte Carlo conformational searches and electrostatic calculations for peptides and proteins ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 235.3, pages 983–1002 (cf. pages 7, 9).

[ABAGYAN et al. 1994]

ABAGYAN, Ruben, Maxim TOTROV et Dmitry KUZNETSOV (mai 1994). « ICM - a new method for protein modeling and design : applications to docking and structure prediction from the distorted native conformation ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 15.5, pages 488–506. ISSN : 0192-8651 (cf. pages 7, 9).

[ARUNAN et al. 2011]

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

[BERENDSEN et al. 1995]

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

[BERGMAN et al. 1993]

BERGMAN, Lawrence D., Jane S. RICHARDSON, David C. RICHARDSON et Frederick P. BROOKS Jr. (1993). « VIEW - an exploratory molecular visualization system with user-definable interaction sequences ». Anglais. Dans *Proceedings of the 20th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. SIGGRAPH '93. Anaheim, CA : ACM, pages 117–126. ISBN : 0-89791-601-8 (cf. page 10).

[BIVALL PERSSON 2008]

BIVALL PERSSON, Petter (nov. 2008). « Learning molecular interaction concepts through haptic protein visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of Svenska föreningen för grafisk databehandling*. SIGRAD 2008. Linköping University Electronic Press, pages 17–19 (cf. page 12).

[BIVALL PERSSON *et al.* 2007]

- BIVALL PERSSON, Petter, Matthew COOPER, Lena TIBELL, Shaaron AINSWORTH, Anders YNNERMAN et Bengt-Harald JONSSON (mar. 2007). « Designing and evaluating a haptic system for biomolecular education ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference 2007*. IEEE Computer Society Press, pages 171–178. ISBN : 1-4244-0905-5 (cf. page 12).

[BLALOCK et SMITH 1984]

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

[BROOKS JR. *et al.* 1990]

- BROOKS JR., Frederick P., Ouh-Young MING, James J. BATTER et Jerome P. KILPATRICK (1990). « Project GROPEHaptic displays for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 17th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*. Dallas, TX, USA : ACM, pages 177–185. ISBN : 0-89791-344-2 (cf. pages 9, 12).

[CHURCH *et al.* 1977]

- CHURCH, George M., Joel L. SUSSMAN et Sung-Hou KIM (avr. 1977). « Secondary structural complementarity between DNA and proteins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences* 74.4, pages 1458–1462 (cf. page 4).

[CUMMINGS *et al.* 1995]

- CUMMINGS, Maxwell D., Trevor N. HART et Randy J. READ (mai 1995). « Monte Carlo docking with ubiquitin ». Anglais. Dans *Protein Science* 4.5, pages 885–899. ISSN : 1469-896X (cf. pages 7, 9).

[DAUNAY *et al.* 2007]

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

[DAUNAY et RÉGNIER 2009]

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

[DAVIES *et al.* 2005]

DAVIES, R. Andrew, Nigel W. JOHN, John N. MACDONALD et Keith H. HUGHES (mar. 2005). « Visualization of molecular quantum dynamics : a molecular visualization tool with integrated Web3D and haptics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 10th international conference on 3D Web technology*. Web3D '05. Bangor, United Kingdom : ACM, pages 143–150. ISBN : 1-59593-012-4 (cf. pages 10, 11).

[DELALANDE *et al.* 2009]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAADEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. page 11).

[DELALANDE *et al.* 2010]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Benoist LAURENT, Marc GUÉROULT, Brigitte HARTMANN et Marc BAADEN (jan. 2010). « Multi-resolution approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device ». Anglais. Dans *Pacific Symposium on Biocomputing*, pages 205–215 (cf. pages 11, 12).

[DELANO 2002]

DELANO, Warren L. (2002). *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. URL : <http://www.pymol.org> (visité le 25 sept. 2011) (cf. page 10).

[DREES *et al.* 1996]

DREES, Robert C., Jürgen PLEISS et Rolf D. SCHMID (1996). « Highly Immersive Molecular Modeling (HIMM) : an architecture for the integration of molecular modeling and virtual reality ». Anglais. Dans *German Conference on Bioinformatics*, pages 190–192 (cf. page 11).

[DREES *et al.* 1998]

DREES, Robert C., Jürgen PLEISS, Rolf D. SCHMID et Dieter ROLLER (juin 1998). « Integrating molecular modeling tools and virtual reality engines : an architecture for a Highly Immersive Molecular Modeling (HIMM) environment ». Anglais. Dans *Proceedings of the Computer Graphics International 1998*. CGI '98. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 391–392. ISBN : 0-8186-8445-3 (cf. page 11).

[EWING *et al.* 2001]

EWING, Todd J. A., Shingo MAKINO, A. Geoffrey SKILLMAN et Irwin D. KUNTZ (mai 2001). « DOCK 4.0 : search strategies for automated molecular docking of flexible molecule databases ». Anglais. Dans *Journal*

of *Computer-Aided Molecular Design* 15.5, pages 411–428 (cf. pages 7, 9).

[FISCHER et BEENSCH 1894]

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

[FRIESNER *et al.* 2004]

10 FRIESNER, Richard A., Jay L. BANKS, Robert B. MURPHY, Thomas A. HALGREN, Jasna J. KLICIC, Daniel T. MAINZ, Matthew P. REPASKY, Eric H. KNOLL, Mee SHELLEY, Jason K. PERRY, David E. SHAW, Perry FRANCIS et Peter S. SHENKIN (mar. 2004). « Glide : a new approach for rapid, accurate docking and scoring. 1. Method and assessment of docking accuracy. » Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 47.7, pages 1739–1749. ISSN : 0022-2623 (cf. pages 7, 9).

15 [GROSDIDIER 2007]

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

20 [HAAN *et al.* 2002]

HAAN, Gerwin de, Michal KOUTEK et Frits H. POST (nov. 2002). « Towards intuitive exploration tools for data visualization in VR ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. VRST '02. Hong Kong, China : ACM, pages 105–112. ISBN : 1-58113-530-0 (cf. page 11).

[HALGREN *et al.* 2004]

30 HALGREN, Thomas A., Robert B. MURPHY, Richard A. FRIESNER, Hege S. BEARD, Leah L. FRYE, W. Thomas POLLARD et Jay L. BANKS (mar. 2004). « Glide : a new approach for rapid, accurate docking and scoring. 2. Enrichment factors in database screening ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 47.7, pages 1750–1759 (cf. pages 7, 9).

[HART et READ 1992]

35 HART, Trevor N. et Randy J. READ (juil. 1992). « A multiple-start Monte Carlo docking method ». Anglais. Dans *Proteins : Structure, Function, and Bioinformatics* 13.3, pages 206–222. ISSN : 1097-0134 (cf. pages 7, 9).

[HASENKNOPF 2005]

HASENKNOPF, Bernold (nov. 2005). « Polyoxométallates fonctionnalisés : de l'assemblage supramoléculaire vers les nanobiotechnologies ». Habilitation à Diriger des Recherches. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI (cf. page 4).

[HESS *et al.* 2008]

HESS, Berk, Carsten KUTZNER, David van der SPOEL et Erik LINDAHL (nov. 2008). « GROMACS 4 : algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation ». Anglais. Dans *Journal of chemical theory and computation* 4.3, pages 435–447 (cf. page 10).

[HOU et SOURINA 2010]

HOU, XiYuan et Olga SOURINA (2010). « Haptic rendering algorithm for biomolecular docking with torque force ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 International Conference on Cyberworlds*. CW '10. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 25–31. ISBN : 978-0-7695-4215-7 (cf. pages 12, 13).

[HUITEMA et LIERE 2000]

HUITEMA, Henk et Robert van LIERE (oct. 2000). « Interactive visualization of protein dynamics ». Anglais. Dans *Proceedings of the 11th IEEE Visualization Conference*. VIS '00. Salt Lake City, UT, USA : IEEE Computer Society, pages 465–468. ISBN : 0-7803-6478-3 (cf. page 10).

[HUMPHREY *et al.* 1996]

HUMPHREY, William F., Andrew DALKE et Klaus SCHULTEN (fév. 1996). « VMD : Visual Molecular Dynamics ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics* 14.1, pages 33–38 (cf. page 10).

[JIANG *et al.* 2003]

JIANG, Sulin, Andrei TOVCHIGRECHKO et Ilya A VAKSER (2003). « The role of geometric complementarity in secondary structure packing : a systematic docking study ». Anglais. Dans *Protein Science* 12.8, pages 1646–1651 (cf. page 6).

[JONES *et al.* 1997]

JONES, Gareth, Peter WILLETT, Robert C. GLEN, Andrew R. LEACH et Robin TAYLOR (avr. 1997). « Development and validation of a genetic algorithm for flexible docking ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 267.3, pages 727–748. ISSN : 0022-2836 (cf. pages 7, 9).

[KEIZERS *et al.* 2005]

- KEIZERS, Peter H. J., Chris de GRAAF, Frans J. J. de KANTER, Chris OOSTENBRINK, K. Anton FEENSTRA, Jan N. M. COMMANDEUR et Nico P. E. VERMEULEN (sept. 2005). « Metabolic regio- and stereoselectivity of cytochrome P450 2D6 towards 3,4-methylenedioxy-N-alkylamphetamines :  
5 in silico predictions and experimental validation ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 48.19, pages 6117–6127 (cf. page 8).

[KESSLER *et al.* 1999]

- KESSLER, Naama, Daniele PERL-TREVES, Lia ADDADI et Miriam EISENSTEIN (oct. 1999). « Structural and chemical complementarity between antibodies and the crystal surfaces they recognize ». Anglais. Dans *Proteins : Structure, Function, and Bioinformatics* 34.3, pages 383–394.  
10 ISSN : 1097-0134 (cf. page 6).

[KLOSOWSKI *et al.* 2002]

- KLOSOWSKI, James T., Peter D. KIRCHNER, Julia VALUYEVA, Greg ABRAM, Christopher J. MORRIS, Robert H. WOLFE et Thomas JACKMAN (mai 2002). « Deep View : high-resolution reality ». Anglais. Dans *IEEE Computer Graphics and Applications* 22.3, pages 12–15. ISSN :  
15 0272-1716 (cf. page 10).

20 [KNAUF 2010]

- KNAUF, Audrey (mai 2010). *Les dispositifs d'intelligence économique : compétences et fonctions utiles à leur pilotage*. Intelligence économique. L'Harmattan. ISBN : 9782296119321 (cf. page 13).

[KOUTEK *et al.* 2002]

- KOUTEK, Michal, Jeroen van HEES, Frits H. POST et A. F. BAKKER (mai 2002). « Virtual spring manipulators for particle steering in molecular dynamics on the responsive workbench ». Anglais. Dans *Proceedings of the workshop on Virtual environments 2002*. EGVE '02. Barcelona, Spain : Eurographics Association, pages 53–62. ISBN : 1-58113-535-1  
25 (cf. page 11).

[KŘENEK *et al.* 1999]

- KŘENEK, Aleš, Martin ČERNOHORSKÝ et Zdeněk KABELÁČ (1999). « Haptic visualization of molecular model ». Anglais. Dans *International Conference on Computer Graphics, Visualization and Computer Vision*,  
35 pages 133–139 (cf. page 10).

[LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2005]

- LAI-YUEN, Susana K. et Yuan-Shin LEE (déc. 2005). « Computer-aided molecular design (CAMD) with force-torque feedback ». Anglais. Dans



- Proceedings of the 9th International Conference on Computer Aided Design and Computer Graphics*. CAD-CG '05. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 199–204. ISBN : 0-7695-2473-7 (cf. page 12).
- 5 [LAI-YUEN et Y.-S. LEE 2006]  
— (2006). « Interactive computer-aided design for molecular docking and assembly ». Anglais. Dans *Computer-Aided Design and Applications* 3.6, pages 701–710 (cf. pages 12, 13).
- [LEACH et al. 2006]  
10 LEACH, Andrew R., Brian K. SHOICHET et Catherine E. PEISHOFF (oct. 2006). « Prediction of protein-ligand interactions. Docking and scoring : successes and gaps ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 49.20, pages 5851–5855. ISSN : 1522-2667 (cf. page 6).
- [Y.-G. LEE et LYONS 2004]  
15 LEE, Yong-Gu et Kevin W. LYONS (jan. 2004). « Smoothing haptic interaction using molecular force calculations ». Anglais. Dans *Computer-Aided Design* 36.1, pages 75–90. ISSN : 0010-4485 (cf. page 11).
- [LENNARD-JONES 1924a]  
20 LENNARD-JONES, John E. (oct. 1924a). « On the determination of molecular fields. I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature ». Anglais. Dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106.738, pages 441–462. ISSN : 09501207 (cf. pages 11, 12).
- [LENNARD-JONES 1924b]  
25 — (oct. 1924b). « On the determination of molecular fields. II. From the equation of state of a gas ». Anglais. Dans *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 106.738, pages 463–477. ISSN : 09501207 (cf. page 11).
- [LEUF et CUNNINGHAM 2001]  
30 LEUF, Bo et Ward CUNNINGHAM (2001). *The wiki way : quick collaboration on the Web*. Anglais. Boston, MA, USA : Addison-Wesley. ISBN : 0-201-71499-X (cf. page 14).
- [LEVINE et al. 1997]  
35 LEVINE, David, Michael FACELLO, Philip HALLSTROM, Gregory REEDER, Brian WALENZ et Fred STEVENS (avr. 1997). « STALK : an interactive system for virtual molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE Computer in Sciences and Engineering* 4.2, pages 55–65. ISSN : 1070-9924 (cf. page 12).

[McCOY *et al.* 1997]

McCOY, Airlie J., V. CHANDANA EPA et Peter M. COLMAN (mai 1997). « Electrostatic complementarity at protein/protein interfaces ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 268.2, pages 570–584. ISSN : 0022-2836

5 (cf. page 6).

[MEAGHER et CARLSON 2004]

MEAGHER, Kristin L. et Heather A. CARLSON (oct. 2004). « Incorporating protein flexibility in structure-based drug discovery : using HIV-1 protease as a test case ». Anglais. Dans *Journal of the American Chemical Society* 126.41, pages 13276–13281 (cf. page 8).

10

[MORRIS *et al.* 1998]

MORRIS, Garrett M., David S. GOODSSELL, Robert S. HALLIDAY, Ruth HUEY, William E. HART, Richard K. BELEW et Arthur J. OLSON (nov. 1998). « Automated docking using a Lamarckian genetic algorithm and an empirical binding free energy function ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 19.14, pages 1639–1662. ISSN : 1096-987X (cf. pages 7, 9).

15

[MÜLLER 1994]

MÜLLER, Paul (1994). « Glossary of terms used in physical organic chemistry ». Anglais. Dans *Pure and applied chemistry* 66.5, pages 1077–1184 (cf. pages 7, 15).

20

[NURISSE 2010]

NURISSE, Alessandra (mai 2010). « Études in silico des interactions protéines-carbohydates ». Thèse de doctorat. Université Joseph-Fourier - Grenoble I (cf. page 4).

25

[ÖSTERBERG *et al.* 2002]

ÖSTERBERG, Fredrik, Garrett M. MORRIS, Michel F. SANNER, Arthur J. OLSON et David S. GOODSSELL (jan. 2002). « Automated docking to multiple target structures : incorporation of protein mobility and structural water heterogeneity in AutoDock ». Anglais. Dans *Proteins* 46.1, pages 34–40 (cf. pages 8, 9).

30

[OUH-YOUNG *et al.* 1988]

OUH-YOUNG, Ming, Michael E. PIQUE, John HUGHES, Neela SRINIVASAN et Frederick P. BROOKS JR. (avr. 1988). « Using a manipulator for force display in molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Robotics and Automation*. Tome 3. Philadelphia, PA, USA, pages 1824–1829 (cf. pages 10, 12).

35

[RADESTOCK *et al.* 2005]

RADESTOCK, Sebastian, Markus BÖHM et Holger GOHLKE (août 2005). « Improving binding mode predictions by docking into protein-specifically adapted potential fields ». Anglais. Dans *Journal of Medicinal Chemistry* 48.17, pages 5466–5479 (cf. page 8).

[RAREY *et al.* 1997]

RAREY, Matthias, Bernd KRAMER et Thomas LENGAUER (juil. 1997). « Multiple automatic base selection : Protein–ligand docking based on incremental construction without manual intervention ». Anglais. Dans *Journal of Computer-Aided Molecular Design* 11.4, pages 369–384. ISSN : 0920-654X (cf. pages 7, 9).

[RAREY *et al.* 1999]

— (mar. 1999). « Docking of hydrophobic ligands with interaction-based matching algorithms. » Anglais. Dans *Bioinformatics* 15.3, pages 243–250 (cf. pages 7, 9).

[ROSCHELLE et TEASLEY 1995]

ROSCHELLE, Jeremy et Stephanie D. TEASLEY (1995). « The construction of shared knowledge in collaborative problem solving ». Anglais. Dans *Computer-Supported Collaborative Learning*. Sous la direction de Claire O'MALLEY. Berlin : Springer, pages 69–97 (cf. page 13).

[SANKARANARAYANAN *et al.* 2003]

SANKARANARAYANAN, Ganesh, Suzanne WEGHORST, Michel SANNER, Alexandre GILLET et Arthur OLSON (mar. 2003). « Role of haptics in teaching structural molecular biology ». Anglais. Dans *Proceedings of the 11th Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems*. HAPTICS'03. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 363–366. ISBN : 0-7695-1890-7 (cf. page 12).

[SCHULZ-GASCH et STAHL 2004]

SCHULZ-GASCH, Tanja et Martin STAHL (déc. 2004). « Scoring functions for protein-ligand interactions : a critical perspective ». Anglais. Dans *Drug Discovery Today : Technologies* 1.3, pages 231–239. ISSN : 1740-6749 (cf. page 6).

[MERCURIAL 2011]

MERCURIAL. MERCURIAL : *source control management*. Anglais. Mercurial community. URL : <http://mercurial.selenic.com/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 14).

- [STONE *et al.* 2010]  
STONE, John, Axel KOHLMAYER, Kirby VANDIVORT et Klaus SCHULTEN (déc. 2010). « Immersive molecular visualization and interactive modeling with commodity hardware ». Anglais. Dans *Advances in Visual Computing*. Sous la direction de George BEBIS, Richard BOYLE, Bahram PARVIN, Darko KORACIN, Ronald CHUNG, Riad HAMMOUD, Muhammad HUSSAIN, Tan KAR-HAN, Roger CRAWFIS, Daniel THALMANN, David KAO et Lisa AVILA. Tome 6454. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin / Heidelberg, pages 382–393. ISBN : 978-3-642-17273-1 (cf. page 13).
- [SUBAŞI 2006]  
SUBAŞI, Erk (juin 2006). « Rigid molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Thèse de doctorat. Koç University (cf. page 12).
- [SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2006]  
SUBAŞI, Erk et Çağatay BAŞDOĞAN (juin 2006). « A new approach to molecular docking in virtual environments with haptic feedback ». Anglais. Dans *Proceedings of Eurohaptics*, pages 141–145 (cf. page 12).
- [SUBAŞI et BAŞDOĞAN 2008]  
— (fév. 2008). « A new haptic interaction and visualization approach for rigid molecular docking in virtual environments ». Anglais. Dans *Presence : Teleoper. Virtual Environ.* 17.1, pages 73–90. ISSN : 1054-7460 (cf. page 12).
- [SUBVERSION 2011]  
SUBVERSION. APACHE SUBVERSION : *Enterprise-class centralized version control for the masses*. Anglais. Apache Software Foundation. URL : <http://subversion.apache.org/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 14).
- [GIT 2011]  
GIT. GIT : *the fast version control system*. Anglais. Software Freedom Conservacy. URL : <http://www.git-scm.com/> (visité le 4 sept. 2011) (cf. page 14).
- [WAGNER 2004]  
WAGNER, Christian (2004). « Wiki : a technology for conversational knowledge management and group collaboration ». Anglais. Dans *Communications of the Association for Information Systems* 13.1, pages 265–289 (cf. page 14).

[WEGHORST 2003]

WEGHORST, Suzanne (déc. 2003). « Augmented tangible molecular models ». Anglais. Dans *Proceedings of International Conference on Artificial Reality and Telexistence*. ICAT 2003 (cf. pages 11, 12).

<sup>5</sup> [WOLLACOTT et MERZ JR. 2007]

WOLLACOTT, Andrew M. et Kenneth M. MERZ JR. (mar. 2007). « Haptic applications for molecular structure manipulation ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 25.6, pages 801–805. ISSN : 1093-3263 (cf. page 12).

## Bibliographie

---

# SHADDOCK – Manipulation collaborative de molécules

## Sommaire

5	<b>2.1 Introduction . . . . .</b>	<b>30</b>
	<b>2.2 Architecture matérielle et logicielle . . . . .</b>	<b>30</b>
	2.2.1 L'interface haptique . . . . .	30
	2.2.2 Configuration de travail collaboratif . . . . .	33
10	2.2.3 Une architecture client/serveur . . . . .	34
	<b>2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation . .</b>	<b>36</b>
	2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire . . . . .	37
	2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire . . . . .	39
	<b>2.4 Les outils d'interaction . . . . .</b>	<b>40</b>
15	2.4.1 Les outils existants . . . . .	40
	2.4.2 Les nouveaux outils d'interaction . . . . .	41
20	<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>45</b>

## 2.1 Introduction

Le chapitre 1 page 3 nous a permis d'identifier des problématiques de recherche. C'est autour de ces problématiques que la plate-forme SHADDOCK a été élaborée.

- 5 Nous commencerons par présenter les choix de matériels et d'architecture logicielle (voir section 2.2). Certaines propriétés particulières sont nécessaires pour le choix de l'interface haptique permettant la manipulation interactive ; elles seront détaillées dans la section 2.2.1. L'ensemble des éléments de la plate-forme sont organisés selon un architecture client/serveur ; les raisons  
10 de ce choix sont expliquées dans la section 2.2.3 page 34.

Ensuite, la plate-forme de simulation moléculaire en temps-réel est présentée (voir section 2.3 page 36). Tout d'abord, un logiciel de visualisation complet est nécessaire pour obtenir des affichages détaillés et complexes de molécules ; le logiciel est présenté dans la section 2.3.1 page 37. Puis un logiciel de si-  
15 mulation est utilisé afin d'obtenir un comportement physique réaliste de la molécule ; les différentes solutions existantes ainsi que le logiciel retenu sont présentés dans la section 2.3.2 page 39. Enfin, un module spécifique permettant d'obtenir des simulations moléculaires en temps-réel est présenté dans la section 2.3.2 page 40.

- 20 Le logiciel de visualisation moléculaire utilisé propose des premiers outils d'interaction avec les molécules. Ces outils sont présentés dans la section 2.4.1 page 40. Cependant, les outils existants n'ont pas été suffisants dans certains cas. De plus, notre étude du travail collaboratif a mené à la proposition de nouveaux outils haptiques présentés dans la section 2.4.2 page 41.

- 25 Les différents éléments de cette plate-forme sont résumés dans deux diagrammes UML (*Unified Modeling Language*). Un diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK est présenté sur la figure 2.1 page ci-contre. L'application VMD est détaillée dans un diagramme de composant UML sur la figure 2.2 page 32.

## 30 2.2 Architecture matérielle et logicielle

### 2.2.1 L'interface haptique

Une plate-forme de manipulation interactive en temps-réel nécessite des outils d'interaction. De plus, le but final de cette thèse est d'apporter des solutions d'assistance haptique pour le travail collaboratif. Les types d'interfaces



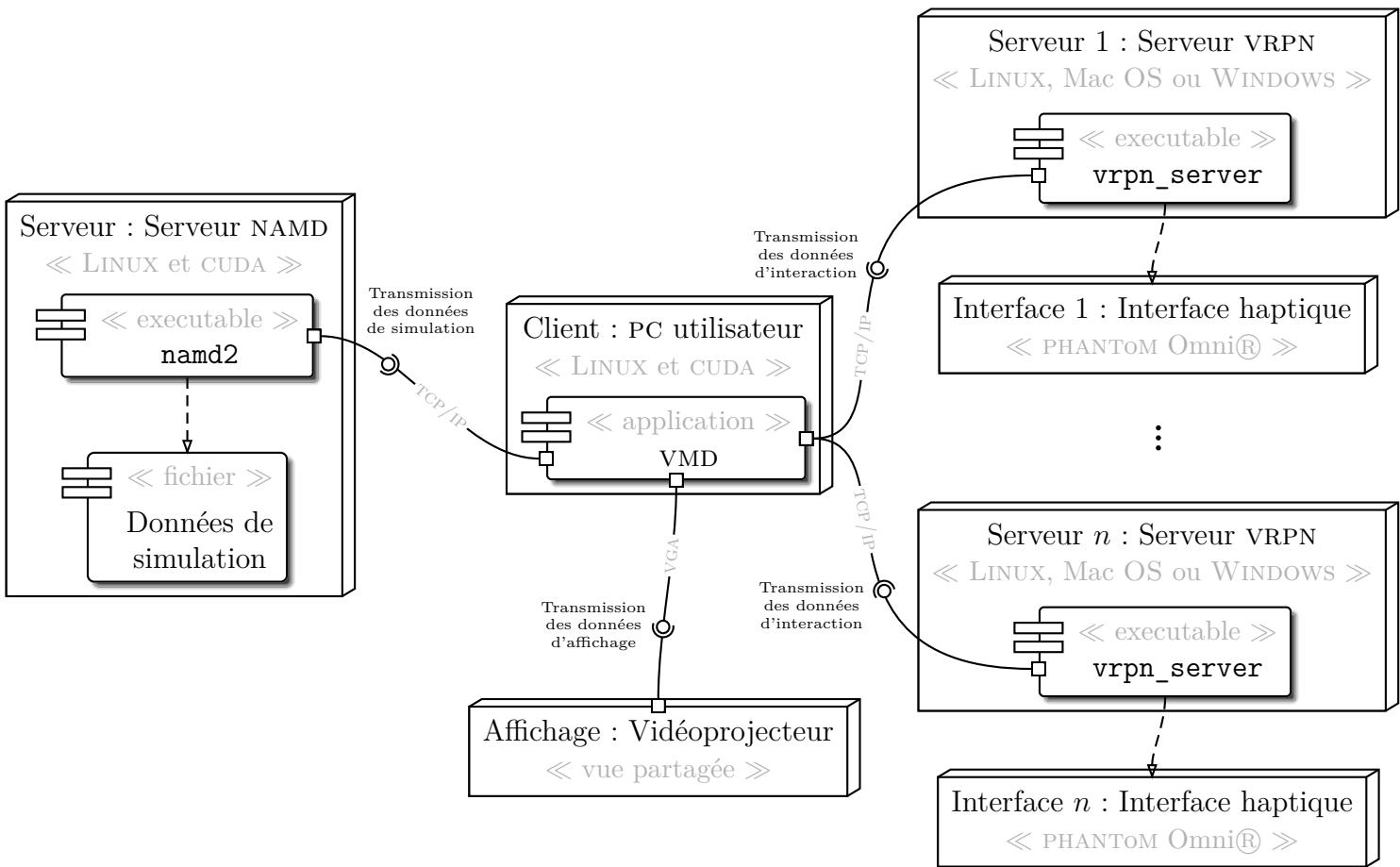
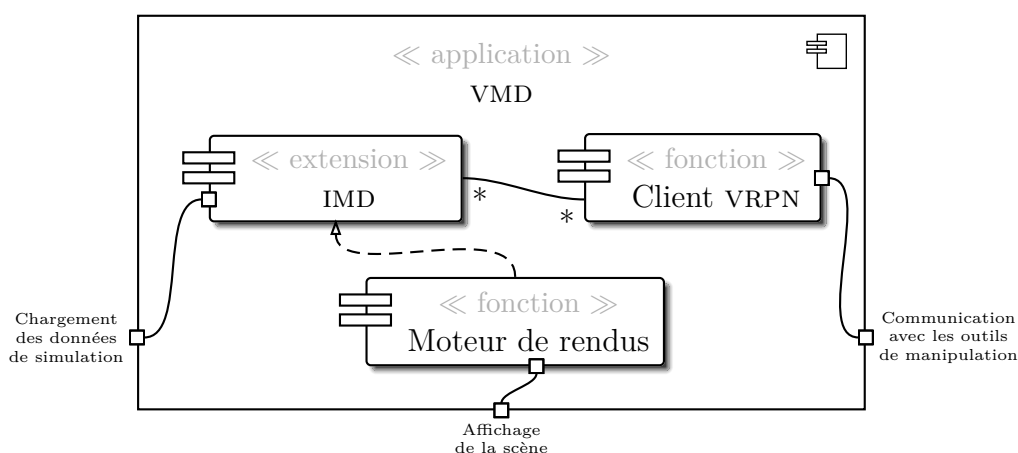


Figure 2.1 – Diagramme de déploiement UML de la plate-forme SHADDOCK



**Figure 2.2** – Diagramme de composant UML du nœud VMD

haptiques disponibles sur le marché sont relativement nombreuses et variées. Cependant, plusieurs contraintes nous ont permis de choisir le PHANTOM Omni® et le PHANTOM Desktop®.

Tout d’abord, nous cherchons à pouvoir effectuer de la manipulation dans un environnement en 3D ; il faut choisir une interface permettant au minimum six DDLs en entrée et au minimum trois DDLs en retour haptique. En effet, un outil permettant de manipuler une molécule en translation et en rotation nécessite six DDLs en entrée. Cependant, il est également nécessaire que le périphérique possède au minimum trois DDLs en retour haptique (en translation) afin de créer des solutions d’assistance haptique. Évidemment, trois DDLs supplémentaires en retour haptique (pour la rotation) pourraient permettre des solutions d’assistance plus spécifiques mais les interfaces haptiques proposant six DDLs sont rares et relativement chères.

De nombreuses interfaces répondent aux critères donnés comme le PHANTOM Premium® de chez SENSABLE ou le VIRTUOSE™ 6D35-45 de chez HAPTATION. Cependant, deux critères supplémentaires nous ont permis de choisir. Tout d’abord, nous souhaitons fournir des outils accessibles à des biologistes : il est préférable d’avoir un outil de taille modérée qui puisse se poser sur un bureau et se substituer à une souris. Deuxièmement, le PHANTOM Omni® fournit actuellement le meilleur rapport qualité/prix du marché en fonction de nos contraintes. En effet, dans le cadre du travail collaboratif, plusieurs interfaces haptiques sont nécessaires. De plus, le prix modéré peut amener les biologistes à adopter les outils sans avoir à investir de gros budgets ; ceci peut également faciliter l’intégration de ces solutions dans les laboratoires de biologistes. C’est donc l’interface PHANTOM Omni® [MASSIE et SALISBURY

1994] de l'entreprise SENSABLE qui répond le mieux à nos attentes pour la plate-forme SHADDOCK (voir figure 2.3).



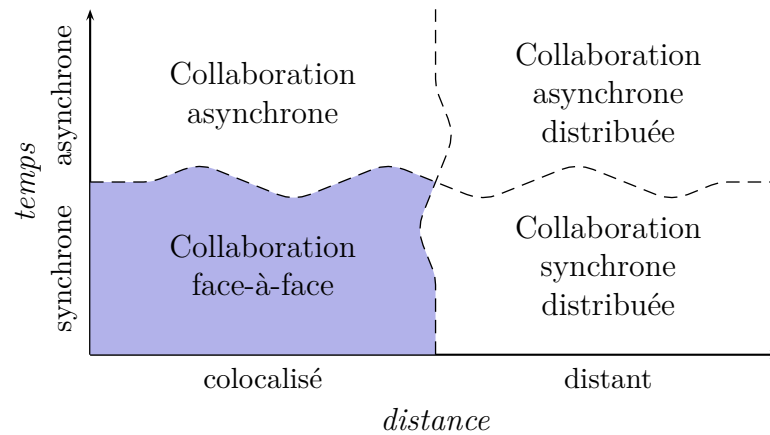
**Figure 2.3** – Interface PHANTOM Omni® 6 DDL/3 DDL

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. Cependant, nous verrons dans la section 2.2.3 page suivante que c'est un logiciel spécifique qui s'occupera de cette communication avec l'interface.

### 2.2.2 Configuration de travail collaboratif

Le chapitre 1 page 3 a permis de lister les principaux critères qui caractérisent une plate-forme pour le travail collaboratif. Le travail peut être synchrone ou asynchrone et il peut être distant ou colocalisé (voir figure 2.4 page suivante).

Nous avons vu l'importance d'une bonne conscience périphérique des autres utilisateurs dans les travaux de CASERA *et al.* [2006] ou TANG *et al.* [2006] et plus particulièrement dans l'étude proposée par SALLNÄS [2010] : elle montre l'amélioration des performances lorsque la conscience périphérique est augmentée. Les solutions de collaboration distantes doivent recréer cette conscience en transmettant les informations audio ou même visuelle. Pour conserver une bonne conscience périphérique, il est préférable de ne pas numériser les communications mais de conserver leur aspect réel : il faut une collaboration synchrone colocalisée ou collaboration face-à-face selon ELLIS *et al.* [1991] (voir figure 2.4 page suivante).



**Figure 2.4** – Classification des tâches collaboratives selon ELLIS *et al.* [1991]

De plus, la conscience périphérique ne se limite pas seulement à la conscience physique des autres utilisateurs. En effet, les collaborateurs agissent sur l'environnement ce qui permet de leur donner une existence virtuelle par l'intermédiaire des modifications de la scène. Ceci participe également à la conscience périphérique. Afin d'obtenir la meilleure conscience périphérique concernant l'environnement virtuel, les utilisateurs doivent partager le même environnement virtuel. C'est pour cette raison que la plate-forme SHADDOCK propose une visualisation vidéoprojetée sur un grand écran. De cette façon, la vue est partagée par l'ensemble des utilisateurs.

### 2.2.3 Une architecture client/serveur

Deux types d'architectures ont été explorés pour les Environnements Virtuels Collaboratifs (EVC) : client/serveur ou pair-à-pair<sup>1</sup>. Parmi les études notables, IGLESIAS *et al.* [2008] propose une tâche d'assemblage collaboratif assisté par l'haptique. Une des problématiques soulevée est la difficulté de maintenir un environnement virtuel cohérent et fidèle pour tous les utilisateurs. Afin de parer à ce problème, les développeurs ont retenu une architecture de type client/serveur : la simulation est effectuée par un processus qui distribue les informations aux différents clients. D'ailleurs, ce papier fournit un bon état de l'art des différents type d'architectures en soulignant les avantages et inconvénients de chacune.

En effet, il est expliqué que les architectures de types pair-à-pair permettent d'avoir des synchronisations sur le réseau plus rapides : elles nécessitent moins

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

de paquet réseau pour la communication. Cependant, ce type d'architecture génère des retours haptiques instables. D'ailleurs, J. KIM *et al.* [2004] qui étudie le déplacement collaboratif d'une boîte virtuelle assisté par l'haptique signalent qu'ils ont dû ajouter une viscosité importante dans le retour haptique pour éviter les instabilités. Bien que les architectures pair-à-pair permettent de bons résultats sur une connexion réseau relativement lente voire même sur un réseau susceptible d'avoir des coupures, elles ne sont pas adaptées pour des application collaboratives utilisant l'haptique.

D'autres travaux proposent des architectures client/serveur utilisant les interactions haptiques. P. HUANG *et al.* [2010] propose la manipulation d'un jeu de construction par blocs. La simulation est centralisée sur un serveur et les interaction haptiques sont produites par l'intermédiaire de clients. Il ne souligne aucune instabilité dans les interactions haptiques. NORMAN et HAMZA-LUP [2010] s'intéresse particulièrement aux influences du réseau sur les interactions visuo-haptiques. L'architecture client/serveur est la plus adaptée pour la gestion de simulation. Cependant, il conclue sur la nécessité d'avoir une information qui transite rapidement afin d'obtenir un rendu haptique le plus fidèle possible.

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. Cependant, l'avantage d'une architecture client/serveur est la cohérence de la simulation entre les différents nœuds du système (et donc entre les utilisateurs). Cependant, ce type d'architecture nécessite deux fois plus de paquets sur le réseau qu'une architecture pair-à-pair. Par opposition, l'architecture de type pair-à-pair ne permet pas d'obtenir un rendu haptique stable alors que l'architecture de type client/serveur le permet.

Dans notre cas, tous les utilisateurs se trouvent confrontés à la même simulation de façon colocalisée. L'affichage étant partagé, c'est l'architecture client/serveur qui est utilisée sur la plate-forme SHADDOCK. Cependant, nous venons de voir que l'architecture client/serveur n'est pas optimale en terme de performances sur le réseau. Heureusement, la proximité des utilisateurs durant l'expérimentation nous permet d'utiliser le réseau interne du laboratoire avec une bande passante suffisante pour compenser l'inefficacité de l'architecture client/serveur en terme de débit. La plate-forme SHADDOCK se distingue donc sous la forme d'une architecture de type client/serveur.

## Serveur de périphériques

Afin de gérer ces connexions client/serveur pour les interfaces haptiques, nous utilisons le logiciel VRPN (*Virtual Reality Protocol Network*) développé par TAYLOR II *et al.* [2001]. La connexion avec le moteur de simulation est gérée  
5 par un autre module qui sera détaillé plus tard dans la section 2.3.2 page 40.

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

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

15 La compilation de VRPN en tant que serveur de PHANTOM Omni® sous le système d'exploitation LINUX (UBUNTU v10.04) a nécessité quelques modifications dans le code. 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  
20 et donc autant d'interfaces haptiques que nécessaire. Cependant, cela suppose également d'avoir autant d'ordinateurs que de serveurs ce qui complexifie la logistique. On pourra noter que la chaleur dégagée par l'ensemble de ces machines additionnée à celle du vidéoprojecteur crée des températures durant l'expérimentation qui peuvent être désagréables. C'est pourquoi aucune des  
25 expérimentations proposée ne dure plus de 30 mn ou, le cas échéant, une pause est effectuée au bout de 30 mn afin d'aérer la salle d'expérimentation.

## 2.3 Plate-forme de simulation et de visualisation

SHADDOCK permet d'effectuer la visualisation de molécules. La visualisation  
30 est un processus complexe qui nécessite des rendus variés et complets. En effet, devant le nombre important d'informations que possède une molécule, il est primordial d'avoir accès à des rendus graphiques performants et complets sans surcharge. Cette tâche est effectuée par un logiciel de visualisation présenté dans la section 2.3.1 page ci-contre.

Ensuite, SHADDOCK simule une dynamique moléculaire. Un logiciel de simulation est nécessaire pour réaliser cette tâche. Il faut que ce logiciel puisse interagir avec le logiciel de visualisation. De plus, il est nécessaire de pouvoir paramétrer finement la simulation. Le logiciel de simulation choisi est  
5 présenté dans la section 2.3.2 page 39. Cependant, les logiciels de simulation ne sont pas conçus pour effectuer des simulations en temps-réel. Pourtant, afin de proposer une dynamique moléculaire interactive aux utilisateurs, il est nécessaire d'avoir accès à une simulation en temps-réel. Un module présenté dans la section 2.3.2 page 40 permet de faire communiquer le logiciel  
10 de visualisation avec le logiciel de simulation afin d'obtenir une simulation en temps-réel.

### 2.3.1 Logiciel de visualisation moléculaire

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

20 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  
25 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.

### 30 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

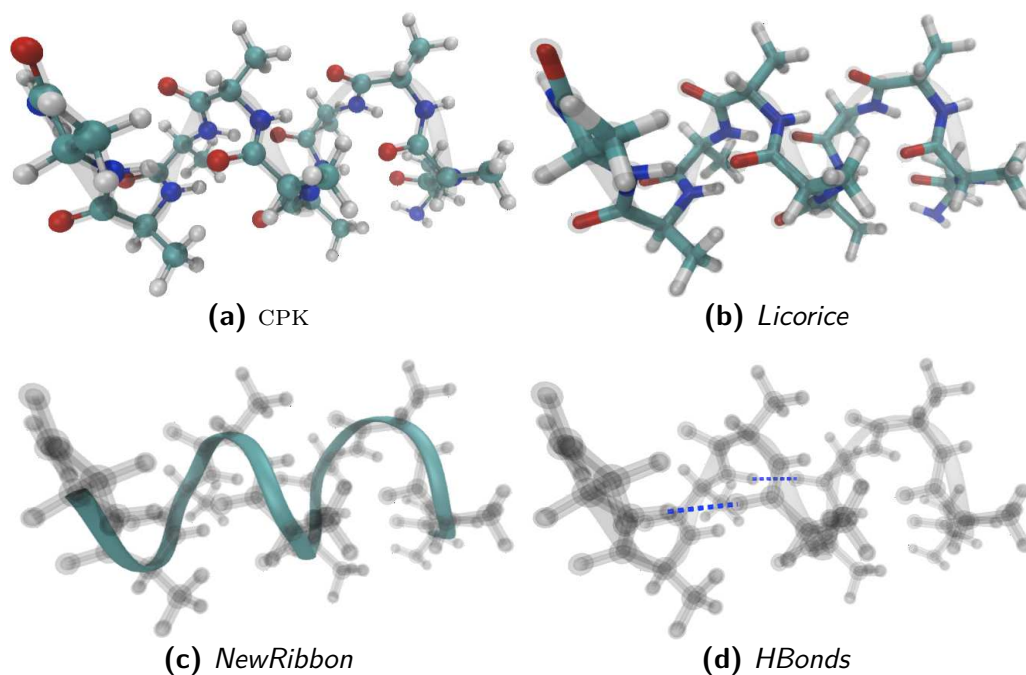
variés pour afficher une molécule. Quatre représentations différentes (voir figure 2.5) ont été utilisées sur la plate-forme SHADDOCK :

5 **CPK** affiche tous les atomes de la molécule sous forme de sphères en les reliant par des cylindres ; c'est un affichage très chargé lorsque le nombre d'atomes est important mais la taille des sphères et des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.5a) ;

**Licorice** représente tous les liens entre les atomes par des cylindres, sans représenter les atomes ; la taille des cylindres peut être modifiée (voir figure 2.5b) ;

10 **NewRibbon** produit une courbe spline sur les atomes  $C_{\alpha}$  représentant l'armature principale de la molécule ; la courbe est représentée sous forme de ruban (voir figure 2.5c) ;

15 **HBonds** affiche les potentielles liaisons hydrogène sous forme de traits en pointillés ; les seuils physiques ainsi que les paramètres d'affichage de la ligne (couleur, largeur, etc.) sont modifiables (voir figure 2.5d).



**Figure 2.5** – 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 (la couleur du curseur par exemple) ;

- 5 **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 ;

- 10 **Transparence** rend transparent les objets tout en conservant la teinte ;

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

### La génération automatique de fichier de simulation

La simulation nécessite de nombreuses informations. Une partie de ces informations découle directement de la molécule à l'état d'équilibre ; ces informa-

- 15 tions sont les suivantes :

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

- 20 La simple description des atomes et de leurs positions à l'état d'équilibre (fichier PDB) couplée aux données générées par CHARMM [BROOKS *et al.* 1983] permet de générer les fichiers nécessaires au logiciel de 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*
- 25 *builder*.

### 2.3.2 Logiciel de simulation moléculaire

Les deux principaux logiciels de simulation existants sont NAMD (*Scalable Molecular Dynamics*) [PHILLIPS *et al.* 2005] et GROMACS [BERENDSEN *et al.* 1995]. GROMACS est plus performant que NAMD, surtout dans les dernières

30 versions [HESS *et al.* 2008] qui offre des performances jusqu'à quatre fois plus rapide que NAMD. NAMD est développé par la même université que VMD et la connexion entre les deux logiciels est facilitée. Enfin, NAMD peut être aisément connecté à VMD dans le cadre d'une simulation interactive contrairement à GROMACS. C'est pourquoi le logiciel NAMD a été retenu pour notre plate-

35 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.

### Plate-forme de simulation moléculaire en temps-réel

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

Cependant, 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` [DELANDE *et al.* 2009] est une interface permettant d'utiliser le protocole `IMD` avec d'autre logiciel de simulation comme `GROMACS`. C'est une interface capable de gérer différents logiciels de visualisation et de simulation. Cependant, cette nouvelle solution n'a pas encore été implémentée dans notre plate-forme.

## 2.4 Les outils d'interaction

### 2.4.1 Les outils existants

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 `DDLs` afin d'observer la molécule sous différents angles. Elle peut également être configurées pour traduire la molécule ou obtenir diverses informations sur la molécules.

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 notre seconde expérimentation (voir chapitre 4 page 79).

5 Enfin, des outils apportant une dimension haptique sont disponibles par l'intermédiaire d'une connexion avec VRPN (voir section 2.2.3 page 36). Ces outils sont liés à des périphériques externes (des interfaces PHANTOM Omni® dans notre cas). Les outils proposés par défaut dans VMD ont été utilisés dans la première expérimentation (voir chapitre 3 page 49). Ils sont les suivants :

10 **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) pour déformer la molécule.

15 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 2.4.2.

## 2.4.2 Les nouveaux outils d'interaction

Durant les différentes études menées dans la suite de ce document, 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  
20 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.

### Amélioration de la sélection

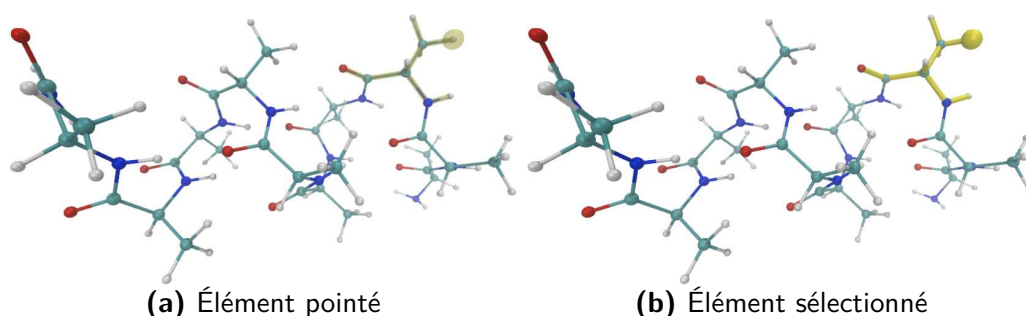
25 Durant le processus de recherche et de sélection, les utilisateurs ont souvent évoqué le besoin de connaître en continu leur position et de savoir à priori l'élément qui va être sélectionné. Pour que les utilisateurs connaissent à chaque instant l'élément qui peut être sélectionné, une information visuelle met en surbrillance l'élément pointé à chaque instant. La mise en surbrillance  
30 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.

Dans le cas d'une sélection par résidu, c'est l'ensemble du résidu qui est mis en surbrillance. Cependant, dans le cas d'une sélection par atome, la mise en

surbrillance d'un seul atome pourrait être difficile à apercevoir au sein d'une molécule complexe. En effet, le nombre important d'atomes d'une molécule peut surcharger le rendu graphique. C'est pourquoi dans ce cas, l'ensemble du résidu auquel appartient l'atome pointé est mis en surbrillance. Cependant,

5 l'atome pointé est agrandi afin de le distinguer du reste du résidu.

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 2.6.



**Figure 2.6** – Différence visuelle entre les éléments pointés et sélectionnés

### 10 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.

15

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

20

préférable de déplacer tous ces atomes liés en une seule manipulation.

C'est pourquoi un outil appliquant une force à un groupe d'atomes permet de le déplacer tout en conservant la stabilité intrinsèque. Les groupes d'atomes dignes d'intérêt sont les résidus (une vingtaine d'atomes), les hélices- $\alpha$  ou feuillets- $\beta$  (une vingtaine de résidus) et les molécules. Cependant, VMD n'est

25

pas capable de fournir l'information sémantique regroupant les atomes en hélices- $\alpha$  ou en feuillets- $\beta$ . 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 puissantes et peuvent produire des incohérences dans la simulation voire même un arrêt de la simulation. En effet, *NAMD* peut décider d'arrêter la simulation s'il considère que la simulation diverge trop d'un état stable. Il est donc nécessaire de diviser l'intensité des forces appliquées proportionnellement au nombre d'atomes sélectionnés.

### Outil de désignation

Un besoin récurrent constaté durant les expérimentations est la nécessité pour les utilisateurs de désigner un élément de la molécule. Parfois les utilisateurs éprouvent le besoin de désigner un élément de l'environnement virtuel pour un autre utilisateur. Les enregistrements audio ont également permis d'identifier ce besoin.

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

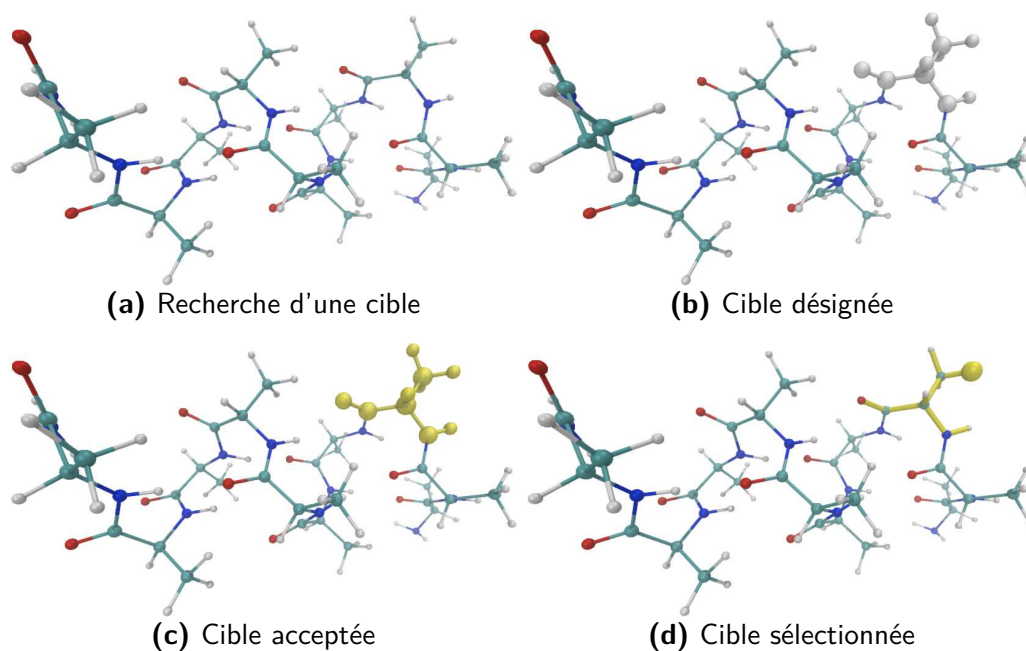
- a. Recherche d'une cible ;
- b. Désignation d'une cible ;
- c. Acceptation d'une cible ;
- d. Sélection d'une cible.

L'étape a consiste pour un utilisateur  $\mathcal{A}$  à rechercher une cible à désigner. Cette cible est choisie en fonction des objectifs de la tâche à réaliser et sera indiquée à un utilisateur  $\mathcal{B}$  (voir figure 2.7a page suivante).

Une fois la cible trouvée, l'utilisateur  $\mathcal{A}$  désigne la cible identifiée lors de l'étape b. La cible est alors mise en surbrillance de façon à être vue des autres utilisateurs (voir figure 2.7b page suivante).

L'étape c 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 (voir figure 2.7c page suivante). Tant qu'elle n'est pas acceptée, la résidu reste en surbrillance jusqu'à ce que la requête soit acceptée ou modifiée.

L'étape d est la dernière étape. L'utilisateur  $\mathcal{B}$  ayant accepté doit maintenant sélectionner la cible pour achever le processus de désignation. Tant que



**Figure 2.7** – Les quatre étapes de la désignation

l'utilisateur  $\mathcal{B}$  n'a pas sélectionné le résidu ciblé, le processus ne peut pas être considéré comme terminé et l'effet de surbrillance reste actif. Lorsque la cible est sélectionnée, le processus de manipulation reprend normalement (voir figure 2.7d).

## Bibliographie

[JMOL 2011]

JMOL. JMOL : *an open-source Java viewer for chemical structures in 3D*. Anglais. Sourceforge.net. URL : <http://www.jmol.org/> (visité le 3 juin 2011) (cf. page 37).

[BERENDSEN *et al.* 1995]

BERENDSEN, Herman J. C., David van der SPOEL et Rudy van DRUNEN (sept. 1995). « GROMACS : a message-passing parallel molecular dynamics implementation ». Anglais. Dans *Computer Physics Communications* 91.1–3, pages 43–56 (cf. page 39).

[BROOKS *et al.* 1983]

BROOKS, Bernard R., Robert E. BRUCCOLERI, Barry D. OLAFSON, David J. STATES, Sundaramoorthi SWAMINATHAN et Martin KARPLUS (avr. 1983). « CHARMM : a program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 4.2, pages 187–217 (cf. page 39).

[CASERA *et al.* 2006]

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 33).

[DELALANDE *et al.* 2009]

DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAA-DEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. page 40).

[ELLIS *et al.* 1991]

ELLIS, Clarence A., Simon J. GIBBS et Gail REIN (jan. 1991). « Groupware : some issues and experiences ». Dans *Communication on ACM* 34.1, pages 39–58 (cf. pages 33, 34).

[HESS *et al.* 2008]

HESS, Berk, Carsten KUTZNER, David van der SPOEL et Erik LINDAHL (nov. 2008). « GROMACS 4 : algorithms for highly efficient, load-balanced, and scalable molecular simulation ». Anglais. Dans *Journal of chemical theory and computation* 4.3, pages 435–447 (cf. page 39).

- [P. HUANG *et al.* 2010]  
HUANG, Pingguo, Yutaka ISHIBASHI, Norishige FUKUSHIMA et Shinji SUGAWARA (oct. 2010). « Interactivity improvement of group synchronization control in collaborative haptic play with building blocks ». Anglais.  
5 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 35).
- [HUMPHREY *et al.* 1996]  
HUMPHREY, William F., Andrew DALKE et Klaus SCHULTEN (fév. 1996).  
10 « VMD : Visual Molecular Dynamics ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Graphics* 14.1, pages 33–38 (cf. page 37).
- [IGLESIAS *et al.* 2008]  
IGLESIAS, Rosa, Sara CASADO, Teresa GUTIÉRREZ, Alejandro GARCÍA-ALONSO, Wai YU et Alan MARSHALL (jan. 2008). « Simultaneous remote  
15 haptic collaboration for assembling tasks ». Anglais. Dans *Multimedia Systems*. Tome 13. 4. Springer, Heidelberg, Germany, pages 263–274 (cf. page 34).
- [ITKOWITZ *et al.* 2005]  
ITKOWITZ, Brandon, Josh HANDLEY et Weihang ZHU (mar. 2005). « The  
20 OpenHaptics<sup>TM</sup> toolkit : a library for adding 3D<sup>TM</sup> 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 33).
- [J. KIM *et al.* 2004]  
25 KIM, Jung, Hyun KIM, Boon K. TAY, Manivannan MUNIYANDI, Man-dayam 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 35).  
30
- [MARSH *et al.* 2006]  
MARSH, James, Mashhuda GLENCROSS, Steve PETTIFER et Roger HUBBOLD (mai 2006). « A network architecture supporting consistent rich  
35 behavior in collaborative interactive applications ». Anglais. Dans *IEEE Transactions on visualization and computer graphics* 12.3, pages 405–416 (cf. page 35).



[MASSIE et SALISBURY 1994]

MASSIE, Thomas H. et Kenneth J. SALISBURY (nov. 1994). « PHAN-ToM 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 32).

[NORMAN et HAMZA-LUP 2010]

NORMAN, Jonathan et Felix G. HAMZA-LUP (avr. 2010). « Challenges in the deployment of visuo-haptic virtual environments on the internet ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2010 Second International Conference on Computer and Network Technology*. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 33–37 (cf. page 35).

[PETTERSEN *et al.* 2004]

PETTERSEN, Eric F., Thomas D. GODDARD, Conrad C. HUANG, Gregory S. COUCH, Daniel M. GREENBLATT, Elaine C. MENG et Thomas E. FERRIN (oct. 2004). « UCSF Chimera - a visualization system for exploratory research and analysis ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 25.13, pages 1605–1612 (cf. page 37).

[PHILLIPS *et al.* 2005]

PHILLIPS, James C., Rosemary BRAUN, Wei WANG, James GUMBART, Emad TAJKHORSHID, Elizabeth VILLA, Christophe CHIPOT, Robert D. SKEEL, Laxmikant KALÉ et Klaus SCHULTEN (mai 2005). « Scalable molecular dynamics with NAMD ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 26.16, pages 1781–1802 (cf. page 39).

[SALLNÄS 2010]

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 33).

[SAYLE et MILNER-WHITE 1995]

SAYLE, Roger A. et E. James MILNER-WHITE (sept. 1995). « RASMOL : biomolecular graphics for all ». Anglais. Dans *Trends in biochemical sciences* 20.9, pages 374–376 (cf. page 37).

[SENSABLE 2002]

SENSABLE, Technologies Incorporated® (avr. 2002). *GHOST® software developer's toolkit programmer's guide*. Anglais. 4.0. SensAble Technologies Incorporated® (cf. page 33).

[STADLER *et al.* 1997]

STADLER, Jörg, Ralf MIKULLA et Hans-Rainer TREBIN (juin 1997). « IMD : a software package for molecular dynamics studies on parallel computers ». Anglais. Dans *International Journal of Modern Physics* 8.5, pages 1131–1140 (cf. page 40).  
5

[TANG *et al.* 2006]

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 33).  
10

[TAYLOR II *et al.* 2001]

TAYLOR II, Russell M., Thomas C. HUDSON, Adam SEEGER, Hans WEBER, Jeffrey JULIANO et Aron T. HELSER (nov. 2001). « VRPN : a device-independent, network-transparent VR peripheral system ». Anglais. Dans *Proceedings of the ACM symposium on Virtual reality software and technology*. Virtual Reality Software and Technology 2001. New York, NY, USA : ACM, pages 55–61 (cf. page 36).  
15

[PYMOL 2011]

PYMOL. *The PyMOL molecular graphics system*. Anglais. Schrödinger, LLC. URL : <http://www.pymol.org/> (visité le 3 juin 2011) (cf. page 37).  
20

# Recherche collaborative de résidu sur une molécule

## Sommaire

5	<b>3.1 Introduction</b>	<b>50</b>
	<b>3.2 Recherche et sélection collaborative</b>	<b>50</b>
	3.2.1 Travaux existants	50
	3.2.2 Objectifs	52
10	<b>3.3 Présentation de l'expérimentation</b>	<b>53</b>
	3.3.1 Description de la tâche	53
	3.3.2 Spécificités du protocole expérimental	57
	<b>3.4 Résultats</b>	<b>60</b>
	3.4.1 Amélioration des performances en binôme	61
15	3.4.2 Stratégies de travail	65
	3.4.3 Résultats qualitatifs	72
	<b>3.5 Synthèse</b>	<b>74</b>
	3.5.1 Résumé des résultats	74
	3.5.2 Conclusion	74
20	<b>Bibliographie</b>	<b>76</b>

## 3.1 Introduction

L'état de l'art du premier chapitre nous a permis d'identifier les principales tâches élémentaires concernant l'interaction en environnement virtuel, décrites par BOWMAN [1999] : les Primitives Comportementales Virtuelles (PCVs) [FUCHS *et al.* 2006]. Chaque primitive nécessite que la précédente ait été réalisée avec succès ; on ne peut pas manipuler tant qu'une sélection n'a pas été effectuée ; on ne peut pas sélectionner sans avoir naviguer, explorer et identifier les cibles à sélectionner. Le processus d'exploration et de sélection sont les étapes primordiales à toute manipulation ultérieure. Cependant, la sélection au sein d'une simulation moléculaire est une problématique complexe à part entière [DELALANDE *et al.* 2010]. En effet, les molécules possèdent un nombre importants d'atomes sous la forme d'une longue chaîne carbonée repliée sur elle-même ce qui rend la recherche d'une cible complexe. L'appréhension d'un tel environnement virtuel peut être effectuée par des améliorations visuelles [CHAVENT *et al.* 2011] ou des interfaces d'interactions adaptées [DELALANDE *et al.* 2010] par exemple. Cependant, nous choisissons d'explorer une troisième solution : la distribution des charges cognitives de travail par l'intermédiaire d'une collaboration synchrone colocalisée.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux deux premières étapes du processus de déformation : la *recherche* et la *sélection* (voir figure 1.9 page 16). Nous étudions tout particulièrement l'influence du travail collaboratif sur ces étapes. Le prétexte de cette étude est la recherche de résidus. L'étude proposée montre l'intérêt du travail collaboratif sur des tâches de nature complexe. Cependant, nous verrons que les binômes adoptent des stratégies différentes, menant à des performances hétérogènes. Nous identifions ainsi les avantages de la collaboration mais également les contraintes d'une telle configuration de travail.

## 3.2 Recherche et sélection collaborative

### 3.2.1 Travaux existants

La sélection en environnement virtuel est une tâche élémentaire relativement peu explorée pour la biologie moléculaire en environnement virtuel. Pourtant, elle est déjà relativement développée pour les microscopes à force atomique (AFM pour *Atomic Force Microscope*) mais les contraintes techniques de cette technologie sont très différentes de nos contraintes en environnement virtuel ; nous ne nous étendrons pas sur ce sujet.

La taille et la complexité des molécules nécessite des solutions de sélection adaptées. Les logiciels les plus utilisés tel que PyMOL ou VMD proposent des moteurs de sélection à base de chaîne de caractères. Par exemple, pour sélectionner tous les atomes de type C, O, N ou CA, on utilisera les commandes

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

ou dans VMD

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

Cette méthode de sélection est seulement efficace dans le cas où la cible à sélectionner est connue à l'avance. Dans le cadre de l'exploration virtuelle d'une molécule en 3D, VMD propose également une sélection par *picking*<sup>1</sup> à l'aide de la souris. Cependant, ce type de méthode atteint ses limites en terme de précision dès que la molécule est de taille trop importante : la perception de la profondeur n'est pas permise avec cette méthode de sélection.

Depuis déjà plusieurs années, la communauté de la réalité virtuelle s'est intéressé à cette problématique en proposant des périphériques d'interaction pour les environnements virtuels en 3D. PAVLOVIĆ *et al.* [1996] ont développé une plate-forme permettant d'interagir avec les molécules en utilisant la voix et les gestes. Cependant, les techniques de segmentations pour la reconnaissance des gestes sont encore difficiles à mettre en place, même si l'arrivée récente de la KINECT de MICROSOFT® a amélioré cette démocratisation. On trouve également les travaux de POLYS *et al.* [2004] qui propose une interaction avec une *wand*<sup>2</sup> ou encore les travaux de OBEYSEKARE *et al.* [1996] permettant l'interaction gestuelle avec un gant sur un *workbench*<sup>3</sup>. Tous ces dispositifs sont relativement lourds à déployer et ne sont pas adaptés pour une utilisation sur un ordinateur de bureau.

Tous les dispositifs présentés dans le paragraphe précédent sont testés sur des molécules ne contenant que quelques atomes et ayant peu d'intérêt pour les biologistes. Cependant, la sélection sur des tâches pertinentes pour les biologistes est un sujet encore peu exploré. LEVINE *et al.* [1997] proposent une plate-forme d'interaction avec un environnement moléculaire virtuel afin

1. Méthode qui consiste à trouver l'élément pointé par la souris (2D) dans l'environnement virtuel (3D).

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

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

d'explorer un complexe ligand-protéine pour réaliser un amarrage de molécules. Cependant, l'amarrage de molécule s'effectue ici sur des corps rigides ce qui simplifie grandement la complexité de l'exploration. On trouve également les travaux de FERREY *et al.* [2008] mais là encore, il s'agit de corps rigides.

5 Cependant, les travaux ont évolué vers des corps flexibles avec DELALANDE *et al.* [2010] qui utilisent les périphériques haptiques pour aider à la localisation de ponts ioniques au sein d'une simulation moléculaire en temps-réel. L'interface haptique utilisée permet de ressentir les forces en action dans la simulation et ainsi améliorer le processus d'exploration et de sélection.

### 10 3.2.2 Objectifs

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

15 par une configuration de travail collaboratif pour la réalisation de cette tâche.

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

20 boratives sur des tâches de nature complexe.

De plus, nous souhaitons observer les stratégies de travail en collaboration. Nous supposons que les stratégies vont varier d'un groupe à l'autre en fonction des affinités et des connaissances intrinsèques du groupe. Nous verrons qu'une configuration collaborative permet de mettre en avant des stratégies

25 de travail distinctes en fonction de la communication entre les utilisateurs, des espaces de travail des manipulateurs, de la répartition des tâches, *etc.*

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

30 nication entre les manipulateurs.

Enfin, nous souhaitons valider la plate-forme de manipulation proposée. Pour cela, l'évaluation sera confiée aux sujets. En effet, il est nécessaire de prendre en compte l'expérience de l'utilisateur afin d'améliorer l'ergonomie des outils proposés. L'objectif est de vérifier l'utilisabilité de la plate-forme afin

35 d'identifier les points faibles et les contraintes.

### 3.3 Présentation de l'expérimentation

Afin de répondre à nos hypothèses de travail, résumées dans la section B.1.1 page 172, nous mettons en place une expérimentation pour la recherche de résidu au sein d'une molécule à travers une simulation en temps-réel. Cette section est destinée à décrire la tâche proposée puis les spécificités du protocole expérimental.

#### 3.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée consiste à trouver des résidus au sein d'une molécule puis à les extraire hors de la molécule. Les résidus sont des groupes d'atomes s'associant les uns aux autres le long d'une chaîne carbonée pour former une molécule. Trois molécules sont proposées dans le cadre de cette expérimentation. La molécule TRP-ZIPPER sera utilisée pour la procédure d'apprentissage de la plate-forme. Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisées pour la tâche de recherche et d'extraction de résidus : chaque molécule possède 5 résidus à extraire. Tous les résidus à rechercher sont affichés dans la table 3.1 page suivante. Pour une description plus précises des molécules, se reporter à la section A.2 page 165.

La figure 3.1 page 56 montre la répartition des résidus sur les deux molécules. Chaque résidu possède ses propres spécificités (position, couleur, *etc.*). Les critères de complexité, résumés pour chaque résidu dans la table 3.2 page 55, sont les suivants :

**Nombre de résidus** Le nombre total de résidus présents dans la molécule. Un nombre important des résidus surcharge visuellement l'environnement virtuel et augmente le nombre de cibles potentielles.

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

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

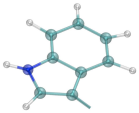

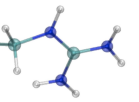
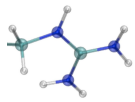
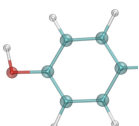
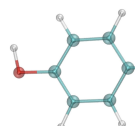
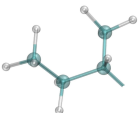
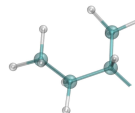
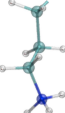
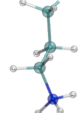
**Chaîne** Une chaîne d'atomes (la plupart du temps carbonés) avec des atomes d'hydrogène de chaque côté.

**Cycle** Une chaîne fermée d'atomes de carbone ou d'azote.

**Table 3.1** – Liste des résidus recherchés

**(a)** Résidus sur la molécule TRP-CAGE

**(b)** Résidus sur la molécule Prion

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



### 3.3. Présentation de l'expérimentation

**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 identifiés grâce à leur couleur singulière. Par contre, les atomes nombreux (comme les hydrogènes ou les carbones) seront plus difficiles à filtrer à cause de leur fréquence d'apparition élevée.

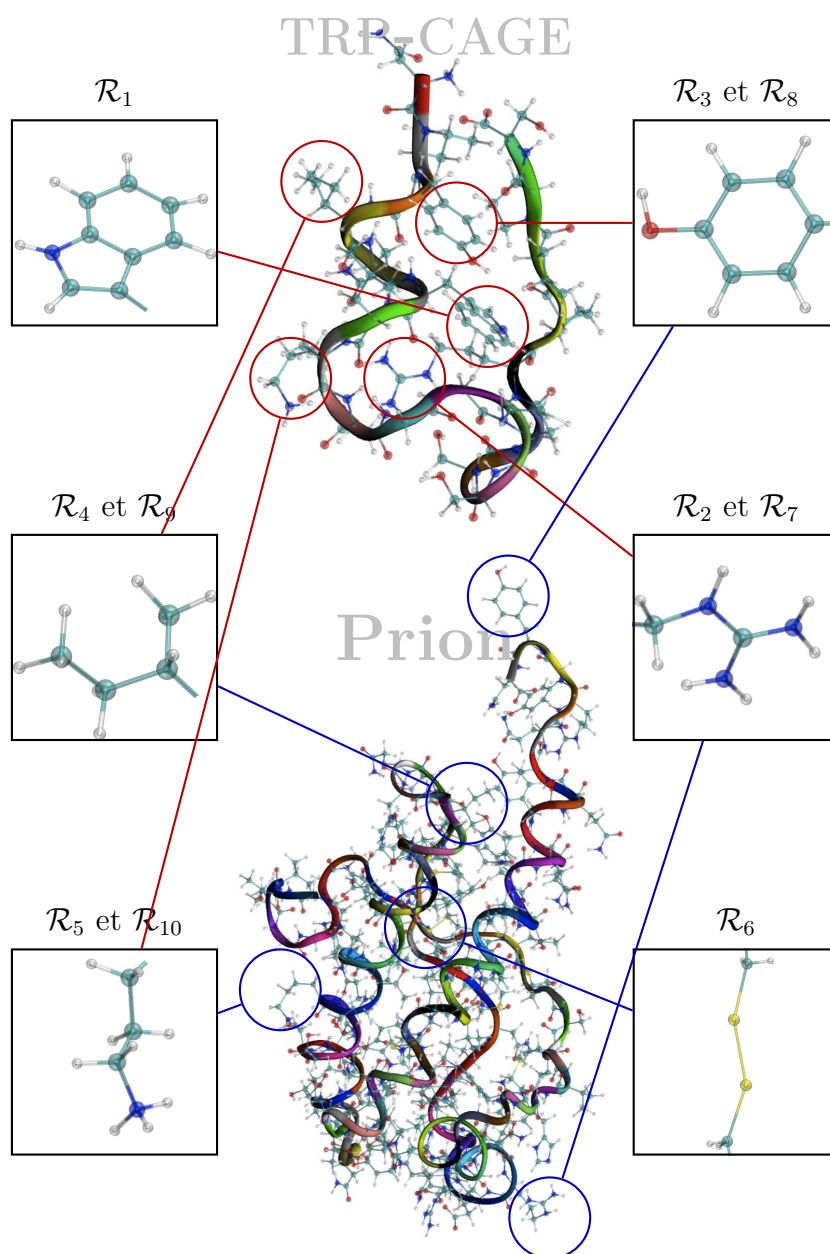
**Similarité** Certains résidus à chercher sont très similaires à d'autres résidus également présents sur la molécule. Les résidus similaires possèdent un atome de moins ou de plus par rapport au résidu recherché. À cause de cette similarité, les sujets vont mobiliser une partie du temps à identifier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

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

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

La tâche proposée nécessite deux étapes. Selon BOWMAN [1999], on distingue tout d'abord l'étape de recherche de la cible. Pour explorer la molécule afin d'identifier cette cible, les sujets disposent de l'outil *grab*. Lorsque la cible recherchée est identifiée, les sujets entrent dans la seconde étape : la sélection. Pour effectuer cette étape de sélection, les sujets disposent de l'outil *tug*. Les outils *grab* et *tug* sont décrits dans la section 2.4.1 page 40.

**Figure 3.1** – Répartition des résidus sur les molécules



### 3.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation est basée sur le dispositif expérimental décrit dans le chapitre A page 163. Cependant, certains choix expérimentaux concernant cette expérimentation sont détaillés dans les sections suivantes. Les détails à propos de la méthode expérimentale, présents dans la section B.1 page 172, sont résumés dans la table 3.3 page 60.

#### Matériel

Cette première expérimentation propose aux sujets d'effectuer une recherche de résidus au sein d'une molécule de taille importante. Les sujets disposent déjà de deux outils de déformation *tug*. Cependant, un outil d'orientation de la molécule est mis à disposition pour des raisons détaillées dans la section 3.3.2 page 59. Ce nouvel outil nécessite l'ajout de quelques matériels.

L'outil d'orientation de la molécule est assuré par un PHANTOM Omni® associé à l'outil *grab* (voir section 2.4.1 page 40). L'ajout d'un outil nécessite également l'ajout d'un ordinateur pour faire office de serveur VRPN. Dans ce cas, une machine de faible puissance est suffisante en tant que serveur. L'interface est placée devant le sujet en charge de cet outil.

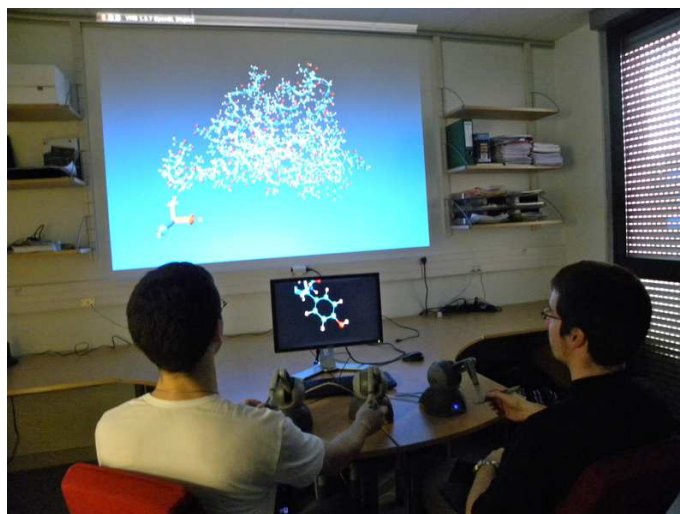
Durant l'expérimentation, il est demandé aux sujets de chercher des résidus sur la molécule. Le résidu à rechercher est affiché aux sujets pendant toute la durée de la tâche. Afin de ne pas perturber la scène virtuelle, le résidu n'est pas affiché sur l'écran de vidéoprojection. Un écran LCD 17 pouces est donc placé sur la table devant les sujets pour afficher en continu la cible à rechercher.

Pour finir, cette première expérimentation est destinée à mettre en évidence les problèmes de communication qui peuvent survenir lors de la réalisation d'une tâche en collaboration. Afin d'analyser la communication entre les différents sujets de l'expérimentation, nous souhaitons enregistrer tous les échanges verbaux. C'est pourquoi, un microphone a été installé sur la table, face aux sujets, afin de capter toutes les communications orales. L'enregistrement est assuré par le logiciel AUDACITY®. Un filtrage du bruit de fond est effectué *a fortiori* afin de rendre plus audibles les enregistrements.

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



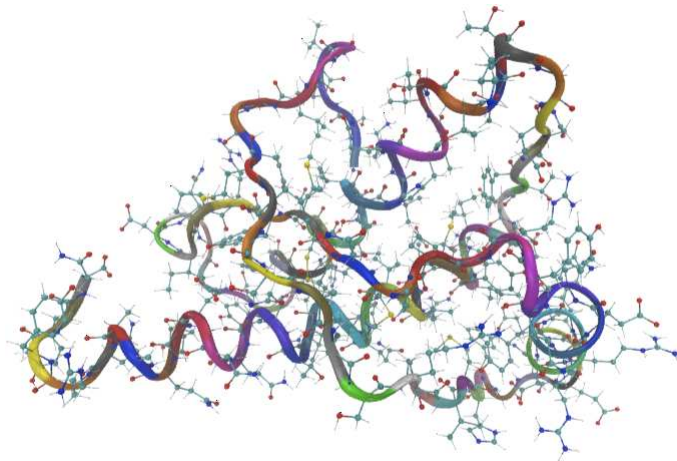
**Figure 3.2** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 3.3** – Photographie du dispositif expérimental

#### Visualisation

Dans cette première expérimentation, c'est la molécule Prion qui a été utilisée. Cette molécule est suffisamment volumineuse pour ne pas nécessiter d'atome fixes au niveau de la simulation. La molécule est donc laissée libre  
5 de tout mouvement. La figure 3.4 est une représentation de cette molécule durant la tâche.



**Figure 3.4** – Représentation de la molécule Prion pour l'expérimentation

#### Outils de manipulation

Durant cette tâche de recherche, nous donnons aux utilisateurs la possibilité de déformer la molécule à l'aide de l'outil *tug*. Cependant, afin de fournir un  
10 moyen d'explorer la molécule sous tous ses angles, il est nécessaire d'avoir également à sa disposition un moyen d'orienter la scène. Le cas échéant, tout résidu qui se trouverait derrière la molécule ne pourrait être trouvé qu'après une longue et fastidieuse déformation. C'est pourquoi, nous mettons un outil d'orientation de la molécule à disposition des sujets.

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

sujet n'a accès qu'à un seul outil de déformation et un outil de manipulation.

**Table 3.3** – Synthèse de la méthode expérimentale

Tâche	Recherche et sélection de motifs		
<b>Hypothèses</b>	$\mathcal{H}_1$	Amélioration des performances en binôme	
	$\mathcal{H}_2$	Stratégies variables en fonction des binômes	
	$\mathcal{H}_3$	Les sujets préfèrent le travail en binôme	
	$\mathcal{H}_4$	La plate-forme est appréciée des utilisateurs	
<b>Variables indépendantes</b>	$\mathcal{V}_{i1}$	Nombre de sujets	
	$\mathcal{V}_{i2}$	Résidu à chercher	
<b>Variables dépendantes</b>	$\mathcal{V}_{d1}$	Temps de réalisation	
	$\mathcal{V}_{d2}$	Distance entre les espaces de travail	
	$\mathcal{V}_{d3}$	Communication verbales	
	$\mathcal{V}_{d4}$	Affinités entre les sujets	
	$\mathcal{V}_{d5}$	Force moyenne appliquée par le sujet	
	$\mathcal{V}_{d6}$	Réponses qualitatives	
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

### 3.4 Résultats

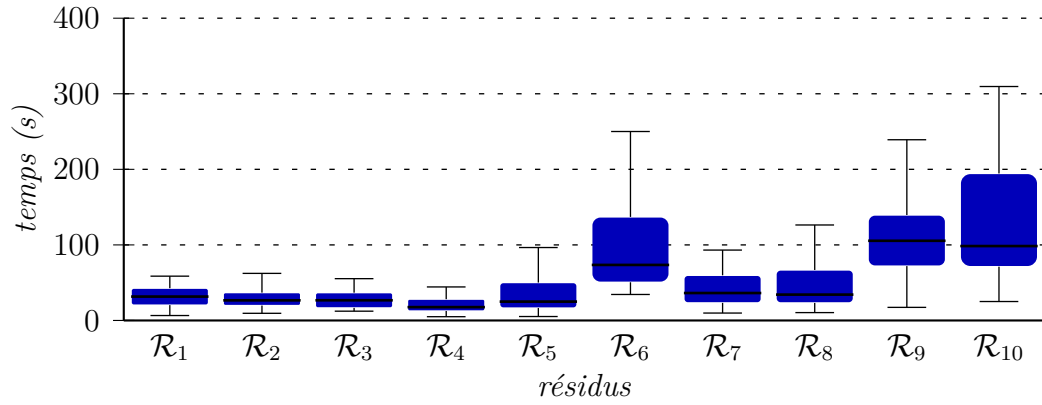
Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette première étude concernant la recherche et la sélection sur une tâche complexe de collaboration. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant, un test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

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

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

### 3.4.1 Amélioration des performances en binôme

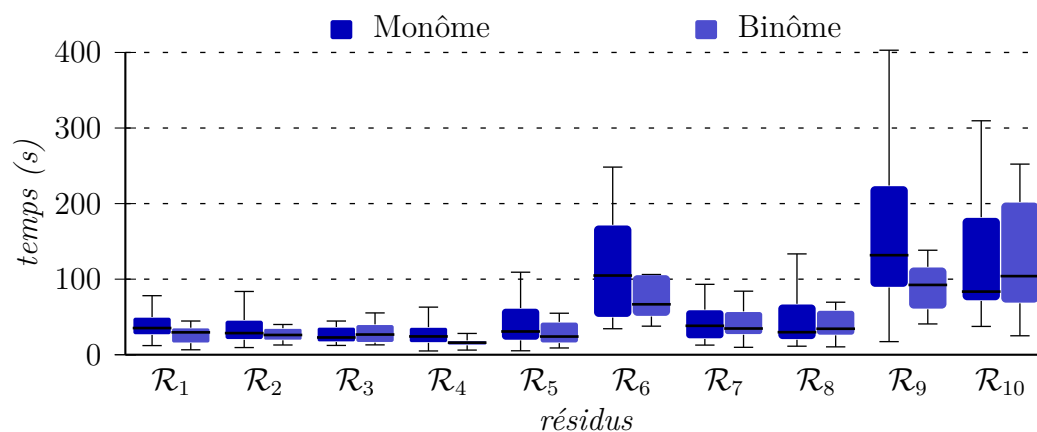
#### Données et statistiques



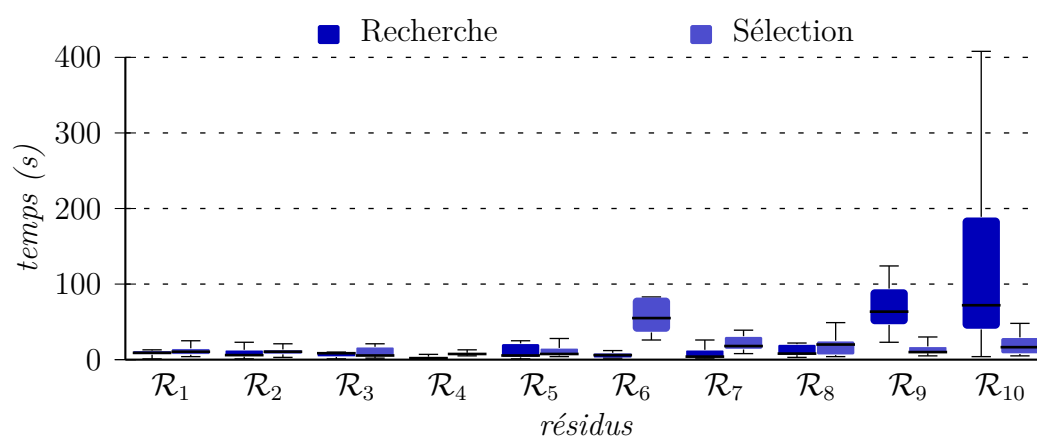
**Figure 3.5** – Temps de réalisation par résidu

- La figure 3.5 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour l'identification et l'extraction de chaque résidu  $\mathcal{V}_{i2}$ . L'analyse montre qu'il y a un effet significatif des résidus  $\mathcal{V}_{i2}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 163.1$ ,  $df = 9$ ,  $p \ll 0.05$ ). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de déterminer que les résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  obtiennent des temps de réalisation significativement plus longs que les autres résidus.

- La figure 3.6 page suivante présente les temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque résidu  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse ne montre pas d'effet significatif du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.082$ ). Cependant, en se limitant au groupe des trois résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  identifiés précédemment comme significativement plus longs à trouver et extraire, l'analyse montre un effet significatif du nombre de participants  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  ( $\chi^2 = 7.7$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.006$ ).



**Figure 3.6** – Temps de réalisation comparés (monôme ou binôme) par résidu



**Figure 3.7** – Temps de recherche et de sélection comparés par résidu



La figure 3.7 page ci-contre présente les temps de recherche et de sélection par résidu  $\mathcal{V}_{i2}$ . L'analyse montre un effet significatif des résidus  $\mathcal{V}_{i2}$  sur les temps de recherche ( $\chi^2 = 97.6$ ,  $df = 9$ ,  $p \ll 0.05$ ). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] permet de

5 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 ( $\chi^2 = 72.8$ ,  $df = 9$ ,  $p \ll 0.05$ ). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une

10 correction de HOLM [1979] permet de déterminer que le résidu  $\mathcal{R}_6$  obtient un temps de sélection significativement plus long que les autres résidus.

### Analyse et discussion

Les cinq résidus  $\mathcal{R}_1$ ,  $\mathcal{R}_2$ ,  $\mathcal{R}_3$ ,  $\mathcal{R}_4$  et  $\mathcal{R}_5$  sont au sein de la molécule TRP-CAGE qui en compte un nombre total relativement limité (20 résidus). Durant la phase d'exploration, les sujets construisent rapidement une carte mentale de

15 la molécule ce qui leur permet de d'identifier rapidement les résidus recherchés. De plus, les faibles contraintes physiques de la molécule (énergie totale du système peu élevée à cause du faible nombre d'atomes) la rend facile à déformer et permet un accès rapide aux structures internes. Cela facilite la

20 recherche des résidus qui sont dans une position interne à la molécule et qui nécessitent une déformation plus importante afin de pouvoir l'extraire. Tous ces facteurs rendent les tâches de recherche et de sélection peu complexes sur la molécule TRP-CAGE ce qui explique des temps de réalisation de la tâche très courts, aussi bien pour les monômes que pour les binômes.

Les cinq résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_7$ ,  $\mathcal{R}_8$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  sont au sein de la molécule Prion

25 qui en compte un nombre total relativement important (112 résidus). La construction complète d'une carte mentale est très complexe à cause du nombre importants d'atomes qui sont continuellement en mouvement (dû à la simulation en temps-réel). Les sujets n'étant jamais confronté plus de deux fois à la même tâche (une fois en monôme et une fois en binôme),

30 le phénomène d'apprentissage ne peut pas être effectué. En effet, les sujets ne se souviennent pas de la position d'un résidu d'une confrontation à l'autre (contrairement à la molécule TRP-CAGE pour certains cas). Les sujets adoptent une stratégie en plusieurs étapes en fonction de la caractéristique de la tâche et du résidu à trouver. Tout d'abord, une recherche exploratoire

35 permet d'identifier les résidus  $\mathcal{R}_7$  et  $\mathcal{R}_8$  qui se trouvent en position externe. Ensuite, lorsque cette première étape exploratoire ne permet pas d'identifier le résidu recherché, les sujets déforment la molécule afin d'accéder aux résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  qui se trouvent en position interne.

Le travail en binôme comparé au travail en monôme ne montre pas d'amélioration significative bien que la  $p$ -value soit très proche du seuil de significativité. Cependant, un test post-hoc a permis de d'identifier les résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  comme ayant un temps de réalisation significativement plus long. Sur ce groupe de résidus plus complexes, les binômes obtiennent une  
 5 amélioration significative des performances par rapport aux monômes. Ce résultat confirme notre hypothèse  $\mathcal{H}_1$  exclusivement sur des tâches de fortes complexité.

Comme développé dans la procédure expérimentale, le temps de réalisation  
 10 de la tâche peut être séparé en deux parties : le temps de recherche et le temps de sélection (voir figure B.1 page 174). Les résidus  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$  se distinguent par un temps de recherche significativement plus long que les autres résidus (excepté  $\mathcal{R}_6$ ). En effet, ces deux résidus sont en présence d'autres résidus similaires au sein de la même molécule (voir table 3.2 page 55). Ces similarités  
 15 ont pour effet de monopoliser l'attention des sujets ce qui provoque une hausse significative du temps de recherche du résidu au sein de la molécule.

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

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

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

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

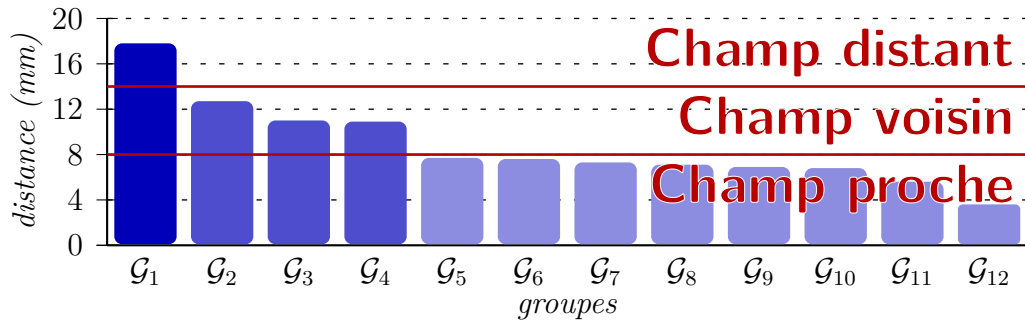
**Temps de sélection prédominant** Les sujets ont un temps important alloué à la sélection et à l'extraction du résidu recherché. Le résidu est

rapidement identifié mais il est difficile d'y accéder directement. Une phase de déformation est nécessaire pour le sélectionner. Le résidu  $\mathcal{R}_6$  est concerné. Dans cette configuration, le travail collaboratif améliore significativement les performances. En effet, l'étape de déformation bénéficie d'une action coordonnée entre les sujets : l'effort déployé est alors plus important et le contrôle sur la déformation meilleur ce qui permet une réalisation de la tâche plus rapide.

### 3.4.2 Stratégies de travail

#### Données et analyses

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

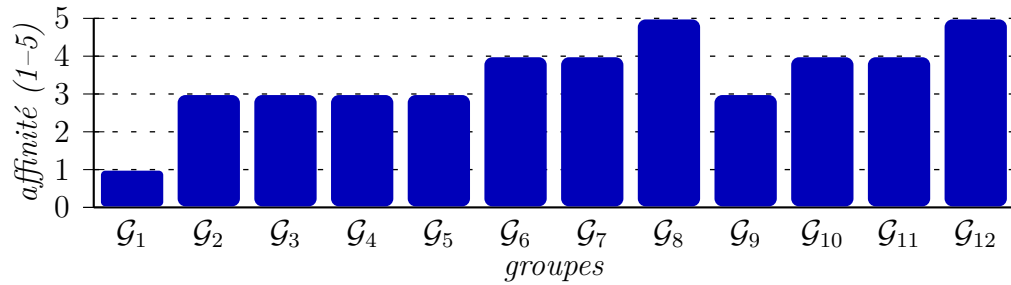


**Figure 3.8** – Distance moyenne entre les sujets pour chaque binôme sur les résidus  $\mathcal{R}_6$ ,  $\mathcal{R}_9$  et  $\mathcal{R}_{10}$

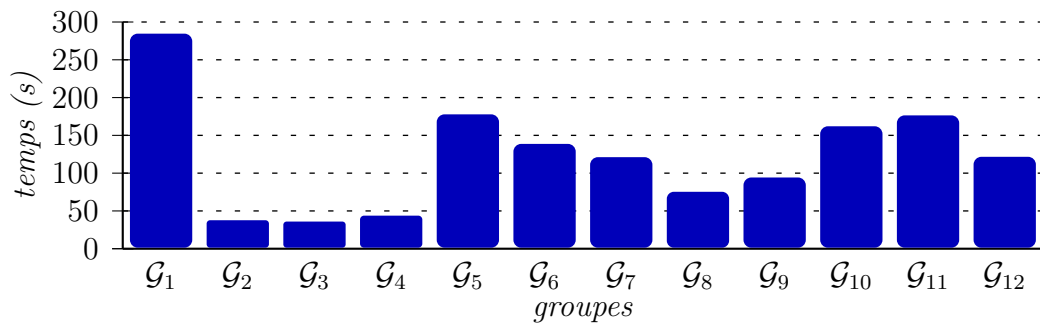
- La figure 3.8 présente la distance moyenne entre les espaces de travail  $\mathcal{V}_{d2}$  de chaque binôme. Les binômes peuvent être classés en trois groupes : *espace distant*, *espace voisin* et *espace proche*.

- La figure 3.9 page suivante présente les affinités  $\mathcal{V}_{d4}$  de chaque binôme. Les notes, comprises entre un et cinq, montre que les binômes choisis ont des affinités relativement variées. L'affinité entre les sujets du groupe  $\mathcal{G}_1$  est très basse contrairement aux groupes  $\mathcal{G}_8$  et  $\mathcal{G}_{12}$  pour lesquelles l'affinité est très élevée.

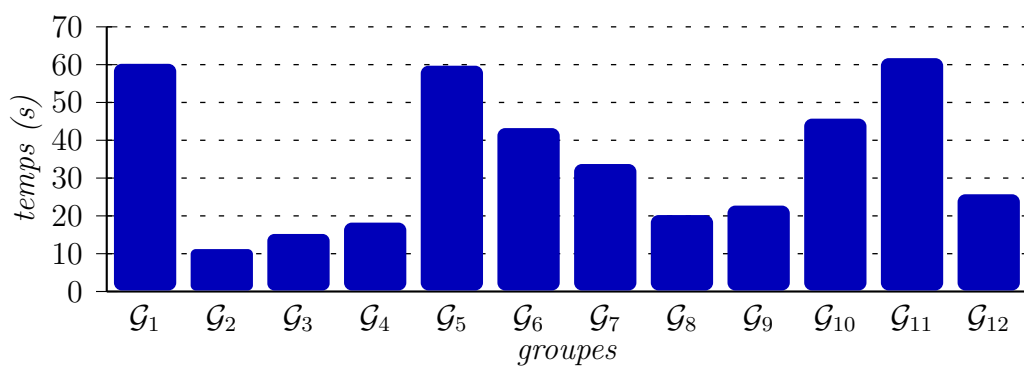
La figure 3.10 page suivante présente les temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  de chaque binôme. Le temps de réalisation de  $\mathcal{G}_1$  est particulièrement important (plus d'une fois et demi les autres groupes les plus longs). À l'opposé, on note que  $\mathcal{G}_2$ ,  $\mathcal{G}_3$  et  $\mathcal{G}_4$  obtiennent des temps de réalisation extrêmement bas.



**Figure 3.9** – Affinité entre les sujets pour chaque binôme

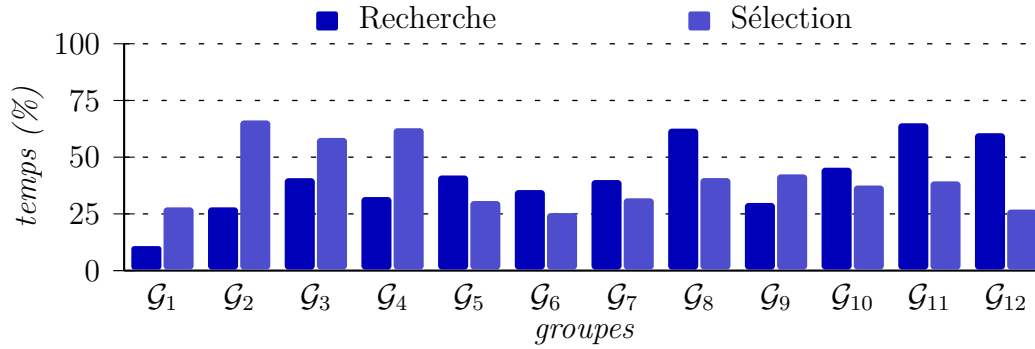


**Figure 3.10** – Temps de réalisation entre les sujets pour chaque binôme



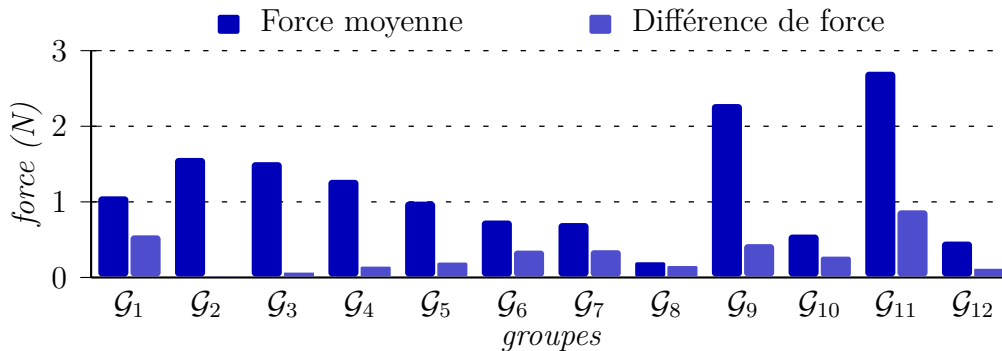
**Figure 3.11** – Temps de communication verbale entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.11 page ci-contre présente les temps de communication verbale  $\mathcal{V}_{d3}$  de chaque binôme.  $\mathcal{G}_2$ ,  $\mathcal{G}_3$  et  $\mathcal{G}_4$  ont des temps de communication verbale inférieurs à 20 s. À l’opposé,  $\mathcal{G}_1$ ,  $\mathcal{G}_5$  et  $\mathcal{G}_{11}$  ont des temps de communication verbale qui approche les 60 s.



**Figure 3.12** – Pourcentage de temps de communication verbale pendant la recherche et la sélection entre les sujets pour chaque binôme

- 5 La figure 3.12 présente les pourcentages de temps de communication verbale durant la phase de recherche et durant la phase de sélection de chaque binôme par rapport au temps total de réalisation de la tâche. Le pourcentage représente le rapport du temps de communication verbale durant la phase recherche ou de sélection rapporté respectivement au temps total de la phase de recherche ou de sélection. Les binômes  $\mathcal{G}_1$  à  $\mathcal{G}_4$  ainsi que  $\mathcal{G}_9$  commu-
- 10 la phase de recherche ou de sélection. Les binômes  $\mathcal{G}_5$  à  $\mathcal{G}_8$  et  $\mathcal{G}_{10}$  à  $\mathcal{G}_{12}$  communiquent plus durant la phase de recherche. Notons également que  $\mathcal{G}_1$  communique assez peu par rapport aux autres binômes.



**Figure 3.13** – Force moyenne et différence de force entre les sujets pour chaque binôme

La figure 3.13 représente la force moyenne appliquée par les sujets  $\mathcal{V}_{d5}$  et

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

L'ensemble des résultats et analyses précédentes permet de différencier les binômes ce qui confirme notre hypothèse  $\mathcal{H}_2$ . Les binômes se différencient pas des stratégies de travail variables. Les sections suivantes caractérisent les différentes stratégies de travail en fonction de plusieurs paramètres (distance  
10 entre les espaces de travail, affinités, temps de réalisation de la tâche, communication verbale, forces moyennes appliquées). Trois stratégies sont décrites, distinguées en fonction des distances entre les espaces de travail.

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

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

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

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

### Collaboration en champ proche

**Caractéristiques** La collaboration en champ proche, inférieures à 8 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des distances inférieures à 10 Å  
20 ce qui est environ l'envergure d'un résidu<sup>4</sup>. 8 binômes sur 12 sont concernés par cette catégorie (binômes  $\mathcal{G}_5$ ,  $\mathcal{G}_6$ ,  $\mathcal{G}_7$ ,  $\mathcal{G}_8$ ,  $\mathcal{G}_9$ ,  $\mathcal{G}_{10}$ ,  $\mathcal{G}_{11}$  et  $\mathcal{G}_{12}$ ). Étant donné la distance inférieure à 10 Å, les binômes concernés manipulent en collaboration étroite sur les mêmes résidus. Ces binômes se caractérisent par une  
25 forte affinité ( $\mu = 4$ ) : ce sont des collègues ou des amis (voir figure 3.9 page 66). D'après la figure 3.10 page 66, ces binômes obtiennent des temps de réalisation de la tâche moyens.

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page précédente montre de fortes disparités entre les binômes concernant la force moyenne appliquée pendant la  
30 manipulation. Des observations pendant l'expérimentation ont permis d'identifier deux stratégies adoptées par les sujets : « par contrôle » où les deux sujets effectuent la même action pour obtenir un meilleur contrôle sur les structures manipulées ; « par guidage » où un des deux sujets indique à son partenaire la déformation à effectuer ou la position à atteindre. Le partage

---

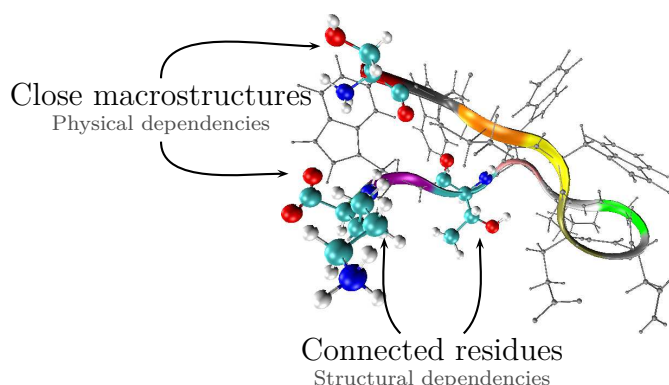
4. « Å » désigne l'Ångström qui est une unité de mesure telle que  $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$

des tâches est donc très différent selon les initiatives de chacun des sujets. Cependant, les binômes se distribuent mal la charge de travail comme le montre les différences importantes entre les forces appliquées par les deux sujets (voir figure 3.13 page 67). En effet, seul un des deux sujets réalise une grande partie de la tâche à réaliser. Le second sujet joue plutôt le rôle du suiveur.

**Communication** Les temps de communication verbale sur la figure 3.12 page 67 montrent une disparité entre les sujets. Les binômes de ce groupe passent plus de temps à communiquer pendant la phase de recherche que pendant la phase de sélection (excepté pour  $\mathcal{G}_9$ ) ce qui met en évidence les difficultés du travail en champ proche liées aux nombreux conflits de coordination pendant la phase de recherche. En effet, les binômes doivent coordonner leurs mouvements de manipulation pour déplacer un résidu et cette coordination nécessite une communication verbale importante. La collaboration est alors étroitement couplée mais il en résulte une perte de temps à cause du temps alloué à la communication. D'ailleurs, l'analyse des communications verbales a permis de mettre en évidence de nombreuses incompréhensions dans l'inter-référencement (« Pas dans cette direction », « Pas ici mais ici », « C'est juste derrière », *etc.*). En effet, la grande complexité des tâches ainsi qu'une conscience incomplète de l'environnement et de l'état de son partenaire provoque des inter-référencements imprécis entraînant une mauvaise coordination. Ces conflits de coordination et ces incompréhensions diminuent les performances globales du binôme.

#### Collaboration en champ voisin

**Caractéristiques** La collaboration en champ voisin, comprises entre 8 mm et 14 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des distances de l'ordre de résidus voisins (entre 10 Å et 20 Å). 3 binômes sur 12 se trouvent dans cette catégorie (binômes  $\mathcal{G}_2$ ,  $\mathcal{G}_3$  et  $\mathcal{G}_4$ ). Ces binômes travaillent en collaboration relativement étroite sur des résidus voisins. La figure 3.14 page suivante montre la dépendance physique ou structurelle entre les résidus voisins. En effet, les résidus interagissent entre eux à travers diverses forces physiques : plus les distances sont courtes, plus les contraintes physiques sont fortes. La figure 3.9 page 66 montre que les binômes concernés ont des affinités moyennes ( $\mu = 3$ ) : ce sont des collègues de bureau ou d'équipe ne travaillant pas forcément sur les mêmes projets. Ces binômes obtiennent de très bonnes performances sur les temps de réalisation de la tâche figure 3.10 page 66.



**Figure 3.14** – Couplage physique et structure entre les résidus

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page 67 illustre une bonne répartition des efforts entre les deux membres du binôme. En effet, la force moyenne est assez élevée par rapport à la plupart des autres binômes ce qui montre qu'aucun des deux sujets n'est moins actif (ce qui entraînerait une force moyenne moins élevée). La différence des forces moyennes quasi-nulle entre les deux sujets confirme ce résultat. Ceci s'explique par une bonne coordination entre les sujets pendant laquelle les deux membres du binôme vont effectuer des actions complémentaires mais de même intensité. La stratégie adoptée peut être définie comme une stratégie *par manipulation complémentaire* : les deux sujets sont attentifs aux actions de leur partenaire afin d'avoir un meilleur contrôle du processus de déformation par une coordination améliorée.

**Communication** La communication verbale est faible comme le montre la figure 3.11 page 66. La manipulation en champ voisin permet d'être continuellement conscient des actions du partenaire (grâce à la vision périphérique) ce qui limite les communications verbales. Cependant, les sujets manipulent des résidus différents restreignant ainsi les conflits de coordination par rapport à la collaboration en champ proche. De plus, la figure 3.12 page 67 montre un nombre de conflits de coordination plus faible pendant la phase de recherche. En effet, la communication verbale est nettement moins importante pendant la phase de recherche que pendant la phase de sélection. L'analyse des communication verbales met en évidence des phases de communication de coordination (« Maintenant, prends ça », « peux-tu m'aider ici? », « Bien! », *etc.*). Les performances des binômes travaillant en champ voisin sont relativement élevées bien que quelques conflits de coordination similaires à ceux rencontrés dans une collaboration en champ proche soient présents. Cependant, le nombre de conflits de coordination est plus limité.



### Collaboration en champ distant

**Caractéristiques** La collaboration en champ voisin, supérieures à 14 mm, correspond, dans l'environnement virtuel, à des résidus sans interaction physique (supérieur à 20 Å). 1 binôme sur 12 est concerné par cette catégorie (binôme  $\mathcal{G}_1$ ). Ce binôme travaille de façon faiblement couplée. En effet, les membres de ce binôme travaillent de façon complètement indépendante, en limitant au maximum le nombre d'interactions. Les affinités des membres de ce binôme sont très faibles (voir figure 3.9 page 66) : les membres ne se connaissent presque pas. Le binôme obtient de très mauvaises performances en ce qui concerne le temps de réalisation de la tâche comme le montre la figure 3.10 page 66.

**Partage de la tâche** La figure 3.13 page 67 montre un effort moyen appliqué par les binômes peu élevé (comparé aux stratégies de collaboration en champ voisin). De plus, les forces moyennes appliquées par chacun des deux sujets sont très inégales. Il y a une mauvaise répartition de la charge de travail au sein du binôme.

**Communication** La figure 3.11 page 66 montre que le temps de communication verbale est assez important. Cependant, le temps de réalisation étant nettement plus important, le taux de communication verbale est beaucoup plus faible que les autres groupes (voir figure 3.12 page 67). En effet, les membres du binôme travaillent à distance et ont peu d'interactions entre eux. Le peu d'interaction permet de limiter le nombre de conflits de coordination ce qui implique le peu de communication verbale comme on peut le voir sur la figure 3.12 page 67. Cette figure montre également que ce binôme communique plus dans les phases de sélection que dans les phases de recherche. En effet, les phases de sélection forcent une collaboration étroite (spécificité de la tâche proposée) et favorisent les conflits de coordination. Cependant, les phases de recherche permettent aux sujets de manipuler de manière distante. Ainsi, ils se définissent leur propre espace de travail mais également leur propre stratégie en fonction des événement locaux à leur espace de travail. Pourtant, la phase de sélection nécessite une collaboration étroite et si les stratégies sont différentes, il en résulte de mauvaises performances dû au temps important pour se coordonner à nouveau.

### Synthèse des stratégies de travail

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

Cependant, ce sont les interactions en champ voisins qui produisent les meilleures performances. En effet, les conflits de coordination sont plus li-  
10 mités que pour des interactions en champ proche mais la collaboration est tout de même couplée. Les résultats montrent à la fois de bonnes performances en terme de temps de réalisation mais aussi en terme de répartition des charges de travail tout en limitant les communication verbales. La plupart du temps, les communications verbales sont destinées à la résolution de  
15 conflits de coordination : elles sont très chronophages et peuvent être évitées. C'est pour cette raison que nous proposerons des outils haptiques pour améliorer cette gestion des conflits de coordination (voir chapitre 6 page 139).

### 3.4.3 Résultats qualitatifs

20 Les résultats qualitatifs sont constitués de deux parties. La première permet de déterminer les impressions des sujets concernant la collaboration, les rôles et efficacité de chacun pendant la tâche. La seconde partie a pour but d'évaluer la plate-forme<sup>5</sup>.

### Évaluation du travail en collaboration

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

30 Durant les tâches collaboratives, les sujets considèrent qu'ils ont effectivement contribué à la réalisation de la tâche ( $\mu = 3.1$ ,  $\sigma = 0.9$ ). Cependant, les sujets considèrent qu'ils ne se sont imposés ni en meneur ou ni en suiveur ( $\mu = 2$ ,

---

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

$\sigma = 0.5$ ). En effet, des questions supplémentaires ont permis de mettre en évidence que chaque sujet a tendance à surestimer le rôle du partenaire ( $\approx 70\%$ ).

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

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

### Évaluation du système

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

Là encore, les résultats permettent de valider l'hypothèse  $\mathcal{H}_4$ . La 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 pendant cette expérimentation sont relativement simples et peu envahissants. Des outils plus complexes, plus informatifs seraient peut-être moins intuitifs au premier abord et pourrait mener à un inconfort.

## 3.5 Synthèse

### 3.5.1 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 des approches collaboratives pour l'amélioration des performances et d'identifier les différentes stratégies de travail. De plus, il fallait valider la pertinence de la plate-forme mise en place.

Les approches collaboratives ont prouvé leur intérêt, notamment sur les tâches les plus complexes. Cependant, la complexité d'une tâche est relativement difficile à établir. Au-delà des facteurs de position, de couleur ou de forme, le nombre d'atomes de la molécule (et donc le nombre de résidus) semble jouer un rôle important dans cette complexité. Un grand nombre d'atomes surcharge l'environnement virtuel qui est difficile à appréhender. Un deuxième facteur de complexité à prendre en compte est l'amplitude des contraintes physiques de la molécule. Certaines zones de la molécule sont dans un état de stabilité tel qu'il est difficile d'en déformer les résidus. L'ensemble de ces contraintes rend pertinent une approche collaborative pour la réalisation d'une tâche de nature complexe.

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

Enfin, il paraît nécessaire d'avoir de bonnes relations sociales avec ces partenaires. Les résultats montrent de façon évidente que tout déséquilibre dans le groupe mène à des performances dégradées.

### 3.5.2 Conclusion

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 que le travail collaboratif apporte une amélioration des performances. Ceci se traduit soit par

des tâches à fortes zones de contraintes (voir chapitre 4 page 79) ou par la manipulation de molécules de taille importante (voir chapitre 5 page 113).

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

L'évaluation qualitative par questionnaire apporte également de nombreuses réponses intéressantes. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant la communication virtuelle dans l'EVC au détriment de la communication gestuelle. Tout d'abord, les sujets ont mis en avant un élément primordial de la communi-  
10 cation : la modalité virtuelle est importante (désignation par exemple). Des observations durant les phases expérimentales nous ont permis de constater que ce moyen de communication est principalement utilisé pour des actions de désignation. Fournir des outils adaptés aux contraintes de la désignation en environnement complexe devient une nécessité.

15 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.

## Bibliographie

[BOWMAN 1999]

5 BOWMAN, Douglas A. (juin 1999). « Interaction techniques for common tasks in immersive virtual environments : design, evaluation, and application ». Anglais. Thèse de doctorat. Atlanta, GA, USA : Georgia Institute of Technology (cf. pages 50, 55).

[BROWN et FORSYTHE 1974]

10 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 60).

[CHAVENT *et al.* 2011]

15 CHAVENT, Matthieu, Antoine VANEL, Alex TEK, Bruno LEVY, Sophie ROBERT, Bruno RAFFIN et Marc BAADEN (oct. 2011). « GPU-accelerated atom and dynamic bond visualization using hyperballs : a unified algorithm for balls, sticks, and hyperboloids ». Anglais. Dans *Journal of Computational Chemistry* 32.13, pages 2924–2935. ISSN : 1096-987X (cf. page 50).

[DELALANDE *et al.* 2010]

20 DELALANDE, Olivier, Nicolas FERREY, Benoist LAURENT, Marc GUÉROULT, Brigitte HARTMANN et Marc BAADEN (jan. 2010). « Multi-resolution approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device ». Anglais. Dans *Pacific Symposium on Biocomputing*, pages 205–215 (cf. pages 50, 52).

25 [FERREY *et al.* 2008]

30 FERREY, Nicolas, Guillaume BOUYER, Christine MARTIN, Patrick BOURDOT, Julien NELSON et Jean-Marie BURKHARDT (mar. 2008). « User needs analysis to design a 3D multimodal protein-docking interface ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2008 IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI '08. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 125–132. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. page 52).

[FRIEDMAN 1940]

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 60).

[FUCHS *et al.* 2006]

FUCHS, Philippe, David AMARANTI, Malika AUVRAY, Mohamed BENALI-KOUDJA, Alain BERTHOZ, Éric BERTON, Jean BLOUIN, Simon BOUISSET, Christophe BOURDIN, Jean-Marie BURKHARDT, Luca LATINI CORAZZINI, Gabriel M. GAUTHIER, Édouard GENTAZ, Marie-Dominique GIRAUDO, Moustapha HAFEZ, Yvette HATWELL, Bernard HENNION, Daniel MESTRE, Franck MULTON, Jean-Paul PAPIN, Patrick PÉRUCH, Guillaume RAO, Nicolas TSINGOS, Jean-Louis VERCHER et Olivier WARUSFEL (mar. 2006). *Traité de la réalité virtuelle*. Sous la direction de Philippe FUCHS. 3<sup>e</sup> édition. Tome 1. Laval, France : Presses de l'École des Mines de Paris (cf. page 50).

[HOLM 1979]

HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 61, 63).

[LEVINE *et al.* 1997]

LEVINE, David, Michael FACELLO, Philip HALLSTROM, Gregory REEDER, Brian WALENZ et Fred STEVENS (avr. 1997). « STALK : an interactive system for virtual molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE Computer in Sciences and Engineering* 4.2, pages 55–65. ISSN : 1070-9924 (cf. page 51).

[MANN et WHITNEY 1947]

MANN, Henry Berthold et Donald Ransom WHITNEY (mar. 1947). « On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 61, 63).

[OBEYSEKARE *et al.* 1996]

OBEYSEKARE, Upul, Chas WILLIAMS, Jim DURBIN, Larry ROSENBLUM, Robert ROSENBERG, Fernando GRINSTEIN, Ravi RAMAMURTHI, Alexandra LANDSBERG et William SANDBERG (oct. 1996). « Virtual workbench - a non-immersive virtual environment for visualizing and interacting with 3D objects for scientific visualization ». Anglais. Dans *Proceedings of the 7th conference on Visualization '96*. VIS '96. San Francisco, California, USA : IEEE Computer Society Press, pages 345–359. ISBN : 0-89791-864-9 (cf. page 51).

[PAVLOVIĆ *et al.* 1996]

PAVLOVIĆ, Vladimir I., Rajeev SHARMA et Thomas S. HUANG (oct. 1996). « Gestural interface to a visual computing environment for mo-

lecular biologists ». Anglais. Dans *IEEE International Conference on Automatic Face and Gesture Recognition*, page 30 (cf. page 51).

[POLYS *et al.* 2004]

- 5 POLYS, Nicholas F., Chris NORTH, Douglas A. BOWMAN, Andrew RAY, Maxim MOLDENHAUER et Chetan DANDEKAR (jan. 2004). « Snap2Diverse : coordinating information visualizations and virtual environments ». Anglais. Dans *Visualization and data analysis* 5295.1, pages 189–200. ISSN : 0277786X (cf. page 51).

[SHAPIRO et WILK 1965]

- 10 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 60).



# Déformation collaborative de molécule

## Sommaire

5	4.1 Introduction . . . . .	80
	4.2 Déformation collaborative en environnement vir- tuel . . . . .	80
	4.2.1 Travaux existants . . . . .	80
10	4.2.2 Objectifs . . . . .	81
	4.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	82
	4.3.1 Description de la tâche . . . . .	82
	4.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	85
	4.4 Résultats . . . . .	90
15	4.4.1 Amélioration des performances en binôme . . . . .	92
	4.4.2 Évolution des performances en fonction de la com- plexité de la tâche . . . . .	97
	4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes . . . . .	102
	4.4.4 Résultats qualitatifs . . . . .	106
20	4.5 Synthèse . . . . .	108
	4.5.1 Résumé des résultats . . . . .	108
	4.5.2 Conclusion . . . . .	108
25	Bibliographie . . . . .	110

## 4.1 Introduction

La précédente expérimentation nous a permis d'étudier les premières PCVs que sont la *recherche* et la *sélection*. Afin de compléter notre étude, nous souhaitons à présent nous intéresser à la *déformation*. En effet, on trouve  
 5 déjà des environnements virtuels permettant de manipuler des molécules rigides pour effectuer un *docking* moléculaire comme les travaux de LEVINE *et al.* [1997] ou encore de FEREY *et al.* [2008]. Cependant, un *docking* moléculaire nécessite de pouvoir déformer les molécules. Ceci est rendu possible par l'avènement des simulations moléculaires interactives en temps-réel, notamment avec IMD développé par STADLER *et al.* [1997]. Plus récemment,  
 10 DELALANDE *et al.* [2009] ont également amené une pierre à l'édifice avec MDDriver pour permettre une simulation moléculaire en temps-réel basée sur différents moteurs de simulation (NAMD ou GROMACS). Puis, DELALANDE *et al.* [2010] améliorent la manipulation et la déformation interactive par  
 15 l'utilisation d'une interface haptique.

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

## 4.2 Déformation collaborative en environnement virtuel

### 4.2.1 Travaux existants

L'utilisation de retours haptiques pour la déformation d'objets flexibles n'est  
 25 pas une idée nouvelle. SHEN *et al.* [2006] proposent déjà une solution pour déformer des objets non-rigides à l'aide de retour haptique. Les objets concernés sont de faible complexité, comme des sphères par exemple. Puis, PETERLÍK [2009] effectue une thèse sur les déformations de tissus cellulaires. Là  
 30 encore, les éléments déformables sont de faible complexité et n'ont quasiment pas d'application utile et concrète dans le monde réel.

Cependant, afin d'effectuer des déformations plus complexes, certains se sont intéressés aux processus de déformation collaboratifs dans les EVCs. SÜMENGEN *et al.* [2007] proposent une plate-forme permettant la déformation de

maillages destinés à des simulations d'objets déformables (tissus, organes, *etc.*) dans un EVC. Pour cela, il propose une architecture de type pair-à-pair basée sur le protocole UDP (*User Datagram Protocol* pour protocole de datagramme utilisateur). De son côté, TANG *et al.* [2010] proposent une plate-  
5 forme client/serveur de déformation collaborative de maillages. Ces deux plate-formes proposent chacun une plate-forme de déformation collaborative mais se focalisent principalement sur les contraintes techniques d'une telle plate-forme. MÜLLER *et al.* [2006] développent le logiciel CLAYWORKS, complété plus tard par GORLATCH *et al.* [2009], permettant la sculpture virtuelle  
10 sur glaise. Dans cette étude, les problématiques d'accès exclusif à certains objets ou à certaines parties d'un objet sont brièvement évoquées afin de faciliter la coordination des différents acteurs.

Tous les travaux présentés ci-dessus proposent une déformation collaborative distante où chaque utilisateur effectue une déformation localement. Les  
15 contraintes liées à la collaboration entre les acteurs n'est pas présentée. En effet, tous les EVCS proposés sont consacrés aux problématiques techniques de la collaboration distante.

### 4.2.2 Objectifs

Ce chapitre sera l'occasion d'aborder les problématiques de la déformation  
20 lors d'une configuration collaborative. La déformation est une tâche nécessitant plus de précision que la recherche car les cibles doivent être déplacées à un endroit défini. Nous souhaitons ainsi comparer les performances sur une tâche complexe nécessitant de la coordination.

L'étude met en jeu un nombre de ressources fixe pour la déformation et  
25 compare une distribution des ressources (configuration collaborative) à une mutualisation des ressources (configuration individuelle). En effet, la première étude nous a montré les contraintes d'une configuration collaborative en terme de temps de communication. Paradoxalement, les utilisateurs qui manipulent seuls sont confrontés à une charge cognitive de travail impor-  
30 tante. En fournissant les mêmes ressources (deux outils de déformation), nous souhaitons comparer la capacité de coordination d'un binôme aux capacités cognitives de traitement d'un monôme face à une importante charge de travail. Nous supposons que les binômes en configuration monomanuelle sont plus performants que les monômes en configuration bimanuelle.

35 Dans un second temps, nous souhaitons définir un lien entre la complexité de la tâche et le nombre de sujets impliqués. En effet, les tâches complexes fournissent une charge cognitive de travail très importante ; plus cette charge

de travail est importante et plus les monômes devraient éprouver des difficultés à traiter l'ensemble des informations. Nous émettons l'hypothèse que les tâches les plus complexes seront plus difficiles à réaliser par les monômes que par les binômes.

- 5 Enfin, cette seconde étude est l'occasion d'observer l'effet du travail collaboratif sur l'apprentissage. Nous comparons les performances des monômes et des binômes concernant la réalisation d'une même tâche répétée plusieurs fois. Nous supposons que la motivation et l'échange qui a lieu lors d'un travail collaboratif va permettre aux binômes d'appréhender plus rapidement la  
10 plate-forme, les outils ou encore la tâche.

## 4.3 Présentation de l'expérimentation

### 4.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation dans un EVC sur des molécules complexes. L'objectif est de modifier la conformation initiale d'une molécule pour  
15 atteindre une conformation finale. En effet, la recherche d'un état stable est exactement ce qu'une tâche de *docking* moléculaire cherche à réaliser. De plus, la déformation est une tâche permettant de stimuler les actions coordonnées pour une collaboration étroitement couplée.

Trois molécules sont utilisées dans le cadre de cette expérimentation. Prion  
20 est une molécule très complexe et sera simplement utilisé dans la phase d'entraînement. TRP-ZIPPER et TRP-CAGE seront chacune utilisée dans deux scénarios distincts. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 165.

Afin de pouvoir évaluer la déformation effectuée, un score est affiché en temps-réel (voir figure 4.1 page ci-contre). Le score affiché est le *Root Mean Square Deviation* (RMSD)  
25 qui permet de mesurer la différence de forme entre deux déformations d'une même molécule en calculant la différence entre chaque paire d'atomes. L'équation 4.1 est utilisée pour le calcul de cette différence.

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

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



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

### Description des scénarios

Quatre scénarios sont proposés sur deux molécules avec deux niveaux de manipulation différents. Les deux niveaux différents de manipulation sont :

- inter-moléculaire (à l'échelle d'un résidu) pour un niveau de déformation avec une granularité élevée ;
- intra-moléculaire (à l'échelle d'un atome) pour un niveau de déformation avec une granularité fine.

Les paragraphes qui vont suivre décrivent les quatre scénarios basés sur les critères de complexité suivants :

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

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

- 15 **Cassure** Ce sont des angles dans la chaîne principale de la molécule ; elles représentent les jonctions entre hélices- $\alpha$  et/ou les feuillettes- $\beta$  et nécessitent deux points d'accroche pour être reformées ;

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

- 20 **Scénario 1A** Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-ZIPPER à l'échelle inter-moléculaire. Un résidu à l'extrémité<sup>1</sup> est fixé afin d'*ancrer* la molécule dans la scène virtuelle et éviter d'éventuelles dérives hors du champ visuel. L'intégralité des onze autres résidus est libre de mouvement ce qui en fait une molécule assez malléable avec un champ de force  
25 moyennement contraint. La forme général de la molécule peut être comparée à un **V** : la chaîne de résidus de la molécule contient une cassure. La difficulté de ce scénario réside dans la nécessité de maintenir les résidus déjà placés pendant que le reste de la molécule est déformée.

- 30 **Scénario 1B** Cette tâche concerne la manipulation de la molécule TRP-CAGE à l'échelle inter-moléculaire. Comme le scénario 1A, elle contient un résidu fixe à une extrémité. L'intégralité des dix neuf autres résidus est libre de mouvement ce qui en fait une molécule assez malléable avec un champ de force moyennement contraint. La forme général de la molécule peut être

---

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

comparée à un **W** : la chaîne de résidus de la molécule contient deux cassures. Ce scénario est plus difficile que le scénario 1A car le nombre d'atomes à placer est plus élevé et qu'il est nécessaire de maintenir en place deux cassures.

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

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

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

**Table 4.1** – Paramètres de complexité des tâches

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

#### 4.3.2 Spécificités du protocole expérimental

L'expérimentation, basée sur le dispositif expérimental présenté dans le chapitre A page 163, a subi quelques modifications qui seront détaillées dans les sections suivantes. Un résumé de la méthode expérimentale se trouve dans

la table 4.2 page 91 qu'on pourra retrouver de manière détaillée dans la section B.2 page 176.

### Matériel

Pour cette seconde expérimentation, une unique modification a été effectuée  
5 par rapport à la plate-forme de base (voir section A.1 page 164). En effet, suite à la première expérimentation, nous avons beaucoup remis en cause la présence de l'outil d'orientation de la molécule. Cet outil permettant de modifier l'orientation de la molécule est nécessaire. Cependant, la forme sous laquelle il est présenté n'est pas idéale. L'outil d'orientation *grab* a posé des  
10 problèmes manifestes d'interaction à certains sujets qui ne réussissaient pas à s'approprier l'outil.

Après une discussion avec un bio-informaticien, il est apparu qu'une souris 3D est un outil plus approprié qu'une interface haptique pour l'orientation de la scène. En effet, le périphérique haptique possède des contraintes  
15 mécaniques qui ne permettent pas des rotations complètes de l'objet. Cette contrainte amène des problématiques connues d'interaction avec les objets virtuels : le débrayage [DOMINJON 2006]. La souris 3D ne souffre pas d'une telle contrainte et peut ainsi être proposée comme outil d'orientation en alternative à l'interface haptique associée à l'outil *grab*. Une souris 3D SpaceNavigator®  
20 est placée sur la table entre les deux sujets. Aucune consigne particulière n'est donnée sur l'utilisation de cet outil et chaque sujet peut l'utiliser au moment où il le souhaite : nous créons ainsi artificiellement un point de conflit pour l'accès à cet outil. L'objectif est de stimuler les interactions.

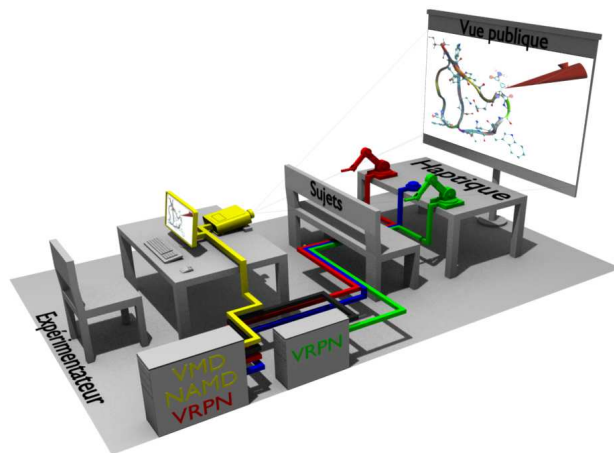
En ce qui concerne l'utilisation des outils de déformation en binôme, chaque  
25 sujet possède à sa disposition un outil de déformation. La répartition de l'outil d'orientation est laissée à la responsabilité des deux membres du binôme. Pour les monômes, le sujet peut utiliser les deux outils de déformation en configuration bimanuelle. Il peut également utiliser l'outil d'orientation mais dans ce cas, il est forcé de lâcher un des deux outils de déformation. Pour  
30 des raisons d'équité entre les monômes et les binômes, l'utilisation de la souris 3D désactive toutes les sélections effectuées avec un outil de déformation. De cette façon, les membres du binôme ne peuvent pas utiliser l'outil d'orientation en même temps que les outils de déformations (contrainte physique inhérente au monômes).

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

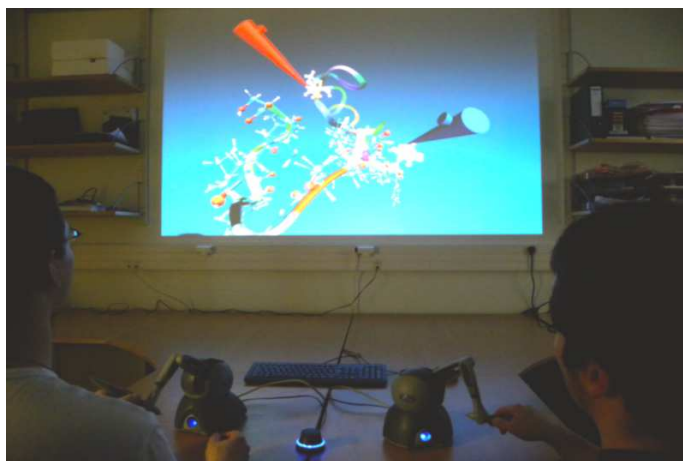


#### 4.3. Présentation de l'expérimentation

---



**Figure 4.2** – Schéma du dispositif expérimental

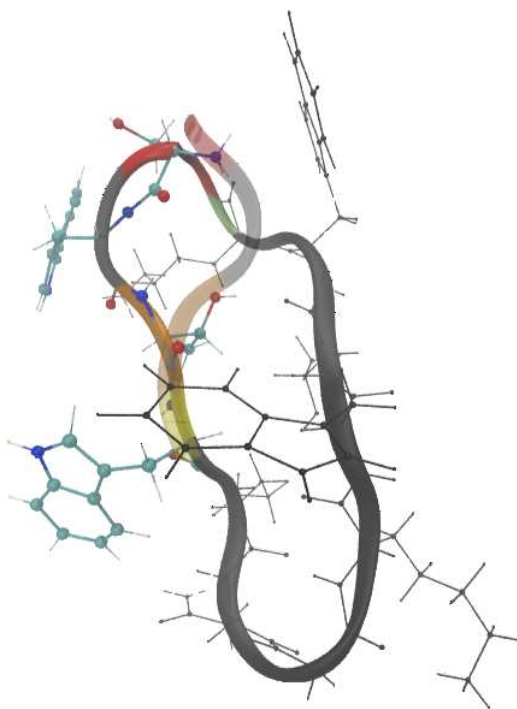


**Figure 4.3** – Photographie du dispositif expérimental

### Visualisation

Pour cette seconde expérimentation, quatre scénarios sont proposés et présentés dans la section 4.3.1 page 84. Ces molécules sont représentées avec les rendus graphiques de base (CPK et *NewRibbon*). Cependant, la tâche nécessite d'afficher la molécule dans son état stable qui est l'objectif que doivent atteindre les sujets. Cette molécule ne peut pas être représentée avec tous les atomes pour deux raisons. Tout d'abord, l'intégralité des atomes serait une surcharge du rendu visuel. De plus, la précision nécessaire pour les déformations demandées ne nécessite pas un affinement au niveau atomique. C'est pourquoi, la molécule dans son état stable sera discrètement affichée avec un rendu *NewRibbon* en transparence.

Des images représentant les différents scénarios dans leurs états initiaux sont présentées. Les scénarios inter-moléculaires 1A et 1B sont respectivement représentés sur la figure 4.4 et la figure 4.5 page suivante. Les scénarios intramoléculaires 2A et 2B sont respectivement représentés sur la figure 4.6 page ci-contre et la figure 4.7 page 90.



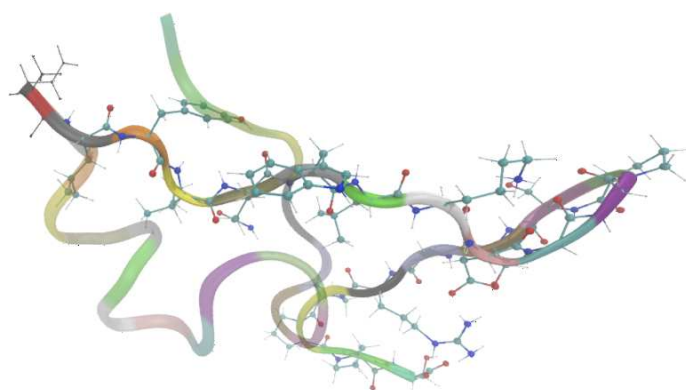
**Figure 4.4** – Représentation de la molécule TRP-ZIPPER pour le scénario 1A



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



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



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

### Outils de manipulation

Concernant l'outil d'orientation de la molécule, maintenant assuré par une souris 3D, une légère modification a été effectuée. Grâce au choix du matériel qui permet de différencier aisément les translations et les rotations, nous  
5 avons choisi de ne conserver que les DDLs en rotation. En effet, la molécule n'a pas besoin d'être déplacée à l'écran et c'est surtout l'orientation la molécule qui est nécessaire aux sujets. Ceci permet également d'éviter que les molécules ne sortent de l'espace visuel des sujets (scène vidéoprojetée) à cause d'une mauvaise manipulation. De plus, ce choix permet d'enlever une part de la  
10 charge cognitive aux manipulateurs.

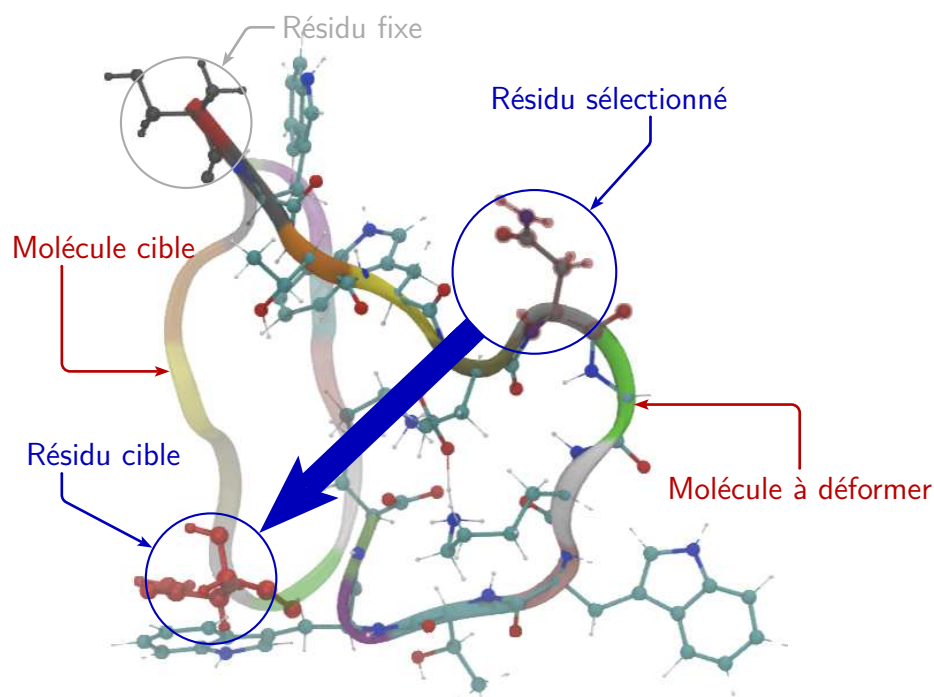
En ce qui concerne les outils de déformation, quelques modifications concernant le rendu visuel ont été effectuées. La tâche consiste à reconstituer une molécule dans son état d'équilibre. Pour aider les sujets dans cette tâche, nous avons affiché un rendu visuel en transparence de la molécule dans son  
15 état stable. Pour augmenter l'aide visuelle apportée, nous allons également indiquer l'emplacement final d'un résidu sélectionné. En effet, dès qu'un sujet sélectionne un résidu, ce résidu est mis en surbrillance. Le résidu correspondant sur la molécule stable est également mis en surbrillance comme expliqué sur la figure 4.8 page 92. Le résidu de la molécule stable est représenté par  
20 un rendu CPK coloré de la couleur du curseur du sujet concerné.

## 4.4 Résultats

Cette section présente et analyse l'ensemble des mesures expérimentales de cette seconde étude concernant la déformation de molécules complexes en

**Table 4.2** – Synthèse de la procédure expérimentale

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



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

configuration collaborative. Les données, confrontées à un test de SHAPIRO et WILK [1965], ne sont pas distribuées selon une loi normale. Cependant, un test de BROWN et FORSYTHE [1974] permet de confirmer l'homoscedasticité. L'analyse de la variance est alors pratiquée avec différents tests statistiques

5 suivant les cas :

- test de FRIEDMAN [1940] pour les variables intra-sujets non-paramétriques ;
- test de KRUSKAL et WALLIS [1952] pour les variables inter-sujets non-paramétriques.

#### 4.4.1 Amélioration des performances en binôme

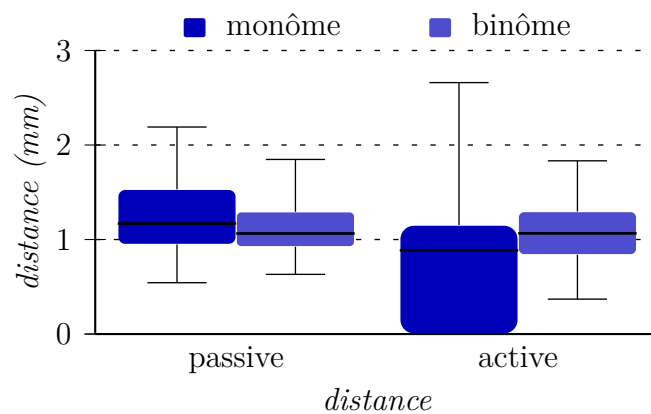
##### 10 Données et statistiques

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

15 La figure 4.10 page ci-contre présente la distance passive  $\mathcal{V}_{d3}$  et active  $\mathcal{V}_{d4}$  entre les effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse



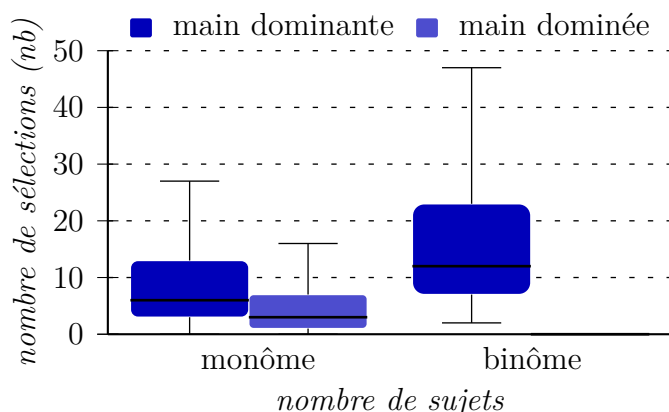
**Figure 4.9** – Temps de réalisation en fonction du nombre de sujets



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

montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance passive  $\mathcal{V}_{d3}$  ( $\chi^2 = 2.8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.092$ ). Cependant, l'analyse montre qu'il y a un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  ( $\chi^2 = 21.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

- 5 On peut également comparer les distances passive et active en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il y a un effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un **monôme** ( $\chi^2 = 42.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). Par contre, l'analyse ne montre pas d'effet significatif de la nature de la distance (passive ou active) au sein d'un **binôme** ( $\chi^2 = 2.5$ ,  
10  $df = 1$ ,  $p = 0.114$ ).



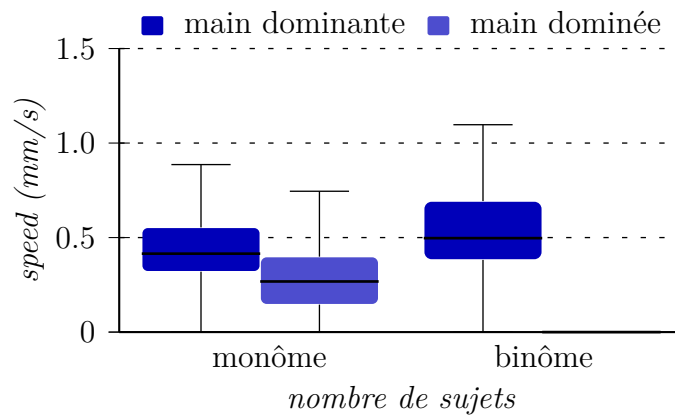
**Figure 4.11** – Nombre de sélections par main dominante/dominée en fonction du nombre de sujets

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

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

La figure 4.12 page ci-contre présente la vitesse moyenne des effecteurs terminaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des effecteurs terminaux en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ .  
25





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

L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  ( $\chi^2 = 122.6$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). L'analyse montre un déséquilibre de vitesse moyenne entre la main dominante et dominée des monômes avec un effet significatif ( $\chi^2 = 51.1$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). L'analyse montre également un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la vitesse moyenne  $\mathcal{V}_{d5}$  de la main dominante ( $\chi^2 = 23$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).

### Analyse et discussion

Le premier résultat sur la figure 4.9 page 93 nous permet de confirmer notre hypothèse  $\mathcal{H}_1$  : les binômes sont plus performants que les monômes. Cependant, la suite de l'analyse va permettre de mettre en avant les paramètres précis pour lesquels il y a un gain de performances ainsi que les scénarios les plus adaptés à cette configuration de travail.

Pour commencer, les distances moyennes entre les effecteurs terminaux nous permet d'observer un déséquilibre de performances entre les monômes et les binômes (voir figure 4.10 page 93). En effet, la distance passive entre les effecteurs terminaux (distance moyenne sur toute la durée de la tâche) est plus importante pour les monômes que pour les binômes. Cependant, la distance active (seulement lorsque les deux effecteurs terminaux sont en phase de sélection) montre un effet inverse. En effet, la manipulation bimanuelle (pour les monômes) constitue une charge de travail cognitive importante. Le sujet doit alors être capable de gérer deux effecteurs terminaux à chaque instant. Cette configuration a mené la plupart des sujets à utiliser seulement un effecteur terminal en laissant le second sur le côté afin que le curseur ne

gêne pas à l'écran. La main dominée n'est utilisée que dans les cas où le sujet estime que c'est absolument nécessaire pour achever la tâche. Ceci a pour effet d'augmenter la distance passive moyenne. Cependant, la distance est censée représenter l'espace de travail couvert au sein de l'environnement virtuel.

5 Dans ce cas, elle est incorrecte car bien que la distance soit importante, elle ne représente pas un espace de travail étant donné que le deuxième effecteur terminal n'est pas utilisé.

La distance active permet d'éviter ce biais de mesure. En effet, cette mesure ne prend pas en compte les phases d'inactivité d'un effecteur terminal. On  
10 constate alors que les binômes couvrent un plus grand espace de travail. Les monômes couvrent un espace de travail plus restreint car ils peuvent focaliser visuellement sur une seule zone de travail à la fois. Par conséquent, les deux effecteurs terminaux se trouvent toujours proche de la zone de manipulation, dans la zone de focus du sujet.

15 La figure 4.11 page 94 confirme ce déséquilibre. En effet, on constate un nombre total de sélections plus grand pour les binômes (19.4 sélections) que pour les monômes (14.1 sélections). Là encore, le sujet effectuant la tâche en monôme n'exploite pas pleinement les deux outils en sa possession : la charge de travail cognitive est trop importante. En effet, la Théorie des Res-  
20 sources Multiples (TRM) [WICKENS 1984] estime que la gestion de plusieurs ressources pour la même modalité est impossible. Cependant, les analyses statistiques montrent que l'outil utilisé par la main dominante obtient un taux d'utilisation identique entre les monômes et les binômes. Les binômes en configuration monomanuelle répartissent correctement la charge de travail  
25 entre les deux ressources disponibles ce qui n'est pas le cas des monômes.

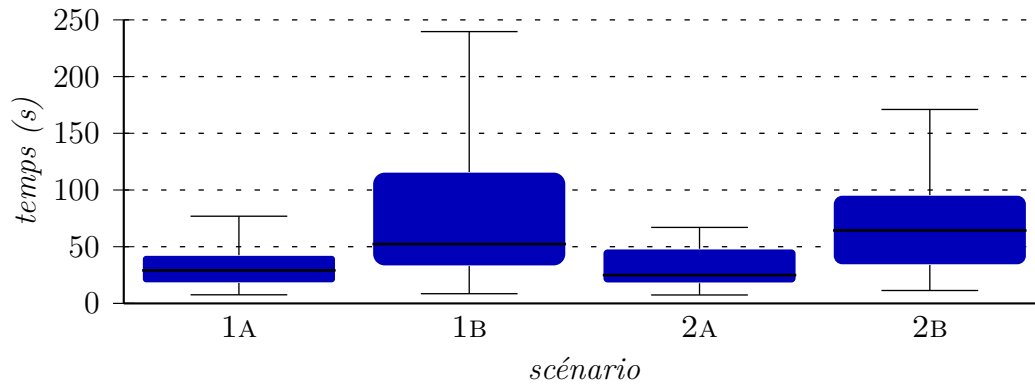
Cependant, l'outil associé à la main dominante est gêné par la configuration bimanuelle. En effet, l'analyse montre une différence significative entre la vitesse moyenne de la main dominante des monômes et celle des binômes. La configuration bimanuelle provoque une séquentialité dans les actions du  
30 sujet : il manipule avec un outil, puis avec l'autre mais rarement les deux en même temps. Cette séquentialité a pour effet des pauses alternatives entre les outils ce qui explique une vitesse moyenne plus basse.

Cette section nous a permis de constater que le travail en binôme permet de meilleures performances que le travail en monôme. Une analyse plus détaillée a mis en avant la difficulté du travail en configuration bimanuelle : la  
35 charge de travail cognitive à assumer avec deux outils est trop importante. Cette difficulté a pour effet de fortement dégrader le taux d'utilisation d'un des deux outils. On constate également une légère baisse de l'utilisation de l'outil associé à la main dominante. Pour résumer, il est préférable de distri-

buer les ressources disponibles (outils de manipulation dans notre cas) entre différents participants : la configuration bimanuelle apporte une charge de travail cognitive trop importante.

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

##### Données et statistiques

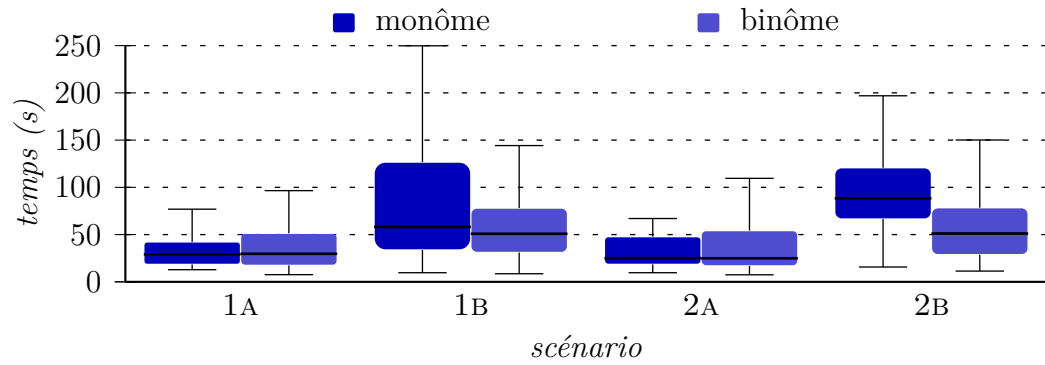


**Figure 4.13** – Temps de réalisation des scénarios

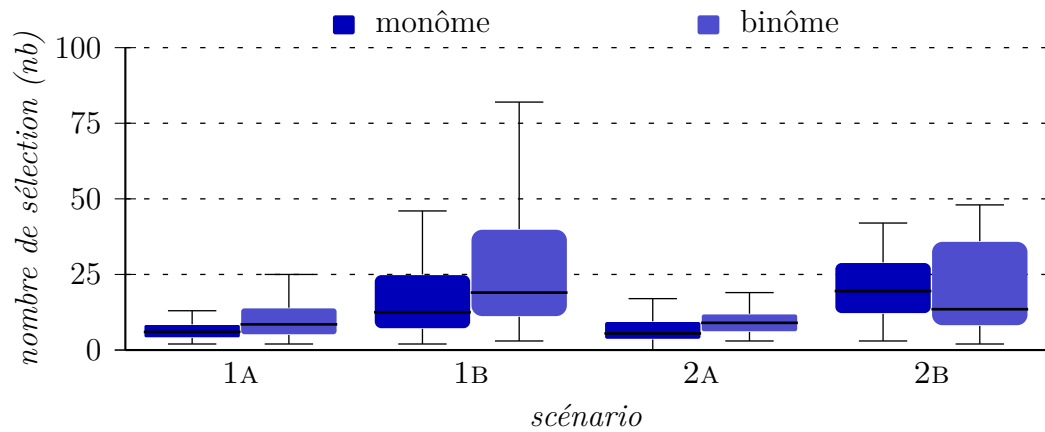
La figure 4.13 présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  en fonction de la complexité de la tâche  $\mathcal{V}_{i2}$  (temps cumulé des monômes et des binômes). L'analyse montre un effet significatif de la complexité de la tâche  $\mathcal{V}_{i2}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$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

La figure 4.14 page suivante présente le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 0.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.713$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 10.4$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.001$ ).

La figure 4.15 page suivante présente le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre

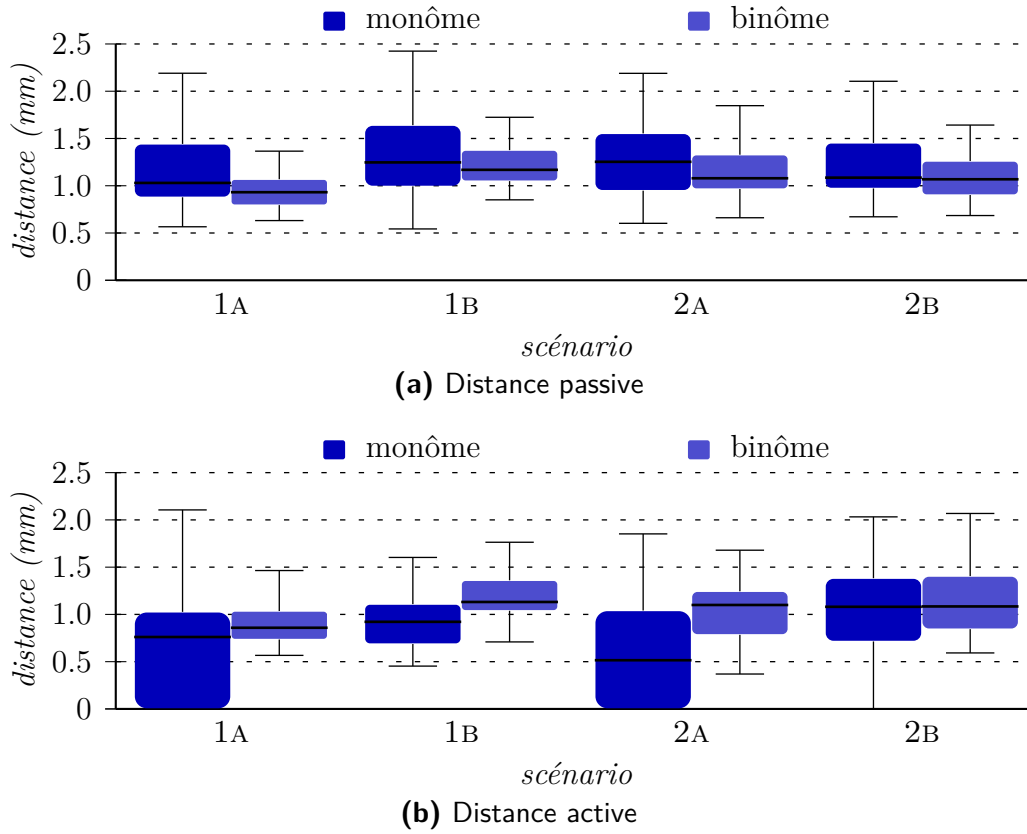


**Figure 4.14** – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de sujets



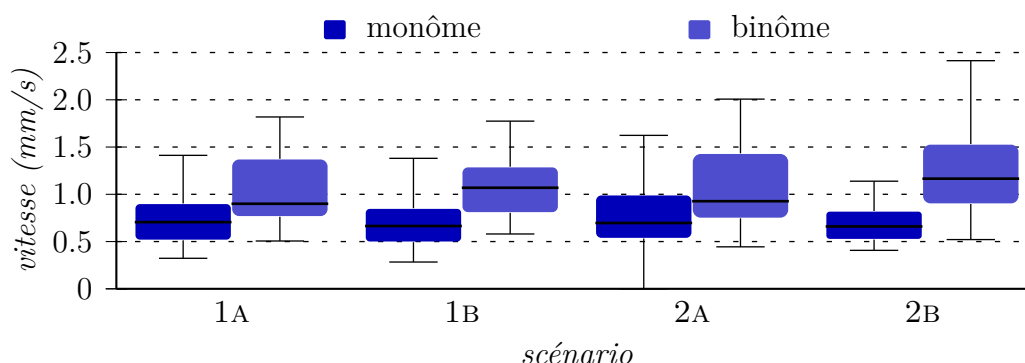
**Figure 4.15** – Nombre de sélections de chaque scénario en fonction du nombre de sujets

de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 11.5$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). Cependant, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 0.4$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.504$ ).



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

- 5 La figure 4.16 présente les distances passives  $\mathcal{V}_{d3}$  et actives  $\mathcal{V}_{d4}$  des différents scénarios  $\mathcal{V}_{i2}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . En regroupant les scénarios par classe de complexité, l'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance passive  $\mathcal{V}_{d3}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 6.3$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.012$ ) mais pas d'effet significatif sur les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 1.6$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.207$ ). Cependant, on constate un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  pour les scénarios 1A et 2A ( $\chi^2 = 17.3$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ) ainsi que sur les scénarios 1B et 2B ( $\chi^2 = 9.7$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.002$ ).
- 10



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

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

## Analyse et discussion

L'analyse du temps de réalisation des différentes tâches ainsi que la table 4.1 page 85 nous permet de classer ces tâches par niveau de complexité : les scénarios 1A et 2A sont simples alors que les scénarios 1B et 2B sont complexes. En effet, les scénarios 1A et 2A concernent la molécule TRP-ZIPPER contenant peu d'atomes et de résidus libres. Par contre, les scénarios 1B et 2B, dont le nombre d'atomes et de résidus libres est plus important, est constitué de champ de force à fortes contraintes physiques et nécessité la formation de plusieurs cassures.

En observant les différences de performances entre les monômes et les binômes sur la figure 4.14 page 98, on constate que l'apport du travail collaboratif n'est vrai que dans le cas des tâches complexes. La contrainte des tâches complexes réside dans la nécessité d'avoir recours aux deux outils pour achever la tâche. En effet, en observant la figure 4.16a page précédente, l'analyse de la distance active montre une différence significative entre les monômes et les binômes pour les scénarios simples. Sur la base des résultats de la section précédente (voir section 4.4.1 page 92), les monômes ont tendance à délaier

le deuxième outil à cause de la forte charge cognitive qu'ajoute la configuration bimanuelle. L'outil délaissé augmente ainsi la valeur de la distance passive mesurée en étant mis à l'écart. En observant seulement les scénarios simples 1A et 2A, on constate que la distance passive des monômes est plus importante que celle des binômes. On en conclue que les monômes que la complexité de ces scénarios n'a pas nécessité une manipulation bimanuelle et que la tâche a pu être achevée avec un seul outil de déformation. Il y a donc peu d'intérêt d'effectuer ces tâches peu complexe en collaboration puisqu'il n'y a aucune amélioration significative des performances bien que le nombre de ressources utilisées (les outils de déformation) soit doublé.

Cependant, pour les scénarios complexes, l'analyse ne montre pas de différence significative de la distance passive entre les monômes et les binômes. Pour ces scénarios, l'utilisation du deuxième outil est nécessaire et malgré la charge cognitive importante que cela représente pour les monômes, la tâche est réalisée à l'aide des deux outils (configuration bimanuelle). Dans ce cadre, la configuration monomanuelle adoptée par les binômes permet de meilleures performances comme le montre les analyses pour une distance active similaire. En effet, l'espace de travail couvert par les monômes est identique à celui des binômes mais leur incapacité à traiter cognitivement cette charge supplémentaire de travail les rend moins performants.

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

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

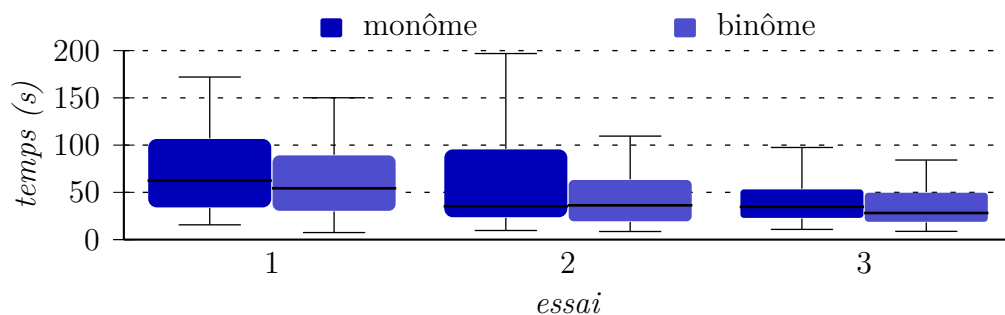


**Figure 4.18** – Temps de réalisation de chaque essai

### 4.4.3 Amélioration de l'apprentissage pour les binômes

#### Données et statistiques

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



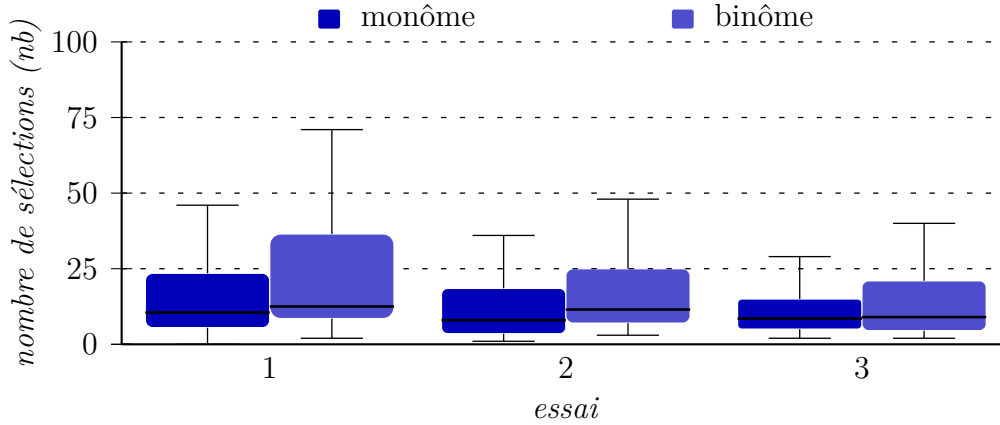
**Figure 4.19** – Temps de réalisation de chaque essai en fonction du nombre de sujets

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

De plus, l'analyse montre un effet significatif du numéro de l'essai  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le temps de réalisation  $\mathcal{V}_{d1}$  pour les monômes ( $\chi^2 = 7.1$ ,  $df = 2$ ,  $p = 0.028$ )



et pour les binômes ( $\chi^2 = 19.8$ ,  $df = 2$ ,  $p \ll 0.05$ ). Un test post-hoc de MANN et WHITNEY [1947] avec une correction de HOLM [1979] montre une évolution significative seulement à partir de dernier essai pour les monômes alors que l'évolution est significative dès le deuxième essai pour les binômes.



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

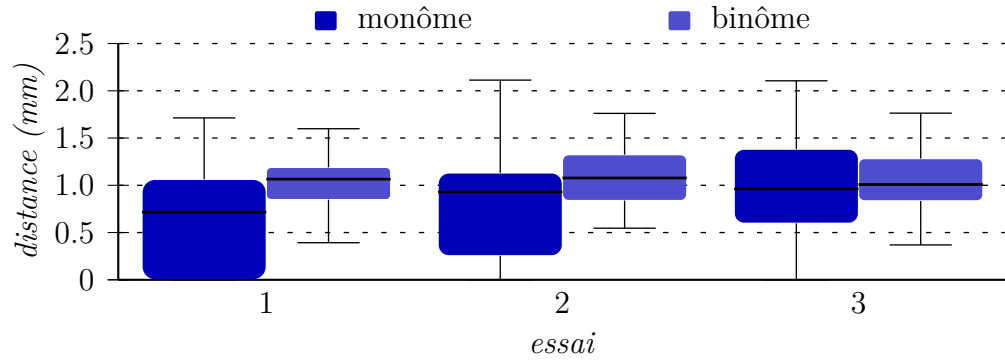
- 5 La figure 4.20 présente le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  des différents essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$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

De plus, l'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du numéro de l'essai  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le nombre de sélections  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les monômes ( $\chi^2 = 0.5$ ,  $df = 2$ ,  $p = 0.763$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du numéro de

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

La figure 4.21 page suivante présente la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  des différents

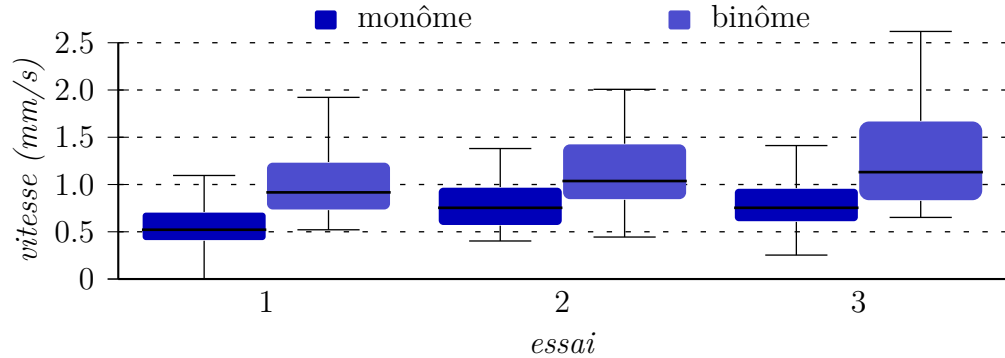
20 essais  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ . La distance passive n'a pas été prise en considération étant donné le biais de mesure décrit dans la section 4.4.1 page 92. L'analyse montre un effet significatif du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$  sur la distance active  $\mathcal{V}_{d4}$  pour le premier essai ( $\chi^2 = 21.4$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ) et pour le deuxième essai ( $\chi^2 = 8.5$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.004$ ) mais pas



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

pour le troisième essai ( $\chi^2 = 0.8$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.362$ ).

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



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

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

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

## Analyse et discussion

L'observation des temps de réalisation de la tâche (voir figure 4.18 page 102) nous permet de caractériser un apprentissage réel sur l'ensemble des trois réalisations de la tâche. Le détail de l'apprentissage en fonction du nombre  
 10 de sujets sur la figure 4.19 page 102 apporte cependant un point important : les binômes améliorent plus rapidement leurs performances que les monômes. En effet, on constate une amélioration franche des performances dès le second essai dans le cas des binômes alors que ce n'est que sur le dernier essai que les monômes montrent une évolution. L'amélioration plus rapide des  
 15 performances chez les binômes suggère un apprentissage plus rapide de la tâche, des outils et de tous les éléments de la plate-forme<sup>2</sup>.

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

On observe clairement l'apprentissage progressif du deuxième outil mis à disposition des monômes dans la figure 4.21 page précédente. Alors que l'es-  
 30 pace de travail des binômes reste stable sur l'ensemble des essais, celui des monômes s'étend au-fur-et-à-mesure des essais jusqu'à atteindre une valeur similaire à celle des binômes. En effet, seul l'apprentissage permet de s'affranchir en partie de la charge cognitive importante que représente la manipulation bimanuelle [WICKENS 1984] : avec l'apprentissage, les monômes sont  
 35 capables de gérer un espace de travail de plus en plus grand. Le potentiel du

---

2. On observe une amélioration des performances par apprentissage mais rien ne permet de distinguer quel aspect de la tâche a été intégrée le plus vite.

deuxième outil n'est pas ignoré et il est utilisé (avec la main dominée) comme un moyen de fixer un résidu déjà déplacé pendant que l'autre outil déforme. Ceci permet de déformer une partie de la molécule tout en conservant la stabilité de la partie déjà déformée. Les monômes ont la capacité d'adopter une  
5 stratégie plus adaptée à la situation car aucune limite de surcharge cognitive ne contraint les sujets.

En ce qui concerne les vitesses moyennes, les monômes comme les binômes s'améliorent en manipulant plus rapidement. Cependant, les binômes restent nettement plus rapides que les monômes. Cette amélioration peut être mise  
10 en relation avec l'amélioration des temps de réalisation : la tâche est réalisée plus rapidement car les sujets manipulent plus rapidement.

Dans cette section, nous avons mis en évidence les améliorations en terme d'apprentissage pour les configurations collaboratives sans distinction sur les aspects de l'apprentissage (plate-forme, outils, tâche, *etc.*). En effet, les  
15 binômes atteignent des performances optimales rapidement tandis que les monômes ont besoin de plus de temps pour converger vers de bonnes performances. La capacité des binômes à communiquer, échanger et conseiller permet de mutualiser l'apprentissage et de l'accélérer. De plus, un binôme peut bénéficier des connaissances spécifiques ou de l'expérience d'un des membres  
20 du binôme et ainsi mutualiser les aptitudes de chacun pour créer une vraie dynamique de groupe. La configuration bimanuelle offre une alternative de manipulation aux monômes avec une surcharge de travail trop importante : l'apprentissage est plus difficile. De plus, les monômes ont probablement atteint les limites de la charge cognitive maximum supportée avec cette confi-  
25 guration : l'ajout de nouvelles fonctionnalités serait probablement inefficace (contrairement aux binômes).

### 4.4.4 Résultats qualitatifs

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

30 Tout d'abord, la grande majorité des sujets travaillant en binôme se sont trouvés utiles dans cette tâche de collaboration ( $\mu = 3.1$ ,  $\sigma = 0.8$ )<sup>3</sup>. Ce résultat élevé permet de vérifier que les sujets ne se sentent pas mis de côté et participent activement à la réalisation de la tâche. Cette collaboration peut se traduire par une participation active à la déformation ou par une  
35 participation plutôt passive (échanges verbaux, conseils, remarques, *etc.*).

---

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

Dans un cas comme dans l'autre, les sujets ne sont pas isolés ce qui permet d'éviter les phénomènes de paresse sociale.

Le sentiment d'avoir été meneur durant la réalisation de la tâche est relativement neutre ( $\mu = 2$ ,  $\sigma = 0.6$ ). Cependant, cette question semble biaisée.

- 5 En effet, les sujets ne souhaitent pas prétendre avoir été meneur ou chef des opérations par modestie. Paradoxalement, ils ne souhaitent pas non plus avouer avoir été dirigé par quelqu'un d'autre par fierté. D'ailleurs, on observe un écart-type relativement bas concernant cette note ce qui signifie que la majorité des sujets ont répondu de façon neutre.
- 10 L'évaluation de la communication confirme ce qui a été observé dans la précédente expérimentation (voir section 3.4.3 page 72). En effet, l'importance de la communication verbale a été mise en avant ( $\mu = 2.4$ ,  $\sigma = 1.2$ ). Par opposition, les sujets ont considéré qu'ils n'utilisaient quasiment pas la modalité virtuelle ( $\mu = 0.9$ ,  $\sigma = 1$ ) et encore moins la modalité gestuelle ( $\mu = 0.3$ ,  
15  $\sigma = 0.6$ ) pour communiquer. La communication verbale étant la plus naturelle, il n'est pas étonnant d'obtenir un tel score. De la même façon, la communication gestuelle est compliquée étant donné que les sujets sont en train de manipuler une interface haptique. De plus, leur vision se focalise principalement sur le déroulement de la tâche à l'écran mais pas sur le partenaire  
20 ce qui laisse peu de place à la communication gestuelle. Cependant, les sujets estiment ne pas souvent avoir recours aux communications virtuelles. Cette modalité de communication offre des possibilités intéressantes puisqu'elle est intégrée à l'environnement de travail et matérialisée principalement par le curseur. L'expérimentation ne proposant aucune fonctionnalité particulière  
25 permettant d'exploiter cette modalité de communication explique probablement ce faible taux d'utilisation. La dernière expérimentation (voir chapitre 6 page 139) propose des outils de désignation qui vont permettre d'exploiter le potentiel de ce canal de communication.

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

## 4.5 Synthèse

### 4.5.1 Résumé des résultats

Dans cette seconde expérimentation, nous avons comparé et étudié les performances de monômes et de binômes sur une tâche de déformation avec  
5 un nombre identique de ressources. De plus, nous avons cherché à observer l'apport de la configuration collaborative sur l'apprentissage sur les performances. L'objectif était de placer la configuration collaborative dans un contexte de déformation avec de nouvelles contraintes par rapport aux tâches de recherche et de sélection.

10 Il a été montré qu'avec un nombre de ressources déterminées (un outil de manipulation et deux outils de déformation dans notre cas), il est préférable de les répartir sur plusieurs sujets. Cette répartition des ressources permet une meilleure distribution cognitive des charges de travail. En effet, la charge cognitive est trop importante pour un utilisateur seul. La configuration col-  
15 laborative, bien que souffrant de conflits de coordination, obtient tout de même des meilleures performances.

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

Le troisième résultat important concerne l'apprentissage. Nous avons montré que le travail en collaboration a une influence sur l'évolution de l'appren-  
25 tissage. En effet, l'apprentissage est catalysé par la communication et les échanges entre les sujets. La complexité de la tâche ainsi que de la plateforme (rendu visuel, outils, *etc.*) nécessite un apprentissage important. L'apprentissage accéléré provoqué par une configuration collaborative est donc un avantage permettant d'appréhender plus rapidement la tâche à réaliser.

### 30 4.5.2 Conclusion

Cette expérimentation nous a permis de comparer une configuration collaborative à une configuration bimanuelle possédant chacune le même nombre de ressources. Nous avons vu les avantages d'une configuration collaborative avec des binômes. L'étape suivante sera l'étude du travail collaboratif sur des

groupes de plus de deux sujets. Ceci devrait permettre d'augmenter encore le potentiel cognitif du groupe.

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

L'ajout de sujets supplémentaires va probablement générer des dynamiques de groupes qui n'avait pas de raison d'exister au sein d'un binôme. Cette  
10 troisième étude permettra l'observation des dynamiques et de les caractériser. L'objectif sera de détecter les limites et les contraintes afin de pouvoir fournir des outils pour répondre aux problématiques soulevées.

Cette deuxième expérimentation a également permis de remettre en cause la pertinence d'une manipulation en configuration bimanuelle. D'après les  
15 analyses, la charge cognitive qu'apporte la gestion d'un deuxième outil de déformation est trop importante. Cependant, l'outil de déformation est relativement complexe à appréhender. Il ne faut donc pas exclure la possibilité de fournir un outil simple et un outil complexe pour une manipulation en configuration bimanuelle. Nous verrons que la configuration de la dernière  
20 étude (voir chapitre 6 page 139) propose une configuration bimanuelle avec un outil simple de déplacement et un outil plus complexe de désignation.

Le questionnaire nous a également permis de mettre en avant les lacunes en ce qui concerne l'utilisation de la modalité virtuelle. La dernière expé-  
rimentation sera l'occasion d'introduire des nouveaux outils adaptés pour  
25 permettre d'utiliser efficacement cette modalité pour la communication et en particulier, un outil de désignation.

## Bibliographie

- [BROWN et FORSYTHE 1974]  
BROWN, Morton B. et Alan B. and FORSYTHE (juin 1974). « Robust tests for equality of variances ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 69.346, pages 364–367 (cf. page 92).  
5
- [DELALANDE et al. 2009]  
DELALANDE, Olivier, Nicolas FÉREY, Gilles GRASSEAU et Marc BAA-DEN (avr. 2009). « Complex molecular assemblies at hand via interactive simulations ». Anglais. Dans *Journal of computational chemistry* 30.15, pages 2375–2387 (cf. page 80).  
10
- [DELALANDE et al. 2010]  
DELALANDE, Olivier, Nicolas FEREY, Benoist LAURENT, Marc GUÉ-ROULT, Brigitte HARTMANN et Marc BAADEN (jan. 2010). « Multi-resolution approach for interactively locating functionally linked ion binding sites by steering small molecules into electrostatic potential maps using a haptic device ». Anglais. Dans *Pacific Symposium on Biocomputing*, pages 205–215 (cf. page 80).  
15
- [DOMINJON 2006]  
DOMINJON, Lionel (avr. 2006). « Contribution à l'étude des techniques d'interaction 3D pour la manipulation d'objets avec retour haptique en environnement virtuel à échelle humaine ». Thèse de doctorat. Laval, France : École doctorale d'Angers (cf. page 86).  
20
- [FEREY et al. 2008]  
FEREY, Nicolas, Guillaume BOUYER, Christine MARTIN, Patrick BOUR-DOT, Julien NELSON et Jean-Marie BURKHARDT (mar. 2008). « User needs analysis to design a 3D multimodal protein-docking interface ». Anglais. Dans *Proceedings of the 2008 IEEE Symposium on 3D User Interfaces*. 3DUI '08. Washington, DC, USA : IEEE Computer Society, pages 125–132. ISBN : 978-1-4244-2047-6 (cf. page 80).  
25
- [FRIEDMAN 1940]  
FRIEDMAN, Milton (mar. 1940). « A comparison of alternative tests of significance for the problem of m rankings ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 11.1, pages 86–92 (cf. page 92).  
30
- [GORLATCH et al. 2009]  
GORLATCH, Sergei, Jens MÜLLER-IDEN, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER, Hamido FUJITA et Yutaka FUNYU (avr. 2009). « Clayworks : toward user-oriented software for collaborative modeling and simulation ». Anglais. Dans *Knowledge-Based Systems* 22.3, pages 209–215 (cf. page 81).  
35



- [HOLM 1979]  
HOLM, Sture (1979). « A simple sequentially rejective multiple test procedure ». Anglais. Dans *Scandinavian journal of statistics* 6.2, pages 65–70 (cf. pages 97, 102–105).
- 5 [KRUSKAL et WALLIS 1952]  
KRUSKAL, William H. et W. Allen WALLIS (déc. 1952). « Use of ranks in one-criterion variance analysis ». Anglais. Dans *Journal of the American statistical association* 47.260, pages 583–621 (cf. page 92).
- [LEVINE et al. 1997]  
10 LEVINE, David, Michael FACELLO, Philip HALLSTROM, Gregory REEDER, Brian WALENZ et Fred STEVENS (avr. 1997). « STALK : an interactive system for virtual molecular docking ». Anglais. Dans *IEEE Computer in Sciences and Engineering* 4.2, pages 55–65. ISSN : 1070-9924 (cf. page 80).
- 15 [MANN et WHITNEY 1947]  
MANN, Henry Berthold et Donald Ransom WHITNEY (mar. 1947). « On a test of whether one of two random variables is stochastically larger than the other ». Anglais. Dans *The annals of mathematical statistics* 18.1, pages 50–60 (cf. pages 97, 102–105).
- 20 [MÜLLER et al. 2006]  
MÜLLER, Jens, Martin ALT, Jan DÜNNWEBER et Sergei GORLATCH (déc. 2006). « Clayworks : a system for collaborative real-time modeling and high-performance simulation ». Anglais. Dans *Second IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing*. e-Science'06, page 104  
25 (cf. page 81).
- [PETERLÍK 2009]  
PETERLÍK, Igor (jan. 2009). « Haptic interaction with non-linear deformable objects ». Anglais. Thèse de doctorat. Brno, Czech Republic : The Faculty of Informatics, Masaryk University (cf. page 80).
- 30 [SHAPIRO et WILK 1965]  
SHAPIRO, Samuel S. et Martin B. WILK (déc. 1965). « An analysis of variance test for normality (complete samples) ». Anglais. Dans *Biometrika* 52.3/4, pages 591–611 (cf. page 92).
- [SHEN et al. 2006]  
35 SHEN, WeiMing, YongMin ZHONG, Bijan SHIRINZADEH, XiaoBu YUAN, Gursel ALICI et Julian SMITH (2006). « A cellular neural network for deformable object modelling ». Anglais. Dans *Information Technology for Balanced Manufacturing Systems*. Tome 220. IFIP International Fe-

deration for Information Processing. Springer Boston, pages 329–336 (cf. page 80).

[STADLER *et al.* 1997]

5 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 80).

[SÜMENGEN *et al.* 2007]

10 SÜMENGEN, Selçuk, Mustafa Tolga EREN, Serhat YESILYURT et Selim BALCISOY (2007). « Real-time deformable objects for collaborative virtual environments ». Anglais. Dans *International Joint Conference on Computer Vision, Imaging and Computer Graphics Theory and Applications*. GRAPP (AS/IE)'07, pages 121–128 (cf. page 80).

[TANG *et al.* 2010]

15 TANG, ZiYing, GuoDong RONG, XiaoHu GUO et Balakrishnan PRABHAKARAN (mar. 2010). « Streaming 3D shape deformations in collaborative virtual environment ». Anglais. Dans *IEEE Virtual Reality Conference*. Waltham, MA, USA, pages 183–186 (cf. page 81).

[WICKENS 1984]

20 WICKENS, Christopher D. (1984). « Processing resources in attention ». Anglais. Dans *Varieties of Attention*. Academic Press, pages 63–101 (cf. pages 96, 105).

# La dynamique de groupe

## Sommaire

5	<b>5.1 Introduction . . . . .</b>	<b>114</b>
	<b>5.2 Collaboration de groupe . . . . .</b>	<b>114</b>
	5.2.1 Travaux existants . . . . .	114
	5.2.2 Objectifs . . . . .	116
	<b>5.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .</b>	<b>117</b>
10	5.3.1 Description de la tâche . . . . .	117
	5.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	118
	<b>5.4 Résultats . . . . .</b>	<b>122</b>
	5.4.1 Amélioration des performances . . . . .	122
	5.4.2 Utilité du <i>brainstorming</i> pour la collaboration . . . . .	126
15	5.4.3 Définition d'un meneur . . . . .	130
	<b>5.5 Synthèse . . . . .</b>	<b>133</b>
	5.5.1 Résumé des résultats . . . . .	133
	5.5.2 Conclusion . . . . .	134
20	<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>136</b>

## 5.1 Introduction

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

Ce chapitre constitue notre première étude sur le travail collaboratif avec des groupes d'utilisateurs<sup>1</sup>. Au regard des travaux existants, une dynamique de groupe devrait émerger. Cependant, notre contexte de travail est différent des précédents travaux sur le sujet : nous nous intéressons aux collaborations étroitement couplées. C'est dans ce contexte que nous allons observer les dynamiques de groupe qui émergent. Nous nous plaçons de nouveau dans un contexte de déformation moléculaire qui fournit un environnement d'étude propice aux collaboratio étroitement couplée. De plus, nous souhaitons tester l'utilité du *brainstorming*<sup>2</sup> qui d'après OSBORN [1963], améliore les performances de groupe.

## 5.2 Collaboration de groupe

### 5.2.1 Travaux existants

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

---

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

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

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

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

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

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

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

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

### 5.2.2 Objectifs

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

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

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

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

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

## 5.3 Présentation de l'expérimentation

### 5.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules dans un EVC. L'objectif est de rendre une molécule complexe conforme à une molécule modèle. Dans cette expérimentation, la molécule TRP-CAGE est utilisée pour la phase d'entraînement. Des molécules plus complexes (Prion et Ubiquitin) sont utilisées pour les scénarios de déformation collaborative. Ces molécules sont détaillées dans la section A.2.1 page 165.

Le mécanisme de sélection et d'affichage est strictement identique à la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 85). De la même façon, le système d'évaluation basé sur le score RMSD est identique. On pourra trouver la description de ces éléments dans la section 4.3.1 page 82.

#### Description des scénarios

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

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

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

### 5.3.2 Spécificités du protocole expérimental

Le dispositif expérimental utilisé, basé sur celui présenté dans le chapitre A page 163, a été adapté pour les besoins de l'expérimentation. Les modifications sont présentées dans les sections qui vont suivre. Le protocole expérimental est détaillé dans la section B.3 page 179 avec un résumé dans la table 5.1 page 121.

#### Matériel

Cette expérimentation se focalise sur le travail de groupe et en particulier, sur les quadrinômes. Il est nécessaire d'ajouter deux outils de déformation supplémentaires à la plate-forme (voir section A.1 page 164). Deux PHANTOM Omni® supplémentaires sont posés sur la table, devant les sujets, de manière à ce que chacun puisse avoir accès à une interface haptique. Un serveur VRPN exécuté par des machines de faible puissance est ajouté pour chaque nouvel PHANTOM Omni®.

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

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

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

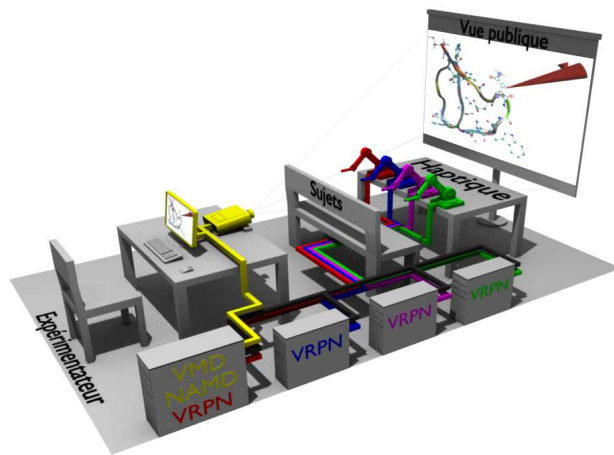
#### Visualisation

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



### 5.3. Présentation de l'expérimentation

---

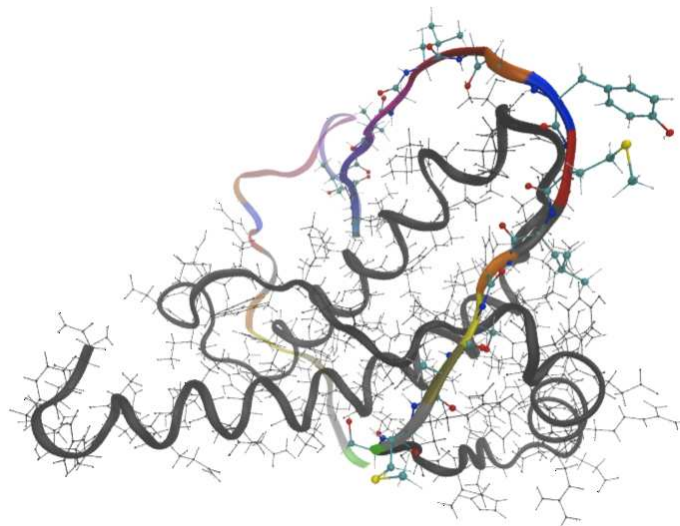


**Figure 5.1** – Schéma du dispositif expérimental



**Figure 5.2** – Photographie du dispositif expérimental

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

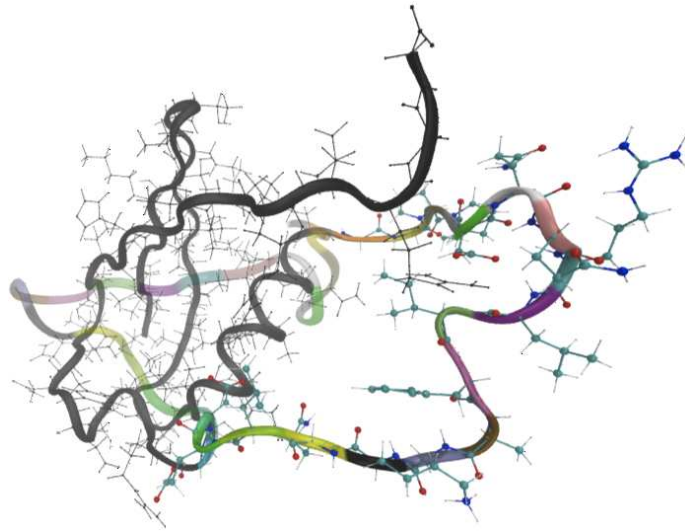


**Figure 5.3** – Représentation de la molécule Prion pour le scénario 1

### Outils de manipulation

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

En ce qui concerne les outils de déformation, ce sont exactement les mêmes  
que dans la seconde expérimentation (voir section 4.3.2 page 90). Chaque  
résidu qu'un sujet sélectionne est mis en surbrillance à la fois sur la molécule  
15 déformable et sur la molécule modèle.



**Figure 5.4** – Représentation de la molécule Ubiquitin pour le scénario 2

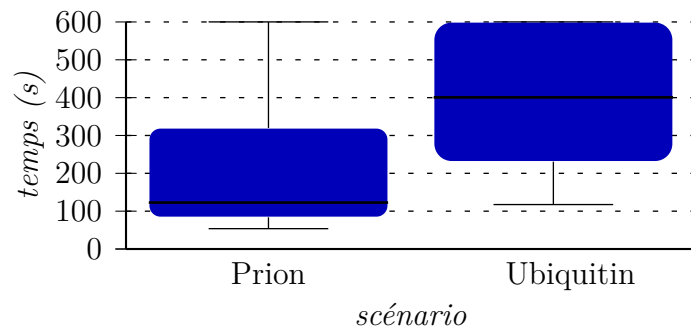
**Table 5.1** – Synthèse de la procédure expérimentale

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

## 5.4 Résultats

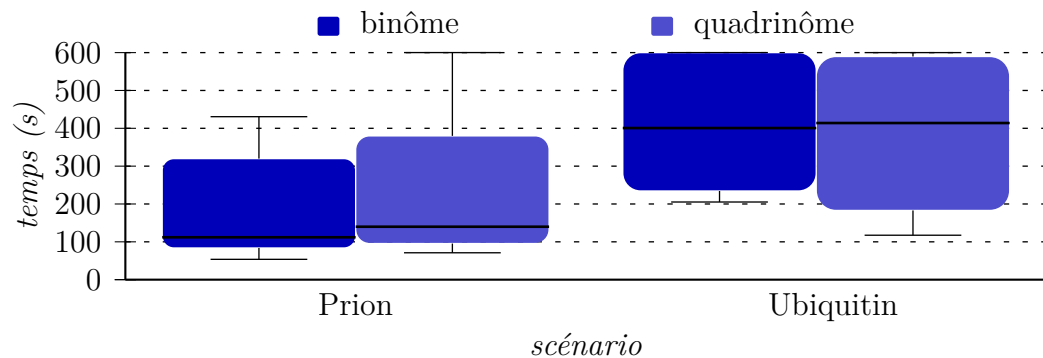
### 5.4.1 Amélioration des performances

#### Données et tests statistiques



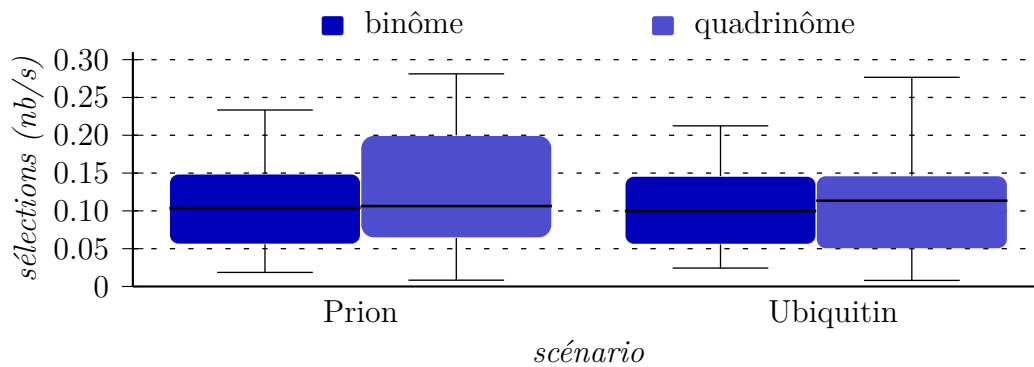
**Figure 5.5** – Temps de réalisation des scénarios

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



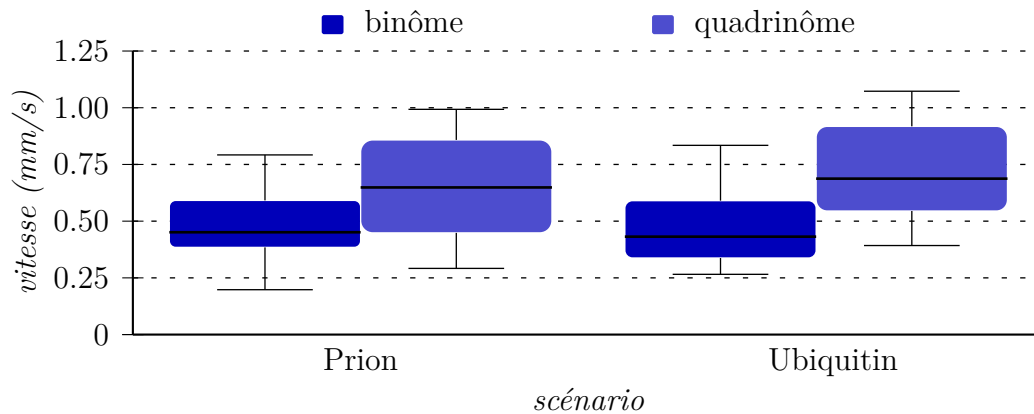
**Figure 5.6** – Temps de réalisation des scénarios en fonction du nombre de participants

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



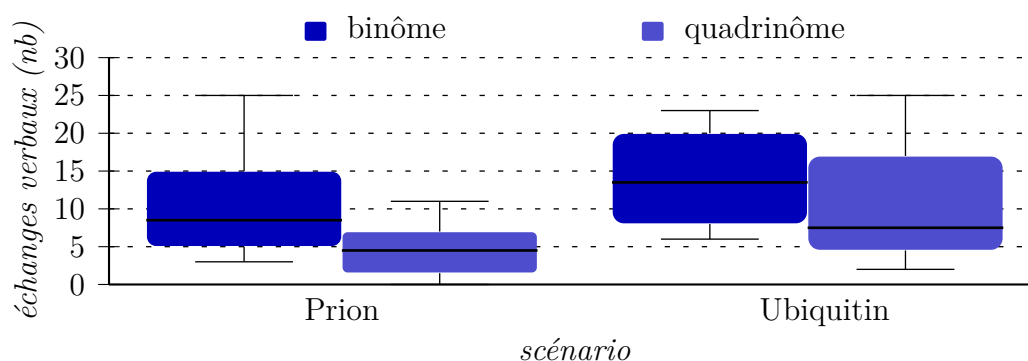
**Figure 5.7** – Fréquence des sélections sur les scénarios en fonction du nombre de participants

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



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

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



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

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

### Analyse et discussion

Les deux tâches proposées sont de natures très différentes. Malgré l'appren-  
 tissage, la figure 5.5 page 122 montre que la molécule Ubiquitin a été la plus  
 10 longue à réaliser : la tâche collaborative étroitement couplée est plus com-  
 plexe que la tâche faiblement couplée. Pourtant, les molécules n'ont pas été  
 alternées lors de la procédure expérimentale (voir section B.3.4 page 181) :  
 c'est toujours la molécule Prion qui a été présentée en premier aux sujets. De  
 plus, de nombreux groupes ont atteint la limite de 10 mn lors de la réalisa-  
 15 tion du scénario 2 (Ubiquitin). Nous pouvons en déduire que la collaboration  
 étroitement couplée est plus complexe à appréhender par les sujets.

L'étude précédente présentée dans le chapitre 3 page 49 a montré que les  
 performances sont meilleures lorsque les ressources disponibles (outils de ma-  
 nipulation) sont partagés entre plusieurs utilisateurs. Cependant, cette étude  
 20 compare deux configurations collaboratives. On constate d'après la figure 5.6  
 page 122 que les quadrinômes obtiennent des performances identiques aux  
 binômes, quel que soit le scénario. D'ailleurs, les binômes et les quadrinômes  
 ont également effectué des fréquences de sélections similaires ce qui confirme  
 ce résultat (voir figure 5.7 page précédente).

Pourtant, la figure 5.8 page 123 montre des différences significatives entre les binômes et les quadrinômes concernant la vitesse moyenne des effecteurs terminaux. L'étude exposée par ROETHLISBERGER *et al.* [1939] a mis en évidence le phénomène de motivation sociale : les utilisateurs se motivent  
 5 entre eux pour réaliser la tâche. Ceci permet aux quadrinômes d'obtenir une activité intense avec peu de phases de relâchement durant la réalisation de la tâche. La vitesse moyenne est ainsi augmentée de manière significative chez les quadrinômes.

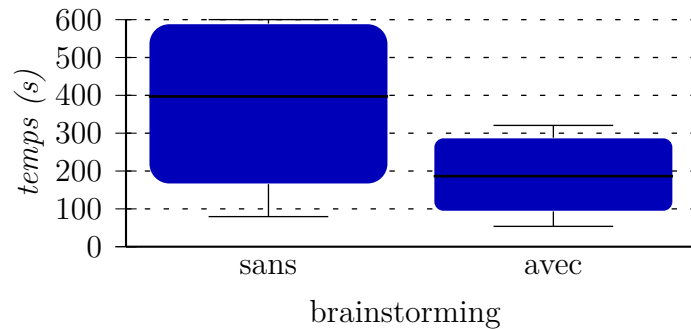
Dans l'étude précédente, nous avons également mis en évidence la présence  
 10 de conflits de coordination chez les binômes. Ces conflits de coordination entravent la progression de la tâche. Cependant, nous avons constaté que les sujets parviennent à résoudre ces conflits grâce à la communication verbale.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

Il semble que la différence entre un binôme et un groupe restreint influe sur la manière de communiquer. À partir d'observations effectuées durant la phase expérimentale, nous avons pu constater que certains sujets se montraient relativement silencieux, même en situation de conflit de coordination. Nous  
 25 verrons dans la section 5.4.3 page 130 que la présence d'un meneur dans un groupe perturbe la communication verbale au sein d'un groupe. En l'occurrence, le meneur a tendance à monopoliser la parole et à gérer les conflits de coordination.

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

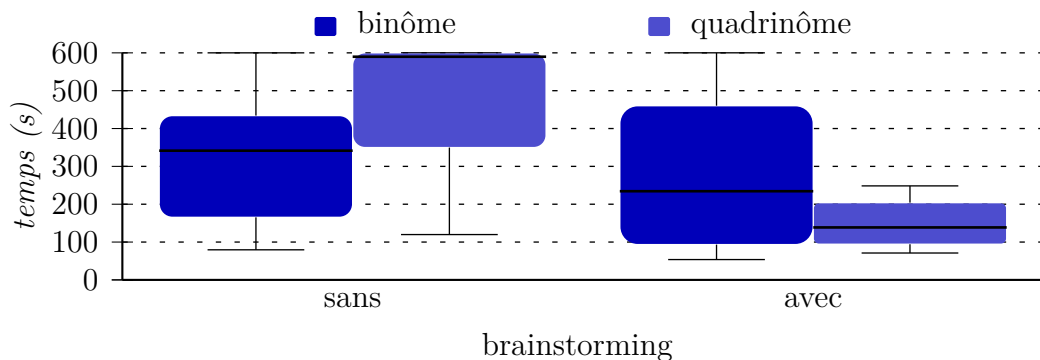
## 5.4.2 Utilité du *brainstorming* pour la collaboration

### Données et tests statistiques



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

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

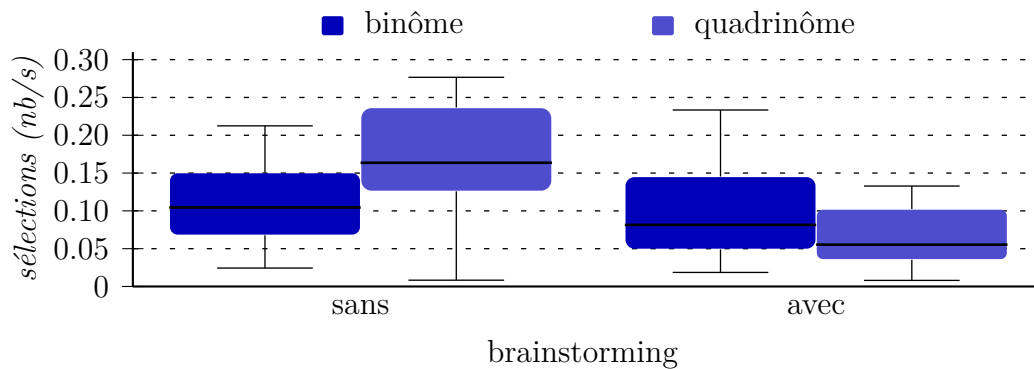


**Figure 5.11** – Temps de réalisation des scénarios en fonction des groupes avec ou sans *brainstorming*

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

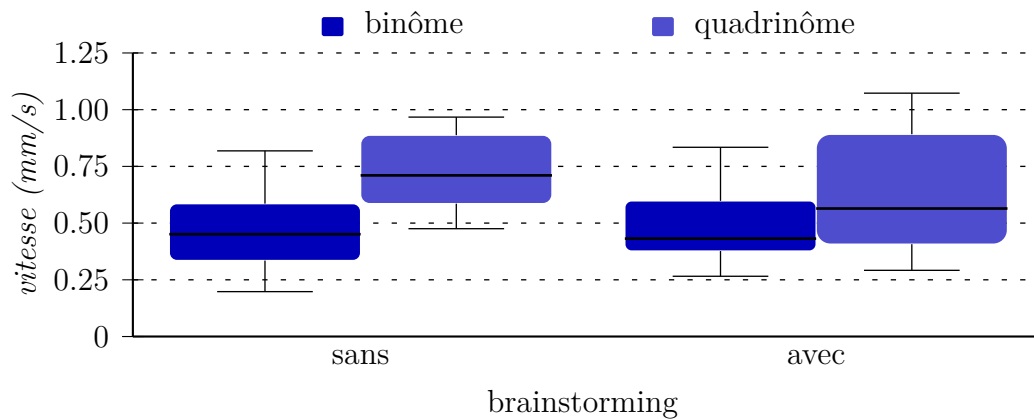
La figure 5.12 page ci-contre présente la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  pour les groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets  $\mathcal{V}_{i1}$ .





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

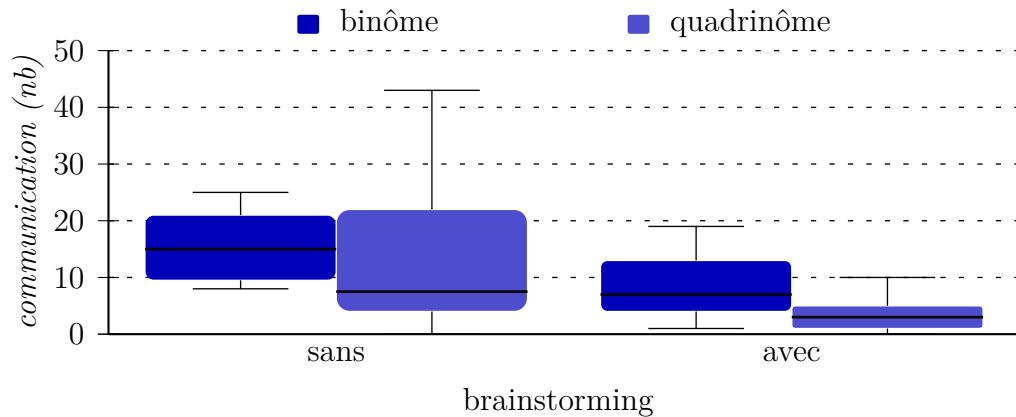
L'analyse montre qu'il n'y a pas d'effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  des binômes ( $\chi^2 = 1.2$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.265$ ). Cependant, l'analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur la fréquence de sélection  $\mathcal{V}_{d2}$  des quadrinômes ( $\chi^2 = 11$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ).



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

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

La figure 5.14 page suivante présente le nombre d'ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  pour les groupes avec ou sans *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  en fonction du nombre de sujets



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

$\mathcal{V}_{i1}$ . L’analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le nombre d’ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des binômes ( $\chi^2 = 12.9$ ,  $df = 1$ ,  $p \ll 0.05$ ). De la même façon, l’analyse montre un effet significatif du *brainstorming*  $\mathcal{V}_{i3}$  sur le nombre d’ordres verbaux  $\mathcal{V}_{d5}$  des quadrinômes ( $\chi^2 = 4.1$ ,  $df = 1$ ,  $p = 0.042$ ).

5

### Analyse et discussion

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

10

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

15

Cependant, la figure 5.11 page 126 et la figure 5.12 page précédente montrent que le *brainstorming* est seulement bénéfique pour les quadrinômes. En effet, les binômes n’obtiennent aucune évolution significative des performances avec ou sans *brainstorming*. De même, la figure 5.13 page précédente montre que la vitesse moyenne de l’effecteur terminal des binômes n’évolue pas. La configuration bimanuelle est certainement la raison de cette vitesse inférieure.

20

Le peu d’intérêt que présente le *brainstorming* pour les binômes s’explique par deux raisons. Le *brainstorming* étant utilisé pour définir une stratégie

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

Cependant, la figure 5.11 page 126 et la figure 5.12 page 127 mettent en évidence l'amélioration des performances pour les quadrinômes. Nous avons vu dans la section 5.4.1 page 122 que les quadrinômes éprouvent des difficultés dans la résolution des conflits de coordination. D'après les figures observées, le *brainstorming* permet l'élaboration d'une stratégie et la définition des rôles de chacun des sujets. L'élaboration d'une stratégie réduit de façon importante le nombre de conflits de coordination pendant la réalisation de la tâche et ainsi améliore les performances. De plus, la mise en place de rôles pour chacun des sujets avant le début de la tâche permet de distribuer la tâche ou de l'organiser le cas échéant et ainsi d'éviter le phénomène de paresse sociale ce qui rejoint les conclusions faites par LATANÉ *et al.* [1979] sur l'identification des rôles.

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

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

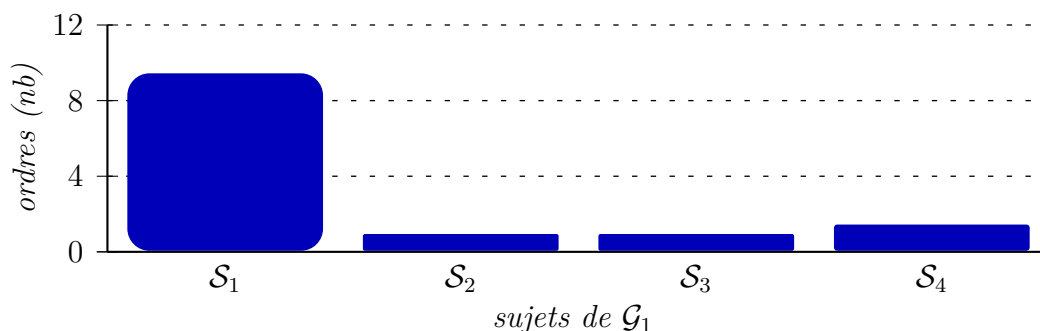
attentifs en même temps que leurs collègues. La réflexion sur la meilleure stratégie à choisir n'est donc pas optimale.

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

### 5.4.3 Définition d'un meneur

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

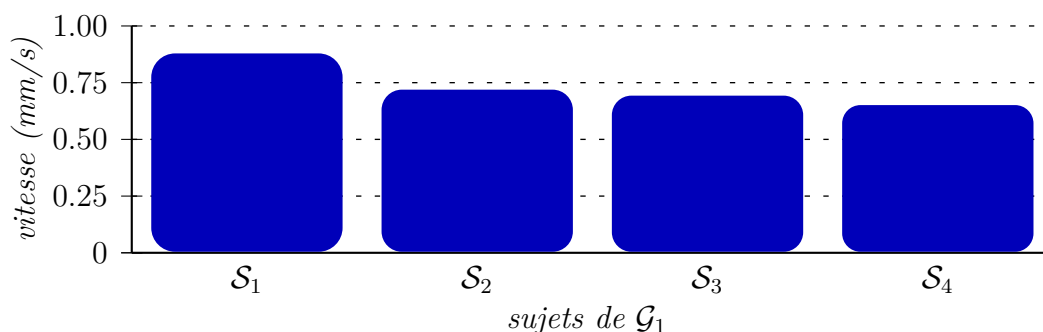
#### Données et statistiques



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

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

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



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

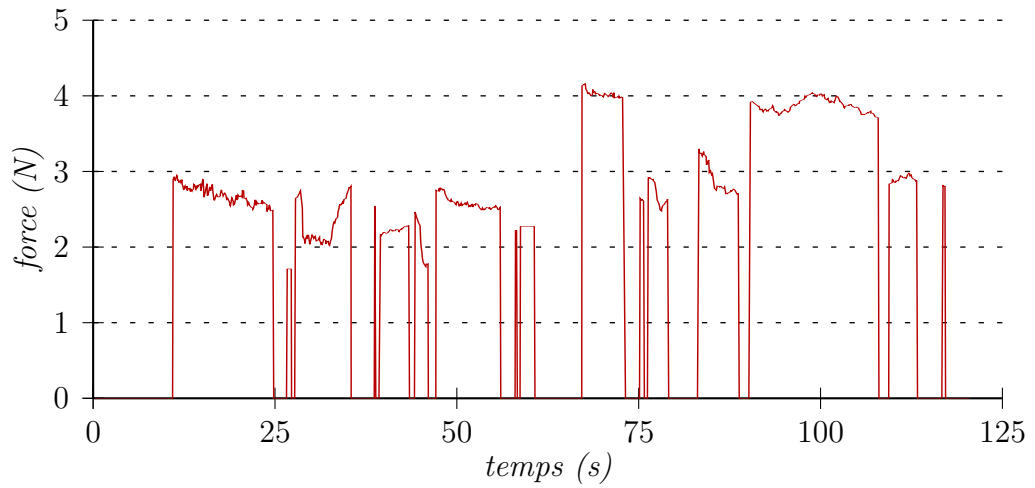
La figure 5.17 page suivante présente les profils de force  $\mathcal{V}_{d4}$  des sujets  $S_1$  et  $S_2$  du groupe  $\mathcal{G}_1$ . Chaque période où la force est maintenue représente une sélection (voir figure 5.17b page suivante). On constate un profil très chaotique pour le sujet  $S_1$  avec un grand nombre de sélections (11 sélections).

- 5 Par opposition, le profil du sujet  $S_2$  est très peu chaotique avec un petit nombre de sélections (4 sélections  $> 10$  s). De plus, les efforts maximaux produits par le sujet  $S_2$  sont plus importants que ceux du  $S_1$  (5 N pour  $S_2$  contre 4 N pour  $S_1$ ).

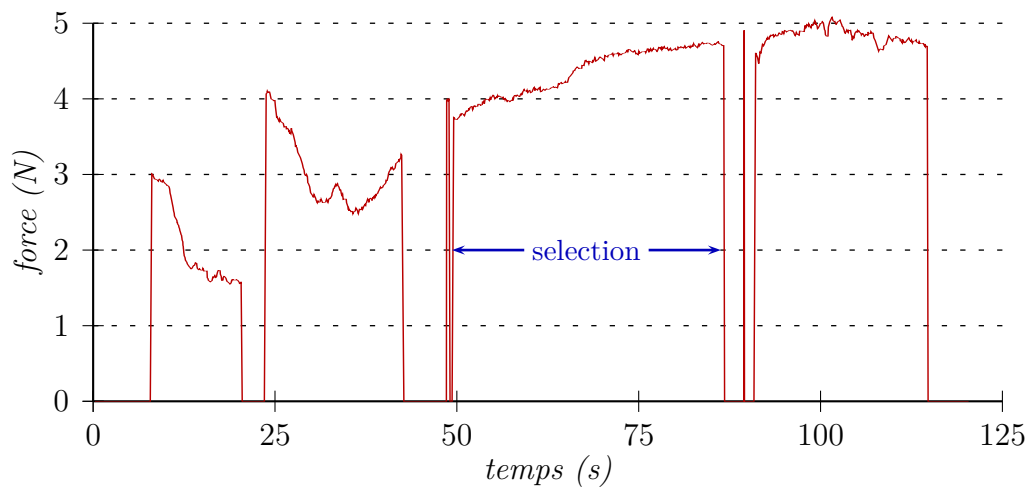
### Analyse et discussion

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

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



(a) Profil de force de  $S_1$



(b) Profil de force de  $S_2$

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

Par opposition, les suiveurs n'explorent pas l'environnement. En effet, la figure 5.17b page ci-contre montre un nombre de sélections peu élevées mais des sélections maintenues sur une longue période de temps. Le suiveur accepte un ordre du meneur et effectue la déformation jusqu'à atteindre l'objectif fixé.

5 Les manipulations des suiveurs sont plutôt lentes car les déformations nécessitent de la précision dans la manipulation. De plus, l'effort déployé est plus important car toute l'attention du suiveur est portée sur la déformation. Le meneur ne déploie pas autant d'effort car il n'effectue pas les déformations.

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

15 afin d'obtenir une bonne harmonie dans le groupe.

## 5.5 Synthèse

### 5.5.1 Résumé des résultats

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

20

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

25

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

30

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

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

### 15 5.5.2 Conclusion

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

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

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

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



La majorité de ces outils seront implémentés dans la dernière version de la plate-forme afin d'effectuer une expérimentation avec des experts de la déformation moléculaire. Ces outils seront évalués à la fois en terme d'amélioration sur les performances mais également en terme d'utilisabilité. Le chapitre 6

5 page 139 décrit ces nouveaux outils et l'ensemble de l'expérimentation.

## Bibliographie

- [BALES 1950]  
BALES, Robert F. (1950). *Interaction process analysis : a method for the study of small groups*. Anglais. Addison-Wesley (cf. pages 114–116, 131).
- [BRUCE 2006]  
BRUCE, Kyle (2006). « Henry S. Dennison, Elton Mayo, and human relations historiography ». Anglais. Dans *Management and Organizational History* 1.2, pages 177–199 (cf. page 115).
- [DIEHL et STROEBE 1987]  
DIEHL, Michael et Wolfgang STROEBE (1987). « Productivity loss in brainstorming groups : toward the solution of a riddle ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 53.3, pages 497–509. ISSN : 0022-3514 (cf. page 115).
- [LATANÉ et al. 1979]  
LATANÉ, Bibb, Kipling WILLIAMS et Stephen HARKINS (juin 1979). « Many hands make light the work : the causes and consequences of social loafing ». Anglais. Dans *Journal of Personality and Social Psychology* 37.6, pages 822–832. URL : <http://content.apa.org/journals/psp/37/6/822> (cf. pages 115, 129, 130).
- [MUGNY et al. 1995]  
MUGNY, Gabriel, Jean-Léon BEAUVOIS et Dominique OBERLÉ (1995). *Relations humaines, groupes et influence sociale*. La psychologie sociale. Presses universitaires de Grenoble (cf. page 114).
- [OSBORN 1963]  
OSBORN, Alex Faickney (1963). *Applied imagination : principles and procedures of creative problem-solving*. Anglais. Scribner (cf. pages 114, 115).
- [POOLE et HOLLINGSHEAD 2005]  
POOLE, Marshall Scott et Andrea B. HOLLINGSHEAD (2005). *Theories of small groups : interdisciplinary perspectives*. Anglais. Sage. ISBN : 9780761930761 (cf. page 115).
- [RINGELMANN 1913]  
RINGELMANN, Maximilien (1913). « Recherches sur les moteurs animés : Travail de l'homme ». Dans *Annales de l'Institut National Argonomique*. Sous la direction de Jean-Baptiste BAILLIÈRE. Tome 12. 2. Librairie Agricole De La Maison Rustique, pages 1–40 (cf. page 115).

[ROETHLISBERGER *et al.* 1939]

ROETHLISBERGER, Fritz J., William J. DICKSON et Harold A. WRIGHT (nov. 1939). *Management and the worker*. Anglais. Cambridge, Mass : Harvard University Press (cf. pages 114, 115, 125).

5 [TUCKMAN 1965]

TUCKMAN, Bruce (juin 1965). « Developmental sequence in small groups ». Anglais. Dans *Psychological bulletin* 63.6, pages 384–399 (cf. page 115).

[J. C. WOOD et M. C. WOOD 2004]

10 WOOD, John Cunningham et Michael C. WOOD (2004). *George Elton Mayo : critical evaluations in business and management*. Tome 1. Critical evaluations in business and management. Routledge. ISBN : 9780415323918 (cf. page 115).

[ZAJONC 1965]

15 ZAJONC, Robert B. (juil. 1965). « Social facilitation ». Anglais. Dans *Science* 149, pages 269–274 (cf. pages 115, 116).

## Bibliographie

---

# Travail collaboratif assisté par haptique

## Sommaire

5	6.1 Introduction . . . . .	140
	6.2 Assistance haptique pour la communication . .	140
	6.3 Présentation de l'expérimentation . . . . .	140
	6.3.1 Description de la tâche . . . . .	140
10	6.3.2 Spécificités du protocole expérimental . . . . .	143
	6.4 Résultats . . . . .	148
	6.5 Synthèse . . . . .	148
	6.5.1 Résumé des résultats . . . . .	148
	6.5.2 Conclusion . . . . .	148
15	Bibliographie . . . . .	149

## 6.1 Introduction

Cette dernière expérimentation aura pour objectif d'introduire et de valider des outils de communication haptique dans le cadre d'une tâche de *docking* moléculaire. Sur la base des précédentes expérimentations, 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 de *docking* 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.

## 6.2 Assistance haptique pour la communication

## 6.3 Présentation de l'expérimentation

### 6.3.1 Description de la tâche

La tâche proposée est la déformation de molécules et de complexes de molécules dans un EVC. L'objectif est de la rendre le plus conforme possible au modèle. Cinq molécules sont utilisés dans le cadre de cette expérimentation dont trois exclusivement réservées pour l'entraînement :

**TRP-CAGE** La molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH *et al.* 2002] a pour identifiant PDB 1L2Y sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 304 atomes dont 20 résidus.

**Prion** La molécule nommée Prion [CHRISTEN *et al.* 2009] avec l'identifiant PDB 2KFL sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus.

---

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

**Ubiquitin** La molécule nommée Ubiquitin [VIJAY-KUMAR *et al.* 1987] avec l'identifiant PDB **1UBQ** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 1 231 atomes dont 76 résidus.

**TRP-ZIPPER** La molécule TRP-ZIPPER [COCHRAN *et al.* 2001] a pour identifiant PDB **1LE1** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus.

**NUSE:NUSG** Le complexe de molécules NUSE:NUSG [BURMANN *et al.* 2010] a pour identifiant PDB **2KVQ** sur la *Protein DataBase*<sup>1</sup>. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1 294 atomes pour 80 résidus et 929 atomes pour 59 résidus.

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

## Description des outils

Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation par molécule que nous nommerons outil de manipulation<sup>2</sup>

**Outil de désignation** Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur désigne une cible. Le coordinateur est renseigné sur l'acceptation de cette désignation par l'arrêt de cette vibration. De plus, tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

**Outil de déformation** Un outil de déformation au niveau atomique est fourni aux deux opérateurs présents lors de l'expérimentation. Nous souhaitons donné la possibilité au coordinateur d'indiqué rapidement qu'une

2. L'outil de déformation par molécule applique une force à l'ensemble des atomes de la molécule et produit ainsi un déplacement complet de la molécule ; cette opération s'apparente plus à une manipulation qu'à une déformation.

désignation a été effectuée. Lorsque le coordinateur désigne une cible, tous les outils des opérateurs sont soumis à une vibration. Il est à noter que si les opérateurs sont en train de déformer la molécule, ils ne ressentent pas la vibration mais dès qu'ils relâchent leur sélection, leur outil leur indique qu'une  
5 désignation est en cours. Les opérateurs ont la possibilité d'accepter ou non la désignation. À l'instant où un des deux opérateur accepte la désignation, les vibrations s'arrêtent. L'opérateur qui a accepté la désignation est attiré vers la cible à déformer. De plus, il se voit offrir le pouvoir de déformer non plus au niveau atomique mais au niveau résiduel ce qui lui donne une capa-  
10 cité étendue. L'objectif de cette étendue des capacités est de stimuler l'envie d'interagir avec le coordinateur.

**Outil de manipulation** Un dernier outil, détenu par le coordinateur, permet la manipulation de la molécule (outil de déformation au niveau moléculaire). Cet outil va permettre au coordinateur de déplacer la molécule comme un  
15 bloc pour la rapprocher de sa cible finale. Afin d'aider le coordinateur dans cette tâche, nous avons souhaiter prendre en compte les actions des opérateurs pour assister la manipulation de la molécule. Ainsi, lorsque les opérateurs effectuent une déformation, une infime partie de l'effort déployé est reporté sur l'ensemble de la molécule afin de la déplacer dans cette même  
20 intention. Les efforts reportés sont relativement faibles pour ne pas perturber la manipulation du coordinateur mais devrait sensiblement modifier le déplacement la molécule vers une position optimale.

Parmi les outils présentés précédemment, les interfaces haptiques sont répartis de la façon suivante :

- 25 – 1 PHANTOM Omni® est l'outil de désignation destiné au coordinateur ;
- 2 PHANTOM Omni® sont les outils de déformation destinés aux opérateurs ;
- 1 PHANTOM Desktop® est l'outil de manipulation destiné au coordinateur.

Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. La souris est donc le troisième périphérique destiné au  
30 coordinateur. Ce choix est désiré afin de limiter au maximum les manipulations à la souris. En effet, la manipulation à la souris perturbe complètement l'environnement virtuel et modifie la position des curseurs par rapport à la molécule. Il est donc inutile de déformer la molécule lorsque l'orientation de la scène est modifié. Cependant, bien que dans la plupart des cas, les  
35 sujets n'éprouvent pas le besoin de modifier l'orientation de la scène, certains groupes en ont fait la demande explicite. En plaçant la souris comme troisième outil, l'objectif est qu'elle soit utilisée seulement lorsque c'est réellement nécessaire.



## Description de la tâche

Le visuel est identique à la tâche présentée pour la troisième expérimentation (voir section 5.3.2 page 118). En effet, la molécule est représentée en CPK et *NewRibbon*. La molécule cible est représentée en *NewRibbon* transparent.

5 **Scénario 1** La première tâche à réaliser est la déformation de la molécule Ubiquitin. La déformation proposée est identique à la déformation proposée dans la troisième expérimentation. En effet, cette tâche s'est révélée très intéressante pour stimuler une collaboration étroite durant la précédente expérimentation. Dans cette tâche, seuls les outils de dési-  
10 gnation et de déformation sont proposés ; la molécule Ubiquitin possède des atomes fixes afin de ne pas dériver.

**Scénario 2** La seconde tâche consiste à reconstituer le complexe de molécules NUSE:NUSG. En effet, la molécule NUSG est laissé complètement libre et doit être amarrer à la molécule NUSE : c'est une tâche de *do-*  
15 *cking* moléculaire simplifié. On distingue deux phases dans cette tâche ; il faut approcher la molécule NUSG puis il faut affiner l'amarrage par une déformation interne de NUSG. Tous les outils (désignation, déformation et manipulation) sont proposés dans ce scénario ; la molécule NUSG est attaché à l'outil de manipulation et l'ensembl des atomes  
20 de la chaîne carbonée principale de la molécule NUSE sont fixes afin d'éviter que la molécule ne dérive.

Les molécules TRP-CAGE et Prion sont utilisés pour l'entraînement des outils de désignation et de déformation. Pour ce propos, la tâche proposée dans la seconde expérimentation pour TRP-CAGE et la tâche proposée dans la  
25 troisième expérimentation pour Prion sont reprises.

La molécule TRP-ZIPPER est utilisée pour l'entraînement de l'outil de manipulation. Pour ce propos, la molécule TRP-ZIPPER a été rendue complètement libre (aucun atome n'est fixé) et elle est attaché à l'outil de manipulation.

Afin de réaliser la tâche, différentes mesures sont disponibles en temps-réel  
30 pour les sujets. La première de ces mesures est le score RMSD qui est décrit dans la section 4.3.1 page 82. La seconde mesure est l'énergie totale du système, valeur calculée par NAMD et représentant une synthèse des énergies électriques et des énergies de VAN DER WAALS.

### 6.3.2 Spécificités du protocole expérimental

35 Les sections suivantes décrivent l'ensemble des modification apportées à la plate-forme de base (voir chapitre A page 163) et principalement aux outils.

La méthode expérimentale est exposée dans la section B.4 page 182. Un résumé de cette méthode se trouve dans la table 6.1 page 148.

### Matériel

Dans cet quatrième et dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils destinés à améliorer les interactions entre les membres d'un trinôme. Deux sujets auront toujours à leur disposition deux outils de déformation adaptés pour le processus de désignation (voir section 6.3.2 page ci-contre). Le troisième sujet aura à sa disposition trois outils dont deux basés sur une interface haptique. Les deux interfaces haptiques utilisées sont un PHANTOM Omni® et un PHANTOM Desktop®, tous deux associés à une machine de faible puissance pour le serveur VRPN. De plus, ce troisième sujet aura accès à un outil de manipulation. En effet, bien que les outils d'orientation soient générateurs de conflits de coordination, il s'est avéré au cours de la troisième expérimentation que certaines situations requièrent un tel outil. Durant la première expérimentation, une interface haptique avait été utilisé mais n'était pas vraiment adaptée pour cette fonctionnalité. Au cours de la seconde expérimentation, c'est une souris 3D qui a remplacé l'interface haptique. Bien que cet outil soit très adapté pour cette fonctionnalité, il est relativement complexe à prendre en main et nécessite un apprentissage. Cet apprentissage n'est pas acceptable durant un processus expérimental d'environ une heure. C'est donc une simple souris USB qui a été choisi comme outil de manipulation : il est un peu moins adapté pour l'orientation d'une molécule qu'une souris 3D mais est nettement plus intuitif pour la plupart des sujets qui sont habitués à manipuler ce type de périphérique.

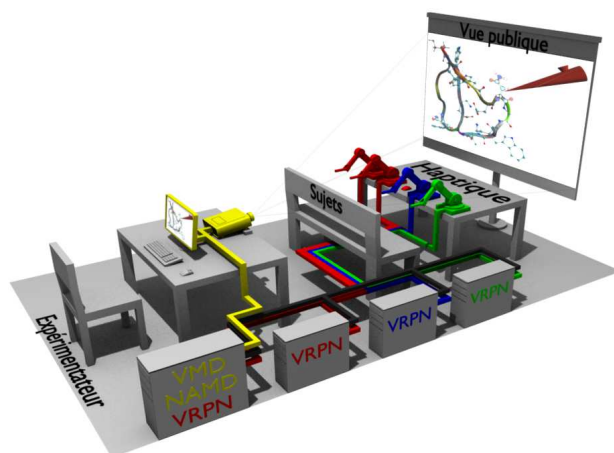
De la même manière que dans la troisième expérimentation, une caméra vidéo SONY® (HDR-CX550) a été installée derrière les sujets afin de filmer à la fois les sujets et l'écran de vidéoprojection. Le son est également capté par la caméra. Là encore, les vidéos sont exportées et séquencées *a fortiori*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

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

Images à compléter  
Il va falloir faire des  
photos du dispositif expérimental

### Visualisation

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



**Figure 6.1** – Schéma du dispositif expérimental

**Figure 6.2** – Photographie du dispositif expérimental

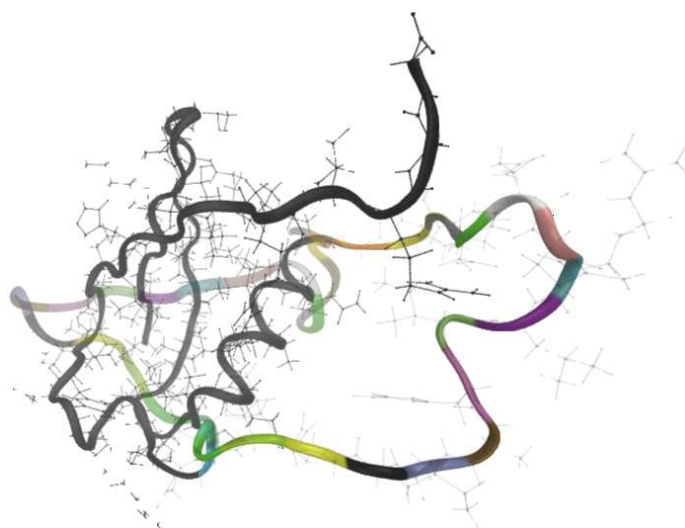
décidé de donner un rendu secondaire aux atomes. En effet, ils sont à présents rendus de manière transparente. Cependant, nous verrons dans la section suivante que le coordinateur aura la possibilité de colorer les résidus au besoin. Pour le reste, le rendu visuel est similaire à celui des expérimentations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

### Outils de manipulation

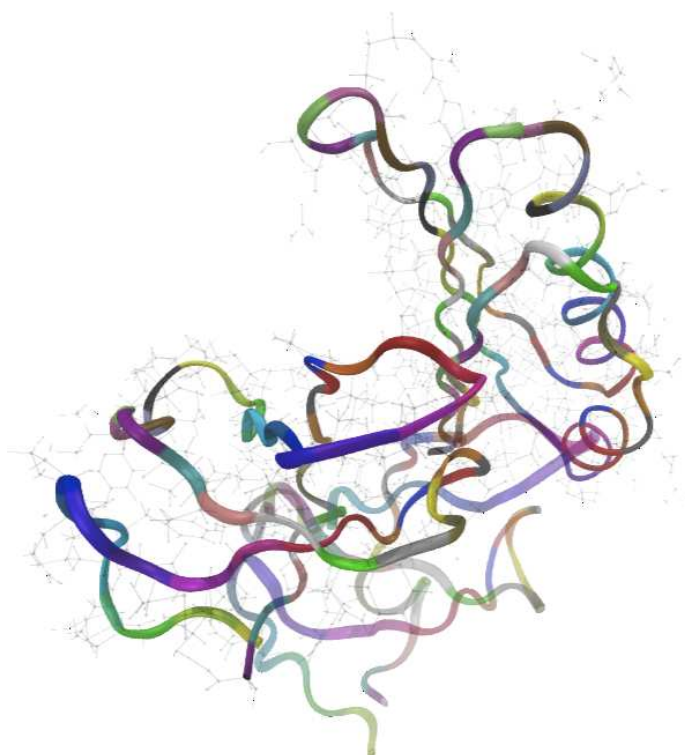
Pour cette expérimentation, des modifications ont été apportés aux différents outils. En effet, nous souhaitons apporter une assistance haptique afin d'augmenter la communication sensorielle entre les sujets. Les outils modifiés sont l'outil de désignation, l'outil de déformation par atome et l'outil de déformation par molécule que nous nommerons outil de manipulation<sup>3</sup>. Ces outils sont décrits dans la section 2.4.2 page 41.

**Outil de désignation** Le coordinateur est en charge d'effectuer les désignations envers les opérateurs. Nous souhaitons fournir au coordinateur un

3. L'outil de déformation par molécule applique une force à l'ensemble des atomes de la molécule et produit ainsi un déplacement de la molécule en bloc ; cette opération s'apparente plus à une translation de la molécule qu'à une déformation.



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



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

moyen de connaître l'état de la désignation à chaque instant. Une vibration est donc générée sur l'outil de désignation lorsque le coordinateur désigne une cible. Le coordinateur est renseigné sur l'acceptation de cette désignation par l'arrêt de cette vibration. De plus, tant que la cible désignée par le coordinateur n'aura pas été acceptée, le coordinateur ne pourra pas désigner une autre cible.

**Outil de déformation** Un outil de déformation au niveau atomique est fourni aux deux opérateurs présents lors de l'expérimentation. Nous souhaitons donner la possibilité au coordinateur d'indiquer rapidement qu'une désignation a été effectuée. Lorsque le coordinateur désigne une cible, tous les outils des opérateurs sont soumis à une vibration. Il est à noter que si les opérateurs sont en train de déformer la molécule, ils ne ressentent pas la vibration mais dès qu'ils relâchent leur sélection, la vibration leur indique qu'une désignation est en cours. Les opérateurs ont la possibilité d'accepter ou non la désignation. À l'instant où un des deux opérateur accepte la désignation, les vibrations s'arrêtent pour tous les opérateurs. L'opérateur qui a accepté la désignation est alors attiré vers la cible à déformer. De plus, il se voit offrir le pouvoir de déformer non plus au niveau atomique mais au niveau résiduel ce qui lui donne une capacité étendue. L'objectif de cette augmentation des capacités est de stimuler l'envie d'interagir avec le coordinateur.

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

**Outil d'orientation** Pour finir, la souris permettant de modifier l'orientation de la scène est assignée au coordinateur. La souris est donc le troisième périphérique destiné au coordinateur. Le choix de surcharger le coordinateur

est délibéré afin de limiter au maximum les manipulations à la souris. En effet, la modification de l'orientation de la molécule ne modifie pas la position des curseurs qui se trouvent dans un référentiel différent. En d'autres termes, la rotation de la molécule va perturber les opérateurs qui sont en train d'effectuer des déformations en modifiant la position des atomes. En mettant à disposition la souris comme troisième outil pour le coordinateur, l'objectif est qu'elle soit peu utilisée, seulement lorsque c'est réellement nécessaire.

**Table 6.1** – Synthèse de la procédure expérimentale

<b>Tâche</b>	Déformation d'une molécule ou d'un complexe de molécule		
<b>Hypothèses</b>	$\mathcal{H}_1$ Performances améliorées par l'assistance haptique $\mathcal{H}_2$ L'assistance haptique améliore la communication $\mathcal{H}_3$ La plate-forme est appréciée des experts		
<b>Variables indépendantes</b>	$\mathcal{V}_{i1}$ Présence de l'assistance $\mathcal{V}_{i2}$ Molécules à déformer		
<b>Variables dépendantes</b>	$\mathcal{V}_{d1}$ Score de ressemblance minimum $\mathcal{V}_{d2}$ Temps du score RMSD $\mathcal{V}_{d3}$ Nombre de sélections $\mathcal{V}_{d4}$ Communication verbales et gestuelles $\mathcal{V}_{d5}$ Test d'utilisabilité de la plate-forme		
<b>Condition <math>\mathcal{C}_1</math></b>	<b>Condition <math>\mathcal{C}_2</math></b>	<b>Condition <math>\mathcal{C}_3</math></b>	<b>Condition <math>\mathcal{C}_4</math></b>
Sans assistance	Avec assistance	Sans assistance	Avec assistance
Ubiquitin	Ubiquitin	NuSE:NuSG	NuSE:NuSG

## 6.4 Résultats

## 6.5 Synthèse

### 6.5.1 Résumé des résultats

### 6.5.2 Conclusion

## Bibliographie

[BURMANN *et al.* 2010]

BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010).  
5 « A NUSE complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 141).

[CHRISTEN *et al.* 2009]

CHRISTEN, Barbara, Simone HORNEMANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar  
10 wallaby (*macropus eugenii*) shows that the  $\beta$ 2- $\alpha$ 2 loop is modulated by long-range sequence effects ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 140).

[COCHRAN *et al.* 2001]

COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVAS-  
15 NIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric  $\beta$ -hairpins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. page 141).

[NEIDIGH *et al.* 2002]

NEIDIGH, Jonathan W., R. Matthew FESINMEYER et Niels H. ANDERSEN  
20 (juin 2002). « Designing a 20-residue protein ». Anglais. Dans *Nature Structural Biology* 9.6, pages 425–430 (cf. page 140).

[VIJAY-KUMAR *et al.* 1987]

VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987).  
25 « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. page 141).

## Bibliographie

---



## **Conclusion et perspectives**



# Glossaire

## **bimanuel**

Qui se fait avec les deux mains. 79, 84, 88, 93, 94, 98, 99, 103–107, 114, 116, 118, 126, 131, 170

## 5 **binôme**

Groupe constitué de 2 personnes. iv, v, vii, x, 47, 48, 57–59, 61, 63, 65–69, 72, 77, 79, 80, 84, 88, 90, 92–95, 97–107, 112, 114, 116, 118, 120–127, 131, 157, 166–174, 176, 182, 187, 188

## **conflit de coordination**

10 Conflit entre deux sujets qui peut survenir lorsque les deux sujets tente d'accéder ou de déformer un objet au même instant. 67–70, 72, 99, 106, 114, 118, 123, 126, 127, 131, 132, 142

## **curseur**

15 Élément virtuel associé à un élément physique que le sujet manipule ; il est lié à l'effecteur terminal. 151

## **docking moléculaire**

Méthode permettant de déterminer l'orientation et la déformation optimale de 2 molécules afin qu'elle s'assemble pour former un complexe de molécules stable. iii, ix, xiii, 3, 4, 6–9, 11–14, 78, 80, 138, 141

## 20 **effecteur terminal**

Élément physique que le sujet manipule ; il est lié au curseur du monde virtuel. x–xii, 90, 92–94, 97, 101, 122, 126, 128, 168, 171, 172, 175, 178

## **homoscedasticité**

25 Équivalent à homogénéité des variances ; permet de comparer des variables aléatoires possédant des variances similaires. 58, 88

## **meneur**

30 En anglais *leader*, personne qui dirige un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est celui qui prend les décisions (voir aussi suiveur). v, 70, 105, 111, 114, 118, 123, 128, 129, 131, 132, 152, 173, 188

**monomanuel**

Qui se fait avec une main. 79, 94, 99, 105, 118, 131

**monôme**

5 *Groupe* constitué d'une unique personne. vii, x, 57–59, 61, 70, 72, 79, 80, 84, 90, 92–95, 97–106, 157, 166, 167, 169–172, 182, 187, 188

**motivation sociale**

En anglais *social facilitation* [TRIPLETT 1900], phénomène de groupe où les personnes fournissent plus d'efforts grâce à la présence de partenaires. 112, 113, 122, 123, 131

10  **paresse sociale**

En anglais *social loafing* [RINGELMANN 1913], phénomène de groupe où les personnes fournissent moins d'effort pour la réalisation d'une tâche que s'ils effectuaient la tâche seuls. 104, 113, 127, 128, 131

**quadrinôme**

15 Groupe constitué de 4 personnes. 116, 118, 120–128, 131, 173, 174, 176

**réalité virtuelle**

C'est une simulation informatique interactive qui immerge un ou plusieurs utilisateurs dans un environnement multimodal. 9, 11, 12

**résidu**

20 Groupe d'atomes constituant un des blocs élémentaires d'une molécule. ix, x, xii, xiii, 15, 36, 37, 39–41, 48, 51, 53, 55, 57, 59, 61–63, 66–69, 72, 73, 82, 83, 88, 98, 103, 115, 116, 118, 138, 139, 142, 159, 167–169, 171

**structure informelle**

Groupe de personnes sans structures ni hiérarchie. 129, 131

25 **suiveur**

En anglais *follower*, personne qui se laisse diriger dans un groupe afin d'atteindre des objectifs communs à ce groupe ; c'est une personne qui ne prend pas de décision (voir aussi meneur). 70, 128, 129, 131, 132, 151

30 **trinôme**

Groupe constitué de 3 personnes. 139, 142

**variable dépendante**

Facteur mesuré sur une expérimentation (nombre de sélections, trajectoire, *etc.*) ; ces variables sont influencées par les variables indépen-  
35 dantes. 152

**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. 167, 171, 174, 177

**variable inter-sujets**

Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à une et une seule des modalités de la variable. 90, 171, 174

**variable intra-sujets**

<sup>5</sup> Variables pour lesquelles les sujets sont confrontés à toutes les modalités de la variable. 58, 90, 167, 171, 174, 177



# Acronymes

## AFM

Microscope permettant l'observation de la topologie de la surface d'un échantillon au niveau atomique. 48

## 5 API

API vient de l'anglais *Application Programming Interface* et désigne une interface avec un programme informatique. 31

## CUDA

10 Technologie permettant d'utiliser l'unité graphique d'un ordinateur pour effectuer des calculs à hautes performances. 28

## DDL

Mouvements relatifs indépendants d'un solide par rapport à un autre. ix, 12, 30, 31, 38, 49, 86

## EVC

15 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. 32, 50, 73, 78–80, 115, 138, 158

## IBPC

20 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. 38

## ICM

25 Méthode de recherche dans un espace de solutions similaire à une descente de gradient. 7, 9

## 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]. 28, 38, 78, 153

### ITAP

Institut de Physique Théorique et Appliquée de STUTTGART à l'origine du développement du logiciel IMD. 38

### CNRS–LIMSI

5      Unité Propre de Recherche du CNRS (UPR 3251) associé aux universités PARIS Sud et Pierre et Marie CURIE. i, 166, 170, 173

### NAMD

Programme de simulation pour la dynamique moléculaire [PHILLIPS *et al.* 2005]. 28, 37, 38, 41, 78, 141, 153, 158

### 10 PCV

Dans une application de réalité virtuelle, les activités d'un sujet peuvent toujours être décomposées en quatre comportements de base, appelés Primitive Comportementale Virtuelle (PCV), qui sont : observer, se déplacer, agir et communiquer [FUCHS *et al.* 2006]. 48, 78, 112, 154

### 15 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. 80, 115, 141, 145, 172, 175, 177, 179

### SUS

20      Échelle de notation entre 0 et 100 proposée par BROOKE [1996] permettant d'évaluer l'utilisabilité d'un système. vii, 157, 178, 189, 194, 195

### TRM

25      Cette théorie, élaborée par WICKENS [1984] (MRT pour *Multiple Resource Theory*), propose un modèle pour la gestion des charges de travail pour un humain. 94

### UDP

30      c'est un des principaux protocole de télécommunication sur internet ; il a pour distinction de ne pas vérifier l'intégrité des données transmises. 78

### UML

C'est un langage graphique de modélisation utilisé principalement en génie logiciel. ix, 28

### VMD

35      Programme de visualisation moléculaire [HUMPHREY *et al.* 1996]. ix, 10, 12, 21, 28, 34–40, 44, 48, 49, 57, 153, 158, 159

### VRPN

Logiciel permettant de connecter différents périphériques de réalité vir-



tuelle à une même application sous forme d'une architecture client/serveur [TAYLOR II *et al.* 2001]. 28, 33, 34, 39, 55, 116, 142, 158

## Acronymes

---

# Annexes



# Dispositif expérimental

## Sommaire

5	A.1 Matériel expérimental . . . . .	164
	A.2 Présentation des molécules . . . . .	165
	A.2.1 Liste des molécules . . . . .	165
	A.2.2 Représentation des molécules . . . . .	165
	A.3 Outils de manipulation . . . . .	168
10	Bibliographie . . . . .	169

## A.1 Matériel expérimental

Les expérimentations se basent sur l'EVC présenté dans le chapitre 2 page 29. Dans cette section, nous allons présenter le matériel utilisé et sa disposition.

Tout d'abord, voici le matériel de base utilisé pour les différentes expérimentations :

- 2 ordinateurs quatre cœurs Intel® Core™ 2 Q9450 (2.66 GHz) avec 4 Go de RAM ;
- 2 interfaces haptiques PHANTOM Omni® ;
- 1 vidéoprojecteur ACER (P5 series)<sup>1</sup> ;
- 1 grand écran de vidéoprojection.

Un premier ordinateur  $\mathcal{A}$  est celui d'où l'expérimentateur va commander l'ensemble de l'expérimentation. Cet ordinateur est destiné à l'application cliente VMD : c'est donc cette machine qui s'occupe du calcul pour les rendus visuels. La seconde machine  $\mathcal{B}$  est dédiée au moteur de simulation NAMD : elle communique avec la machine  $\mathcal{A}$  par une connexion TCP/IP.

L'affichage de l'environnement virtuel est assuré par un vidéoprojecteur connecté à l'ordinateur  $\mathcal{A}$ . Le vidéo projecteur est placé derrière les sujets et projette la scène virtuelle sur un grand écran de 2.2 m par 2 m. L'écran est placé face aux sujets et tous les sujets perçoivent la même scène virtuelle. Afin que la communication entre les sujets soit optimales, aucune contrainte de communication ne leur est donnée et ils sont libres d'utiliser tous les moyens de communication possibles (verbaux, gestuels, virtuels*etc.*).

Les ordinateurs  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$  sont également utilisés en tant que serveur VRPN. Un PHANTOM Omni® est connecté sur chacune des deux machines. Ces interfaces haptiques sont placées sur une table devant les sujets. Les sujets ont la possibilité de déplacer les interfaces haptiques (avec l'aide de l'expérimentateur) afin de s'installer confortablement et d'utiliser la main qu'ils désirent pour la manipulation du périphérique.

Ce qui vient d'être décrit est la plate-forme de base qui est utilisée au cours des différentes expérimentations. Cependant, des spécificités liées aux tâches proposées durant les différentes expérimentations sont détaillées au-fur-et-à-mesure.

---

1. Pour la première expérimentation, c'est un vidéoprojecteur CASIO XJ qui a été utilisé.

## A.2 Présentation des molécules

Durant les différentes expérimentations, plusieurs molécules ou complexe de molécules ont été utilisées. À partir de ces molécules, différents scénarios ont été conçus et les difficultés sont décrites au-fur-et-à-mesure de la présentation des différentes expérimentation. Tout d'abord, nous présenterons la liste des molécules utilisées. Puis nous expliquerons le rendu visuel utilisé dans tous les expérimentations.

### A.2.1 Liste des molécules

Chaque molécule utilisée est référencée sur la *Protein DataBase*<sup>2</sup> par un identifiant PDB. Voici la liste des molécules utilisées :

**TRP-ZIPPER** La molécule TRP-ZIPPER [COCHRAN *et al.* 2001] a pour identifiant PDB **1LE1**. Cette molécule contient 218 atomes dont 12 résidus.

**TRP-CAGE** La molécule nommée TRP-CAGE [NEIDIGH *et al.* 2002] a pour identifiant PDB **1L2Y**. Cette molécule contient 304 atomes dont 20 résidus.

**Prion** La molécule nommée Prion [CHRISTEN *et al.* 2009] avec l'identifiant PDB **2KFL**. Cette molécule contient 1 779 atomes dont 112 résidus.

**Ubiquitin** La molécule nommée Ubiquitin [VIJAY-KUMAR *et al.* 1987] avec l'identifiant PDB **1UBQ**. Cette molécule contient 1 231 atomes dont 76 résidus.

**NUSE:NUSG** Le complexe de molécules NUSE:NUSG [BURMANN *et al.* 2010] a pour identifiant PDB **2KVQ**. Il est constitué de deux molécules NUSE et NUSG possédant respectivement 1 294 atomes pour 80 résidus et 929 atomes pour 59 résidus.

On notera la présence de molécule de taille relativement petite comme TRP-ZIPPER et TRP-CAGE. On trouve également des molécules de taille assez importante comme Prion et Ubiquitin. Enfin, pour la dernière expérimentation, un complexe de molécules a été utilisé avec NUSE:NUSG.

### A.2.2 Représentation des molécules

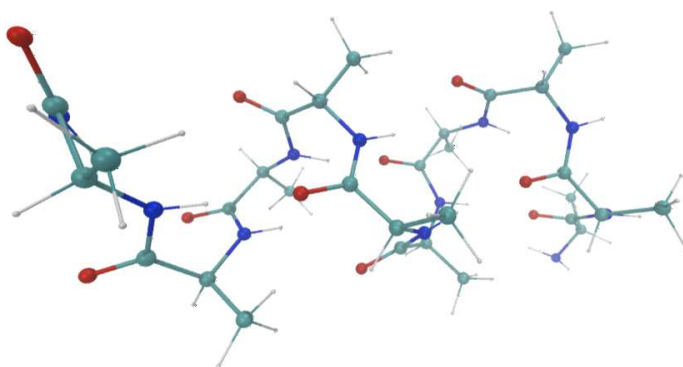
La représentation des molécules est un domaine de recherche à part entière. En effet, la complexité et l'abondance d'informations à visualiser nécessite

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

des rendus graphiques avancés et complémentaires. De plus, la quantité importante d'informations à représenter peut nécessiter une machine puissante afin de générer un rendu en temps-réel. Heureusement, VMD possède un moteur de rendu graphique avancé (voir section 2.3.1 page 37), aussi bien en  
5 terme de choix de rendu qu'en terme d'accélération graphique.

Afin d'obtenir un rendu de molécule pertinent, nous avons bénéficié des conseils d'un biologiste. Ensuite, nous avons pu adapter les rendus de molécules en fonction de nos besoins pour les différents scénarios proposés. Cependant, une base commune a été utilisée.

10 Tout d'abord, les atomes étant l'élément constituant de la molécule, il est nécessaire de les représenter en intégralité. Cependant, ils sont très nombreux et produisent rapidement une surcharge de la scène donc le choix de leur taille est primordial. Une première solution est de s'affranchir, partiellement, des atomes d'hydrogène. En effet, ces derniers ne constituent pas une information  
15 importante et peuvent être déduits à partir du reste de la structure de la molécule. Les atomes d'hydrogènes peuvent donc être représentés avec une taille réduite par rapport aux autres atomes. Le rendu CPK est utilisé pour effectuer un rendu des atomes (voir figure A.1).

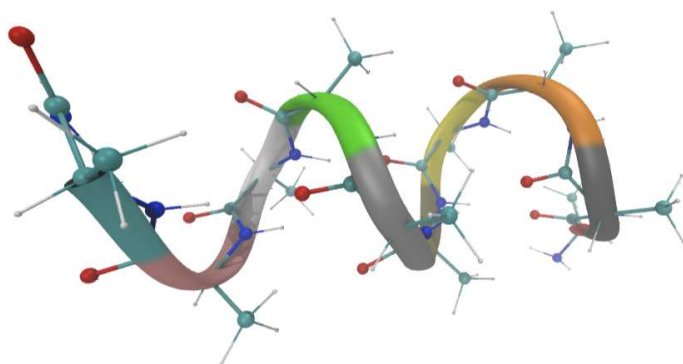


**Figure A.1** – Représentation des atomes avec CPK

Cependant, la représentation de la molécule exclusivement avec les atomes  
20 et les liaisons entre les atomes ne permet pas d'appréhender la structure globale. En effet, on peut voir une molécule comme un long brin qui se replie sur lui-même avec des feuilles tout le long du brin. Il est donc pertinent de représenter cette structure principale. C'est la représentation *NewRibbon* qui tient ce rôle (voir figure A.2 page suivante).

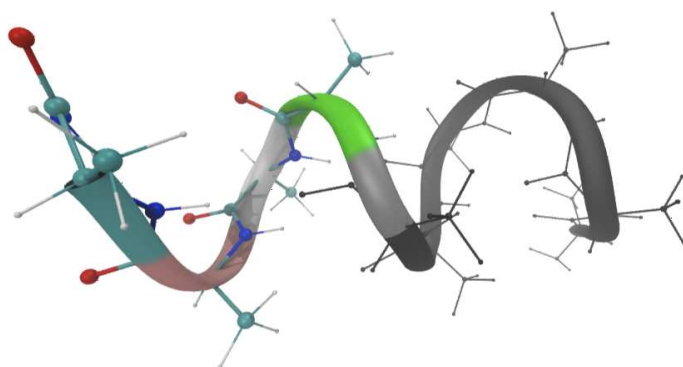
25 Pour finir, pour des raisons physiques d'interaction, certains atomes sont fixés au niveau de la simulation afin d'éviter des dérives de la molécule. Ces atomes





**Figure A.2** – Représentation de la structure principale de la molécule avec *NewRibbon*

sont signalés visuellement par une représentation en gris (voir figure A.3 page ci-contre).



**Figure A.3** – Représentation des atomes fixés en gris

## A.3 Outils de manipulation

La plate-forme de base propose deux interfaces haptiques. Ces deux interfaces haptiques sont utilisées comme interfaces de déformation de la molécule :  
5 des outils *tug*. Pour comprendre ce que sont des outils de déformation, on peut se reporter à la section 2.4.1 page 40. Au cours des trois premières expérimentations, seules quelques modifications du rendu visuel associés à ces outils sont effectués. Cependant, la quatrième expérimentation apporte des modifications plus lourdes de cet outil que ce soit au niveau visuel ou au  
10 niveau haptique. On pourra se reporter aux chapitres respectifs pour plus de détails.

De plus, un outil de manipulation et d'orientation de la molécule sera proposé sous différentes formes au cours des différentes expérimentations. Ce sera par l'intermédiaire d'un outil *grab* dans la première expérimentation (voir section 3.3.2 page 57), par une souris 3D dans la seconde (voir section 4.3.2 page 86) puis par une simple souris USB dans la dernière expérimentation (voir section 6.3.2 page 144).

## Bibliographie

[BURMANN *et al.* 2010]

- 5 BURMANN, Björn M., Kristian SCHWEIMER, Xiao LUO, Markus C. WAHL, Barbara L. STITT, Max E. GOTTESMAN et Paul RÖSCH (avr. 2010). « A NUSE complex links transcription and translation ». Anglais. Dans *Science* 328.5977, pages 501–504 (cf. page 165).

[CHRISTEN *et al.* 2009]

- 10 CHRISTEN, Barbara, Simone HORNEMANN, Fred F. DAMBERGER et Kurt WÜTHRICH (juin 2009). « Prion protein NMR structure from tammar wallaby (*macropus eugenii*) shows that the  $\beta$ 2- $\alpha$ 2 loop is modulated by long-range sequence effects ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 389.5, pages 833–845 (cf. page 165).

[COCHRAN *et al.* 2001]

- 15 COCHRAN, Andrea G., Nicholas J. SKELTON et Melissa A. STAROVASNIK (mai 2001). « Tryptophan zippers : Stable, monomeric  $\beta$ -hairpins ». Anglais. Dans *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*. Tome 10. 98, pages 5578–5583 (cf. page 165).

[NEIDIGH *et al.* 2002]

- 20 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 165).

[VIJAY-KUMAR *et al.* 1987]

- 25 VIJAY-KUMAR, Senadhi, Charles E. BUGG et William J. COOK (1987). « Structure of ubiquitin refined at 1.8 Å resolution ». Anglais. Dans *Journal of Molecular Biology* 194.3, pages 531–544 (cf. page 165).

## Bibliographie

---



# Méthode expérimentale

## Sommaire

5	<b>B.1 Première expérimentation . . . . .</b>	<b>172</b>
	B.1.1 Hypothèses . . . . .	172
	B.1.2 Sujets . . . . .	172
	B.1.3 Variables . . . . .	173
10	B.1.4 Procédure . . . . .	175
	<b>B.2 Seconde expérimentation . . . . .</b>	<b>176</b>
	B.2.1 Hypothèses . . . . .	176
	B.2.2 Sujets . . . . .	176
	B.2.3 Variables . . . . .	177
15	B.2.4 Procédure . . . . .	178
	<b>B.3 Troisième expérimentation . . . . .</b>	<b>179</b>
	B.3.1 Hypothèses . . . . .	179
	B.3.2 Sujets . . . . .	180
	B.3.3 Variables . . . . .	180
20	B.3.4 Procédure . . . . .	181
	<b>B.4 Quatrième expérimentation . . . . .</b>	<b>182</b>
	B.4.1 Hypothèses . . . . .	182
	B.4.2 Sujets . . . . .	183
	B.4.3 Variables . . . . .	183
25	B.4.4 Procédure . . . . .	184
	<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>187</b>

## B.1 Première expérimentation

### B.1.1 Hypothèses

Nous émettons plusieurs hypothèses concernant cette première expérimentation. Les hypothèses concernent les performances des binômes ainsi que leurs stratégies de travail. Deuxièmement, une évaluation de la plate-forme est nécessaire. Des hypothèses sont formulées pour noter l'utilisabilité de la plate-forme ainsi que la sensation de collaboration des utilisateurs.

$\mathcal{H}_1$  **Amélioration des performances en binôme** Nous émettons l'hypothèse que les performances des binômes seront meilleures que les performances des monômes. Les performances seront évaluées en terme de temps de réalisation de la tâche mais aussi en terme de ressources utilisées comme le nombre de sélections.

$\mathcal{H}_2$  **Stratégies variables en fonction des binômes** Nous émettons l'hypothèse que les binômes adopteront des stratégies de collaboration différentes en fonction des affinités des sujets et de leurs espaces de travail respectifs. L'identification des différentes stratégies permettra de les évaluer et de trouver la plus performante.

$\mathcal{H}_3$  **Les sujets préfèrent le travail en binôme** Notre troisième hypothèse est de nature qualitative et suppose que les utilisateurs auront une préférence pour le travail en binôme comparé au travail en monôme. Le travail en binôme créé une collaboration sociale qui est préférée en général.

$\mathcal{H}_4$  **La plate-forme est appréciée des utilisateurs** Notre dernière hypothèse concerne la validation de notre plate-forme en terme d'utilisabilité (intuitivité, ergonomie, *etc.*). Elle est nécessaire pour la poursuite des études de cette thèse.

### B.1.2 Sujets

24 sujets (4 femmes et 20 hommes) avec une distribution d'âge de  $\mu = 27.8$ ,  $\sigma = 7.2$  ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au

sein du Laboratoire pour l'Informatique, la Mécanique et les Sciences de l'Ingénieur (CNRS-LIMSI) et sont chercheurs, assistants de recherche, étudiants en thèse ou stagiaires dans les domaines suivants :

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

Tous les sujets sont francophones. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant), de déficience audio ou de déficience moteur du  
10 haut du corps. Les sujets ne sont pas rémunérés pour l'expérimentation.

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expérimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur est donnée au commencement de l'expérimentation. Cependant, l'objectif de l'expérimentation n'est pas révélé.

### 15 B.1.3 Variables

#### Variables indépendantes

$\mathcal{V}_{i1}$  **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable intra-sujets.  $\mathcal{V}_{i1}$  possède deux valeurs possibles : « un sujet » (*c.f. monôme*) ou « deux sujets » (*c.f. binôme*). 24 monômes et 12 binômes ont été testés.

20  $\mathcal{V}_{i2}$  **Résidu recherché** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets.  $\mathcal{V}_{i2}$  concerne les résidus recherchés qui sont au nombre de 10 répartis à part égale dans deux molécules (voir table 3.1 page 54). Différents niveaux de complexité caractérisent chaque résidu (voir table 3.2 page 55).

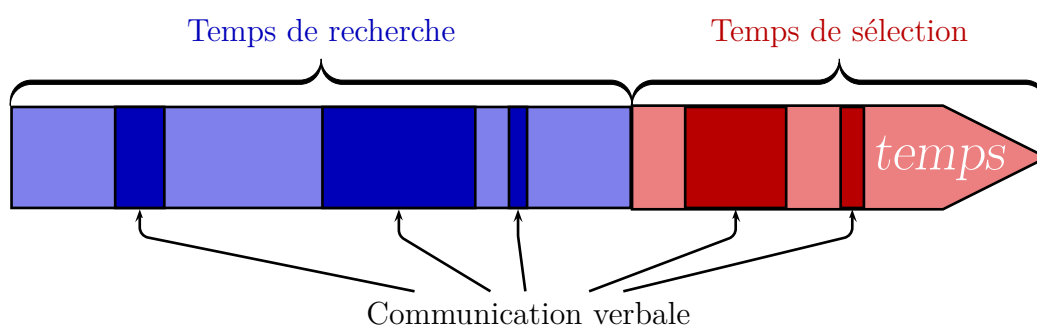
#### Variables dépendantes

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

30 **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 hors de la molécule.

- 5  $\mathcal{V}_{d2}$  **La distance entre les espaces de travail** Cette mesure est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux correspondant aux outils *tug*. Elle est mesurée dans le monde réel mais peut être convertie dans l'environnement virtuel (à l'échelle de la molécule). L'ordre de grandeur de cette mesure est le centimètre.
- 10  $\mathcal{V}_{d3}$  **Communications verbales** L'enregistrement des communications verbales permet de mesurer la durée de parole de chaque sujets pour chaque étape 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 B.1.



**Figure B.1** – Étapes de la communication verbale pour la recherche d'un résidu

- 15  $\mathcal{V}_{d4}$  **Affinité entre les sujets** Le degré d'affinité – concernant uniquement les binômes – est compris entre 1 et 5 selon les critères suivants :
1. Les sujets ne se connaissent pas ;
  2. Les sujets travaillent dans la même entreprise, le même laboratoire ;
  3. Les sujets travaillent dans la même équipe, sur les mêmes projets ;
  - 20 4. Les sujets travaillent ensemble, sont dans le même bureau ;
  5. Les sujets sont amis proches.

$\mathcal{V}_{d5}$  **Force moyenne appliquée par les sujets** Le force appliquée par chaque sujet sur les atomes pendant la simulation est mesurée. Une valeur moyenne de cette force est calculée pour être analysée.



$\mathcal{V}_{d6}$  **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Il est constitué de trois ou quatre parties respectivement destinés aux monômes et binômes. Le questionnaire fourni aux sujets est disponible dans la section C.1 page 190.

### B.1.4 Procédure

L'expérimentation débute par une phase d'apprentissage sur la molécule TRP-ZIPPER. L'apprentissage est destiné à familiariser les sujets avec la plate-forme, les outils de manipulation et la tâche à réaliser. Cette phase dure maximum 5 mn. L'expérimentateur est disponible pour répondre aux questions des sujets.

Lorsque l'étape d'apprentissage est terminée, nous présentons aux sujets la série de 10 résidus selon la procédure suivante. Le premier résidu est affiché sur l'écran LCD et les sujets débutent la phase de recherche. Lorsque le résidu est identifié, sélectionné puis extrait hors de la molécule, l'application est arrêtée. Ensuite, un second résidu est affiché, l'application est de nouveau démarrée et ainsi de suite pour les 10 résidus à identifier. L'enregistrement audio est démarré à la fin de l'étape d'apprentissage.

L'ensemble des résidus est proposé dans un ordre aléatoire afin d'éviter un biais lié à l'apprentissage de la plate-forme et de la tâche. Les sujets sont tenus de trouver et extraire dix résidus en monôme et dix résidus en binôme. Toujours pour éviter un biais lié à l'apprentissage, les sujets sont soumis aux tâches en monôme et en binôme de façon alternée selon les trois combinaisons suivantes :

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

Lorsque les sujets ont réalisé toutes les tâches dans les deux configurations possibles (monôme et binôme), un questionnaire leur est proposé. Chaque sujet répond au questionnaire de manière autonome, sans communiquer avec son partenaire.

## B.2 Seconde expérimentation

### B.2.1 Hypothèses

Les hypothèses de cette nouvelle étude sont en grande partie basée sur l'étude  
5 précédente. Nous souhaitons confirmer l'intérêt du travail collaboratif dans la  
tâche élémentaire de *manipulation*, notamment sur les tâches de complexité  
importante. De plus, cette expérimentation propose d'étudier l'apprentissage  
de la tâche et d'en observer l'évolution dans le cadre du travail collaboratif.

$\mathcal{H}_1$  **Amélioration des performances en binôme** Nous émettons l'hypothèse  
10 que les performances des binômes seront meilleures que les performances des  
monômes. Cette hypothèse a pour objectif de confirmer les conclusions obte-  
nues dans la première étude dans un contexte de *manipulation*. La première  
hypothèse est une amélioration des performances pour les binômes en colla-  
boratif comparés aux monômes en bimanuel.

15  $\mathcal{H}_2$  **Meilleur gain de performances sur les tâches complexes** Nous émet-  
tons l'hypothèse que plus la tâche est complexe et plus une configuration de  
travail collaboratif produira un gain significatif de performances comparé à  
un monôme.

20  $\mathcal{H}_3$  **L'apprentissage est plus performant pour les binômes** Nous émettons  
l'hypothèse que le travail en collaboration augmente la vitesse d'apprentis-  
sage de la tâche. En effet, nous supposons que l'interaction entre les parte-  
naires va stimuler l'apprentissage et permettre l'échange des connaissances.

25  $\mathcal{H}_4$  **Les sujets préfèrent le travail en collaboration** Nous souhaitons éva-  
luer auprès des utilisateurs l'intérêt vis-à-vis du travail collaboratif. Notre  
hypothèse est que les utilisateurs préfèrent le travail collaboratif. En effet,  
le contact social et la possibilité de communiquer sont des apports appréciés  
dans le milieu du travail.

### B.2.2 Sujets

30 36 sujets (8 femmes et 28 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 25.9$ ,  
 $\sigma = 4.7$  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 ;
- 5 – 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.

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

### B.2.3 Variables

#### Variables indépendantes

15  $\mathcal{V}_{i1}$  **Nombre de sujets** La première variable indépendante est une variable inter-sujets.  $\mathcal{V}_{i1}$  possède deux valeurs possibles : « un sujet (*c.f. monôme*) » ou « deux sujets (*c.f. binôme*) ». 12 monômes et 12 binômes sont testés.

$\mathcal{V}_{i2}$  **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées sur chacune  
20 des deux molécules : 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-sujets. Tous les sujets sont confrontés trois fois à la même série de tâches (quatre scénarios) sur trois jours successifs afin d'observer l'effet  
25 de l'apprentissage en monôme et en binôme.

#### Variables dépendantes

$\mathcal{V}_{d1}$  **Temps de réalisation** C'est le temps total pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre la conformation finale. Le temps est limité à 10 mn. Au-delà de cette limite, l'application est arrêtée

$\mathcal{V}_{d2}$  **Nombre de sélections** C'est le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome ou un résidu est sélectionné par chacun des deux effecteur terminal.

5  $\mathcal{V}_{d3}$  **Distance passive entre les espaces de travail** C'est la distance moyenne entre les deux effecteurs terminaux pendant toute la durée de chaque tâche. Mesurée dans l'espace physique de l'utilisateur, elle est de l'ordre du centimètre.

10  $\mathcal{V}_{d4}$  **Distance active entre les espaces de travail** Basée sur le même principe que la précédente, elle mesure la distance entre les deux effecteurs terminaux. Cependant, la moyenne est calculée seulement sur les distances lorsque les deux effecteurs terminaux sont en phase de sélection, lorsqu'ils sont actifs. Les distances ne sont pas prises en compte lorsque les deux effecteurs terminaux sont inactifs ou que seulement un des deux est en phase de sélection.  
15 Cette moyenne est également de l'ordre du centimètre.

$\mathcal{V}_{d5}$  **Vitesse moyenne** Elle mesure la vitesse moyenne de chaque effecteur terminal. Elle est calculée par intégration numérique des positions successives en fonction du temps.

20  $\mathcal{V}_{d6}$  **Réponses qualitatives** Un questionnaire est proposé à tous les sujets (variable en fonction des monômes et des binômes). Il se décline en deux versions destinées soit aux monômes, soit aux binômes. Le questionnaire soumis aux sujets est exposé dans la section C.2 page 196.

## B.2.4 Procédure

25 L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule Prion. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontées aux scénarios 1A et 1B. Les scénarios sont alternés entre les groupes de sujets  
30 afin d'éviter les biais d'apprentissage. L'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil RMSD désiré est atteint.

Dès que les scénarios 1A et 1B ont été achevés, les sujets sont confrontés aux scénarios 2A et 2B également de façon alternée. De la même façon, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil `RMSD` désiré est atteint ou lorsque 10 mn de déformation sont dépassées.

Tous les sujets sont confrontés trois fois à l'ensemble des quatre scénarios avec un jour d'intervalle entre chaque confrontation. L'objectif de cette multiple confrontation est l'étude de l'apprentissage en configuration collaborative.

## B.3 Troisième expérimentation

### B.3.1 Hypothèses

Lors de cette nouvelle étude, nous souhaitons observer les dynamiques de groupe. Nos hypothèses concerneront principalement l'évolution des groupes durant la réalisation de la tâche.

**$\mathcal{H}_1$  Amélioration des performances en quadrinôme** Nous émettons l'hypothèse que les performances des quadrinômes seront meilleures que les performances des binômes. Cette hypothèse vient contredire les conclusions obtenue par ZAJONC [1965] concernant les tâches complexes. Cependant, notre contexte est différent puisqu'il concerne la collaboration étroite et nous pensons que dans ce contexte, il est nécessaire d'augmenter le nombre de sujets pour améliorer les performances, même sur une tâche complexe.

**$\mathcal{H}_2$  Émergence de meneur dans le quadrinôme** D'après BALES [1950], les groupes restreints voient émerger un voire deux meneurs, quelque soit la taille du groupe. Nous émettons l'hypothèse que l'émergence d'un meneur aura également lieu dans notre contexte de collaboration étroitement couplée.

**$\mathcal{H}_3$  Le *brainstorming* structure le quadrinôme** Dans cette nouvelle expérimentation, nous allons étudier la mise en place d'une période de réflexion, également appelée *brainstorming*, avant le début de la tâche. Nous émettons l'hypothèse que cette période de réflexion sera principalement utile pour les quadrinômes.

### B.3.2 Sujets

16 sujets (4 femmes et 12 hommes) avec une moyenne d'âge de  $\mu = 26.1$ ,  $\sigma = 5.3$  ont participé à cette expérimentation. Ils ont tous été recrutés au sein du laboratoire CNRS-LIMSI et sont étudiants, chercheurs ou assistants de recherche dans les domaines suivants :

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

Ils ont tous le français comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou corrigée le cas échéant) ni de déficience audio. Tous les participants de cette expérimentation ont été choisis car ils ont déjà une expérience sur la plate-forme : les participants connaissent déjà les outils de déformation et l'environnement virtuel. Ceci doit permettre d'observer les évolutions de la dynamique de groupe tout en limitant les effets de l'apprentissage.

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

### B.3.3 Variables

#### Variables indépendantes

$\mathcal{V}_{i1}$  **Nombre de sujets** Cette variable indépendante est une variable intra-sujets.  $\mathcal{V}_{i1}$  possède deux valeurs possibles : « deux sujet (*c.f. binôme*) » ou « quatre sujets (*c.f. quadrinôme*) ». 8 binômes et 4 quadrinômes sont testés.

$\mathcal{V}_{i2}$  **Complexité de la tâche** La seconde variable indépendante est une variable intra-sujets. Deux tâches de déformation sont proposées et décrites dans la section 5.3.1 page 117.

$\mathcal{V}_{i3}$  **Temps alloué pour le *brainstorming*** La troisième variable indépendante est une variable inter-sujets.  $\mathcal{V}_{i3}$  possède deux valeurs possibles : « pas de *brainstorming* » ou « 1 mn de *brainstorming* ». Cette période de *brainstorming* est allouée avant le début de chaque tâche et permet une réflexion préalable sur la tâche.

### Variables dépendantes

$\mathcal{V}_{d1}$  **Temps de réalisation** C'est le temps total que les sujets ont mis pour réaliser la tâche demandée, c'est-à-dire manipuler et déformer la molécule afin d'atteindre l'objectif fixé. Le temps est limité à 10 mn.

$\mathcal{V}_{d2}$  **Fréquence des sélections**  $\mathcal{V}_{d2}$  représente la fréquence des sélections réalisées durant chaque tâche à réaliser. Une sélection est comptabilisée lorsqu'un atome est sélectionné par un des effecteur terminal. Un compteur est affecté pour chacun des effecteurs terminaux qui lui-même est associé à un sujet. C'est l'information de fréquence qui est conservée puisqu'elle ne dépend pas du temps total de réalisation de la tâche.

$\mathcal{V}_{d3}$  **Vitesse moyenne** Cette variable est une mesure de la vitesse moyenne de chaque effecteur terminal. Elle est calculée par intégration numérique des positions successives en fonction du temps.

$\mathcal{V}_{d4}$  **Force moyenne appliquée par les sujets** La force appliquée sur les atomes durant la simulation par les sujets est mesurée. C'est la force appliquée lorsqu'un atome est sélectionné. La mesure conservée est la valeur moyenne sur l'ensemble de la tâche réalisée.

$\mathcal{V}_{d5}$  **Communications verbales** L'enregistrement des communications verbales permet de mesurer le nombre d'interventions verbales de chacun des sujets. Deux catégories d'interventions sont distinguées :

**Les observations** pour indiquer aux autres sujets une intention d'action ou pour informer sur l'état actuel de l'environnement ;

**Les ordres** sont donnés aux autres sujets afin qu'ils réalisent une action déterminée.

### B.3.4 Procédure

L'expérimentation débute par une étape d'entraînement avec la molécule TRP-CAGE. Pendant cette phase, les outils sont introduits et expliqués un par un. Les sujets ayant déjà réalisé une expérience sur la plate-forme, cette phase est effectuée pour se remémorer l'environnement et les outils. Cette phase dure entre 5 mn et 10 mn. Chaque sujet a la possibilité de tester les outils et peut questionner l'expérimentateur.

Lorsque la phase d'entraînement est terminée, les sujets sont confrontés au scénario 1. Puis dans un second temps, le scénario 2 leur est proposé. Pour chaque scénario, l'application s'arrête automatiquement lorsque le seuil **RMSD** (voir section 4.3.1 page 82) désiré est atteint. L'ordre de ces deux scénarios n'est pas contre-balancé sur les différents groupes de sujets.

Tous les sujets sont confrontés aux deux scénarios deux fois. Une première fois en binôme et une seconde fois en quadrinôme. L'ordre de passage en binôme et en quadrinôme est alterné selon les groupes afin d'éviter les biais d'apprentissage.

L'enregistrement vidéo est démarré au début de la phase d'apprentissage pour chaque groupe. Il est arrêté à la fin du second scénario. La phase d'apprentissage est filmée pour des questions de simplicité logistique mais n'est pas utilisée dans les analyses.

## B.4 Quatrième expérimentation

### B.4.1 Hypothèses

$\mathcal{H}_1$  **Performances améliorées par l'assistance haptique** Nous émettons l'hypothèse que les performances de groupe seront meilleures lorsque l'assistance haptique sera mise à disposition des utilisateurs. Les performances principalement basées sur la qualité de la solution. En effet, dans un cadre de déformation moléculaire avec des experts, le résultat final prend une place plus importante que le temps mis pour l'atteindre.

$\mathcal{H}_2$  **L'assistance haptique améliore la communication** Dans cette dernière expérimentation, nous introduisons de nouveaux outils pour aider la communication entre les utilisateurs en utilisant la modalité haptique. Nous émettons l'hypothèse que la communication sera améliorée grâce à ces outils.

$\mathcal{H}_3$  **La plate-forme est appréciée des experts** Lors de cette expérimentation, nous effectuons une analyse de l'utilisabilité du système. Nous émettons l'hypothèse que cette plate-forme répondra à des critères minimum d'utilisabilité. Le test d'utilisabilité est basé sur l'échelle de notation proposée par BROOKE [1996].



## B.4.2 Sujets

<000 sujets (000 femmes et 000 hommes)> avec une moyenne d'âge de  $\langle \mu = 00.0 (\sigma = 0.00) \rangle$  ont participé à cette expérimentation. Ils ont été recrutés  
 5 au sein <laboratoire> et sont <statuts, métier>. Ils ont tous le français  
 comme langue principale. Aucun participant n'a de déficience visuelle (ou  
 corrigée le cas échéant) ni de déficience audio.

Nombre de sujets  
 Remplir toutes les in-  
 formations statistiques  
 concernant les sujets

Chaque participant est complètement naïf concernant les détails de l'expé-  
 rimentation. Une explication détaillée de la procédure expérimentale leur  
 10 est donnée au commencement de l'expérimentation mais l'objectif de l'étude  
 n'est pas révélé.

## B.4.3 Variables

### Variables indépendantes

$\mathcal{V}_{i1}$  **Présence de l'assistance** La première variable indépendante est une va-  
 15 riable intra-sujets.  $\mathcal{V}_{i1}$  possède deux valeurs possibles : « sans assistance » ou  
 « avec assistance ». L'assistance haptique est ajoutée aux différents outils de  
 manipulation, de désignation et de déformation afin d'améliorer l'interaction  
 et la communication entre les sujets pendant la tâche.

$\mathcal{V}_{i2}$  **Molécules à déformer** La seconde variable indépendante est une va-  
 20 riable intra-sujets.  $\mathcal{V}_{i2}$  concerne les cinq molécules ou complexes de molécules  
 à assembler :, « TRP-CAGE », « Prion », « Ubiquitin », « TRP-ZIPPER » et  
 « NUSE:NUSG ». Parmi ces molécules, seules Ubiquitin et NUSE:NUSG sont  
 utilisées pour les tâches expérimentales. Les autres molécules sont simplement  
 utilisés au cours de l'entraînement sur la plate-forme.

### Variables dépendantes

$\mathcal{V}_{d1}$  **Score de ressemblance minimum** Un score RMSD est calculé en temps-  
 réel de la même façon que dans la seconde et la troisième expérimentation.  
 Le score minimum atteint est enregistré : il représente la meilleure solution  
 trouvé au cours de la manipulation.

30  $\mathcal{V}_{d2}$  **Temps du score RMSD minimum** Les sujets ont 8 mn pour réaliser le  
 meilleur score RMSD possible. Cependant, c'est le temps mis pour atteindre  
 ce score minimum qui est enregistré.

$\mathcal{V}_{d3}$  **Nombre de sélections**  $\mathcal{V}_{d2}$  représente le nombre de sélections réalisées durant chaque tâche à réaliser. Une sélection est comptabilisée lorsque un atome est sélectionné par un des deux effecteur terminal. Un compteur est affecté pour chacun des effecteurs terminaux.

$\mathcal{V}_{d4}$  **Communications verbales et gestuelles** L'enregistrement audio permet de mesurer la quantité de temps de parole pendant chaque tâche de l'expérimentation. De plus, la vidéo permet de mettre en relation les différentes phases de l'expérimentation (déformation, désignation, modification du point de vue de la scène, *etc.*) avec la quantité de temps de parole.

$\mathcal{V}_{d5}$  **Test d'utilisabilité de la plate-forme** Un questionnaire est proposé à tous les sujets. Ce questionnaire est une traduction en français du questionnaire SUS (*System Usability Scale*) proposé par BROOKE [1996]. La traduction soumise aux sujets est disponible dans la section C.3 page 197. Il nous permet d'obtenir un score d'utilisabilité de la plate-forme compris entre 0 et 100.

## B.4.4 Procédure

La procédure expérimentale se déroule en neuf phases bien distinctes.

**Phase 1 : répartition des rôles** Pour commencer, avant de pénétrer dans la salle d'expérimentation, il va être demandé aux sujets de choisir leurs rôles. Nous nous plaçons dans le cadre d'une structure informelle dans laquelle un des sujets sera le coordinateur et les deux autres seront les opérateurs. Chaque rôle est important et il est nécessaire de l'expliquer aux sujets pour qu'aucun des rôles ne soit choisi par dépit. Durant cette première phase, l'expérimentateur explique de façon claire et concise les deux rôles possibles. Puis les sujets sont amenés à se répartir les rôles entre eux. Une fois cette phase terminée, les sujets sont invités à pénétrer dans la salle d'expérimentation et à s'installer : le coordinateur se trouve au milieu et les opérateurs se trouvent de part et d'autre du coordinateur.

**Phase 2 : présentation des outils** Avant de commencer cette phase, l'enregistrement vidéo est activé. La seconde phase est une phase d'entraînement sur la molécule TRP-CAGE. Elle a pour objectif premier de présenter les outils de désignation et de déformation. De plus, les sujets sont amenés à se familiariser avec l'interface, la tâche à effectuer, les différentes informations

disponibles ainsi que le moyen d'évaluation. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire pour un apprentissage correct des outils de désignation et de déformation. L'enregistrement vidéo est mis en marche au début de cette phase.

**Phase 3 : introduction de l'haptique** Cette troisième phase est également une phase d'entraînement sur la molécule Prion. L'entraînement porte sur l'introduction des assistances haptiques (présentées dans la section 6.3.1 page 141) sur les outils de désignation et de déformation. De plus, cette seconde molécule d'entraînement permet de familiariser les sujets avec une molécule de taille importante. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire pour une bonne compréhension des assistances haptiques proposées.

**Phase 4 : outil de manipulation** Cette nouvelle phase d'entraînement sur la molécule TRP-ZIPPER est destinée à introduire l'outil de manipulation. La tâche peut être recommencée autant de fois que nécessaire afin que le coordinateur assimile correctement ce nouvel outil.

**Phase 5 : première étape d'évaluation** Cette première étape d'évaluation concerne les deux scénarios à réaliser (scénario 1 et scénario 2) sur la molécule Ubiquitin et le complexe de molécules NUSE:NUSG. L'évaluation s'effectue en deux étapes, avec et sans assistance haptique. En fonction des groupes et afin de contrebalancer la variable  $\mathcal{V}_{i1}$ , la première étape d'évaluation s'effectue avec ou sans haptique.

On présente le scénario 1 puis le scénario 2 toujours dans cet ordre. Pour le scénario 1, seuls les outils de désignation et de déformation sont présents. Tous les outils disponibles sont proposés pour le scénario 2.

Au début de chaque scénario, une période de 1 mn de *brainstorming* est laissée aux sujets pendant laquelle ils peuvent visualiser et explorer la molécule non soumise à la simulation. Ensuite, la phase de déformation est proposée. L'objectif est d'atteindre le score  $\text{RMSD}$  le plus petit possible dans un temps limité à 8 mn. Les sujets peuvent décider de s'arrêter avant les 8 mn s'ils estiment ne pas pouvoir obtenir un meilleur score.

**Phase 6 : première partie du questionnaire** Lorsque la première étape d'évaluation est terminée, une première partie du questionnaire est proposée aux sujets (voir section C.3 page 197). La section à remplir dépend du premier

passage : avec ou sans assistance haptique. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

**Phase 7 : Deuxième étape d'évaluation** La deuxième étape d'évaluation est identique à la première excepté pour la variable  $\mathcal{V}_{11}$ . Si les sujets ont été confrontés à une assistance haptique dans la première étape, alors la seconde étape s'effectuera sans assistance haptique et réciproquement.

Durant cette deuxième étape, il n'y a pas de phase exploratoire étant donné que les sujets connaissent déjà la molécule. Seules les deux phases de déformations de 8 mn, Ubiquitin puis NUSE:NUSG, sont proposées.

**Phase 8 : deuxième partie du questionnaire** La seconde partie du questionnaire est complémentaire à la première (voir section C.3 page 197). Les mêmes questions sont abordées mais pour cette deuxième étape de l'évaluation donc avec une condition différente concernant l'assistance haptique. Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux.

**Phase 9 : questionnaire d'utilisabilité** Pour terminer l'expérimentation, les sujets sont invités à remplir un questionnaire d'utilisabilité (voir section C.3 page 197). Durant cette phase, il est demandé aux sujets de ne pas communiquer entre eux. Des informations concernant les caractéristiques du sujet sont également demandées à la fin du questionnaire. L'enregistrement vidéo est arrêté à la fin de cette phase.

## Bibliographie

[BALES 1950]

5     BALES, Robert F. (1950). *Interaction process analysis : a method for the study of small groups*. Anglais. Addison-Wesley (cf. page 179).

[BROOKE 1996]

10     BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall MCCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. pages 182, 184).

[ZAJONC 1965]

     ZAJONC, Robert B. (juil. 1965). « Social facilitation ». Anglais. Dans *Science* 149, pages 269–274 (cf. page 179).

## Bibliographie

---



# Questionnaires

## Sommaire

5	<b>C.1 Première expérimentation . . . . .</b>	<b>190</b>
	<b>C.2 Seconde expérimentation . . . . .</b>	<b>196</b>
	C.2.1 Questionnaire pour les monômes . . . . .	196
	C.2.2 Questionnaire pour les binômes . . . . .	196
10	<b>C.3 Quatrième expérimentation . . . . .</b>	<b>197</b>
	C.3.1 Le questionnaire SUS . . . . .	203
	<b>Bibliographie . . . . .</b>	<b>205</b>

## C.1 Première expérimentation

Le questionnaire proposé durant cette expérimentation est constitué de deux parties. La deuxième partie est exclusivement réservée aux binômes et n'était  
5 pas proposée au monômes. Ce questionnaire contient 5 pages (3 pages pour les monômes). Les questions sont évaluées selon une échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.





Ne pas remplir →

Merci d'avoir participé à cette expérimentation. Je vous invite maintenant à répondre à un questionnaire afin de connaître vos impressions.

Les questions se présentent sous la forme d'une note à 5 niveaux. Distinguez bien les questions qui vous concernent et les questions qui concernent votre collaborateur. Ne répondez pas aux questions en essayant de savoir ce que votre collaborateur aurait pu répondre ou ce qu'il aurait voulu que vous répondiez. Ne répondez que ce que vous pensez.

Si vous avez des interrogations par rapport au questionnaire, n'hésitez surtout pas et posez la question.

Et bien sûr, tous les commentaires sont les bienvenus.

## 1 Vous et votre manipulation

Date du jour –      jj / mm / aaaa    hh : mm

Nom –

Prénom –

Sexe –                      F                      M

Âge –

Main dominante –                      Gauche                      Droite

Langue maternelle –

### 1.1 Prise en main

Cette partie concerne la prise en main de l'ensemble de la plate-forme, que ce soit le logiciel, les interfaces, la tâche à réaliser. Cochez le niveau qui décrit le mieux ces 3 points.

Le visuel concerne tous ce qui est affiché à l'écran, les molécules, les curseurs, les atomes, les flèches indiquant l'effort appliqué...

		Visuel						
		1	2	3	4	5		
Incompréhensible								Intuitif
Inconfortable								Confortable
Fatigant								Relaxant

## Annexe C. Questionnaires

---

L'interaction concerne la maniabilité des interfaces haptiques<sup>1</sup>, le confort des vibrations, le côté intuitif de la manipulation...

		Interaction						
		1	2	3	4	5		
Incompréhensible							Intuitif	
Inconfortable							Confortable	
Fatigant							Relaxant	

La tâche concerne la nature de la tâche qui vous a été demandée. Vous semblait-elle complexe a priori ? Était-elle difficile à réaliser ?

		Tâche						
		1	2	3	4	5		
Complexe							Simple	
Difficile							Facile	

---

### Commentaires

## 1.2 Évaluation

Avez-vous été efficace pour exécuter les tâches demandées, pensez-vous avoir été rapide ?

		1	2	3	4	5		
Inefficace							Efficace	

Est-ce que les éléments extérieurs (murs, personnes...) vous ont perturbés ou vous êtes vous senti immergé dans cet environnement virtuel ?

		1	2	3	4	5		
Pas immergé							Immergé	

---

<sup>1</sup>Les interfaces haptiques sont les bras articulés qui vous servent à manipuler votre curseur à l'écran.

## C.1. Première expérimentation

---

Vous êtes-vous senti seul pour exécuter la tâche ou avez-vous senti la présence de votre collaborateur ?

	1	2	3	4	5	
Seul	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Groupe

---

Avez-vous perturbé votre collaborateur ou pensez-vous plutôt l'avoir aidé durant l'exécution de la tâche ?

	1	2	3	4	5	
Perturbation	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Aide

---

Avez-vous donné des informations pour votre collaborateur afin de l'aider à accomplir la tâche avec vous ?

	1	2	3	4	5	
Pas d'aide	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Informations

---

Vous êtes-vous senti dominé pendant la durée de la manipulation ou avez-vous plutôt eu l'impression d'être le meneur ?

	1	2	3	4	5	
Dominé	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Meneur

---

Quels ont été vos moyens pour communiquer avec votre collaborateur ?

**Oral** effectué avec la voix, des phrases, des mots, des interjections ;

**Gestuel** effectué avec vos mains, vos bras, votre corps dans son ensemble ;

**Virtuel** effectué avec votre curseur ou en manipulant les objets virtuels.

	Pas du tout	1	2	3	4	5	Beaucoup
Oral		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Gestuel		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Virtuel		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

---

**Commentaires**

## 2 Votre collaborateur et sa manipulation

Cette partie du questionnaire va vous demander votre impression en ce qui concerne le travail, la manipulation de votre collaborateur.

Nom –

Prénom –

### 2.1 Affinité

Cochez la case qui correspond à ce qui vous lie, vous et votre collaborateur.

Même bureau	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Même équipe	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Même groupe	Oui <input type="checkbox"/>	Non <input type="checkbox"/>
Autre (précisez)		

### 2.2 Évaluation

Cette partie concerne ce que vous avez pensé de l'efficacité de votre collaborateur. Cochez le niveau qui qualifie le mieux l'action de votre collaborateur.

A-t-il été efficace pour exécuter les tâches, pensez-vous qu'il a été rapide ?

	1	2	3	4	5	
Inefficace	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Efficace

Votre collaborateur vous a-t-il perturbé ou vous a-t-il plutôt aidé ?

	1	2	3	4	5	
Perturbation	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Aide

Votre collaborateur vous a-t-il donné des informations afin d'accomplir la tâche avec vous ?

	1	2	3	4	5	
Pas d'aide	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Informations

A-t-il été dominé pendant la durée de la manipulation ou a-t-il plutôt été le meneur ?

	1	2	3	4	5	
Dominé	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Meneur

Pensez-vous qu'il n'a pas senti votre présence pendant l'expérimentation ou qu'il a vraiment eu l'impression d'un travail de groupe ?

	1	2	3	4	5	
Seul	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Groupe

---

Quels ont été les moyens que votre collaborateur a utilisés pour communiquer avec vous ?

**Oral** effectué avec sa voix, des phrases, des mots, des interjections ;

**Gestuel** effectué avec ses mains, ses bras, son corps dans son ensemble ;

**Virtuel** effectué avec son curseur ou en manipulant les objets virtuels.

	1	2	3	4	5	
Pas du tout						Beaucoup
Oral	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Gestuel	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Virtuel	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

---

**Commentaires**

**Commentaires généraux**

## C.2 Seconde expérimentation

Le questionnaire proposé durant la seconde expérimentation est décliné en deux versions : une version pour les monômes et une version pour les binômes.

- 5 Le questionnaire est soumis aux sujets oralement par l'expérimentateur et les réponses sont directement reportées dans une tableau. Il est constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

### C.2.1 Questionnaire pour les monômes

Pour les monômes, le questionnaire est le suivant :

- 10 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 ?

### 15 C.2.2 Questionnaire pour les binômes

Chaque sujet dans un binôme est interrogé séparément pour éviter que les réponses de l'un influence les réponses de l'autre. Pour les binômes, le questionnaire est le suivant :

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

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

## C.3 Quatrième expérimentation

- 10 Le questionnaire proposé durant la quatrième et dernière expérimentation contient une traduction en français du questionnaire SUS proposé par BROOKE [1996]. Une explication détaillé de ce questionnaire se trouve dans la section C.3.1 page 203. Le questionnaire est soumis sous un format papier et chaque utilisateur est invité à y répondre seul, sans l'aide de ces partenaires. Il est  
15 constitué de plusieurs questions notées sur échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux.

## Questionnaire

No

Ne pas remplir ↑

Merci d'avoir participé à cette expérimentation. Nous vous invitons maintenant à répondre à ce questionnaire afin de connaître vos impressions.

Ce questionnaire contient des affirmations. Lisez chacune d'elles attentivement. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion sur la feuille de réponse.

<b>Fortement en Désaccord (FD)</b> si l'affirmation est tout à fait fausse ou si vous êtes fortement en désaccord.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Désaccord (D)</b> si l'affirmation est plutôt fausse ou si vous n'êtes pas d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Neutre (N)</b> si l'affirmation est à peu près également vraie et fausse ou si vous n'arrivez pas à choisir ou si vous n'avez pas d'opinion par rapport à cette affirmation.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Accord (A)</b> si l'affirmation est plutôt vraie ou si vous êtes d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>Fortement en Accord (FA)</b> si l'affirmation est tout à fait vraie ou si vous êtes fortement d'accord.	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Répondez bien comme vous le pensez sans vous soucier des autres. Il n'y a pas de bonne ou de mauvaise réponse et vous n'avez pas besoin de compétence particulière pour remplir ce questionnaire. Le but de ce questionnaire sera atteint si vous exprimez vos opinions aussi exactement que possible.



### 1 Le système

Dans cette section, vous allez évaluer le système, la plate-forme et les outils que vous avez utilisés. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Je pense que j'aimerais utiliser ce système fréquemment.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'ai trouvé le système inutilement complexe.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'ai pensé que le système était facile à utiliser.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
Je pense que j'aurais besoin de support technique pour être capable d'utiliser ce système.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'ai trouvé que les différentes fonctionnalités ont été bien intégrées au système.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'ai pensé qu'il y avait trop d'incohérence dans ce système.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'imagine que la plupart des biologistes serait capable d'apprendre à utiliser ce système très rapidement.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'ai trouvé le système très lourd à utiliser.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
Je me suis senti(e) très confiant(e) en utilisant le système.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA
J'avais besoin d'apprendre beaucoup de choses avant de pouvoir utiliser ce système.	<input type="checkbox"/> FD	<input type="checkbox"/> D	<input type="checkbox"/> N	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> FA

## 2 Sans haptique

Dans cette section, vous allez évaluer vos impressions pour les cas où aucun complément haptique n'était présent. Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Mes partenaires comprennent rapidement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
Les informations visuelles sont utiles pour connaître les actions de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Lorsque je dois communiquer avec mes partenaires, j'utilise seulement les outils visuels .	FD	D	N	A	FA
Je comprends rapidement les actions que mes partenaires souhaitent que je réalise.	FD	D	N	A	FA
Mes partenaires sont attentifs à mes actions sans effort particulier de ma part.	FD	D	N	A	FA
Je dois me signaler explicitement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
J'interroge souvent mes partenaires pour connaître leurs actions.	FD	D	N	A	FA
J'utilise principalement ma voix pour communiquer avec mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je mets du temps à comprendre les consignes de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je dois explicitement indiquer mes actions pour que mes partenaires en soient avertis.	FD	D	N	A	FA

### 3 Avec haptique

Dans cette section, vous allez évaluer vos impressions pour les cas où les compléments haptiques étaient présents . Pour chaque affirmation, cochez la case qui correspond le mieux à votre opinion.

Mes partenaires comprennent rapidement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
Les informations visuelles et haptiques sont utiles pour connaître les actions de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Lorsque je dois communiquer avec mes partenaires, j'utilise seulement les outils visuels et haptiques.	FD	D	N	A	FA
Je comprends rapidement les actions que mes partenaires souhaitent que je réalise.	FD	D	N	A	FA
Mes partenaires sont attentifs à mes actions sans effort particulier de ma part.	FD	D	N	A	FA
Je dois me signaler explicitement lorsque j'accepte une consigne.	FD	D	N	A	FA
J'interroge souvent mes partenaires pour connaître leurs actions.	FD	D	N	A	FA
J'utilise principalement ma voix pour communiquer avec mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je mets du temps à comprendre les consignes de mes partenaires.	FD	D	N	A	FA
Je dois explicitement indiquer mes actions pour que mes partenaires en soient avertis.	FD	D	N	A	FA

### 4 Vous

Pour terminer, nous aurions besoin de disposer de quelques informations vous concernant. Nous vous rappelons que les données seront traitées de manière confidentielle.

Date du jour jj / mm / aaaa hh : mm

Nom

Prénom

Sexe F M

Âge

Main dominante Gauche Droite

Langue maternelle

Rôle Coordinateur Opérateur

Avez-vous déjà utilisé une interface haptique de type « bras articulé » ?

Aucune	Une à trois fois	Plus de trois fois
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Si vous avez des commentaires, n'hésitez pas à en faire part :

---

---

---

---

### C.3.1 Le questionnaire SUS

#### Les questions

Le questionnaire SUS est constitué de 10 questions. Chaque question donne  
5 lieu à une réponse sur une échelle de LIKERT [1932] à cinq niveaux allant de  
« Fortement en désaccord (score de 1) » à « Fortement en accord (score de  
5) ». Les questions sont les suivantes :

- Q1. Je pense que j'utiliserai ce système fréquemment
- Q2. J'ai trouvé ce système inutilement complexe
- 10 Q3. J'ai pensé que ce système était facile à utiliser
- Q4. Je pense qu'il me faudrait l'aide d'un technicien pour être capable d'utiliser ce système
- Q5. J'ai trouvé que les différentes fonctions de la plate-forme étaient bien intégrées
- 15 Q6. J'ai trouvé qu'il y avait trop d'incohérences dans cette plate-forme
- Q7. Je pense que la plupart des gens apprendraient rapidement à utiliser cette plate-forme
- Q8. J'ai trouvé le système très lourd à utiliser
- Q9. Je me sentais très confiant en utilisant cette plate-forme
- 20 Q10. J'aurai besoin d'apprendre beaucoup de choses avant de pouvoir utiliser cette plate-forme

#### Évaluation du score SUS

Pour évaluer le score SUS à partir du questionnaire, il faut des score entre 0  
et 4 pour chacune des questions. Concernant les questions 1, 3, 5, 7 et 9, on  
25 prend le score compris en 1 et 5 auquel on enlève 1. Concernant les questions  
2, 4, 6, 8 et 10, on soustrait de 5 le score compris en 1 et 5. Pour terminer,  
on multiplie par 2.5 la somme de l'ensemble des scores. Le score final obtenu  
est une note comprise entre 0 et 100.

#### Exemple de score SUS

- 30 Imaginons un questionnaire rempli de la façon suivante :
- Q1. réponse 5  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$
  - Q2. réponse 4  $\Rightarrow$  score  $5 - 4 = 1$

## Annexe C. Questionnaires

---

Q3. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

Q4. réponse 1  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$

Q5. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

5 Q6. réponse 3  $\Rightarrow$  score  $5 - 3 = 2$

Q7. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $2 - 1 = 1$

Q8. réponse 4  $\Rightarrow$  score  $5 - 4 = 1$

Q9. réponse 5  $\Rightarrow$  score  $5 - 1 = 4$

Q10. réponse 2  $\Rightarrow$  score  $5 - 2 = 3$

10 Le score total peut maintenant être calculé.

$$(4 + 1 + 1 + 4 + 1 + 2 + 1 + 1 + 4 + 3) \times 2.5 = 22 \times 2.5 = 55$$

## Bibliographie

[BROOKE 1996]

- 5       BROOKE, John (1996). « SUS - A quick and dirty usability scale ». Anglais. Dans *Usability evaluation in industry*. Sous la direction de Patrick W. JORDAN, Bruce THOMAS, Bernard A. WEERDMEESTER et Ian Lyall McCLELLAND. London : Taylor et Francis (cf. page 197).

[LIKERT 1932]

- 10       LIKERT, Rensis (1932). « A technique for the measurement of attitudes ». Anglais. Dans *Archives of Psychology* 22.140 (cf. pages 190, 196, 197,  
4700       203).