

Couplages haptiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique

Aude Bolopion

► To cite this version:

Aude Bolopion. Couplages haptiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique . Automatique / Robotique. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2010. Français. NNT : . tel-00546946

HAL Id: tel-00546946 https://theses.hal.science/tel-00546946

Submitted on 15 Dec 2010 $\,$

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse

présentée à

L'Université Pierre et Marie Curie

 par

Aude BOLOPION

pour obtenir le diplôme de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie

Spécialité : Robotique

Couplages haptiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique

Soutenue le 1^{er} juillet 2010

JURY

М.	N. CHAILLET	Professeur à l'Université de Franche-Comté	$\operatorname{Rapporteur}$
М.	P. POIGNET	Professeur à l'Université de Montpellier 2	Rapporteur
М.	V. HAYWARD	Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie	$\operatorname{Examinateur}$
М.	A. MICAELLI	Directeur de recherche au Commissariat à l'Energie Atomique	$\operatorname{Examinateur}$
М.	S. REDON	Chargé de recherche à l'Institut National de Recherche	
		en Informatique et Automatique	$\operatorname{Examinateur}$
М.	S. REGNIER	Directeur de thèse	
		Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie	$\operatorname{Examinateur}$

INVITE

М.	S. HALIYO	Maître de conférences à l'Université Pierre et Marie Curie	$\mathbf{Examinateur}$
----	-----------	--	------------------------

Thèse

présentée à

L'Université Pierre et Marie Curie

 par

Aude BOLOPION

pour obtenir le diplôme de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie

Spécialité : Robotique

Couplages haptiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique

Soutenue le 1^{er} juillet 2010

JURY

М.	N. CHAILLET	Professeur à l'Université de Franche-Comté	$\operatorname{Rapporteur}$
М.	P. POIGNET	Professeur à l'Université de Montpellier 2	Rapporteur
М.	V. HAYWARD	Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie	$\operatorname{Examinateur}$
М.	A. MICAELLI	Directeur de recherche au Commissariat à l'Energie Atomique	$\operatorname{Examinateur}$
М.	S. REDON	Chargé de recherche à l'Institut National de Recherche	
		en Informatique et Automatique	$\operatorname{Examinateur}$
М.	S. REGNIER	Directeur de thèse	
		Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie	$\operatorname{Examinateur}$

INVITE

М.	S. HALIYO	Maître de conférences à l'Université Pierre et Marie Curie	$\mathbf{Examinateur}$
----	-----------	--	------------------------

Couplages haptiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique

Résumé

Dans le domaine des nanosciences, la manipulation directe des objets par l'opérateur est impossible, à cause notamment de leur taille, des champs de forces complexes et non intuitifs, ainsi que de la très grande sensibilité des systèmes aux conditions environnementales. La téléopération avec retour d'effort apparaît donc comme une solution prometteuse pour les nanosciences alliant intuitivité de manipulation et flexibilité. Pour obtenir des dispositifs complets, permettant la conception, la fabrication, et l'analyse de systèmes aux propriétés inédites, deux outils principaux sont nécessaires : les systèmes de manipulation robotisés, et les simulateurs. Les problématiques de la téléopération pour ces deux outils sont similaires, et comportent notamment des problèmes importants de transparence du fait des champs de forces complexes qui doivent être retournés aux utilisateurs, et de stabilité du fait de la réduction d'échelle. Dans l'état actuel des développements, que ce soit pour la téléopération d'objets réels ou virtuels, il n'existe pas de systèmes complets, utilisables pour réaliser des manipulations complexes. Les applications se limitent le plus souvent à de simples démonstrations de faisabilité. Pour obtenir des systèmes avec une large gamme d'applications, plusieurs points doivent être abordés :

- la maîtrise de l'influence de la réduction d'échelle sur les schémas de commande, et l'adéquation entre les performances des couplages et les applications recherchées, notamment en termes de transparence et de stabilité,
- la définition de stratégies adaptées aux contraintes technologiques des systèmes de manipulation,
- l'utilisation de solutions adaptées pour s'affranchir du compromis fort entre stabilité, facilité de manipulation et qualité du ressenti haptique dû à la différence d'échelle.

Les premières téléopérations complexes à l'échelle nanoscopique ont pu être menées en prenant en compte les points précédents. Des opérations de ressenti des interactions nanoscopiques ont été réalisées, et des billes de quelques micromètres ont été manipulées, par roulement ou par saisie-dépose. Cette dernière manipulation est la première téléopération 3D complexe avec retour d'effort sur des objets microscopiques. Pour la simulation, un système de téléopération moléculaire avec un large champ d'application, comprenant notamment la modification globale de systèmes moléculaires, la recherche d'états caractéristiques ou encore la déformation de molécules, a été développé.

Ce travail n'est que le premier pas vers l'utilisation de la téléopération à l'échelle nanoscopique pour des manipulations complexes, mais il montre la faisabilité et l'intérêt de cette approche pour les nanosciences.

Mots clefs : Téléopération, haptique, schéma de commande, couplage bilatéral, micro-manipulation, simulation moléculaire.

Haptic coupling schemes for nanoscale teleoperation

Abstract

A key issue for further developments in nanotechnology is the manipulation of objects. Operators cannot handle them manually due to the reduced size, complex and counterintuitive force fields, and the high influence of environmental conditions. Force feedback teleoperation appears as a promising solution as it allows high intuitivity and flexibility. For the different steps of conception, fabrication, and analysis of new nanoscale systems, two tools are required : robotic manipulators and simulators. Similar issues arise for teleoperations dealing with these tools, including complex force fields that must be transmitted to users, and instabilities due to the scaling difference. Currently, for teleoperation of either real or virtual objects, there is no system that can be used to perform complex manipulations. Applications are limited to demonstrations of some pre-defined experiments. In order to develop multi-purpose remote nano handling systems, following issues should be resolved :

- the control of the influence of the scale reduction on the coupling schemes, and the adequacy between the coupling characteristics and the applications, in terms of transparency and stability,
- the definition of strategies in respect to technological constraints of manipulation systems,
- the use of methods to overcome the compromise between stability, ease of manipulation and haptic feedback quality due to the scale difference.

In this work, first complex teleoperations at nanoscale have been performed by considering these points. On a variety of implemented remote nano handling applications, users were able to manipulate micro spheres (rolling,

pick and place) while receiving haptic feedback on nanoscale interactions. A state-of-art example of 3D manipulation with force-feedback is also presented. Moreover, as an example of nanoscale realtime simulation applications, a molecular simulator has been fitted with a haptic interface. The operator is hence able to act directly on the simulated molecule, and induce deformations and atomic motions while receiving haptic information relative to inter molecular atomic forces.

This work is a preliminary step toward the generalized use of haptic remote handling in nanoscale, and demonstrates the advantages of this approach for nanotechnology through several dedicated applications.

Keywords : Teleoperation, haptic, control scheme, bilateral coupling, micromanipulation, molecular simulation.

4

Remerciements

Les travaux présentés dans ce document ont été effectués à l'Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR). Ils n'auraient pu avoir lieu sans le soutien, les conseils et les remarques avisées de nombreuses personnes. J'aimerais donc exprimer ici ma gratitude à tous ceux qui ont participé directement ou non à cette thèse.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma reconnaissance aux membres du jury qui ont accepté d'évaluer mes travaux de recherche. Je remercie tout particulièrement les deux rapporteurs, Nicolas Chaillet et Philippe Poignet pour leurs remarques et leurs conseils judicieux, ainsi que pour le temps qu'ils ont consacré à cette thèse.

Si j'ai pu effectuer ces travaux, c'est grâce à mon directeur de thèse, Stéphane Régnier. Il a été présent tout au long de ces trois années, toujours à l'écoute, et prêt à prendre le temps nécessaire pour discuter des sujets qui me tenaient à coeur. Je tiens à le remercier pour son implication, sa patience, l'ambiance de travail et la cohésion qu'il a su créer au sein de l'équipe. Merci pour toutes ces soirées, tous ces week-ends sacrifiés pour un article ou une présentation. Cette thèse lui doit beaucoup.

Un immense merci également à Sinan Haliyo, pour sa patience pour mes questions naïves sur le fonctionnement de Linux. Ses idées originales sont à l'origine d'une grande partie de ces travaux.

Je tiens à remercier Alain Micaelli pour ses conseils et le temps qu'il m'a consacré. J'ai beaucoup apprécié les discussions que nous avons pu avoir, et la gentillesse avec laquelle il m'a toujours reçue. Je souhaite également remercier Vincent Hayward pour ses discussions passionnantes sur l'haptique.

J'ai eu le plaisir de faire partie de l'équipe MAP de l'ISIR, et de côtoyer ainsi des doctorants et post-doctorants venant des quatre coins de la planète. Grâce à son implication dans la gestion de son équipe, Stéphane Régnier a transformé ce mélange en un groupe d'amis. Merci à tous pour votre soutien, et pour tous ces bons moments passés ensemble. J'adresserai des remerciements particuliers à Bruno Daunay, Barthélemy Cagneau et Florian Schramm pour m'avoir patiemment expliqué tout ce qu'il faut savoir pour réussir une thèse. J'espère avoir correctement suivi vos conseils. Merci à Hui Xie pour m'avoir donné accès à une plate-forme expérimentale exceptionnelle, et avoir eu la patience de m'apprendre à m'en servir. Cette aide est inestimable. Merci également à Antoine Le Berre pour son aide pour la préparation des systèmes lors des visites. Je tiens à exprimer ma reconnaissance à l'ensemble des membres de l'ISIR pour leur soutien. Je remercie particulièrement mes collègues de bureau pour m'avoir fait découvrir des plats des quatre coins du monde, ainsi que pour leur bonne humeur contagieuse.

Au cours de cette thèse, j'ai eu le plaisir de passer trois mois dans l'équipe NANO-D à l'INRIA, dirigée par Stéphane Redon. Je voudrais donc le remercier pour m'avoir accueillie si chaleureusement, et pour le temps qu'il m'a consacré. Merci également à l'ensemble de l'équipe, pour m'avoir si patiemment aidée, soutenue, et pour ces quelques rudiments de russe!

Je ne m'étendrai pas ici sur les remerciements personnels car ils dépassent largement le cadre de cette thèse ... mais les personnes concernées se reconnaîtront !

Table des matières

Т	lable des matières i		
Т	able o	des figures	v
In	trod	uction générale	1
1	\mathbf{Ret}	our d'effort pour les nanosciences	5
	1	La téléopération	6
		1.1 Les systèmes de téléopération	6
		1.2 Le couplage haptique	7
		1.2.1 Le formalisme associé aux couplages haptiques	7
		1.2.2 La mesure des performances d'un couplage haptique	8
		1.2.2.1 La transparence \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	8
		1.2.2.2 La stabilité \ldots	9
	2	La téléopération aux échelles micro et nanoscopiques	12
		2.1 Les applications	12
		2.2 La plate-forme de micro-manipulation	14
		2.2.1 Le module de vision	15
		2.2.2 Le bloc de déplacement	17
		2.2.3 Le système de mesure des efforts	17
		2.2.4 L'outil de manipulation	19
		2.3 Le logiciel de simulation	20
		2.4 Changement d'échelle et téléopération	22
	3	Les systèmes de téléopération existants	23
		3.1 Les travaux en téléopération directe	23
		3.2 Les travaux en téléopération virtuelle	26
		3.2.1 Teleoperations d'objets micro et nanoscopiques	26
		3.2.2 Teleoperations moleculaires	27
		3.3 Les travaux en teleoperation augmentée	29
	4	Objectifs et approche retenue	32
2	\mathbf{Sch}	émas de couplage haptique pour la téléopération directe	35
	1	La téléopération directe à l'échelle nanoscopique	36
		1.1 Le système de téléopération de l'ISIR	36
		1.2 Relation entre les déformations de la poutre et les efforts d'interaction	37

			1.2.1 Poutre avec pointe	8
			1.2.2 Poutre sans pointe $\ldots \ldots 3$	9
		1.3	Le cycle d'approche-retrait	1
	2	Analy	se des schémas de couplage pour la téléopération directe	2
		2.1	Présentation des schémas de couplage 4	3
		2.2	Etude de la transparence	3
			2.2.1 Couplage à retour d'effort direct	4
			2.2.2 Couplage Force Position	6
			2.2.3 Conclusion	7
		2.3	Etude de la stabilité	7
			2.3.1 Couplage à retour d'effort direct	8
			2.3.2 Couplage Force Position	0
	3	Applic	m ations	4
		3.1	Exploration haptique : ressenti du phénomène de <i>snap-in</i> sur un cycle d'approche-	
			retrait \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 5	5
		3.2	Opération de roulement sur des microbilles avec retour haptique 2D 5	6
			3.2.1 Calcul des forces haptiques	6
			3.2.2 Ressenti des efforts 5	8
			3.2.3 Analyse de l'opération de roulement	0
		3.3	Analyse des applications	0
	4	Conclu	ision	1
_	a .			_
3	Sché	émas c	le couplage haptique pour la téléopération virtuelle 6	3
	Ţ	Coupl	age entre la simulation molèculaire et le bras haptique 6	4
		1.1	Le logiciel de simulation SAMSON	4
			1.1.1 Représentation et simulation du système molèculaire	5
			1.1.2 Principe de resolution de l'équation du mouvement	6
		1.0	1.1.3 Adaptativité des degrés de liberte simules	7
		1.2	Interfaçage du bras haptique avec SAMSON	8
			1.2.1 Modes de manipulation	8
		1.0	1.2.2 Forces transmises a l'utilisateur	9
	0	1.3	Notations	9
	2	Analy	se des schemas de couplage pour la teleoperation virtuelle	0
		2.1	Contrôle en position \dots γ	1
		2.2	Contrôle en force	2
		2.3	Comparaison des propriétés de transparence et de stabilité	3
			2.3.1 Etude de la transparence	3
		0.4	$2.3.2 \text{Etude de la stabilite} \dots \dots$	с тт
	0	2.4	$\bigcup_{i \in \mathcal{I}} (i \in \mathcal{I}) = \bigcup_{i \in \mathcal{I}} (i $)
	3	Appne 2 1	ations) 7
		ა.1 ეე	Défense de molècules entières, l'exemple du VIII	1
		3.2 9.9	Deformation de structures moleculaires	0
	4	3.3	Determination des positions d'équilibre	0
	4	Concu	Ision	T
4	Stra	tégies	avancées pour la téléopération nanoscopique 8	3
-	1	Téléor	pération avec retour haptique 3D pour la manipulation de microsphères	4
	-	11	Le système de téléonération à deux poutres de l'ISIR	4
		1.2	Protocole de la micro-manipulation 3D	6
		1.3	Assistance au positionnement de la pince	7
		<u> </u>	1.3.1 Mesures d'amplitude en mode <i>tannina</i>	8
			1.3.2 Retour haptique pour l'alignement des poutres 8	8
			1.3.3 Détermination du guide virtuel . 9	õ
			1.3.4 Validation expérimentale de l'alignement des poutres	0
		1.4	Saisie-dépose par téléopération avec retour hantique	4
		-·-		*

		1.4.1	Retour haptique des interactions nanoscopiques	 95
		1.4.2	Retour haptique pour l'assistance	 96
		1.4.3	Bilan sur le retour haptique pour la phase de saisie-dépose	 98
	1.5	Constr	uction d'une pyramide à deux étages	 99
	1.6	Conclu	sion	 101
2	Gains	adaptat	ifs pour la simulation moléculaire	 101
	2.1	$\operatorname{Interac}$	tions moléculaires et schéma haptique	 102
		2.1.1	Spécificités des interactions moléculaires	 102
		2.1.2	Spécificités du couplage haptique pour la simulation moléculaire	 103
	2.2	Systèm	le adaptatif	 105
		2.2.1	Simulation moléculaire adaptative	 105
		2.2.2	Couplage haptique adaptatif	 105
	2.3	Téléop	ération adaptative	 107
		2.3.1	Exemple du VIH	 107
		2.3.2	Discussion	 108
	2.4	Analys	e de la stratégie	 110
3	Concl	usion .	-	 110
Concl	usions	et pers	pectives	111
Notat	ions of	abróvi	ations	115
INUTAL		abievia	110115	110
Anne	\mathbf{exes}			119
A Ca	lcul de	l'angle	de rotation de la poutre	119
B Ré	solutio	n de l'é	quation du mouvement pour la simulation moléculaire	121
Biblio	graphi	e		123
Liste	des pu	hlication	ns	139
L1906	ues pu	oncautor		100

Table des figures

Eléments constituant un système de téléopération.	6
Interfaces à structure série	7
Interfaces à structure parallèle	7
Echanges d'informations entre les différents éléments d'un système de téléopération	8
Les trois types de téléopération	13
Exemples de téléopérations directes et virtuelles	14
Architecture d'une plate-forme de micro-manipulation	15
Imagerie à l'échelle nanoscopique	16
Capteurs mesurant les déformations de la sonde	18
Courbe d'approche-retrait d'une poutre AFM sur un substrat	19
Outils de manipulation	20
Simulateurs à l'échelle nanoscopique	21
Changement d'échelle entre l'utilisateur et l'environnement.	23
Système de nanomanipulation, Institute of Industrial Sciences, Tokyo.	24
Interfaces à retour d'effort	24
Couplage haptique, Université de Pittsburg	26
Environnements de téléopérations virtuelles basés sur la manipulation AFM	27
Systèmes de téléopération moléculaire	28
The nanoManipulator, North Carolina University	31
Modules d'affichage pour la téléopération augmentée	31
Manipulation de nanotubes de carbone en téléopération augmentée	32
Plate-forme de téléopération avec retour d'effort de l'ISIR	36
Relation entre la mesure des déformations et les efforts d'interaction	37
Mesure des efforts - poutre avec pointe	38
Principe de mesure des efforts à l'aide d'un laser pour une poutre sans pointe	40
Point d'application de la force pour une poutre sans pointe	40
Force appliquée sur la poutre lors d'une expérience d'approche-retrait	42
Schéma de commande à retour d'effort direct (DFF)	43
Schéma de commande Force-Position (FP)	44
Diagrammes de Bode des impédances du schéma de couplage DFF	45
Diagrammes de Bode des impédances du schéma de couplage FP	47
Domaine de stabilité du système en fonction de α_f et α_d	49
Courbes d'approche-retrait pour une poutre de raideur $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, schéma DFF	50
	Eléments constituant un système de téléopération. Interfaces à structure série

$\begin{array}{c} 2.13 \\ 2.14 \\ 2.15 \\ 2.16 \\ 2.17 \\ 2.18 \\ 2.19 \end{array}$	Critère de Llewelyn pour la poutre $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ Courbes d'approche-retrait effectuées avec le schéma de commande FP Courbe d'approche-retrait pour une poutre de raideur $k_z = 0.05 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, schéma DFF Relation entre la mesure des déformations et le retour haptique pour l'aide à la manipulation Profil des efforts fournis à l'utilisateur Positions et forces pendant les expériences de roulements longitudinal et latéral Positions et forces dans le plan (xOy) au cours de l'expérience de roulement 2D	53 54 55 56 57 59 60
$3.1 \\ 3.2 \\ 3.3 \\ 3.4$	Interfaçage du bras haptique avec le logiciel de simulation	65 66 67
3.5 3.6 3.7 3.8 3.9 3.10 3.11 3.12	sont activés	68 70 71 73 76 78 79 79 80
3.12 3.13 3.14	Force haptique lors du dépliement d'un inhibiteur du VIII	81 82
$\begin{array}{c} 4.1 \\ 4.2 \\ 4.3 \\ 4.4 \\ 4.5 \\ 4.6 \\ 4.7 \\ 4.8 \\ 4.9 \\ 4.10 \\ 4.11 \end{array}$	Système de téléopération à deux poutres AFM	85 87 88 89 91 92 93 93 93 94 95
$\begin{array}{c} 4.12 \\ 4.13 \\ 4.14 \\ 4.15 \\ 4.16 \\ 4.17 \end{array}$	Retour haptique pour l'assistance lors d'une manipulation de saisie-dépose	90 97 99 100 100 103 104
$ \begin{array}{r} 4.18 \\ 4.19 \\ 4.20 \end{array} $	Influence du coefficient en déplacement α_d sur la force haptique, $\alpha_f = 1.5 \cdot 10^9$ Profil de l'amplification des efforts en utilisant une fonction non linéaire Retour haptique des interaction entre deux molécules d'eau en utilisant un facteur d'am-	104 106
4.21 4.22	plification en effort non linéaire	107 108 109
ч.22 А.1	Calcul de l'angle de rotation d'une poutre sans pointe	119
B.1	Principe de l'algorithme de R. Featherstone	122

Introduction générale

Le développement actuel des micro et nanotechnologies est considérable, et les applications potentielles intéressent un très grand nombre de domaines, comme la physique des matériaux, les technologies pour la santé ou l'électronique. Cependant, à cette échelle, l'interaction directe avec les objets est impossible du fait notamment de leur taille, des champs de forces complexes et non intuitifs, et de la grande sensibilité des systèmes aux conditions environnementales. Une solution consiste à automatiser l'ensemble des tâches. Cependant, le manque de flexibilité qui en résulte, et l'impossibilité de bénéficier de l'expertise des opérateurs au cours d'une manipulation sont autant de facteurs pénalisants. Pour garantir l'interactivité, l'utilisation d'interfaces à retour d'effort, ou interfaces haptiques, est une solution prometteuse. L'opérateur contrôle alors les outils à l'aide du bras maître, par lequel lui sont transmis notamment les efforts d'interaction.

Le développement des nanosciences passe par la conception, la simulation, l'analyse et la fabrication de systèmes, dans le but d'aboutir notamment à la création de nouveaux matériaux ou alliages aux propriétés inédites, ou encore à des structures moléculaires "sur mesure", capables d'interactions précises et ciblées. Pour atteindre ces objectifs, des systèmes robotisés permettent de manipuler des objets microscopiques réels. Les tâches classiques incluent notamment la saisie, et la dépose, le roulement, la découpe, et l'indentation, qui sont des opérations importantes pour construire des structures complexes. En plus de ces systèmes, des outils de simulation ont été développés. Travailler sur des objets virtuels facilite les phases de conception de nouvelles structures. Les applications, notamment en technologie pour la santé, sont nombreuses. La manipulation aux échelles micro et nanoscopiques passe par l'intermédiaire de ces deux systèmes, dont les applications répondent aux besoins des nanotechnologies.

Que ce soit pour des objets réels ou virtuels, les champs de forces déterminant leurs comportements sont notamment basés sur les forces de van der Waals. La téléopération pour ces deux systèmes présente donc des problématiques très similaires. La transparence (capacité à retransmettre fidèlement les interactions nanoscopiques à l'utilisateur) des schémas de couplage doit être bonne. En effet, des faibles variations d'efforts, et des champs de forces complexes doivent être transmis. La stabilité des schémas de couplage est difficile à assurer du fait de la différence d'échelle, de la grande dynamique, et des temps de calcul importants dans le cas de la simulation.

Actuellement, les systèmes robotisés manipulent des objets dont la taille est de l'ordre de quelques micromètres, ou de la centaine de nanomètres. A cause de contraintes technologiques fortes, il est difficile d'interagir de manière précise avec des objets de taille inférieure. La manipulation est une étape clef pour les nanotechnologies car la fabrication de toute entité complexe en dépend. Les simulateurs sont eux limités par les temps de calcul importants engendrés par la complexité des interactions nanoscopiques quand la taille des objets augmente. Cependant, les logiciels de simulation moléculaire sont largement développés, et possèdent un large champ d'application dans le domaine de la pharmacologie notamment. Cette thèse s'intéressera donc à la manipulation d'objets microscopiques, ainsi qu'à la simulation moléculaire, domaines dont les applications variées sont au coeur du développement des nanosciences.

Des systèmes de téléopération existent pour des opérations simples, mais à notre connaissance, aucune manipulation complexe n'a été effectuée à ce jour. Les applications sont généralement limitées à de simples démonstrations. Il reste donc à prouver que des opérations complexes sont réalisables à l'échelle nanoscopique à l'aide de la téléopération à retour d'effort.

Les applications sont limitées notamment par des problèmes d'instabilité, ou par un retour haptique non adapté ou de qualité insuffisante. Pour aboutir à des systèmes de téléopération complets, permettant des applications variées, les principales causes de ces problèmes sont traitées dans cette thèse :

- l'influence du changement d'échelle sur les performances des schémas de commande est clairement établie,
- les performances des schémas de commande sont évaluées, et les domaines d'application sont définis en conséquence,
- les spécificités de chacun des types de téléopération, selon que l'objet manipulé est réel ou virtuel, sont analysées, et les couplages sont étudiés en conséquence. Les temps de calcul importants dans le cas des simulations sont notamment considérés,
- des stratégies adaptées sont définies pour aboutir à des téléopérations complexes. Elles prennent en compte les spécificités de ces échelles, notamment les contraintes technologiques qui rendent les systèmes de micro-manipulation complexes, et le compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation qui existe à ces échelles.

Les couplages utilisés dans cette thèse sont issus de schémas de commande largement utilisés à l'échelle macroscopique, et adaptés pour des applications nanoscopiques en prenant en compte les points précédents.

Le présent document est composé de quatre chapitres, chacun dédié à un problème spécifique de l'haptique pour les nanosciences.

Le premier chapitre présente la téléopération avec retour d'effort à l'échelle nanoscopique. La notion de couplage haptique est introduite, ainsi que les outils permettant d'évaluer les performances de ces schémas de commande, notamment la transparence et la stabilité. Ils seront utilisés tout au long de cette thèse pour analyser et comparer les couplages. L'intérêt de la téléopération pour les nanosciences est mise en évidence, et les applications sont détaillées. Trois grands types de téléopération apparaissent, la téléopération directe, virtuelle et augmentée et qui diffèrent selon leur capacité à manipuler des objets réels et/ou virtuels. Les deux premières classes de téléopération seront traitées au cours de cette thèse. La téléopération augmentée ne sera pas détaillée, car la bonne maîtrise de deux types précédents est nécessaire avant de l'aborder. En fonction de la téléopération considérée, l'opérateur interagit avec différents environnements. Les éléments qui constituent une plateforme de micro-manipulation, ainsi que les logiciels de simulation sont détaillés. Dans les deux cas, la diminution d'échelle pose de nombreux problèmes technologiques, de modélisation et de simulation. Il est important de comprendre et connaître ces difficultés et les limites qui en découlent pour mettre en place des schémas de téléopération adaptés. Une étude bibliographique montre que les systèmes actuels souffrent notamment de la mauvaise connaissance de l'influence des spécificités liées à la réduction d'échelle sur les schémas de commande et du manque de stratégies adaptées. Leurs applications sont donc limitées, que ce soit pour les téléopérations directes, virtuelles ou augmentées.

Le second chapitre concerne l'étude de schémas de couplage haptique pour la téléopération directe. L'interface haptique est connectée à la plate-forme de micro-manipulation par microscope à force atomique (AFM) de l'ISIR. Deux schémas de couplage sont analysés et comparés en termes de transparence et de stabilité. Le couplage à retour direct est la structure la plus simple pour connecter le robot à retour d'effort avec l'outil de manipulation. Seuls deux gains homothétiques mettant à l'échelle les variables de force et de position sont nécessaires. Ce schéma est donc une référence intéressante pour évaluer des structures plus complexes. L'étude de ses performances montre une très bonne transparence, mais une stabilité difficile à assurer. Dans le second couplage, un terme d'amortissement est introduit. La transparence est dégradée, mais la stabilité est meilleure. Il convient donc à des opérations plus complexes. En plus de la comparaison de ces deux couplages, ce chapitre présente un ensemble de règles pour choisir les gains de ces schémas de commande. Ces résultats sont validés par des explorations haptiques au cours desquels des phénomènes fins, comme les forces attractives, sont transmises aux utilisateurs. Des efforts de quelques dixièmes de nanonewton sont ressentis. Une téléopération 2D originale de roulement de microbille est également effectuée. Le retour haptique est alors utilisé non plus pour transmettre fidèlement les efforts d'interaction mesurés, mais pour fournir aux utilisateurs une aide lors d'une manipulation simple. Des premiers résultats sont obtenus. Cependant, ce chapitre met en avant les limitations de ces couplages dues au manque de stratégies adaptées prenant en compte les contraintes technologiques des plate-formes de micro-manipulation et le compromis fort entre stabilité, facilité de manipulation et ressenti haptique.

Le troisième chapitre traite de la téléopération virtuelle pour la simulation moléculaire. Cet exemple est choisi pour ses domaines d'application variés et en pleine expansion, comme la pharmacologie. De plus, il met en avant la plupart des difficultés caractéristiques de ce type de téléopération puisque les objets simulés comportent plusieurs centaines ou milliers de degrés de liberté, et provoquent des temps de simulation importants. Par rapport au chapitre précédent, un problème supplémentaire se pose, lié au temps de calcul du simulateur utilisé pour modéliser le comportement des molécules. L'importance des retards introduits dans les couplages rend les schémas de commande instables. Les couplages courants à travers lesquels l'utilisateur fixe la position des molécules souffrent de ces instabilités, leur intégration dans les simulateurs moléculaires n'étant pas aisée. Leur domaine d'application est donc limité aux opérations nécessitant une bonne transparence, mais induisant peu de modifications du système moléculaire global. Le mode de contrôle en effort par lequel l'utilisateur applique une force sur les molécules est envisagé. Bien que le schéma de commande associé soit moins transparent, sa stabilité le rend intéressant. La capacité offerte aux opérateurs de pouvoir déformer des structures moléculaires rend possible de nouvelles applications. Ces schémas de commande, couplés au simulateur SAMSON, développé par l'INRIA, offrent un système dont les applications sont variées et complémentaires. Cependant, comme dans le cas de la téléopération directe, les limitations dues au manque de stratégies adaptées sont mises en évidence.

Le dernier chapitre est consacré à la mise en place de stratégies spécifiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique. Il s'appuie sur l'analyse des schémas de commande effectuée dans les chapitres 2 et 3, ainsi que celle des résultats expérimentaux obtenus sur des exemples simples. En particulier, les chapitres précédents mettent en évidence les deux principales limitations des systèmes classiques, liées respectivement à la non prise en compte des contraintes technologiques des systèmes de micro-manipulation robotisés, et au compromis fort entre stabilité, facilité de manipulation et qualité du ressenti haptique présent à ces échelles. Le premier problème est traité à travers une tâche de manipulation 3D de microbilles de 2.5 µm de rayon. Différents retours d'effort sont définis, basés sur des mesures de force ou de variations d'amplitude liées à l'utilisation de l'AFM en mode statique ou dynamique. Une micropyramide à deux étages est construite par saisie-dépose des billes pour valider la stratégie. Il semblerait que cette téléopération soit la première manipulation complexe 3D avec retour haptique à l'échelle nanoscopique. La stratégie utilisée pourra être directement appliquée à des systèmes de téléopération virtuelle ou augmentée utilisant un système similaire. Le second problème, commun à tous les types de téléopération à l'échelle nanoscopique, est traité par l'utilisation de gains adaptatifs. Des premiers résultats sont donnés sur la simulation moléculaire, et des interactions qui n'étaient jusqu'à présent pas perceptibles par les utilisateurs ont été ressenties. Cette stratégie s'adapte également à la téléopération directe et augmentée. Ces expériences sont parmi les premières téléopérations complexes avec retour d'effort à l'échelle nanoscopique. Elles ne représentent que le premier pas vers des systèmes complets aux applications variées, mais elles montrent la faisabilité et l'intérêt de cette approche.

La conclusion montre qu'une bonne maîtrise des spécificités des schémas de commande liées à la ré-

duction d'échelle est nécessaire. A l'aide de couplages adaptés à l'application, des premiers résultats sur des explorations haptiques (ressenti d'interactions nanoscopiques) et de roulement 2D sont obtenues sur des objets réels. Un système de téléopération moléculaire avec un large champ d'application est également développé. Cependant, sans stratégies adaptées, les applications restent limitées par les contraintes technologiques qui rendent les systèmes de micro-manipulation complexes, et le compromis fort entre stabilité, facilité de manipulation et qualité du ressenti haptique. Des premières solutions sont apportées par la définition de retours haptique basés sur des mesures d'amplitude issues d'un AFM utilisé en mode dynamique, et l'utilisation d'outils complexes composés de deux poutres AFM. L'utilisation de gains adaptatifs, testé sur des téléopérations moléculaires est une solution prometteuse pour traiter le compromis entre stabilité, aisance de manipulation et ressenti. Ce travail montre la faisabilité de l'utilisation de la téléopération à retour d'effort pour des manipulations complexes à l'échelle nanoscopique grâce à des stratégies adaptées.

Cette thèse n'est que le premier pas vers des systèmes de téléopération intuitifs et ayant une large gamme d'applications. Les perspectives présentées soulignent notamment l'importance de la réalité augmentée pour pallier le manque d'informations liées aux contraintes technologiques, comme l'absence de mesure d'effort des outils couramment utilisés pour la micro-manipulation, et l'absence de vision temps réel lors de la réduction d'échelle. Des tests utilisateurs précis et ciblés, devraient également être réalisés, notamment pour évaluer les stratégies liées aux gains adaptatifs. La simulation moléculaire serait une bonne plate-forme de test. La combinaison du système robotisé de micro-manipulation avec le logiciel de simulation permettrait de réaliser des manipulations complètes, pour lesquelles les interactions simulées donneraient accès à des informations impossibles à obtenir par des mesures directes. Il serait alors possible d'aboutir à un système complet, aux applications variées.

α	• •
t in:	anitre
OID	aprore

1

Retour d'effort pour les nanosciences

L'intérêt de la téléopération pour interagir avec des environnements hostiles, géographiquement distants ou inaccessibles à l'homme n'est plus à démontrer. Cette approche est notamment largement utilisée aux échelles micro et nanoscopiques puisque l'interaction directe avec les objets est impossible. Le retour d'effort est rendu nécessaire par le retour visuel réduit et les difficultés liées à la manipulation.

Pour répondre aux besoins des nanotechnologies et manipuler des objets réels et virtuels à l'aide d'un système de téléopération, il est nécessaire de maîtriser les performances des couplages haptiques. L'objet de ce chapitre est d'exposer les outils utilisés pour l'étude des schémas de commande, et les spécificités de l'environnement avec lequel l'utilisateur interagit. Les particularités liées à la différence d'échelle sont donc détaillées, et montrent la nécessité d'adapter les schémas de commande, mais aussi les stratégies de manipulation. Un état de l'art fait le point sur les travaux dans ce domaine et montre que le manque de maîtrise des schémas de couplage et de stratégies adaptées limite les applications potentielles des systèmes de téléopération.

Dans un premier temps, l'architecture d'un système de téléopération ainsi que les outils mesurant ses performances sont présentés. Deux critères principaux sont considérés, la transparence et la stabilité, et seront utilisés dans les chapitres suivants pour évaluer et comparer différents schémas de commande.

Dans un deuxième temps, les spécificités de l'environnement d'un système de téléopération pour des applications aux échelles micro et nanoscopiques sont détaillées. Une description de la plate-forme de manipulation et du logiciel de simulation met en évidence les difficultés liées à la réduction d'échelle et la complexité des modèles qui en découle.

La troisième partie présente les travaux existants. Leurs applications sont limitées, que ce soit pour des environnements réels ou simulés. Le peu de manipulations complexes est dû principalement à une mauvaise maîtrise des spécificités du couplage haptique induites par la réduction d'échelle ainsi qu'au manque de stratégies de téléopération adaptées.

1 La téléopération

La téléopération consiste à manipuler un objet distant à l'aide d'un robot maître commandant un bras esclave. Ce système a été développé initialement pour des opérations en milieu hostile ou déporté, comme les centrales nucléaires et les missions spatiales. De manière à accroître l'interactivité, un retour d'effort a été introduit. La téléopération à retour d'effort est actuellement utilisée dans de très nombreux domaines, allant du prototypage de systèmes industriels aux opérations chirurgicales [Coiffet 02], [Zarrad 07].

1.1 Les systèmes de téléopération

Les éléments composant un système de téléopération avec retour d'effort sont détaillés sur la figure 1.1. L'utilisateur manipule le bras maître dénommé robot à retour d'effort, ou interface haptique. Les principales caractéristiques de ce robot sont le nombre de degrés de liberté en mouvement et en retour d'effort, ainsi que les efforts maximaux transmissibles à l'utilisateur. Ce bras doit posséder une large bande passante pour faire ressentir des changements d'effort brusques, et des frottements réduits. Le contact simulé doit être raide. L'espace de travail est également à prendre en considération. Il existe actuellement de nombreuses interfaces haptiques, à l'état de prototypes ou disponibles dans le

Il existe actuellement de nombreuses interfaces haptiques, à l'état de prototypes ou disponibles dans le commerce. Les deux types d'architecture utilisés sont la structure série et la structure parallèle.



Utilisateur Interface haptique

Couplage

Environnement

Figure 1.1 - Eléments consituant un système de téléopération. La photo de l'environnement provient de [Andersen 09].

Interfaces à structure série Le principal avantage de cette structure est l'importance de l'espace de travail, notamment en rotation. Cependant, le fait que certains axes sont distants de la base n'est pas sans poser des problèmes de motorisation. En effet, si les moteurs sont embarqués, la structure est alourdie, et s'ils sont distants, les transmissions qui les relient aux axes sont complexes.

Plusieurs interfaces commerciales utilisent cette technologie. Parmi les plus courantes, citons notamment le *Phantom* de *SensAble*¹ et le *Virtuose* d'*Haption*² (voir figure 1.2).

Interfaces à structure parallèle A la différence des structures séries, les structures parallèles possèdent un espace de travail plus réduit, notamment en rotation. De plus, le couplage entre les translations et les rotations est important. Leurs principaux avantages résident dans la simplicité de chaque sous structure, et dans leurs performances dynamiques (dues au fait que les moteurs sont proches de la base). De plus, elles peuvent simuler une interaction plus raide que les interfaces séries.

Parmi les interfaces commercialisées, on trouve notamment le Delta, et l'Omega de Force Dimension³ et l'interface à câbles d'Haption (voir figure 1.3).

¹http://www.sensable.com

²http://www.haption.com

 $^{^{3} \}rm http://www.forcedimension.com$



Figure 1.2 - Interfaces à structure série

Figure 1.3 - Interfaces à structure parallèle

Ces robots sont généralement modélisés par un corps rigide d'inertie M_h , et d'amortissement B_h [Diolaiti 06]. Leur fonction de transfert H(s) ayant comme entrée la force appliquée sur la poignée et comme sortie la vitesse de cette dernière s'écrit donc dans le domaine de Laplace comme :

$$H(s) = [(B_h + M_h s)]^{-1}$$
(1.1)

où s représente la variable de Laplace. Les valeurs numériques de M_h et B_h diffèrent selon les interfaces utilisées. Les caractéristiques des principaux robots à retour d'effort sont données dans [Diolaiti 06]. Les performances des interfaces commerciales actuelles sont suffisantes pour un très grand nombre d'applications. Cette propriété explique leur large emploi dans la plupart des systèmes de téléopération ainsi que dans le cadre de cette thèse. Cependant, le développement d'interfaces haptiques dédiées à la tâche reste un domaine ouvert, notamment pour des applications aux échelles micro et nanoscopiques [Millet 09b].

Pour relier le bras maître et l'environnement, un schéma de commande, appelé couplage haptique, est utilisé. Les performances du système de téléopération dépendent fortement de cet élément, et plusieurs outils ont été développés pour choisir et évaluer sa structure. Les principaux sont donnés dans la partie suivante.

1.2 Le couplage haptique

Dans la majorité des systèmes de téléopération, les variables échangées entre les différents éléments de la chaîne sont celles de la figure 1.4. L'utilisateur applique un effort F_{op} sur l'interface⁴, et ressent en retour un effort F_h . La position X_h ou la vitesse V_h de la poignée de l'interface haptique est utilisée comme entrée du couplage haptique. La position X_e ou la vitesse V_e calculée par le schéma de commande est envoyée comme consigne à l'outil. La force d'interaction environnementale F_e est une entrée du couplage.

1.2.1 Le formalisme associé aux couplages haptiques

Une manière courante de représenter les systèmes de téléopération est de les modéliser par un ensemble de sous systèmes à deux ports interconnectés [Hannaford 89]. Cette méthode met en avant les échanges d'énergie entre les différents éléments visibles sur la figure 1.4. Les blocs sont représentés par des matrices d'immittance **P** qui traduisent le transfert en termes d'éffort et de vitesse [Adams 99].

⁴Dans toute la suite, sauf indication contraire, les variables sont scalaires et les études réalisées sont monodimensionnelles. Comme les axes sont découplés, le principe des analyses est généralisable à des variables vectorielles. Les variables en minuscules, resp. majuscules représentent des variables dans le domaine temporel, resp. dans le domaine

Les variables en minuscules, resp. majuscules representent des variables dans le domaine temporel, resp. dans le domaine de Laplace.



Figure 1.4 - Echanges d'informations entre les différents éléments d'un système de téléopération. La photo de l'environnement provient de [Andersen 09].

Les différentes matrices possibles sont :

• la matrice d'impédance $\mathbf{Z} : \begin{bmatrix} F_h \\ F_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{11} & z_{12} \\ z_{21} & z_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_h \\ -V_e \end{bmatrix}$ • la matrice d'admittance $\mathbf{Y} : \begin{bmatrix} V_h \\ -V_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{21} & y_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_h \\ F_e \end{bmatrix}$ • la matrice hybride $\mathbf{G} : \begin{bmatrix} F_h \\ -V_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_h \\ F_e \end{bmatrix}$

Ces matrices sont utilisées pour étudier les performances des couplages haptiques.

1.2.2 La mesure des performances d'un couplage haptique

Pour comparer et évaluer les schémas de commande, les performances seront mesurées en termes de *transparence* et de *stabilité*. La transparence traduit le fait que le ressenti de l'opérateur lorsqu'il manipule le bras haptique doit être le plus proche possible de celui qu'il aurait s'il manipulait directement l'objet. Notamment, lorsqu'aucun effort ne s'applique, il faut que les frottements soient les plus faibles possibles. A l'inverse, quand il est en contact avec un objet dur, l'utilisateur doit ressentir un contact raide. La définition exacte de cette notion est donnée au paragraphe 1.2.2.1.

Le second critère que doit vérifier le couplage est la stabilité. S'il est instable, le système de téléopération est inutilisable. Plusieurs approches abordant la problématique de la stabilité sont détaillées au paragraphe 1.2.2.2.

1.2.2.1 La transparence

La transparence d'un couplage haptique est sa capacité à retransmettre fidèlement à l'opérateur les phénomènes propres à l'environnement. Elle est couramment mesurée en termes d'impédance. Elle est définie dans [Lawrence 93] et [Hokayem 06] comme une comparaison entre l'impédance côté utilisateur $Z_{op} = \frac{F_{op}}{V_h}$ et celle côté environnement $Z_e = \frac{F_e}{V_e}$. La transparence idéale est atteinte quand :

$$Z_{op} = Z_e \tag{1.2}$$

Cette condition s'écrit de manière équivalente à l'aide de la matrice hybride \mathbf{G} du couplage [Hokayem 06]. Le couplage est transparent si :

$$\begin{bmatrix} F_h \\ -V_e \end{bmatrix} = \mathbf{G} \begin{bmatrix} V_h \\ F_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_h \\ F_e \end{bmatrix}$$
(1.3)

Une deuxième mesure intéressante est celle de l'intervalle d'impédance que le couplage peut retransmettre [Colgate 94], [Adams 99]. Plus cet intervalle est important, et plus la variété d'impédances transmises à l'utilisateur est importante. [De Gersem 05] présente un résumé intéressant de ces différentes approches. La transparence est une problématique importante de la téléopération. En particulier, les tâches pour lesquelles de faibles variations d'effort, ou des champs de forces complexes, doivent être transmis à l'utilisateur requièrent une grande transparence des schémas de commande. En plus du couplage, les caractéristiques de l'interface haptique utilisée sont à prendre en compte pour obtenir de bonnes performances.

1.2.2.2 La stabilité

La stabilité est une condition essentielle pour que le système de téléopération soit utilisable, car un système instable provoque des dommages sur les outils et les objets manipulés. Deux approches sont considérées actuellement : la passivité et la stabilité. Ces deux notions sont détaillées dans les paragraphes suivants. Certaines des définitions rappelées dans ce document s'appliquent uniquement à des systèmes linéaires, invariants dans le temps (LTI). Ils constituent en effet le cadre de l'étude des chapitres suivants. Bien que pour l'application considérée cette hypothèse soit restrictive, elle est communément admise pour les études analytiques.

Les critères de stabilité

La stabilité considérée est généralement la stabilité au sens "entrée bornée \rightarrow sortie bornée" (EBSB). Le cas des systèmes continus et discrets sont traités dans les paragraphes suivants. Plus de précisions peuvent être trouvées dans [Ostertag 04] pour les systèmes continus, et [Ogata 95] pour les systèmes discrets.

Systèmes continus La stabilité EBSB des systèmes continus se définit par :

Définition 1. Un système est dit stable au sens "entrée bornée - sortie bornée" si toute entrée bornée produit une sortie qui tend vers une limite finie lorsque le temps est infiniment grand.

Pour qu'un système asservi soit stable au sens EBSB, il faut qu'il vérifie le théorème suivant :

Théorème 1. Un système asservi est stable si et seulement si les racines de l'équation caractéristique du système bouclé sont toutes à partie réelle strictement négative.

Il existe plusieurs critères permettant de vérifier cette condition de stabilité. Les plus courants sont le critère de Nyquist ou le critère du Revers, appliqués sur la fonction de transfert en boucle ouverte du système asservi. Les critères algébriques comme celui de Routh-Hurwitz pour lesquels le calcul explicite des racines n'est pas nécessaire peuvent aussi être exploités.

Systèmes discrets Lorsqu'ils font intervenir un logiciel de simulation (manipulation assistée ou réalité virtuelle), les systèmes de téléopération sont ralentis, et des retards sont introduits. Les schémas de commande doivent prendre en compte cette spécificité, et leur stabilité doit être étudiée à l'aide de critères propres aux systèmes discrets. De manière équivalente au cas continu, la condition nécessaire et suffisante de la stabilité des systèmes discrets peut être énoncée :

Théorème 2. Un système asservi est stable si et seulement si toutes les racines de l'équation caractéristique du système bouclé ont un module inférieur à 1.

Pour étudier cette stabilité il est possible d'utiliser les critères développés pour le cas continus après avoir appliqué une transformation bilinéaire $z = \frac{2+\omega T_e}{2-\omega T_e}$, où z est une variable discrète, T_e est la période

d'échantillonnage et ω est la pulsation. Des critères spécifiques ont également été développés, notamment un critère analogue à celui de Routh-Hurwitz, le critère de Jury, qui donne des conditions nécessaires et suffisantes de stabilité.

Cette approche nécessite de modéliser l'environnement avec lequel l'opérateur interagit pour déterminer la fonction de transfert du système (reliant la force exercée par l'opérateur sur l'interface haptique F_{op} à la position de la poignée du robot maître X_h). Cette modélisation se révèle parfois délicate du fait de la complexité des interactions environnementales. Des approximations assez fortes sont alors utilisées.

La passivité

La passivité est une notion qui garantit la stabilité d'un système, si le schéma de commande est couplé à des environnements passifs. L'opérateur est considéré comme passif dans le sens où il interagit avec des objets passifs de manière passive [Hogan 89], [Kim 06]. L'environnement est généralement considéré lui aussi comme passif. Aux échelles micro et nanoscopiques, cette hypothèse est simplificatrice.

Il existe deux types de critères pour vérifier la passivité d'un système, basés sur des définitions énergétiques et fréquentielles détaillées dans les paragraphes suivants.

Définition énergétique La définition énergétique se base sur le principe qu'un système est passif si et seulement si il ne crée pas d'énergie. A partir de cette définition, il est possible d'étudier la passivité à l'aide des signaux temporels (continus ou discrets) [Hannaford 02] :

Définition 2. Un système à M-port avec une énergie initiale E(0) est passif si et seulement si :

$$\int_0^t f_1(\tau)v_1(\tau) + \dots + f_M(\tau)v_M(\tau)d\tau + E(0) \ge 0 \quad \forall t \ge 0$$
(1.4)

pour toutes les forces et vitesses admissibles.

A l'aide de cette définition, des observateurs/contrôleurs de passivité sont mis en place [Hannaford 02], [Artigas 09]. Si le système crée de l'énergie, le contrôleur ajoute de l'amortissement dans le système pour la dissiper.

Définition fréquentielle Dans le domaine fréquentiel les matrices d'immittances (admittance, impédance, hybride) sont représentatives de l'échange d'énergie entre les sous-systèmes. La passivité se définit donc également comme [Niemeyer 96], [Adams 99] :

Théorème 1. Un système linéaire à deux ports est passif si et seulement si la matrice d'immittance est positive réelle.

La définition d'une matrice positive réelle se trouve notamment dans [Anderson 73] et [Khalil 02].

Pour vérifier numériquement la passivité, une définition basée sur la matrice de répartition est introduite. Pour les systèmes LTI, l'opérateur de répartition S peut être exprimé dans le domaine fréquentiel par la matrice de répartition $\mathbf{S}(s)$ (où s est la variable de Laplace continue) [Anderson 89] :

Définition 3.

$$F(s) - V(s) = \mathbf{S}(s)(F(s) + V(s))$$
(1.5)

Dans le cas d'un système à deux ports, cette matrice de répartition peut être liée aux matrices hybride, impédance et admittance par [Anderson 89] :

$$\mathbf{S}(s) = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{bmatrix} (\mathbf{H}(s) - \mathbf{I})(\mathbf{H}(s) + \mathbf{I})^{-1}$$
(1.6)

$$\mathbf{S}(s) = (\mathbf{Z}(s) - \mathbf{I})(\mathbf{Z}(s) + \mathbf{I})^{-1}$$
(1.7)

$$\mathbf{S}(s) = (\mathbf{I} - \mathbf{Y}(s))(\mathbf{I} + \mathbf{Y}(s))^{-1}$$
(1.8)

A partir de la matrice de répartition, la passivité d'un système s'étudie avec le théorème suivant [Anderson 73], [Colgate 93] :

Théorème 2. Soit un système LTI. Pour qu'il soit passif, la matrice de répartition doit vérifier :

- $\mathbf{S}(s)$ est stable (ou les éléments de $\mathbf{S}(s)$ n'ont pas de pôle dans $Re(s) \ge 0$),
- I-S^{*}(jw)S(jω) ≥ 0 pour tout ω (ou encore I-S^{*}(jω)S(jω) ≥ 0 est non négatif défini hermitien, i.e. x^T(I-S^{*}(jω)S(jω))x ≥ 0 pour tout x).

Approches moins conservatives L'inconvénient de la passivité est sa conservativité (elle fournit des conditions de stabilité suffisantes, mais pas forcément nécessaires). Cependant, il existe des solutions pour rendre moins strictes ces conditions de stabilité.

La première approche donnée par [Adams 99] consiste à considérer non pas le cas général d'un schéma de commande couplé à des systèmes à deux ports (comme c'était le cas dans le paragraphe précédent), mais à des systèmes à un port (condition vérifiée par l'opérateur et l'environnement). L'étude se fait alors en terme de stabilité inconditionnelle dont une condition nécessaire et suffisante est donnée par le critère de Llewelyn [Llewellyn 52] :

Théorème 3. Un système représenté par la matrice d'immittance \mathbf{P} (impédance, admittance ou hybride) est inconditionnellement stable si et seulement si les conditions suivantes sont vérifiées :

$$c_1 : Re(p_{11}) \ge 0$$
 (1.9)

$$c_2 : Re(p_{22}) \ge 0 \tag{1.10}$$

$$c_3 : 2Re(p_{11})Re(p_{22}) - |p_{12}p_{21}| - Re(p_{12}p_{21}) \ge 0$$

$$(1.11)$$

Cette approche, moins conservative que la passivité, reste plus stricte que la stabilité puisqu'aucune hypothèse n'est faite ni sur l'environnement, ni sur l'opérateur mis à part le fait qu'ils doivent être passifs [Micaelli 02].

La seconde approche consiste à restreindre la condition sur l'opérateur et l'environnement, pour ne pas considérer la totalité des systèmes passifs, mais uniquement les situations effectives [Haddadi 09]. Ce choix revient à prendre en compte un amortissement minimum introduit par l'opérateur, et à ne considérer que les environnements avec lesquels l'opérateur interagit au cours de la manipulation.

Conclusion

Deux principales approches peuvent être utilisées pour étudier la stabilité d'un système de téléopération. La première, l'étude de la stabilité, nécessite de modéliser les interactions nanoscopiques. Elle donne des conditions nécessaires et suffisantes de stabilité. La seconde s'applique sans aucune connaissance de l'environnement. La seule hypothèse est que cet élément soit passif (c'est à dire qu'il ne produise pas d'énergie). Elle est donc plus conservative puisqu'elle garantit la stabilité quel que soit l'environnement. Seules des conditions suffisantes de stabilité sont obtenues. Le cadre de notre étude étant les systèmes linéaires invariants dans le temps, l'étude des systèmes non linéaires n'est pas traitée. Elle est détaillée dans [Khalil 02].

2 La téléopération aux échelles micro et nanoscopiques

Aux échelles micro et nanoscopiques, l'interaction directe avec les objets est impossible, de par leur taille, la complexité des champs de forces et la grande sensibilité des systèmes aux conditions environnementales. Une solution consiste donc à automatiser les tâches à réaliser. Cependant, l'expertise des opérateurs ne peut alors pas être exploitée pendant les manipulations. L'utilisation d'aides à la manipulation apparaît comme une alternative prometteuse, conservant l'interactivité de la manipulation directe tout en facilitant sa réalisation. L'haptique est un des moyens privilégiés pour transmettre les informations à l'utilisateur, puisqu'il restitue une indication que les opérateurs ont naturellement l'habitude de traiter lors de manipulations directes à l'échelle macroscopique [Ferreira 06].

Dans cette partie, les différentes opérations réalisées à ces échelles, sur des objets réels ou virtuels, sont détaillées. Selon l'objet considéré, trois types de téléopération, la téléopération directe, virtuelle et augmentée, apparaissent. Plusieurs classes d'applications sont alors possibles, définies selon la nature de la tâche effectuée. L'ensemble de ces points est traité dans les paragraphes suivants.

2.1 Les applications

Pour créer de nouveaux matériaux ou alliages spécifiques, ou des structures moléculaires avec des propriétés inédites et ciblées, il est nécessaire de disposer à la fois d'une plate-forme de micro nanomanipulation et d'un outil de simulation.

Actuellement, sur les plate-formes robotisées, les objets manipulés sont principalement sphériques ou cylindriques. Les plus courants sont des billes de verre (figure 1.6(b)), et des nanotubes de carbone simple ou multi-feuillets (figure 1.6(c)). Les manipulations réalisées sont relativement simples (roulement, poussée, ...). Quelques opérations de saisie-dépose sont également rapportées [Xie 09]. Une plate-forme spécifique est nécessaire pour manipuler les objets tout en mesurant les efforts d'interaction (voir partie 2.2). Du fait des spécificités liées à la réduction d'échelle, il est nécessaire de mettre en place des stratégies particulières pour réaliser des manipulations complexes.

Pour la simulation, deux grandes classes de logiciels sont apparues (cf. paragraphe 2.3). Les premiers sont basés sur les simulateurs macroscopiques, auxquels des champs de forces sont ajoutés. Ils sont utilisés pour représenter les opération effectuées sur les plate-formes de micro nano-manipulation. L'objectif de la simulation est alors l'apprentissage de gestes techniques ou la possibilité de tester différentes stratégies pour réaliser une tâche donnée. Cependant, les résultats sont limités par la précision des champs de forces. Les seconds partent de la description atomique des systèmes, et simulent le comportement global par sommation. Ils sont limités par les temps de calcul importants lorsque la taille des systèmes augmente. Leur domaine d'application est la simulation de structures moléculaires. Ils sont particulièrement utilisés pour l'exploration dans le but de trouver des propriétés particulières, ou pour la conception de nouvelles structures. Ils sont notamment au coeur du processus de fabrication de nouveaux médicaments, lors des phases de tests visant à déterminer les affinités entre différentes molécules.

Les problématiques de la téléopération pour la manipulation d'objets réels ou virtuels sont très similaires et comportent notamment une grande exigence sur la transparence pour transmettre fidèlement des champs de forces complexes, et une stabilité difficile à assurer à cause de la différence d'échelle. Cependant, certains points sont spécifiques à l'objet considéré, comme les contraintes technologiques dans le cas d'objets réels, ou les temps de calcul importants pour les simulations. Trois types de téléopération sont donc définis, selon l'objet, réel ou virtuel, considéré (figure 1.5) :

1. la téléopération **directe** : l'opérateur agit à l'aide de l'interface haptique sur un robot esclave qui manipule l'objet réel. Dans cette thèse, nous nous intéresserons à des objets ayant des tailles comprises entre quelques micromètres et quelques dizaines de micromètres, et à des efforts d'interaction compris entre quelques dixièmes de nanonewton et quelques micronewtons. Pour agir sur de tels



Figure 1.5 - Les trois types de téléopération : directe (l'opérateur manipule des objets réels), virtuelle (l'opérateur manipule des objets virtuels) et augmentée (couplage entre le logiciel de simulation et la scène réelle). Les images de l'environnement sont issues du logiciel de simulation SAMSON et de [Andersen 09].

objets, un système de manipulation robotisé est nécessaire. Les éléments qui le constituent sont détaillés dans la partie 2.2.

- 2. la téléopération **virtuelle** : l'opérateur manipule un objet virtuel dans un environnement également virtuel. Les principales caractéristiques des simulateurs pour des applications aux échelles micro et nanoscopiques sont données dans la partie 2.3.
- 3. la téléopération **augmentée** : elle consiste à combiner les deux solutions précédentes. L'opérateur interagit avec un objet virtuel dans une scène virtuelle qui représente la scène réelle. La simulation est couplée avec la plate-forme de micro-manipulation, afin que les actions de l'utilisateur soient utilisées par la simulation pour manipuler l'objet réel. L'intérêt principal de ce type de téléopération est de fournir à l'utilisateur des indications qui ne sont pas directement disponibles par les mesures pour l'assister lors d'une tâche de manipulation. Un exemple classique est celui de la reconstruction des efforts à l'aide d'images provenant d'un microscope dont la fréquence d'acquisition est trop faible pour qu'elles soient utilisées dans le calcul d'un retour haptique [Vitard 08].

Les tâches réalisées à l'aide de ces systèmes de téléopération se classent en deux catégorie : les applications dont le but est une une meilleure compréhension de l'environnement et des interactions entre objets (pédagogie et exploration), et celles qui induisent une modification des objets ou de l'environnement (découpe d'un objet, indentation d'un substrat, ...). Ces tâches sont distinguées selon leur niveau de complexité.

La pédagogie L'haptique comme outil pédagogique s'est surtout développé par l'arrivée de la réalité virtuelle, et des simulateurs associés. Pour immerger les personnes dans un environnement peu familier et en améliorer leur connaissance, l'haptique est un outil complémentaire aux retours visuels et auditifs. Il est particulièrement important dans le cas des échelles micro et nanoscopiques du fait des efforts non intuitifs entre les objets (forces à distance attractives et répulsives notamment) [Marchi 10].



(a) Indentation d'un substrat de polycarbonate [Li 04]



(b) Dépose sélective de billes de verre par vibration de la poutre [Haliyo 02]



(c) Torsion de nanotubes de carbone multifeuillets [Guthold 00]



(d) Docking moléculaire de la biotine sur le site actif de la streptavidine [Daunay 07a]



L'exploration L'exploration donne des informations sur la topologie d'un système (substrat, objet). Dans le cas d'une simulation moléculaire, l'exemple le plus courant est celui du *docking*, qui consiste à arrimer un ligand dans le site actif d'une protéine (voir figure 1.6(d)). Le choix du site actif est de la plus haute importance pour maximiser les interactions entre le ligand et la protéine, et est une étape clef lors de la conception de médicaments.

L'opération A la différence de l'exploration, l'opération induit une modification du substrat ou de l'objet. Citons notamment l'indentation (figure 1.6(a)), la déformation (étirement, repliement, découpe), et le changement de position ou d'orientation par poussée (figure 1.6(c)).

La manipulation La manipulation d'objets comporte des opérations selon les trois directions de l'espace, comme la saisie-dépose (figure 1.6(b)), ou la modification de la composition d'un objet (ajout ou suppression d'atomes dans le cas d'une molécule virtuelle).

2.2 La plate-forme de micro-manipulation

Pour manipuler un objet réel, notamment en téléopération directe et augmentée, un système robotisé de manipulation est nécessaire (figure 1.7). Dans ce paragraphe, l'ensemble des éléments le constituant sont détaillés, et les problématiques liées aux spécificités des échelles micro et nanoscopiques sont exposées. Il est également possible de se référer à [Sitti 01] et [Régnier 08] pour plus de détails. On ne s'intéressera ici qu'aux équipements compatibles avec des objets ayant des tailles entre quelques micromètres et quelques dizaines de micromètres, et à des efforts d'interaction de quelques dixièmes de nanonewton à quelques micronewtons. A ces échelles, le développement d'éléments robotisés est un champ de recherche ouvert. Seuls les principes les plus couramment utilisés seront mentionnés ici puisque cette thèse ne traite pas de la conception de tels outils, mais utilise les plate-formes disponibles dans notre laboratoire. Bien que présentant des systèmes variés, ce paragraphe est fortement lié à l'architecture de la plate-forme

de l'ISIR, sur laquelle sont réalisées les expériences de téléopération directe présentées dans les chapitres suivants. A travers cet exemple, les problématiques de la micro nano-manipulation sont appréhendées.



Figure 1.7 - Architecture d'une plate-forme de micro-manipulation [Dionnet 05]

2.2.1 Le module de vision

Différents appareils de vision sont actuellement disponibles. Ils diffèrent par la technologie employée et présentent des caractéristiques différentes en termes :

- de l'amplification maximale réalisable, et de la profondeur de champ disponible,
- des contraintes physiques sur l'objet traité (conducteur, ...) et sur l'environnement (air, vide, ...),
- de la taille des surfaces qu'il est possible d'imager, et de la durée de l'opération.

Les paragraphes suivants présentent les caractéristiques des systèmes de vision pour l'infiniment petit.

Le microscope optique Le microscope optique est un instrument utilisé pour obtenir un agrandissement d'une image à l'aide de lentilles et de miroirs. Assez simple sur le principe, il souffre cependant de plusieurs limitations :

- l'échantillon à agrandir doit être fin, pour être traversé par les rayons lumineux,
- la résolution, qui est, selon la loi de Rayleigh, inférieure à la moitié de la longueur d'onde d'illumination, est de l'ordre du dixième de micromètre,
- le champ de vision diminue lorsque la résolution de l'objectif augmente.

Le microscope à sonde locale Les microscopes à sonde locale (ou *Scanning Probe Microscope* : SPM) se composent d'une sonde, généralement également utilisée comme outil de manipulation, et d'un système de mesure des efforts qui s'appliquent sur cette sonde. Cette dernière, placée proche ou au contact du substrat, interagit avec ce dernier de différentes manières. De ces types d'interactions découlent deux microscopes, à effet tunnel, et à force atomique.

- Le microscope à effet tunnel (ou *Scanning Tunneling Microscope* : STM) est basé sur le principe du courant à effet tunnel créé entre la pointe de la sonde maintenue proche de la surface à analyser et cette dernière. Il est donc nécessaire que l'échantillon soit conducteur, ou semi conducteur. Sa résolution est de l'ordre du dixième de nanomètre.
- Le microscope à force atomique (ou Atomic Force Microscope : AFM) utilise les interactions interatomiques (notamment les forces de van der Waals) pour obtenir une image de la surface (figures 1.8(a) et 1.8(b)). La résolution de ce microscope est limitée par le bruit des appareils de mesure, composés d'un laser et d'une photodiode, et par le bruit thermique de la poutre. Le niveau de détails qu'il est possible d'obtenir à l'aide de ce système d'imagerie dépend également beaucoup de la taille de l'extrémité de la pointe de la sonde.

Le désavantage majeur de ces microscopes est l'impossibilité d'obtenir des images pendant la manipulation puisque le même outil est utilisé pour ces deux opérations.



(a) Reconstruction 2D de nanoparticules d'oxyde de fer de 300 à 800 nm de diamètre à partir de mesures AFM



(c) Pointe AFM imagée à partir d'un SEM, avec un temps d'acquisition de 90 ms



(b) Reconstruction 3D de nanoparticules d'oxyde de fer de 300 à 800 nm de diamètre à partir de mesures AFM



(d) Pointe AFM imagée à partir d'un SEM, avec un temps d'acquisition de 40 s



Le microscope électronique à balayage Le Microscope Electronique à Balayage (MEB), ou Scanning Electron Microscope (SEM), est basé sur le principe de l'interaction entre la matière et les électrons. Lorsqu'il est frappé par le faisceau d'électrons, l'échantillon réémet des particules, qui, une fois analysées, permettent de reconstruire sa surface. La résolution d'un tel microscope est de l'ordre du nanomètre. Cependant, cette technique impose de travailler sous vide, et n'est pas utilisable sur les échantillons pouvant être endommagés par le faisceau d'électrons (notamment des échantillons biologiques). De plus, il n'est pas possible d'obtenir des images en temps réel, et des temps d'acquisition assez longs sont nécessaires pour obtenir des images de bonne qualité (figures 1.8(c) et 1.8(d)).

Les instruments existants fournissent des images de différentes résolutions, avec plus ou moins de contraintes concernant l'environnement de travail et les caractéristiques de l'échantillon. Cependant, il n'est actuellement pas possible d'imager une surface avec une résolution de l'ordre du nanomètre en temps réel, tout en ayant la possibilité de réaliser des manipulations simultanément. Ce manque de retour visuel est l'un des problèmes majeurs de la manipulation aux échelles micro et nanoscopiques et doit être compensé par d'autres sources d'information, notamment le retour haptique, pour envisager des manipulations complexes.

2.2.2 Le bloc de déplacement

Le bloc de déplacement est caractérisé par plusieurs paramètres, notamment sa précision, sa course, ses degrés de liberté et son temps de réponse. Différents principes physiques sont utilisés, et les principaux actionneurs sont [Régnier 08] :

- les micro-actionneurs thermiques. Ils exploitent la déformation des matériaux lors de la modification de leur température. Bien que les constantes de temps de ces systèmes, notamment celle de refroidissement, soient diminuées par la réduction d'échelle, ils restent relativement lents.
- les micro-actionneurs en alliage à mémoire de forme. Les matériaux à mémoire de forme sont une classe de matériaux cristallins qui après déformation permanente à basse température retrouvent leur forme initiale par chauffage. C'est lors d'un retour contrarié par chauffage que ces matériaux produisent un travail mécanique. Comme pour les actionneurs thermiques, les constantes de temps de ces systèmes sont importantes.
- les micro-actionneurs électrostatiques. Le principe de ces actionneurs repose sur la loi de Coulomb : un travail mécanique est créé entre deux corps chargés électriquement. Le mouvement est commandé par la différence de potentiel entre les deux corps. A l'échelle macroscopique, ce phénomène demande des tensions trop importantes pour être envisageable. C'est grâce à la réduction d'échelle qu'il est intéressant. Cependant, la structure de tels actionneurs est complexes, et la charge qu'ils déplacent est limitée. Leur course est également limitée par leur structure, généralement basée sur des peignes interdigités.
- les micro-actionneurs piézoélectriques. Le principe de base est l'apparition d'une polarisation du matériau sous l'effet d'une contrainte mécanique, et inversement. Les céramiques PZT sont parmi les matériaux les plus employés. Leur principaux inconvénients sont l'hystérésis, la dérive lente, et la sensibilité aux conditions environnementales (température, humidité) [Rakotondrabe 09]. Cependant, leur constante de temps très faible et leur structure relativement simple en font des systèmes très usités, et commercialement développés. Les actionneurs commerciaux de la plateforme de l'ISIR sont basés sur ce principe.

Pour obtenir une précision suffisante (i.e. 10 à 100 fois supérieure à la taille de l'objet manipulé) et un espace de travail important, il est courant d'utiliser plusieurs modules, l'un ayant une course importante et l'autre possédant la précision demandée.

2.2.3 Le système de mesure des efforts

Pour mesurer les efforts, la méthode la plus fréquemment employée est de mesurer les déformations d'une sonde, généralement utilisée également comme outil de manipulation (voir paragraphe 2.2.4). A partir des lois de comportement de cette sonde et des mesures effectuées, les efforts appliqués sont calculés. Les deux problèmes qui se posent sont donc la mesure des déformations, et la modélisation de la sonde.



 (a) Mesure des déformations par un capteur intégré (b) Mesure des déformations par un capteur déporté [Dionnet 05]
 [Xie 08b]

Figure 1.9 - Capteurs mesurant les déformations de la sonde

Mesure des déformations Diverses méthodes existent pour mesurer les déformations induites, soit par des capteurs directement intégrés à la sonde, soit par des moyens déportés :

- mesure directe : les déformations de la sonde sont mesurées par des capteurs intégrés situés à sa base (voir figure 1.9(a)). Plusieurs principes sont utilisés, notamment des jauges de contraintes résistives ou la variation de capacités. Des montages complexes comme des ponts de Wheatstone ou des ponts de Sauty sont nécessaires pour traiter les signaux. L'avantage majeur de cette technique est le faible encombrement du système de mesure des efforts. Cependant, la sonde utilisée doit être suffisamment raide pour que les déformations soient transmises jusqu'à son extrémité. La résolution des forces mesurées est donc limitée au micronewton.
- mesure indirecte : la déformation de la sonde est mesurée par une caméra, ou un laser dont le rayon réfléchi sur l'extrémité de la sonde est capté par une photodiode (voir figure 1.9(b)). Ce principe sera étudié plus en détails par la suite. Des sondes de raideur plus faible que dans le cas de mesures indirectes sont utilisables. C'est donc ce principe qui est retenu dans cette thèse.

Dans les deux cas, la résolution des efforts obtenus est également limitée par le bruit des signaux.

Lois de comportement de la sonde Les sondes utilisées sont généralement des poutres, qui servent également d'outil pour la manipulation. Les modèles sont donc issus de la théorie des poutres, pour des poutres encastrées libres [Sitti 04]. Les déformations mesurées sont la flexion et l'angle de rotation, liés aux forces par les raideurs normales ou de torsion. Ces dernières sont calibrées expérimentalement. Des techniques variées ont été développées, et cette problématique fait toujours l'objet de nombreux travaux [Xie 08a]. La reconstruction des efforts à partir de la mesure des déformations sera traitée plus en détails dans la partie 1.2 du chapitre 2.

Ces techniques de mesure des efforts ne rendent pas toute la dynamique des phénomènes d'interaction. La sonde joue un rôle de filtre, et la gamme des efforts mesurés dépend de sa raideur. Les définitions de la transparence du couplage haptique données par les équations (1.2) et (1.3) supposent que les efforts sont mesurés fidèlement, et ne prennent pas en compte ces aspects.

Un exemple de courbe d'effort obtenue par ces capteurs est le cycle d'approche-retrait (figure 1.10). La sonde est approchée du substrat (A-B), mise en contact (B-D) puis éloignée du substrat (E). Bien que très simple, cette expérience met en évidence les phénomènes caractéristiques de l'échelle nanoscopique. Des efforts à la fois attractifs et répulsifs sont mesurés (la force est calculée à partir de la mesure de la flexion de la sonde et de la connaissance de la raideur normale de la poutre), et deux phénomènes discontinus apparaissent :

- B-C : la sonde est attirée vers le substrat (saut au contact, ou *snap-in*),
- D-E : la sonde est relâchée brutalement (*pull-off*).

Ce cycle d'approche-retrait est une des expériences couramment réalisée pour tester et comparer les systèmes de téléopération. Elle sera détaillée dans le chapitre 2.



Figure 1.10 - Courbe d'approche-retrait d'une poutre AFM sur un substrat [Millet 09a]

2.2.4 L'outil de manipulation

Deux types de manipulations sont possibles : avec ou sans contact. La manipulation sans contact est réalisée principalement en milieu aqueux, sans mesure d'effort directe (les forces sont estimées indirectement par vision). Elle s'adresse principalement à des objets biologiques (cellules, ADN). La téléopération avec retour d'effort sans contact est traitée notamment dans [Pacoret 09]. Dans la suite de ce document, seule la manipulation avec contact sera étudiée. C'est en effet la technique la plus répandue actuellement pour manipuler et caractériser des objets en milieu ambient. La téléopération pourrait donc apporter à ces systèmes largement développés des possiblités nouvelles. Les outils les plus employés sont décrits au cours des paragraphes suivants.

Les poutres Comme décrit au paragraphe 2.2.1 portant sur les microscopes à sonde locale, elles sont également utilisées pour imager les surfaces. Elles peuvent être ou non munies d'une pointe à leur extrémité (figures 1.11(a), 1.11(b)). Leur raideur est comprise entre quelques centièmes de newton par mètre, et plusieurs dizaines de newtons par mètre. Les poutres sans pointe sont utilisées notamment pour faire rouler des objets. Celles avec pointes sont indiquées entre autres pour les opérations d'indentation, de poussée, de découpe et de caractérisation.

Les poutres utilisées comme outil de manipulation sont généralement munies d'un système de mesure des efforts (voir paragraphe 2.2.3). Les forces appliquées sur les objets sont donc contrôlées.

Les pinces D'autres outils ont également été développés, notamment des pinces. Le problème majeur de ces manipulateurs est la mesure des efforts de serrage [Agnus 09]. Les pinces manipulant des objets inférieurs à quelques dizaines de micromètres en sont dépourvues (figure 1.11(c)). Celles qui agissent sur des objets de plus de 100 μ m en possèdent généralement une (figure 1.11(d)). La technique employée est analogue à la mesure des déformations des poutres (voir paragraphe 2.2.3). Cependant, des problèmes de conception se posent : pour des raisons de manque d'espace, la mesure par laser est peu employée. C'est donc la technique piézorésistive qui est le plus souvent retenue, avec une résolution limitée au micronewton.



Figure 1.11 - Outils de manipulation

Les poutres, par leur mesure de l'effort d'interaction entre l'outil et l'objet, sont largement utilisées à cette échelle. A l'aide de stratégies adaptées, des manipulations complexes sont réalisables avec cet outil. De plus, elles se prêtent à la manipulation des objets considérés dans cette thèse, dont la taille est de l'ordre du micromètre ou de la dizaine de micromètres. Les systèmes de mesure des efforts sont également compatibles, puisque les forces s'appliquant sur ces objets sont comprises entre quelques dixièmes et quelques centaines de nanonewtons. Ce document sera donc centré autour des poutres pour la téléopération directe.

Compte tenu des masses faibles (de l'ordre de 10^{-14} kg), les accélérations des objets sont de l'ordre de $10 \cdot 10^3$ m \cdot s⁻². Cette différence de comportement entre les échelles macro et nanoscopiques est à l'origine de nombreux problèmes de manipulation, et nécessite de mettre en place des stratégies spécifiques. Les systèmes de téléopération developpés devront en tenir compte.

2.3 Le logiciel de simulation

L'outil de simulation est utilisé dans le cadre de la téléopération augmentée ou virtuelle. Deux approches sont utilisées. La première consiste à adapter les modèles classiques pour inclure les efforts d'interaction spécifiques aux échelles micro et nanoscopiques. La seconde part des descriptions atomiques des objets, résoud les équations sur chacun des atomes, et par sommation, remonte au comportement global. Ces deux approches sont détaillées et comparées dans les paragraphes suivants.

Simulation globale La méthode globale est basée sur les outils de simulation classiques et s'intéresse aux différents corps présents dans la scène. Des champs de forces spécifiques sont ajoutés pour prendre en comptes les interactions micro et nanoscopiques (figure 1.12(a)). Pour les forces à distance, les plus couramment considérées sont les interactions inter-atomiques (van der Waals), les forces capillaires et les forces électrostatiques. Pour les forces de contact, plusieurs modèles ont été développés. La théorie de Hertz considère un contact élastique sans effet d'adhésion. Elle est donc très simplificatrice, et reflète mal les particularités des échelles micro et nanoscopiques. Pour compléter ce modèle, deux autres théories ont été proposées. La première, la théorie JKR [Johnson 71], prend en compte le travail d'adhésion entre les deux corps. Cependant, une aberration théorique existe : elle prévoit une tension infinie au bord de la zone de contact. La seconde, la théorie DMT [Derjaguin 75], se situe entre le modèle de Hertz et la théorie JKR, et évite ainsi l'anomalie de la tension infinie présente dans cette dernière. Ces deux derniers modèles ont été ensuite unifiés par la théorie de Maugis [Maugis 92], avec l'introduction d'un paramètre d'élasticité.

La précision des résultats obtenus dépend des forces prises en compte lors de la simulation. Cependant, elle est dans tous les cas limitée par les incertitudes des modèles à ces échelles. La modélisation est actuellement à l'état de recherche [Alvo 10], et certains comportements observables expérimentalement ne sont pas prédits. La très grande sensibilité des systèmes aux conditions environnementales rend difficile cette tâche.



(a) Simulation de l'interaction entre une pointe AFM et (b) Simulation moléculaire par la méthode un substrat par la méthode continue [Kim 06] discrète [Hamdi 08]

Figure 1.12 - Simulateurs à l'échelle nanoscopique

Simulation discrète La simulation discrète consiste à repartir de la description atomique des objets (figure 1.12(b)). La manière la plus précise pour représenter les interactions entre les atomes consiste à utiliser la mécanique quantique, par l'équation de Schrödinger. Celle-ci décrit les atomes constitués d'une seule particule située dans un certain champ de forces. Cependant, le temps de calcul nécessaire pour cette méthode la rend inadaptée pour des applications temps réel. La communauté scientifique s'est donc tournée vers des solutions alliant la précision de la mécanique quantique, avec les simplifications des méthodes empiriques. Ces méthodes, appelées méthodes hybrides, négligent certains termes (comme des interactions à longue distance par exemple), et utilisent des données ajustées sur des résultats expérimentaux afin de simplifier les calculs. Cette approximation n'étant généralement pas assez importante pour réduire notablement les temps de calcul, la mécanique quantique est abandonnée pour les applications temps réel, au profit de la mécanique classique newtonienne. Elle postule que la molécule est représentée par un ensemble d'atomes ponctuels, de masses et de charges électriques définies, reliés entre eux par des liaisons covalentes déformables. Les paramètres des champs de forces utilisés sont issus de mesures expérimentales.

Par sommation, des interactions intermoléculaires sont obtenues. La simulation de systèmes de taille plus importante, notamment de poutres AFM et d'objets simples (billes, nanotubes de carbone), sont envisageables. Cependant, actuellement les temps de calcul très importants limitent la taille des systèmes simulés à quelques molécules.
Certains simulateurs ne donnent accès qu'à l'énergie du système. La simulation de la scène est réalisée en trouvant la conformation d'énergie minimum par des algorithmes de minimisation. Pour envisager un retour haptique, il est alors nécessaire de calculer les efforts d'interaction correspondants [Daunay 07b]. Le couplage entre un simulateur moléculaire et un bras à retour d'effort est simplifié lorsque la résolution numérique est basée sur le principe fondamental de la dynamique. Les efforts d'interaction sont alors directement disponibles.

Conclusion Avec la simulation globale, des systèmes tels que des poutres AFM manipulant des objets sont simulés. Cependant, la précision des résultats est limitée par les modèles employés. Des travaux de recherche sont en cours pour affiner les champs de forces utilisés. Les téléopérations basées sur l'approche globale sont donc pour le moment limitées par la précision des outils de simulation.

L'approche discrète souffre quant à elle de temps de simulation généralement assez longs du fait de la complexité des scènes. Elle n'est actuellement pas envisageable pour des systèmes aussi complexes que des poutres AFM. Par contre, elle prend tout son sens à l'échelle moléculaire, avec de nombreuses applications notamment en pharmacologie. C'est donc cette approche qui sera considérée au cours de cette thèse. Pour ces systèmes, les efforts simulés sont de l'ordre du nanonewton. Comme précédemment, les faibles masses des objets conduisent à des accélérations importantes. De plus, dans le cadre de la simulation moléculaire, le pas d'intégration doit être réduit (de l'ordre de la femtoseconde) pour que les utilisateurs puissent appréhender les phénomènes mis en jeu et pour préserver la stabilité.

2.4 Changement d'échelle et téléopération

Comme cela a été mis en évidence dans les paragraphes précédents, les forces et accélérations mises en jeu sont d'un ordre de grandeur totalement différent de celles des échelles macroscopiques. Plusieurs conséquences sur le système de téléopération en découlent :

- comme les dimensions (resp. efforts) caractéristiques de l'interface haptique et ceux des objets manipulés ne sont pas du même ordre de grandeur, des coefficients homothétiques doivent être introduits dans le schéma de commande. La figure 1.13 illustre cette différence d'échelle dans le cas d'une téléopération à l'échelle micro ou nanoscopique. Dans toute la suite, α_f correspond au coefficient homothétique en effort, et α_d à celui en déplacement.
- les définitions de la transparence données par les équations (1.2) et (1.3) sont modifiées par l'introduction de ces facteurs d'échelle de la manière suivante :

$$\frac{F_{op}}{V_h} = \frac{-\alpha_f F_e}{\alpha_d V_e} \iff Z_{op} = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e \tag{1.12}$$

et :

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0 & \alpha_f \\ -\frac{1}{\alpha_d} & 0 \end{bmatrix}$$
(1.13)

- les critères de stabilité restent inchangés. Cependant, aux échelles micro et nanoscopiques, les forces attractives (*snap-in* et *pull-off*) ne sont pas négligeables. Les observateurs de passivité classiques ne sont pas adaptés car ils suppriment ces efforts en ajoutant de l'amortissement au système.
- la forte accélération et la prépondérance des forces surfaciques sur les forces volumiques ([Fearing 95]) nécessitent le développement d'outils et de stratégies de manipulation adaptés [Menciassi 04]. Les systèmes de téléopération devront prendre en compte ces contraintes.

Cette thèse s'inscrit dans ce domaine d'application. L'ensemble de ces remarques devront donc être considérées lors de l'élaboration des systèmes de téléopération.



Figure 1.13 - Changement d'échelle entre l'utilisateur et l'environnement.

3 Les systèmes de téléopération existants

De nombreux systèmes de téléopération pour des applications en nanosciences ont été développés. Ils couvrent les trois domaines évoqués précédemment : la téléopération directe, la téléopération virtuelle et la téléopération augmentée (voir figure 1.5).

3.1 Les travaux en téléopération directe

L'utilisation de la téléopération pour des applications à l'échelle micro et nanoscopique a commencée en 1990. Y. Hatamura et H. Morishita souhaitaient un système pouvant reproduire les mouvements de l'opérateur après une mise à l'échelle, et étant capable de rendre de manière amplifiée les paramètres clefs du nanomonde (température, sons, odeurs, images, efforts) [Hatamura 90]. De ces variables, ils n'en conserveront que deux pour des raisons technologiques : les efforts et l'image. Ces paramètres sont à la base de tous les systèmes de téléopération actuels. Les forces exercées sur l'objets sont mesurées par leur interface, le *Nanorobot System*, mais ces dernières sont transmises par un indicateur d'effort visuel, et non haptiquement.

Le premier système de téléopération avec retour haptique utilise l'interface *Magic Wrist*, basée sur le principe de la lévitation magnétique [Hollis 90]. Ce bras maître à six degrés de liberté, couplé à un microscope à effet tunnel, déplace la pointe de la poutre dans le plan du substrat. Le mouvement vertical de l'interface est déterminé par la hauteur de la poutre, qui suit le relief de l'échantillon. Les utilisateurs explorent ainsi des films pulvérisés d'or et des substrats de graphite, mais les bruits d'origine électronique et les hystérésis dégradent la fidélité du ressenti.

Le premier couplage entre une interface haptique et une poutre AFM est réalisé par M. Sitti et H. Hashimoto [Sitti 98a]. Leur interface haptique possède un degré de liberté et retourne des efforts selon l'axe vertical (figure 1.14). La poutre est déplacée dans le plan du substrat à l'aide d'une souris. Des explorations haptiques sont réalisées sur différents échantillons [Sitti 03]. Par la mise en contact entre la poutre et un substrat de silicium, les utilisateurs ressentent les forces répulsives, ainsi que les forces attractives lors du retrait de la pointe, mais le *snap-in* n'est pas transmis. Une deuxième expérience consiste à ressentir des aspérités de 480 nm de haut, et 3 μ m de large d'une grille de silicium.

Le couplage entre une interface haptique et une pointe AFM est également à l'origine de manipulations simples à l'échelle microscopique effectuées au Laboratoire de Robotique de Paris (devenu par la suite l'ISIR) [Venture 06]. Elles consistent en des saisies de microsphères par adhésion, et dépose par roulement. Seuls les efforts verticaux sont transmis à l'opérateur à l'aide d'une interface haptique composée d'un bouton rotatif, *Brigit*. Cependant, les efforts d'interaction poutre/objet ne sont pas mesurés notamment lors de la phase de transport, et l'utilisation d'un capteur piézorésistif limite aussi la mesure de force au micronewton.



(a) Interface haptique [Sitti 98b]



(b) Interface haptique, principe [Sitti 03]

Figure 1.14 - Système de nanomanipulation, Institute of Industrial Sciences, Tokyo.

A l'Université Libre de Belgique, les limitations de ces systèmes sont analysées [Letier 03]. Deux points particuliers sont relevés : les retards de communication induits par la mesure d'effort et l'acquisition des données introduisent de fortes vibrations dans le retour haptique transmis par leur interface (figure 1.15(a)), et le système de mesure poutre-laser ne fournit que la mesure de l'effort vertical de manière immédiate. Ces deux points font encore actuellement l'objet de nombreux travaux.



(a) Université Libre de Belgique [Le- (b) Université d'Oldenbourg, HIMiC [Fatier 03] tikow 031

Figure 1.15 - Interfaces à retour d'effort

Le premier problème soulevé par l'équipe de l'Université Libre de Belgique, la limitation des vibrations et des instabilités du retour haptique, passe par une étude des schémas de couplage, et de l'influence des gains homothétiques [Sitti 98a], [Sitti 03].

Les critères développés pour les systèmes macroscopiques présentés au cours de ce chapitre sont largement utilisés pour vérifier la stabilité des couplages. Le critère de Llewelyn est par exemple utilisé dans [Venture 06].

Cependant, ces outils ne sont parfois pas adaptés aux spécificités des échelles micro et nanoscopiques. C. Onal et M. Sitti proposent donc un contrôleur de passivité adapté, d'abord en simulation [Kim 06], puis sur un système de téléopération directe [Onal 09]. Un soin particulier est pris pour ne pas supprimer les forces attractives caractéristiques de cette échelle. Différentes opérations d'approche-retrait valident le couplage haptique.

A Bourges, le couplage entre une interface haptique à un degré de liberté et une micropince piezoélectrique de type MOC du Laboratoire d'Automatique de Besançon est étudié. Ces travaux prennent en compte la spécificité du micro monde, les erreurs de modélisation ainsi que la présence d'éventuels retards de communication (cas d'applications distantes). Deux schéma de commande sont proposés, basés sur les variables d'ondes [Boukhnifer 06] ou la méthode $H\infty$ [Boukhnifer 07]. Bien qu'un énorme travail ait été fait tant au niveau théorique que sur des simulations, peu de résultats expérimentaux d'opérations de micro manipulation sont présentés. De plus, bien que prise en compte pour la synthèse des correcteurs,

l'influence du changement d'échelle sur le système de téléopération n'est pas mise en évidence.

Le second problème souligné, la reconstruction d'efforts à partir de la mesure AFM, est traité notamment par l'équipe de N. Xi [Zhang 05]. Les déformations de la poutre étant mesurées par un laser dont le signal est réfléchi sur une photodiode, seules deux informations sont disponibles : la déflexion verticale (flexion), et la rotation selon l'axe de la poutre (torsion). Pour améliorer le retour haptique de leur système de téléopération, N. Xi et son équipe étudient la relation entre la mesure de la photodiode et les forces réelles s'appliquant sur la pointe selon les trois axes, en prenant en compte la direction du déplacement de la poutre [Liu 06]. Cette méthode paraît cependant difficile à mettre en œuvre dans la pratique de par la sensibilité des expressions numériques aux conditions de manipulation. Peu de résultats mettent en évidence les forces haptiques résultantes.

Pour reconstruire les efforts C. Onal et M. Sitti utilisent la connaissance de la topologie du substrat et un modèle de friction [Onal 10]. Les paramètres du modèle sont modifiables en ligne. Des validations expérimentales d'exploration haptiques sont présentées et montrent des résultats prometteurs. Cependant, lors de manipulations d'objets, les résultats de ces études ne sont pas utilisables pour reconstruire, par exemple, la force de préhension entre deux poutres AFM.

	Interface	Système	Application	Particularité
[Hatamura 90]	Maison :	Aiguille	Opération (inden-	Pas de retour haptique
	Nanorobot		tation sur un sub-	
	System		strat d'aluminium)	
[Hollis 90]	Maison :	STM	Exploration	Retour haptique limité par le
	Magic			bruits et l'hystérésis
	Wrist			
[Venture 06]	Maison :	Poutre	Manipulation (sai-	Utilisation du critère de Llewe-
	Brigit	piezoré-	sie : adhésion, dé-	lyn pour vérifier la stabilité du
		sistive	pose : roulement)	couplage, efforts limités au mi-
			de grains de pollen	cronewton, pas de mesure des ef-
			$(rayon : 10 \ \mu m)$	forts d'interaction $poutre/objet$
[Letier 03]	Maison	AFM	Exploration	Mise en évidence des problèmes
				liés au rendu des forces
[Sitti 98a],	Maison	AFM	Exploration	Description des facteurs homo-
[Sitti 03]	Maison		Exploration	thétiques nécessaires au couplage
[Ona] 09]	Omeaa	AFM	Exploration opéra-	Contrôleur de passivité
	e mega		tion (indentation)	
Boukhnifer 06],			D 1 (1)	
Boukhnifer 07	Maison	Pince	Peu de resultats ex-	Contrôleurs par variables d'onde
			périmentaux	ou par la méthode $H\infty$
[Znang Ub],	Phantom	AFM	Exploration, opéra-	Découplage des efforts
			tion (indentation)	
[Onal 10]	Omega	AFM	Exploration	Reconstruction des efforts 3D
[Fatikow 03],	Maison	Pince	Peu de résultats ev-	Bendu des forces basé sur des
[Shirinov 04]	HIMiC	1 11100	nérimentaux	modèles prédéfinis
			pormentaux	moucies predenins

Tableau 1.1 - Principaux travaux en téléopération directe, par ordre d'apparition dans le texte.

Plutôt que de reconstruire fidèlement les efforts appliqués sur l'outil, il peut être intéressant de considérer d'autres retours haptiques pour des opérations de manipulation. A l'université d'Oldenbourg, les informations issues d'une micro pince munie d'un capteur d'effort piezorésistif (figure 1.11(d)) sont traitées. Les forces haptiques sont calculées à l'aide de modèles prédéfinis [Shirinov 04], puis renvoyées par l'intermédiaire de leur interface haptique, la *HIMiC*, *Haptic Interface for a Microrobot Cell* (figure 1.15(b)). Différentes configurations sont implémentées, notamment le modèle "environnement libre" (pas de force mesurée, force haptique retournée nulle. Le modèle "mur" est activé lorsqu'un effort est mesuré dans une direction. L'interface haptique renvoie alors des efforts correspondant au modèle, dont les caractéristiques sont notamment la raideur, l'amortissement et le frottement. Cette approche rend le couplage stable même en présence de retards ou de grandes variations de forces. De plus, elle ouvre la possibilité d'utiliser plusieurs capteurs pour recréer un modèle complet de l'environnement. Cependant, chaque modèle doit être implémenté séparément. Travailler sur la définition des forces haptiques est une idée intéressante pour des manipulations. Cependant, peu de validations expérimentales de ces travaux sont détaillées.

L'ensemble des travaux en téléopération directe est résumé dans le tableau 1.1. Il apparaît que peu de travaux traitent de la mise en évidence de la spécificité du couplage haptique liée au changement d'échelle. L'exploitation des signaux de la photodiode pour un retour d'effort tridimensionnel n'est abordée que dans le cas d'explorations haptiques. Son adaptation aux manipulations passe par la modélisation des préhenseurs, des outils, et de l'environnement. L'utilisation de guides virtuels est proposée, mais n'est pas développée.

3.2 Les travaux en téléopération virtuelle

En téléopération virtuelle, deux types de travaux sont présentés, basés sur les deux grandes classes de simulateurs décrits au paragraphe 2.3. Les premiers ont pour but de représenter les tâches décrites en téléopération directe. Les seconds se placent à un niveau inférieur pour l'ordre de grandeur des objets considérés, et traitent des interactions moléculaires.

3.2.1 Téléopérations d'objets micro et nanoscopiques

Les environnements virtuels simulant la manipulation à l'aide d'une poutre AFM ont des buts multiples, le principal étant de s'affranchir des problèmes de répétabilité des systèmes réels à cette échelle. Ils sont donc principalement utilisés comme plate-forme de tests pour des algorithmes ou des stratégies de manipulation. Les applications dépendent fortement des environnements virtuels utilisés, notamment de la variété des systèmes qu'il est possible de simuler, et de la précision des modèles.



Two-Port Network Model

Figure 1.16 - Couplage haptique, Université de Pittsburg [Kim 06]

Le premier système a été proposé à l'EPFL. L'utilisateur explore un substrat préalablement numérisé à l'aide d'une poutre AFM. Seule sa géométrie est perceptible par l'utilisateur. Le but de ces travaux est d'aboutir par la suite à un système de téléopération augmentée, où des nanotubes de carbone pourraient être manipulés à travers le module de réalité virtuelle [Grange 01].

L'équipe de M. Sitti a ensuite développé un environnement virtuel composé d'un substrat et d'une poutre AFM manipulée par une interface haptique à 3 degrés de liberté de type Omega (figure 1.16) pour des

opérations de mise en contact de la poutre avec le substrat, et d'indentation. Les efforts d'interaction entre l'outil et l'échantillon sont calculés à partir d'un modèle de Maugis-Dugdale [Kim 06]. L'intérêt d'un tel environnement virtuel pour l'apprentissage est souligné, mais n'est pas exploité. Par contre, des stratégies de couplage haptique sont testées. En particulier, un contrôleur de passivité basé sur une mesure de l'énergie selon le modèle de ceux de B. Hannaford [Hannaford 02]est implémenté. Le schéma de couplage testé a été par la suite utilisé en téléopération directe, avec de bons résultats, sur des opérations de mise en contact de la poutre avec le substrat, et d'indentation.

L'apport de l'haptique pour la pédagogie aux échelles micro et nanoscopiques est étudié par G. Millet [Millet 08] sur un cycle d'approche-retrait. Plusieurs aides sont considérées : le retour haptique et une analogie visuelle d'un aiment attaché à un ressort (figure 1.17(a)). Les tests effectués sur 45 étudiants ne possédant pas de connaissance en nanophysique suggèrent qu'une combinaison des deux aides est efficace.



(a) Téléopération virtuelle et analogie visuelle pour (b) Téléopération virtuelle de saisie-dépose de microla pédagogie [Millet 08] billes à l'aide d'une poutre AFM [Millet 09a]



Ces simulateurs ont été développés uniquement pour des opérations d'indentation sur des substrats plats. Un environnement plus complexe est proposé par [Vogl 06]. Le substrat est numérisé à partir d'un échantillon réel, puis modélisé à l'aide de splines. Un algorithme de détection de collisions est utilisé pour calculer les efforts entre la pointe AFM virtuelle et le substrat. Différents paramètres sont modifiables : le module de Young qui représente la raideur du substrat, l'énergie de surface qui détermine le caractère adhésif de la surface, et son coefficient de Poisson. Mais là encore, seules des explorations ou des opérations d'indentation sont possibles.

Les premières stratégies pour des opérations sur des objets virtuels sont testées par G. Millet [Millet 09a]. Des téléopérations de saisie et de dépose de billes par adhésion et par roulement sont considérées. Différent retours d'effort ayant pour but de transmettre fidèlement à l'utilisateur les interactions entre la pour et l'objet, ou d'apporter une assistance lors de la manipulation à l'aide de métaphores haptiques, sont testés (figure 1.17(b)).

Les travaux en téléopération virtuelle à l'aide de poutres AFM sont résumés dans le tableau 1.2. Grâce à des simulateurs simples, les couplages haptiques sont évalués en termes de schémas de commande et d'apport pour la pédagogie. Cependant les simulateurs actuels sont très spécifiques, et les applications possibles sont limitées. Quelques stratégies sont étudiées, mais les manipulations complexes ne sont pas possibles.

3.2.2 Téléopérations moléculaires

L'intérêt de l'haptique pour interagir avec des simulateurs moléculaires a été montré dès 1990 pour des applications de *docking* avec le projet *GROPE* (voir figure 1.18(a)) [Ouh-Young 88], [Brooks Jr. 90]. De très nombreux systèmes de téléopération ont été développés par la suite, mais les applications restent

	Interface	Système	Application	Particularité
[Grange 01]	Delta	AFM	Exploration	Exploration d'un substrat préa-
				lablement scanné
[Kim 06]	Omega	AFM	Exploration, opéra-	Test de schémas de commande
			tion (indentation)	
[Millet 08]	Virtuose 3D	AFM	Exploration	Evaluation de l'haptique pour la
				pédagogie
[Vogl 06]	Phantom	AFM	Exploration, opéra-	Retour d'effort 3D par la
			tion (indentation)	connaissance de la géométrie du
				substrat
[Millet 09a]	Omega	AFM	Manipulation	Evaluation d'assistances hap-
			de saisie-dépose	tiques
			par adhésion et	
			roulement	

Tableau 1.2 -	Principaux	travaux e	en téléopération	$virtuelle \ pour$	des	${\it manipulations}$	par	AFM,	par	ordre
d'apparition dar	ns le texte.									

limitées par la complexité des modèles.

Un grand nombre de simulateurs moléculaires ont été développés à des fins pédagogiques [Sankaranarayanan 03], [Murayama 07], [Persson 07], [Sourina 08]. Ces simulateurs sont assez simples et cherchent à mettre en avant les efforts d'interaction prépondérants, notamment les forces de van der Waals, et les forces électrostatiques (figure 1.18(b)). L'usage de l'haptique améliore la compréhension des étudiants sur les forces moléculaires. Cependant, le bénéfice de tels simulateurs est limité par la précision des simulations [Persson 07].



(a) Système de téléopération moléculaire, projet GROPE [Brooks Jr. 90]



(b) Simulation des interactions entre deux molécules d'eau à but éducatif [Murayama 07]



(c) Grille précalculée pour limiter les temps de calculs [Wollacott 07]

Figure 1.18 - Systèmes de téléopération moléculaire

Des simulateurs plus complets, destinés notamment aux biologistes et aux pharmacologues, ont été développés. Cependant, d'importants problèmes de stabilité des systèmes de téléopération associés apparaissent, dus notamment aux temps de calculs importants et à la différence d'échelle. Un compromis doit être trouvé entre la précision de la simulation et la stabilité du système de téléopération. Plusieurs approches sont actuellement utilisées pour garantir un système stable : la réduction des temps de simulation, la limitation des coefficients homothétiques, et l'introduction d'amortissement :

- réduction des temps de simulation : les solutions les plus couramment utilisées sont de précalculer des grilles de force tridimensionnelles (figure 1.18(c)), et/ou de rigidifier les molécules [Lai-Yuen 06], [Nagata 02], [Wollacott 07]. Dans ce dernier cas, la précision de la simulation est alors réduite car la reconfiguration moléculaire n'est pas considérée. Des modèles simplifiés, comme des ressorts, sont également utilisés pour repousser deux atomes proches [Lee 04]. Cette modification du champ de forces élimine les instabilités dues aux gradients de forces importants, mais détériore la précision du système.
- limitation des coefficients homothétiques : un compromis entre stabilité, qualité du retour haptique et facilité de manipulation doit être trouvé [Wollacott 07]. Si l'amplification des efforts est trop faible, l'utilisateur ne bénéficiera pas du retour haptique. Si elle est trop forte, des instabilités apparaissent, et les efforts supérieurs à la limite admissible de l'interface haptique seront tronqués. La qualité du retour d'effort sera alors détériorée. Le facteur d'échelle en déplacement doit également être considéré car des mouvements trop faibles nuisent à la facilité de manipulation. S'ils sont trop importants, ils génèrent des instabilités. Une solution à ce dernier problème consiste à combiner des modes de contrôle en position et en vitesse [Subasi 08].
- introduction d'amortissement : pour garantir la stabilité des systèmes de téléopération, il est possible de modifier le couplage haptique, en particulier en ajoutant de l'amortissement. Les variables d'ondes sont une solution, mais elles diminuent la transparence du système [Daunay 09]. La distinction des différentes forces est alors difficile.

Une autre difficulté de la téléopération moléculaire vient du fait que la plupart des simulateurs calculent une énergie d'interaction alors que le retour haptique requiert un effort. Pour connecter un robot à retour d'effort de type *Virtuose* au logiciel de simulation commercial MOE⁵ (figure 1.6(d)), B. Daunay utilise un modèle paramétrable basé sur la méthode des moindres carrés pour l'actualisation de ses paramètres pour la conversion énergie/force. La dérivée analytique fournit les forces et les moments de l'interaction [Daunay 07a]. La faisabilité d'un retour haptique à l'aide de ces simulateurs a été démontrée, mais la qualité du ressenti est fortement détériorée par les techniques employées pour assurer la stabilité.

Dans l'ensemble des travaux, les opérations rapportées, notamment les opérations de *docking*, sont limitées par ce compromis entre stabilité et précision de la simulation. De plus, dans la très grande majorité des systèmes, seul un mode de manipulation est disponible (définir la position de la molécule, ou lui appliquer une force extérieure). La flexibilité de ces systèmes ainsi que leurs applications sont resteintes par ce manque de diversité des schémas de couplage.

Pour les mêmes raisons, très peu d'opérations sont rapportées. Seules quelques mesures de raideurs lors du dépliement de molécules sont effectuées [Hamdi 05], [Hamdi 08].

Les travaux de téléopération virtuelle sur des simulateurs moléculaires sont regroupés dans le tableau 1.3. Ils montrent l'importance des temps de calcul que beaucoup tentent de diminuer à l'aide de grilles précalculées, et des problèmes d'instabilités engendrés. Les applications potentielles de ces systèmes de téléopération sont par conséquent limitées.

3.3 Les travaux en téléopération augmentée

Certaines équipes ont développé des systèmes plus complets, intégrant des simulateurs pour fournir aux opérateurs davantage d'informations lors de téléopérations sur des systèmes réels.

⁵ Molecular Operating Environment

	Interface	Simulateur	Application	Molécule	Particularité
[Ouh-Young 88], [Brooks Jr. 90]	Maison : Ar- gonne mani- pulator	Calcul d'énergie	Exploration (<i>docking</i>)	Ligand : trimétho- prime, récepteur : dihydrofolate réductase	Montre l'intérêt de l'haptique pour des applications de <i>docking</i>
[Sankaranarayanan 03], [Murayama 07], [Persson 07], [Sourina 08]	Phantom ou Maison : SPIDAR-G	Grilles précalculées ou champs de forces sim- plifiés	Exploration	Superoxyde dismutase; molécules d'eau; an- hydrase carbonique II; peptide anti α II/hélice intégrine α II	Evaluation de l'haptique pour la pédagogie
[Lai-Yuen 06], [Nagata 02], [Lee 04]	Maison ou Phantom	Grilles précalculées	Exploration	Tyrosine/tyrosyl-tRNA synthétase; atomes d'oxygène et d'hydro- gène; dihydrofolate réductase	Simplification de la simulation pour diminuer les temps de cal- cul et garantir la stabilité du cou- plage
[Stone 01]		Développent le simula- teur NAMD	Exploration (passage d'ions dans des canaux)	Canal : gramicidine A et ion : sodium	Description des différents fac- teurs homothétiques, y compris temporel, application d'un effort par l'utilisateur pour manipuler l'ion
[Wollacott 07]	Phantom	Grilles précalculées, calcul d'énergie		Canal : 18-Crown-6 et ion : potassium	Saturation des forces haptiques pour garantir la stabilité
[Subasi 08]		Grilles précalculées, molécules rigides, calculs hors ligne	Exploration (docking)	Plusieurs couples li- gands/protéines sont testés	Mode de contrôle combinant po- sition et vitesse
[Daunay 09]	Virtuose 6D	Logiciel commercial MOE, calcul d'énergie	$\begin{array}{c} \text{Exploration} \\ (\textit{docking}) \end{array}$	Ligand : biotine, récep- teur : streptavidine	Utilisation de variables d'onde pour garantir la stabilité
[Hamdi 05], [Hamdi 08]	Phantom	Logiciel NAMD de l'University of Illinois, Urbana-Champaign	Opération (éti- rement)	Hélice α Deca alanine	Mesure de la raideur des hélices

Tableau 1.3 - Principaux travaux en téléopération virtuelle pour des simulations moléculaires, triés par ordre d'apparition dans le texte.

Le premier système de téléopération augmentée est celui de l'équipe de la North Carolina University, The nanoManipulator. Ce système est composé d'un robot à retour haptique (le Phantom) et d'une interface de réalité virtuelle, utilisable avec des microscopes à sonde locale (figure 1.19). Une attention particulière est accordée au rendu visuel avec la reconstruction d'images tridimensionnelles mettant en valeur des détails que les bidimensionnelles laissent invisibles [Taylor II 97b]. Le concept d'outil virtuel, est également introduit. Il consiste à automatiser certaines opérations, tout en laissant à l'utilisateur le soin de contrôler les manipulations. Par exemple, pour pousser un objet, des mouvements latéraux rapides de la poutre sont automatisés, mais l'utilisateur contrôle la direction et la vitesse du déplacement. Cependant, peu de résultats expérimentaux sont apportés [Falvo 99], [Guthold 00].



Figure 1.19 - The nanoManipulator, North Carolina University [Taylor II 97a]

S'inspirant de ces travaux, la plupart des systèmes de téléopération augmentée projettent à l'utilisateur une reconstruction 3D en temps réel de la scène, avec les déformations subies par les objets (figure 1.20(a)) [Fok 05], [Onal 09]. La reconstruction de cet environnement provient d'un modèle des interactions entre la poutre et les objets, comme celui de Maugis-Dugdale.



(a) Opération d'indentation d'un élastomère, Université de (b) Visualisation des Pittsburg [Onal 09] tion autour des particu

(b) Visualisation des zones d'attraction autour des particules, Université de Bourges [Ammi 07]



Les applications de la téléopération augmentée vont plus loin, notamment dans l'utilisation d'informations préalablement recueillies par l'obtention d'une image de la surface de travail à l'aide d'un microscope à force atomique [Ammi 07]. Après localisation des objets, différentes aides sont envisageables. Au niveau du rendu visuel une reconstruction tridimensionnelle de la scène avec des ajouts de textures et d'ombres est possible, ainsi que la mise en évidence de la zone d'attraction des objets (figure 1.20(b)). La planification de trajectoires est également envisagée. Ces informations (zone d'attraction autour des particules et trajectoire optimale) sont aussi rendues de manière haptique, à travers une interface de type *Phantom*. Ces concepts sont intéressants, mais ne sont pas validés expérimentalement.

Les systèmes avec retours multisensoriels, incluant notamment des informations sonores sont également évoqués [Marliere 04], [Marliere 06]. Cependant, ces travaux sortent du cadre de cette thèse, qui s'attache uniquement au retour haptique.

En plus des guides virtuels, la téléopération augmentée est utilisée pour reconstruire des efforts d'interaction en temps réel, notamment lors de l'usage de microscopes électroniques à balayage. Les modèles physiques compensent la lenteur de la fréquence d'acquisition des images, et rendent possible un retour haptique temps réel [Vitard 08]. Cette contrainte est particulièrement importante dans le cas de pinces sans capteur d'effort. Des manipulations de saisie et dépose de nanotubes de carbone ont aussi été réalisées (figure 1.21).



(a) Plate-forme de manipulation avec un microscope électronique (b) Vues du microscope et de la simulation

Figure 1.21 - Manipulation de nanotubes de carbone en téléopération augmentée [Vitard 08]

Les travaux en téléopération augmentée sont listés dans le tableau 1.4. Les applications de ces systèmes sont prometteuses, mais sont actuellement limitées par la difficulté d'obtenir des couplages haptiques stables, et le peu de stratégies développées spécifiquement pour la téléopération aux échelles micro et nanoscopiques.

4 Objectifs et approche retenue

Aux échelles micro et nanoscopiques, le comportement des objets est largement modifié par rapport aux échelles macroscopiques. Des outils spécifiques doivent être utilisés pour les manipuler et les simuler. Un effort particulier doit être fait sur l'interaction entre l'utilisateur et les objets nanoscopiques, et l'haptique est une solution prometteuse. Beaucoup de travaux ont été menés sur la téléopération avec retour d'effort aux échelles micro et nanoscopiques. Cependant, que ce soit en téléopération directe, virtuelle ou augmentée, très peu d'entre eux font état de manipulations. La raison principale est la difficulté d'obtenir des schémas haptiques transparents et stables pour des applications à ces échelles, notamment à cause des différences de tailles caractéristiques et de la forte variation des efforts. Dans le cas où des simulations sont utilisées (téléopération augmentée ou virtuelle), la stabilité est d'autant plus difficile à assurer que les temps de calcul augmentent du fait de la complexité des modèles nécessaires pour rendre compte de l'ensemble des interactions. A ces problèmes de transparence et de stabilité s'ajoute la nécessité de définir des stratégies adaptées pour envisager des manipulation complexes, prenant en compte les contraintes technologiques de manipulation, et le compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation.

	Interface	Système	Application	Particularité
[Taylor II 97b], [Falvo 99], [Guthold 00]	Phantom	SPM	Exploration, opéra- tion (indentation) sur des nano- tubes de carbone, adénovirus, ADN	Reconstruction d'images tridi- mensionnelles, concept d'outil virtuel
[Fok 05], [Onal 09]	Joystick, Omega	AFM	Exploration, opéra- tion (indentation)	Représentation visuelle des dé- formations des objets
[Ammi 07]	Phantom	AFM	Opération de roule- ment, et de saisie- dépose par adhé- sion de billes de $10-25 \ \mu m$ de rayon	Calcul de trajectoire, génération de guides virtuels sur la base d'une image obtenue préalable- ment par AFM
[Marliere 04], [Marliere 06]	Maison	AFM	Exploration	Usage d'informations sonores en complément du retour haptique
[Vitard 08]	Virtuose 3D	Pince	Manipulation (sai- sie et dépose de nanotubes de car- bone)	Retour haptique basé sur une si- mulation de l'effort d'interaction remise à jour par des images pro- venant d'un SEM

Tableau 1.4 - Principaux travaux en téléopération augmentée, triés par ordre d'apparition dans le texte.

L'objectif de cette thèse est de proposer des **systèmes de téléopération polyvalents pour des applications à l'échelle nanoscopique**⁶. Ces travaux s'inscrivent dans le cadre du projet ANR⁷ PSIROB PACMAN (Perception haptique des échelles micro et nanoscopiques). Pour proposer de tels systèmes, deux verrous scientifiques doivent être levés :

- 1. le choix de schémas de couplage adaptés à la tâche, et la définition de règles pour la détermination des gains des correcteurs prenant en compte les spécificités de l'échelle nanoscopique. Des méthodologies pour le choix de la structure du schéma de commande suivant l'application voulue, et du réglage des gains doivent être mises en place. Les couplages proposés seront issus de schémas de commande largement utilisés à l'échelle macroscopique, adaptés à l'échelle nanoscopique. Deux applications sont considérées car elles regroupent les difficultés rencontrées à ces échelles : la téléopération directe et la téléopération virtuelle. En téléopération directe, des explorations haptiques et des opérations de roulement seront effectuées sur la plate-forme de micro-manipulation de l'ISIR⁸. Pour la téléopération virtuelle, le logiciel de simulation utilisé est SAMSON⁹, développé par l'équipe de S. Redon à l'INRIA¹⁰. La téléopération augmentée étant une extension des deux types précédents, il est nécessaire de bien maîtriser leurs problématiques avant de l'aborder. Le choix a donc été fait de se concentrer dans cette thèse sur les téléopérations directe et virtuelle.
- 2. le **développement de stratégies spécifiques** prenant en compte les particularités de l'échelle nanoscopique. En effet, les applications des systèmes de téléopération classiques sont limitées. Il est donc nécessaire de définir des stratégies spécifiques les contraintes technologiques de manipulation,

⁶L'ordre de grandeur des efforts transmis à l'utilisateur est compris entre quelques dixièmes et quelques centaines de nanonewtons. Nous parlerons donc de téléopération à l'échelle nanoscopique, bien que les objets manipulés puissent avoir des dimensions de l'ordre du micromètre en téléopération directe, et de l'angström ou du nanomètre pour la téléopération virtuelle.

 $^{^7\,\}mathrm{Agence}$ Nationale de la Recherche

⁸Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique

⁹Système Adaptatif pour la Modélisation et la Simulation d'Objets Nanoscopiques

¹⁰Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique

et le compromis fort entre stabilité, qualité du retour haptique et facilité de manipulation. Une téléopération complexe 3D de saisie-dépose de micro billes sera réalisée, et un système entièrement adaptatif sera proposé pour la téléopération moléculaire.

Pour appréhender ces problématiques, deux chapitres abordent respectivement les couplages haptiques pour la téléopération directe et la téléopération virtuelle. Le dernier chapitre s'appuie sur les schémas de couplage développés pour proposer des stratégies pour des téléopérations complexes.

Le chapitre 2 s'intéresse aux schémas de couplage pour la téléopération directe. Les difficultés inhérentes à l'échelle nanoscopique sont mises en évidence, et deux structures de schémas de commande possédant des performances complémentaires en termes de transparence et de stabilité sont comparées. Des expériences d'explorations haptiques sur un cycle d'approche-retrait et des opérations de roulement de microbilles sont présentées pour valider expérimentalement les résultats.

Le chapitre 3 traite de la téléopération virtuelle. Les difficultés supplémentaires en terme de couplage liées aux temps de calculs importants des simulateurs sont analysées. Un troisième schéma est introduit, où l'utilisateur ne contrôle plus la position de l'objet, mais lui applique une force. Ces différents modes de manipulation augmentent le champ d'application possible. La diversité des couplages est nécessaire pour envisager des opérations multiples sur des systèmes moléculaires, et des manipulations. Des premiers résultats sont obtenus sur la modification globale des systèmes, la déformation de molécule et la recherche d'états caractéristiques.

Les applications possibles des schémas de commande développés dans les deux chapitres précédents restent limitées par le manque de stratégies adaptées à la spécificité de l'échelle nanoscopique. Ce problème est abordé dans le chapitre 4, dans lequel sont définies des stratégies prenant en compte les contraintes technologiques de manipulation, ainsi que le compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation. Des téléopérations directes et virtuelles complexes sont alors présentées avec notamment la manipulation 3D de microbilles, et l'utilisation d'un système de téléopération moléculaire entièrement adaptatif.

Chapitre 2

Schémas de couplage haptique pour la téléopération directe

Le chapitre précédent a montré l'intérêt des systèmes de téléopération pour la manipulation à l'échelle nanoscopique. Cependant, les applications sont limitées par les schémas de couplage utilisés, peu adaptés à la spécificité de ces échelles.

Le but de ce chapitre est d'analyser les difficultés inhérentes à la téléopération à l'échelle nanoscopique, et de proposer des couplages haptiques adaptés à ces spécificités selon la tâche à réaliser. Des règles pour le choix des gains de ces schémas de commande doivent également être définies. Deux schémas sont étudiés et comparés en termes de transparence et de stabilité à l'aide des outils présentés dans le chapitre précédent. Des premières règles pour le choix des gains des correcteurs sont établies. Pour valider les résultats, ces schémas de commande sont testés sur une téléopération monodimensionnelle représentative des phénomènes caractéristiques de ces échelles : le cycle d'approche-retrait. Des conclusions sur le domaine d'application de chaque schéma de commande sont tirées. Elles sont validées par deux téléopérations avec retour d'effort. La première est une exploration haptique lors de laquelle les phénomènes les plus fins, en particulier les forces attractives de quelques dixièmes de nanonewton (*snap-in*), sont ressentis. La seconde est une opération de roulement de billes de $25 \ \mu m$ de rayon, avec un retour haptique 2D. Bien que les objets soient de tailles micrométriques, il sera fait mention de "téléopération à l'échelle nanoscopique", car les efforts d'interaction sont nanoscopiques. Des premiers résultats intéressants sont obtenus dans ce chapitre, mais les applications de ces expériences restent cependant limitées.

La première partie de ce chapitre présente la plate-forme de manipulation sur laquelle sont effectuées les expériences, ainsi que les enjeux du retour haptique à cette échelle illustrés sur le profil des efforts lors d'un cycle d'approche-retrait. Cette courbe sert de référence pour les tests effectués par la suite. Dans la seconde partie de ce chapitre, les schémas de couplage haptique sont présentés, analysés et comparés en termes de transparence et de stabilité. Des téléopérations d'approche-retrait sont effectuées pour valider les conclusions.

Dans la dernière partie, quelques applications possibles sont discutées, et une exploration haptique ainsi qu'une opération de roulement sont présentées.

1 La téléopération directe à l'échelle nanoscopique

1.1 Le système de téléopération de l'ISIR

Les systèmes de téléopération directe comportent une interface haptique, et une plate-forme de micromanipulation composée d'un module de vision, un bloc de déplacement, un outil de manipulation et un système de mesure des efforts (voir partie 2.2 du chapitre 1). Les éléments de la plate-forme de l'ISIR (figure 2.1), utilisée pour réaliser les expériences présentées dans la suite de ce chapitre, sont détaillés dans les paragraphes suivants.



(a) Plate-forme de micro nano-manipulation de l'ISIR



(b) Interface haptique de type Virtuose



(c) Système de mesure des efforts

Figure 2.1 - Plate-forme de téléopération avec retour d'effort de l'ISIR

L'interface haptique L'interface haptique est de type Virtuose, fabriquée par Haption¹ (figure 2.1(b)). C'est une interface à six degrés de liberté, avec un retour d'effort selon trois axes (les trois translations). Elle transmet des efforts de 5 N en continu, et de 10 N pour les forces maximales. L'espace de travail est de 500 mm selon l'axe vertical, et respectivement de 350 et 640 mm pour les deux autres translations. Ce robot est modélisé selon l'équation (1.1) du chapitre 1 par un corps rigide d'inertie $M_h = 0.4$ kg et d'amortissement $B_h = 0.1 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}$. Dans toutes les expériences suivantes, pour éviter tout dommage sur le bras maître, les efforts sont saturés à 5 N.

Le module de vision Le module de vision est composé d'un microscope optique avec un objectif $20\times$, relié à une caméra CCD. Il permet de visualiser la position relative d'objets micrométriques dans le plan du substrat.

Le bloc de déplacement Le substrat est déplacé à l'aide de 3 nanotranslateurs fabriqués par *Physik* Instrumente², ayant une course (resp. résolution) de 12 μ m (resp. 1.83 nm) pour l'axe vertical, et une course (resp. résolution) de 50 μ m (resp. 0.1 nm) pour les axes horizontaux. La fonction de transfert

¹http://www.haption.com

²http://www.physikinstrumente.com/

en boucle fermée du nanotranslateur selon l'axe vertical est une fonction du second ordre, avec deux constantes de temps τ_1 et τ_2 :

$$N(s) = \left[(1 + \tau_1 s)(1 + \tau_2 s) \right]^{-1}$$
(2.1)

où :
$$\tau_1 = 1.35 \cdot 10^{-3}$$
 s et $\tau_2 = 0.57 \cdot 10^{-3}$ s [Dionnet 05].

L'outil de manipulation Des poutres avec ou sans pointe, dont la raideur varie de quelques centièmes à quelques dizaines de $N \cdot m^{-1}$ sont utilisées, selon l'application envisagée.

Le système de mesure des déformations Les déformations de l'outil de manipulation sont mesurées à l'aide d'un laser, réfléchi par la poutre sur une photodiode (voir figure 2.1(c)). Cette dernière est composée de quatre quadrants de tensions respectives T_l , T_r , B_l , B_r . Deux tensions de sortie sont disponibles, u_v et u_h , définies comme :

$$u_v = (T_l + T_r) - (B_l + B_r) u_h = (T_l + B_l) - (T_r + B_r)$$
(2.2)

Elles correspondent à une mesure du déplacement de l'impact du laser sur la photodiode selon les axes respectivement vertical et horizontal. A partir des sensibilités verticale et horizontale S_v et S_h calibrées de la photodiode [Xie 08b], et de la mesure des tensions de sortie u_v et u_h , il est possible de connaître les déformations (flexion δ_z et angle ϕ) de la poutre :

$$\delta_z = S_v u_v \tag{2.3}$$

$$\phi = S_h u_h \tag{2.4}$$

Les efforts d'interaction entre la poutre et l'environnement sont calculés à partir de ces mesures et des lois de comportement de la sonde. Cette opération est l'objet de la partie suivante.

1.2 Relation entre les déformations de la poutre et les efforts d'interaction

Comme expliqué dans la partie 2.2.3 du chapitre 1, en plus des mesures issues de la photodiode, il est nécessaire de connaître les lois de comportement de la sonde pour calculer les efforts d'interaction (voir figure 2.2). La modélisation généralement retenue est celle d'une *poutre encastrée-libre* de longueur L, largeur w et épaisseur t. Des exemples de valeurs numériques pour une poutre en silicium sont donnés dans le tableau 2.1.



Figure 2.2 - Relation entre la mesure des déformations et les efforts d'interaction

En fonction du type de la poutre (avec ou sans pointe), différents efforts d'interaction³ sont calculés à partir des mesures issues de la photodiode (δ_z et ϕ). Ces deux cas sont détaillés dans les paragraphes suivants.

Dans toute la suite, l'axe x, resp. y correspond à l'axe longitudinal, resp. latéral, de la poutre. L'axe z est perpendiculaire au substrat, dirigé selon la verticale (voir figure 2.3). Le point (x = 0, y = 0) est situé à l'origine de la poutre (au niveau du support), et en son centre (ligne médiane).

³Pour être cohérent avec les conventions de notation choisies (minuscules pour les variables temporelles, majuscules pour

	Signification	Exemples de valeurs numériques
L, t, w	longueur, épaisseur et largeur de la poutre	$L = 220 \ \mu \text{m}, \ t = 2.9 \ \mu \text{m}, \ w = 27 \ \mu \text{m}$
k_z, k_{t_ϕ}	raideurs normale et de torsion de la poutre	$\begin{aligned} k_z &= 2.4 \ \mathrm{N} \cdot \mathrm{m}^{-1}, \\ k_{t_\phi} &= 64.0 \cdot 10^{-9} \ \mathrm{N} \cdot \mathrm{m} \end{aligned}$
E, G	module de Young et de cisaillement	$E = 150$ GPa, $G = \frac{E}{2(1+\nu)}$
ν	coefficient de Poisson	$\nu = 0.17$
I_x, I_y	moment quadratique par rapport à l'axe x (resp. y)	$I_x = \frac{tw^3}{12}, \ I_y = \frac{t^3w}{12}$

Tableau 2.1 - Variables décrivant une poutre AFM, et valeurs numériques associées pour une poutre en silicium (les dimensions sont données à titre d'exemple)

1.2.1 Poutre avec pointe



(b) Détail des notations

Figure 2.3 - Mesure des efforts - poutre avec pointe

Dans la cas d'une poutre avec pointe, les interactions entre l'outil et l'objet se situent à l'extrémité de cette pointe, qui correspond donc au point d'application des forces (voir figure 2.3). Les deux déformations mesurables par la photodiode, la flexion verticale (δ_z) et la rotation (ϕ), correspondent respectivement à une force verticale, et une force selon l'axe y.

Flexion δ_z La flexion mesurée par la photodiode est provoquée par un effort d'interaction f_e^z entre la poutre et le substrat (ou l'objet) dirigé selon l'axe vertical. Le point d'application de cette force est l'extrémité de la pointe de la poutre (voir figure 2.3). D'après la loi de comportement, qui modélise la poutre comme un ressort de raideur k_z , cet effort d'interaction est calculé par :

$$f_e^z = k_z \delta_z = k_z S_v u_v \tag{2.5}$$

celles du domaine de Laplace), les forces d'interaction seront notées en minuscules bien qu'elles ne fassent pas référence à des forces linéiques ou volumiques.

Plusieurs techniques sont possibles pour calibrer la raideur normale de la poutre, notamment en utilisant l'expression de la raideur en fonction des dimensions de la poutre :

$$k_z = \frac{Ewt^3}{4L^3} \tag{2.6}$$

w et L sont estimées à l'aide d'un microscope optique. Pour mesurer précisément l'épaisseur, la poutre est excitée, et les fréquences de résonance sont enregistrées pour différents modes propres. Cette épaisseur est alors calculée d'après :

$$t = \frac{\omega_n}{K_n^2} \sqrt{\frac{12\rho}{E}} \tag{2.7}$$

où ω_n est la fréquence de résonance en flexion du $n^{\text{ème}}$ mode propre, K_n est le nombre d'onde de la poutre et ρ est sa masse volumique. Cette méthode est décrite en détails dans [Xie 08b]. La précision des mesures obtenues dépendra en grande partie de la précision du calibrage.

Rotation ϕ La rotation de la poutre est provoquée par une force f_e^y , dirigée selon l'axe y. En première approximation, le point d'application de cette force sera considéré comme étant l'extrémité de la pointe de la poutre (voir figure 2.3(b)). Cette force appliquée avec un bras de levier h correspondant à la hauteur de la pointe de la poutre provoque un moment de torsion M_t . Ce dernier est calculé selon la loi de comportement retenue :

$$M_t = k_{t\phi}\phi = k_{t\phi}S_h u_h \tag{2.8}$$

où $k_{t_{\phi}}$ est la raideur de torsion et vaut $k_{t_{\phi}} = \frac{Gwt^3}{3L}$. Comme pour la raideur normale, de nombreuses techniques existent pour calibrer la raideur de torsion. L'angle ϕ étant faible, l'effort d'interaction f_e^y correspondant est calculé par :

$$f_e^y = k_y \delta_y \tag{2.9}$$

où $k_y = \frac{Gwt^3}{3Lh^2} = \frac{k_{t_\phi}}{h^2}$ et $sin(\phi) = \frac{\delta_y}{h}$. L'approximation $\phi = \frac{\delta_y}{h}$ est généralement faite. L'effort d'interaction s'estime donc à partir des mesures issues de la photodiode par :

$$f_e^y = k_y h S_h u_h \tag{2.10}$$

Conclusion Les efforts d'interaction qu'il est possible de calculer à partir des mesures de la photodiode et des lois de comportement retenues sont résumés dans le tableau 2.2. Il faut noter que la raideur longitudinale de la poutre étant très importante par rapport à la raideur de flexion, il n'est pas possible de mesurer précisément l'effort d'interaction entre un objet et la poutre selon l'axe x. Lors des opérations de poussée, cette méconnaissance est une limitation sérieuse.

Tableau 2.2 - Relations entre les mesures et les efforts d'interaction pour une poutre avec pointe

Mesure	Lois de comportement	Effort d'interaction calculable
δ_z	k_z	f_e^z
ϕ	$k_{t_{\phi}}, k_{y}$	M_t, f_e^y

1.2.2 Poutre sans pointe

Par rapport à une poutre avec pointe, deux points sont fondamentalement différents (figure 2.4) :

• le point d'application des efforts n'est pas fixé, mais se situe à un endroit quelconque $P(x_p, y_p)$ sous la poutre (voir figure 2.5),



Figure 2.4 - Principe de mesure des efforts à l'aide d'un laser pour une poutre sans pointe

• il n'est plus possible de provoquer de torsion de la poutre car le bras de levier dû à la pointe n'existe plus.

Ces différences entrainent des modifications importantes dans les efforts qu'il est possible de mesurer, puisque l'interaction entre l'outil et l'objet n'est plus située sur la pointe, mais sur la poutre elle-même.



Figure 2.5 - Point d'application de la force pour une poutre sans pointe : sa position n'est pas fixe, et dépend de la position de l'objet.

Flexion δ_z Comme dans le cas de la poutre avec pointe, la flexion est provoquée par un effort d'interaction entre l'outil et l'objet selon l'axe vertical. Cependant, cet effort est maintenant appliqué au point de contact P entre l'objet et la poutre, et est donc susceptible de varier. Comme pour la poutre avec pointe, cet effort se calcule en fonction de la loi de comportement par :

$$f_e^z(x_p, y_p) = k_z(x_p)\delta_z(x_p, y_p)$$
(2.11)

 $k_z(x_p)$ est la raideur normale de la poutre au point x_p :

$$k_{z}(x_{p}) = \frac{Ewt^{3}}{4x_{p}^{3}} = \left(\frac{L}{x_{p}}\right)^{3} k_{z}(L)$$
(2.12)

où $k_z(L)$ est la raideur normale de la poutre à son extrémité libre, et correspond à celle utilisée dans le cas d'une poutre avec pointe. Pour une poutre encastrée-libre l'expression de la déflexion de la poutre $\delta_z(x, y_p)$ est :

$$\delta_z(x, y_p) = \frac{f_e^z(x_p, y_p)}{EI_y} \left(x \frac{x_p^2}{2} - \frac{x_p^3}{6} \right) \text{ pour } x_p \le x \le L$$
(2.13)

 $\mathbf{D}\text{'après}$ cette équation :

$$\delta_z(x_p, y_p) = \frac{2x_p}{3L - x_p} \delta_z(L, y_p) \tag{2.14}$$

L'effort d'interaction est calculé avec les équations (2.12) et (2.14) :

$$f_e^z(x_p, y_p) = \frac{2L^3}{x_p^2(3L - x_p)} k_z(L) \delta_z(L, y_p)$$
(2.15)

Pour des raisons techniques, le point de focalisation du laser est l'extrémité de la poutre, sur la ligne médiane (point E(L,0), figure 2.4). La flexion mesurée, δ_z , est donc la flexion en ce point ($\delta_z(L,0)$). Seule la force $f_e^z(x_p,0)$ est ainsi calculable de manière précise.

Rotation ϕ Comme la poutre ne possède pas de pointe, la rotation n'est pas due à un effort d'interaction f_e^y , mais au fait que le point d'application de la force ne soit pas situé sur la ligne médiane (i.e. $y_p \neq 0$). Le calcul de la déformation est alors effectué en considérant une poutre selon l'axe y (libre à son extrémité), et l'hypothèse que le problème est monodimensionnel. La force $f_e^z(x_p, y_p)$ appliquée selon la direction verticale provoque une rotation $\phi(x_p, y_p)$ de la poutre (voir annexe A) :

$$\phi(x_p, y_p) = \frac{f_e^z(x_p, y_p)}{2EI_x} y_p^2 + \phi(x_p, 0)$$
(2.16)

Le moment $M_t(x_p, y_p)$ qui correspondrait à cet angle est :

$$M_t(x_p, y_p) = k_{t_{\phi}}(x_p)\phi(x_p, y_p)$$
(2.17)

où $k_{t_{\phi}}(x_p) = \frac{Gwt^3}{3x_p}$ est la raideur de torsion. Comme l'angle de rotation est mesuré au point de focalisation du laser, seul $M_t(L,0)$ est mesurable.

Conclusion Les relations entre mesures issues de la photodiode, effort d'interaction appliqué sur la poutre et effort calculable sont données dans le tableau 2.3. Comme dans le cas de la poutre avec pointe, la raideur longitudinale de la poutre étant très importante par rapport à la raideur de flexion, il n'est pas possible de mesurer précisément l'effort d'interaction entre un objet et la poutre selon l'axe x. Les efforts appliqués sur la tranche de la poutre sont l'axe y provoquent une déformation dans le plan de la poutre, qui ne sont pas mesurables par la photodiode.

Tableau 2.3 - Relations entre les mesures et les efforts d'interaction pour une poutre sans pointe

Mesure	Lois de comportement	Effort d'interaction réel	Effort calculable
δ_z	$k_z(x_p)$	$f_e^z(x_p, y_p)$	$f_e^z(x_p,0)$
ϕ	$k_{t_{\phi}}(x_p)$	$f_e^z(x_p, y_p)$	Moment équivalent $M_t(L,0)$

1.3 Le cycle d'approche-retrait

La difficulté de la téléopération à l'échelle nanoscopique vient en grande partie des phénomènes physiques particuliers mis en jeu. Pour appréhender ces derniers, les points caractéristiques d'une courbe de force lors d'un cycle d'approche-retrait présentée au chapitre 1 sont étudiés dans cette partie. La force appliquée sur la poutre au cours d'une telle expérience est représentée sur la figure 2.6. Son évolution en fonction de la distance entre la poutre et le substrat est rappelée sur la figure 2.6(a) (les flèches indiquent le déroulement chronologique). Le tracé des efforts en fonction du temps correspondant à la même manipulation est donnée figure 2.6(b). Cette dernière courbe représente ce que l'opérateur doit ressentir au cours de l'expérience via l'interface haptique.

Plusieurs caractéristiques apparaissent sur ces courbes d'effort :



Figure 2.6 - Force appliquée sur la poutre lors d'une expérience d'approche-retrait

- la présence de deux phénomènes discontinus (notés A et E sur les tracés). Ils représentent respectivement les instants pendant lesquels la poutre est attirée (saut au contact, ou *snap-in*) puis relâchée par le substrat (*pull-off*). Dans ces deux cas, ces phénomènes indiquent des changements d'équilibre de l'interaction poutre-substrat. Par exemple, pour la rupture, la force élastique de la poutre devient supérieure à la force d'adhésion.
- la variété des forces d'interaction. Les premiers efforts appliqués sur la poutre au cours de la manipulation (B) ainsi que les derniers (D) sont attractifs, alors que ceux ayant lieu entre ces instants sont répulsifs (C).
- la variation de l'amplitude des efforts. L'amplitude des forces de *snap-in* est 10 à 100 fois moins importante que celle du *pull-off*.
- la faible amplitude de la force de *snap-in*. Elle est de l'ordre de quelques dixièmes de nanonewton.

Le schéma de couplage doit transmettre à l'utilisateur de manière la plus fidèle possible l'ensemble de ces phénomènes. Le cycle d'approche-retrait est utilisé afin de comparer les performances des schémas de couplage, ainsi que l'influence des gains des correcteurs sur la qualité du rendu haptique.

2 Analyse des schémas de couplage pour la téléopération directe

Deux schémas de couplage largement utilisés pour la téléopération à l'échelle macroscopique [Goethals 07] sont considérés. Le premier, le couplage à retour d'effort direct, est la structure minimale pour connecter une interface haptique et un outil agissant sur des objets. Comme la stabilité est un enjeu majeur des couplages haptiques, un deuxième schéma de commande, avec de l'amortissement, est sélectionné.

Ces schémas de commande sont analysés et comparés en termes de transparence et de stabilité. Dans le cadre de ces études, l'environnement est modélisé selon l'hypothèse suivante :

Hypothèse 1. Le robot esclave interagit avec l'environnement à l'aide d'une poutre de raideur k_z . Le substrat est modélisé par une raideur k_s . Ces deux ressorts en série forment un ressort équivalent de raideur k_{eq} :

$$\frac{1}{k_{eq}} = \frac{1}{k_s} + \frac{1}{k_z}$$
(2.18)

Cette modélisation, bien que simplificatrice est utile pour comparer les schémas de couplage. L'analyse des schémas de couplage est faite selon l'axe vertical, de manière à pouvoir valider les conclusions sur un

cyle d'approche-retrait. L'ensemble des variables sont donc des scalaires. L'implémentation des couplages est faite dans le domaine discret (implémentation informatique, et mesures provenant de la photodiode échantillonnées). Cependant, comme la période d'échantillonnage est faible (quelques millisecondes), l'étude des schémas de commande est réalisée dans le domaine de Laplace, en continu. Les phénomènes d'ordre supérieurs seront atténués par la dynamique du bras haptique.

2.1 Présentation des schémas de couplage

Ces deux schémas de couplage, nommés respectivement couplage à retour d'effort direct ou DFF(Direct Force Feedback [De Gersem 05]) et couplage Force-Position (FP) sont représentés sur les figures 2.7 et 2.8. Pour les deux couplages, l'opérateur applique un effort F_{op} sur l'interface haptique, et reçoit en retour une force haptique F_h qui dépend de la force mesurée entre l'outil et les objets manipulés F_e . La vitesse de la poignée du robot maître V_h est utilisée comme entrée du couplage haptique. La consigne de déplacement du nanotranslateur V_n est basée sur cette vitesse. Ces transferts correspondent à ceux identifiés sur la figure 1.4 du chapitre 1.

A cause de la différence d'échelle, des gains homothétiques en effort et en déplacement α_f et α_d sont utilisés dans ces couplages.



Figure 2.7 - Schéma de commande à retour d'effort direct (DFF)

Pour le schéma FP, deux correcteurs supplémentaires sont introduits. Le premier, C(s), est un correcteur Proportionnel Intégral (PI):

$$C(s) = \frac{F_h}{V_h - \alpha_d^{-1} V_n} = B_{fp} + \frac{K_{fp}}{s}$$
(2.19)

où les termes intégral K_{fp} et proportionnel B_{fp} sont utilisés pour modifier la raideur et l'amortissement de la force retournée. Le deuxième correcteur, G_n calcule la vitesse de consigne du nanotranslateur. Comme expliqué précédemment, la période d'échantillonnage étant suffisamment faible, le schéma de commande est représenté dans le domaine continu. Des retards d'une période modélisés par e^{-sT_e} sont introduits dans le schéma de commande pour éviter les boucles algébriques lors de l'implémentation informatique du couplage dans le domaine discret. Les variables f_h et \dot{x}_n sont en effet enregistrées pour être utilisées lors des calculs effectués au pas de temps suivant.

2.2 Etude de la transparence

La transparence de ces deux couplages haptique est comparée en terme d'impédance. Conformément au chapitre 1, la transparence idéale est obtenue si :

$$Z_{op}(s) = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(s) \tag{2.20}$$



Figure 2.8 - Schéma de commande Force-Position (FP)

où $Z_{op}(s) = \frac{F_{op}(s)}{V_h(s)}$ et $Z_e(s) = \frac{F_e(s)}{V_e(s)}$ sont respectivement l'impédance côté utilisateur et l'impédance de l'environnement.

La transparence est étudiée dans le domaine fréquentiel (la pulsation ω est liée à la variable de Laplace par $s = j\omega$). Les comportements en basses et hautes fréquences (BF et HF) sont mis en évidence. Deux cas particuliers, le mode contact et le mode non contact sont traités :

- mode contact : la poutre est au contact des objets ou du substrat. En première approximation, le contact est modélisé selon l'hypothèse 1. L'impédance de l'environnement est donc : $Z_e(s) = \frac{k_{eq}}{s}$. La transparence évalue alors si la raideur du contact est transmise fidèlement.
- mode non contact : aucun effort n'est appliqué sur la poutre ($Z_e = 0$). Même si les interactions à distance ont une portée théorique infinie, elles sont négligeables lorsque l'outil est suffisamment loin des objets. Pour ce mode, la transparence reflète la facilité de manipulation apportée à l'utilisateur. Si la transparence en mode non contact est bonne, la téléopération sera moins fatigante, et la distinction avec le mode contact sera plus aisée.

Dans cette partie, les impédances sont comparées analytiquement, ainsi qu'à l'aide de diagrammes de Bode. Pour tracer ces diagrammes, les valeurs numériques choisies correspondent à celles qui sont utilisées dans les parties suivantes pour les expériences de cycle d'approche-retrait. La valeur de la raideur équivalente k_{eq} est prise égale à celle de la poutre k_z , en faisant l'hypothèse que le substrat est beaucoup plus raide que la poutre. Ces valeurs sont définies pour illustrer les résultats.

2.2.1 Couplage à retour d'effort direct

En utilisant le schéma de couplage représenté sur la figure 2.7, l'impédance côté l'utilisateur est calculée :

$$Z_{op}(s) = \frac{F_{op}(s)}{V_h(s)} = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(s) N(s) + \frac{1}{H(s)}$$
(2.21)

<u>Contact</u> Lors du contact, l'impédance côté utilisateur est celle donnée par l'équation (2.21). D'après l'équation (2.20), ceci correspond à l'impédance idéale $\left(\frac{\alpha_f}{\alpha_d}Z_e(s)\right)$ pondérée par le nanotranslateur. Les paramètres caractéristiques de l'interface haptique interviennent également. Dans le domaine fréquentiel l'équation (2.21) se réécrit :

$$Z_{op}(j\omega) = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(j\omega) \frac{1}{\tau_1 \tau_2 \omega^2 + (\tau_1 + \tau_2)j\omega + 1} + (M_h j\omega + B_h)$$
(2.22)

En **basses fréquences**, l'impédance $Z_{op,BF}^{DFF}$ peut être approchée par :

$$Z_{op,BF}^{DFF}(j\omega) \underset{\omega \ll 1}{\approx} \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(j\omega) + B_h$$
(2.23)

L'impédance de l'environnement, ainsi que la viscosité de l'interface haptique sont transmises à l'utilisateur. Cependant B_h est généralement faible devant $\frac{\alpha_f}{\alpha_d}Z_e$, donc ce schéma de commande approche la transparence idéale en basses fréquences.

En hautes fréquences, l'impédance $Z_{op,HF}^{DFF}$ est :

$$Z_{op,HF}^{DFF}(j\omega) \underset{\omega \gg 1}{\approx} M_h j\omega \tag{2.24}$$

La transparence de ce schéma de couplage en hautes fréquences dépend uniquement de l'inertie du bras maître.

Le diagramme de Bode correspondant aux impédances lors du contact est représenté figure 2.9(a). Conformément aux résultats précédents, la transparence du système approche la transparence idéale en basses fréquences (la viscosité de l'interface haptique peut être négligée). Elle est dégradée par l'inertie du bras maître en hautes fréquences.



Figure 2.9 - Diagrammes de Bode des impédances du schéma de couplage DFF. Les valeurs numériques utilisées pour le tracé sont : $k_{eq} = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, $\alpha_f = 6 \cdot 10^6$ et $\alpha_d = 0.05 \cdot 10^6$. Elles correspondent aux valeurs choisies pour réaliser les expériences d'approche-retrait.

<u>Non contact</u> Lorsqu'aucune force n'est appliquée sur la poutre, l'impédance équivalente de l'environnement est $Z_e(j\omega) = 0$. D'après l'équation (2.22) :

$$Z_{op}(j\omega) = M_h j\omega + B_h \tag{2.25}$$

En basses fréquences, l'impédance dépend surtout de la viscosité de l'interface haptique, alors qu'en hautes fréquences, l'inertie du bras maître est prédominante. Cette remarque est vérifiée sur le diagramme de Bode de la figure 2.9(b).

Avec ce schéma de commande, la qualité du ressenti dépend uniquement des caractéristiques de l'interface haptique, lors du contact comme lors du non contact.

2.2.2 Couplage Force Position

Pour analyser la transparence, l'impédance côté utilisateur $Z_{op}(s) = F_{op}(s)/V_h(s)$ est calculée en utilisant le schéma de commande représenté figure 2.8 :

$$Z_{op}(s) = \frac{n_{z_e}(s)Z_e(s) + \alpha_f C(s)H(s)e^{-sT_e} + \alpha_f + \alpha_d G_n C(s)e^{-2sT_e}}{d_{z_e}(s)Z_e(s) + \alpha_f H(s) + \alpha_d G_n C(s)H(s)e^{-2sT_e}}$$
(2.26)

où :

$$n_{z_e}(s) = \alpha_f G_n C(s) H(s) N(s) e^{-2sT_e} + \alpha_f G_n N(s) e^{-sT_e}$$
(2.27)

$$l_{z_e}(s) = \alpha_f G_n H(s) N(s) e^{-sT_e}$$
(2.28)

 T_e étant faible (quelques millisecondes), l'approximation par un développement de Taylor à l'ordre 1 de $x \mapsto e^x$ autour de 0 ($T_e \to 0$), $e^{-sT_e} \approx 1 - sT_e$ est faite dans les paragraphes suivants.

<u>**Contact</u>** Quand le contact est effectif, $Z_{op,BF}^{FP}$ en **basses fréquences** est :</u>

$$Z_{op,BF}^{FP}(j\omega) \underset{\omega \ll 1}{\approx} \frac{\alpha_f}{\alpha_d + \frac{\alpha_f k_{eq}}{K_{fp}}} Z_e(j\omega) + \frac{1}{1 + \frac{\alpha_d K_{fp}}{\alpha_f k_{eq}}} + \frac{1}{\frac{G_n k_{eq}}{K_{fp}} + \frac{\alpha_d G_n}{\alpha_f}} + B_h$$
(2.29)

L'impédance de l'environnement est divisée par $\frac{\alpha_f}{\alpha_d + \frac{\alpha_f K_{eq}}{K_{fp}}}$. Si K_{fp} augmente, ce terme tend vers l'impédance idéale. Le terme $\frac{1}{1 + \frac{\alpha_d K_{fp}}{\alpha_f K_{eq}}} + \frac{1}{\frac{G_n K_{eq}}{K_{fp}} + \frac{\alpha_d G_n}{\alpha_f}}$ et la viscosité de l'interface haptique ajoutent une erreur sur l'impédance coté utilisateur. Cette erreur peut être minimisée en augmentant K_{fp} et G_n .

Pour les hautes fréquences, l'impédance $Z_{op,HF}^{FP}$ côté utilisateur est :

$$Z_{op,HF}^{FP}(j\omega) \underset{\omega\gg1}{\approx} M_h j\omega \tag{2.30}$$

Comme pour le schéma DFF, l'impédance dépend surtout de l'inertie de l'interface haptique pour $\omega \gg 1$.

Le diagramme de Bode représenté sur la figure 2.10(a) est utile pour illustrer les résultats analytiques, et pour les comparer à ceux obtenus pour le schéma DFF. En basses fréquences, les variations du diagramme de Bode sont identiques pour l'impédance du contact simulé et pour celle de l'environnement. Les impédances réelles et côté utilisateur diffèrent seulement d'une constante dont la valeur peut être réduite en augmentant K_{fp} et G_n . Ainsi, quand l'utilisateur atteint le point de contact, il est capable de détecter la variation des efforts présents au cours de la manipulation.

<u>Non contact</u> Lorsqu'aucune force ne s'applique sur la poutre, l'impédance côté utilisateur est :

$$Z_{op}(j\omega) = \frac{\alpha_f \left(K_{fp} + B_{fp}j\omega\right) e^{-j\omega T_e}}{\alpha_f j\omega + \alpha_d G_n \left(K_{fp} + B_{fp}j\omega\right) e^{-2j\omega T_e}} + M_h j\omega + B_h$$
(2.31)

En **basses fréquences**, l'impédance $Z_{op,BF}^{FP}$ est approchée par :

$$Z_{op,BF}^{FP}(j\omega) \underset{\omega \ll 1}{\approx} \frac{\alpha_f}{\alpha_d G_n} + B_h \tag{2.32}$$

Pour réduire cette impédance sans modifier les facteurs d'échelle, G_n est le seul paramètre qui puisse être réglé. Plus il sera élevé, meilleure sera la transparence. Comme pour le schéma *DFF*, l'utilisateur ressent également la viscosité de l'interface haptique.



Figure 2.10 - Diagrammes de Bode des impédances du schéma de couplage FP. Les valeurs numériques utilisées pour le tracé sont : $k_{eq} = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, $\alpha_f = 6 \cdot 10^6$, $\alpha_d = 0.05 \cdot 10^6$ (valeurs identiques à celles de la figure 2.9), $K_{fp} = 100 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, $B_{fp} = 2 \text{ N} \cdot \text{s} \cdot \text{m}^{-1}$, $G_n = 48.0 \text{m} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ et $T_e = 5 \text{ ms}$. Elles correspondent aux valeurs choisies pour réaliser les expériences d'approche-retrait.

En hautes fréquences, l'impédance est : $Z_{op,HF}^{FP}(j\omega) \underset{\omega \gg 1}{\approx} M_h j\omega$. Là encore, comme pour le schéma DFF, l'inertie de l'interface haptique est prédominante.

Le diagramme de Bode (figure 2.10(b)) confirme la validité des approximations précédentes. La comparaison de ce tracé avec le diagramme de Bode du schéma de commande DFF (figure 2.9(b)) pour le mode non-contact, met en avant le manque de transparence du FP en basses fréquences. Cette différence peut être réduite en augmentant G_n .

2.2.3 Conclusion

Le tableau 2.4 résume les impédances approchées des schémas DFF et FP et met en avant la meilleure transparence du couplage DFF. Pour obtenir une transparence similaire avec le schéma FP, K_{fp} doit être suffisamment élevé pour assurer un contact raide, alors que G_n influe sur le comportement en modes contact et non contact. En particulier, plus ce gain est élevé, et moins le ressenti est visqueux.

Tableau 2.4 - Etude de la transparence : valeurs approchées de Z_{op} pour les schémas DFF et FP

		Basses fréquences	Hautes fréquences		
	Non contact	Contact	Non contact	Contact	
DFF	B_h	$\frac{\alpha_f}{\alpha_d}Z_e + B_h$			
FP	$\frac{\alpha_f}{\alpha_d G_n} + B_h$	$\frac{\frac{\alpha_f}{\alpha_d + \frac{\alpha_f k_{eq}}{K_{fp}}} Z_e + \frac{1}{1 + \frac{\alpha_d K_{fp}}{\alpha_f k_{eq}}} + \frac{1}{\frac{G_n k_{eq}}{K_{fp}} + \frac{\alpha_d G_n}{\alpha_f}} + B_h$	$M_h j$	ω	

2.3 Etude de la stabilité

Cette partie met en évidence l'influence des gains des correcteurs sur la stabilité ainsi que celle des caractéristiques de l'outil et de l'environnement. Ce dernier est modélisé selon l'hypothèse 1. Comme les

paragraphes suivants le confirment, le cas le plus défavorable pour la stabilité est de considérer la raideur équivalente la plus élevée. Prendre $k_{eq} = k_z$ revient donc à se placer dans un cas restrictif, et sera utilisé dans toute la suite. Cette modélisation, bien que simplificatrice, est utile pour comparer les schémas de couplage.

Les caractéristiques de l'outil et l'environnement ne sont pas prises en compte par les critères de passivité. Seul le fait qu'ils soient eux-mêmes passifs est nécessaire. Pour mettre en évidence leur influence, des critères de stabilité comme celui de Routh-Hurwitz sont utilisés (les systèmes considérés sont linéaires, invariants dans le temps). Lorsque les expressions analytiques sont facilement interprétables, des conditions nécessaires et suffisantes de stabilité sont données. Quand les relations sont trop complexes, des cas particuliers sont considérés pour définir des conditions nécessaires de stabilité. Les valeurs des gains sont alors choisies, puis la stabilité globale du système est validée numériquement à l'aide du critère de Llewelyn. En continu, étudier la stabilité entre $F_{op}(s)$ et $X_h(s)$ ou entre $F_{op}(s)$ et $V_h(s)$ donne des résultats identiques. Comme le critère de Llewelyn s'écrit en fonction de forces et de vitesses, la fonction de transfert étudiée sera $\frac{V_h(s)}{F_{op}(s)}$.

Couplées aux conclusions sur la transparence de la partie précédente, les relations obtenues sont utilisées pour définir des règles sur le choix des gains des correcteurs. Des expériences sur des cycles d'approche-retrait confirment les résultats énoncés.

2.3.1 Couplage à retour d'effort direct

Pour déterminer les conditions nécessaires et suffisantes de stabilité de ce schéma de couplage, le critère de Routh-Hurwitz est utilisé. La fonction de transfert en boucle fermée se déduit directement de l'impédance calculée pour l'étude de la transparence :

$$\frac{V_h(s)}{F_{op}(s)} = \frac{1}{Z_{op}(s)} = \frac{H(s)}{1 + H(s)N(s)\frac{\alpha_f}{\alpha_s}\frac{k_{eq}}{s}}$$
(2.33)

L'équation caractéristique correspondante est :

$$M_h \tau_1 \tau_2 s^4 + [M_h(\tau_1 + \tau_2) + B_h \tau_1 \tau_2] s^3 + [M_h + B_h(\tau_1 + \tau_2)] s^2 + B_h s + \frac{\alpha_f}{\alpha_d} k_{eq} = 0$$
(2.34)

Le critère de Routh-Hurwitz donne la condition de stabilité nécessaire et suffisante suivante :

$$R = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} < \frac{\gamma_{DFF}}{k_{eq}} = R_{max} \tag{2.35}$$

où $\gamma_{DFF} = \frac{B_h(\tau_1+\tau_2)[M_h^2+M_hB_h(\tau_1+\tau_2)+B_h^2\tau_1\tau_2]}{[M_h(\tau_1+\tau_2)+B_h\tau_1\tau_2]^2}$. γ_{DFF} est uniquement fonction des paramètres du système (interface haptique, et nanotranslateur). La stabilité de ce système dépend donc du rapport $\frac{\alpha_f}{\alpha_d}$. La figure 2.11 (a) représente graphiquement cette condition de stabilité : pour une valeur k_{eq} donnée, l'amplification des efforts doit être inférieure à une valeur donnée, et les déplacements doivent être suffisamment diminués pour garantir la stabilité. Cette condition de stabilité est d'autant plus stricte que la raideur augmente (figure 2.11(b)).

Détermination des gains des correcteurs

Pour ce schéma de couplage, seuls deux coefficients doivent être réglés : α_f et α_d . D'une manière générale, ils doivent prendre en compte les critère suivants, donnés par ordre décroissant de priorité :

1. stabilité : le rapport choisi doit vérifier la condition (2.35),



(a) Domaines de stabilité et d'instabilité pour k_{eq} = (b) Evolution des domaines de stabilité et d'instabilité 2.4 N·m⁻¹ pour différentes raideurs k_{eq}

Figure 2.11 - Domaine de stabilité du système en fonction de α_f et α_d

- 2. mise à l'échelle : en tant que facteurs homothétiques, α_f et α_d doivent prendre en compte les contraintes de mise à l'échelle. Le choix se fera en fonction des robots maître et esclave utilisés, et de la tâche à accomplir,
- 3. transparence : d'après la partie 2.2.1, la transparence du système dépend uniquement des caractéristiques des robots maître et esclave. Les valeurs de α_f et α_d seront donc choisies indépendamment de ce critère.

Validation des conclusions sur un cycle d'approche-retrait

Pour valider les conditions énoncées précédemment, des expériences sur un cycle d'approche-retrait sont effectuées avec une poutre de raideur $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. D'après l'équation (2.35) et la figure 2.11(a), la valeur maximale du rapport R pour garantir la stabilité du système est : $R_{max} = 21.7$.

Le paramètre α_d est choisi en fonction des courses des robots maître et esclave. Pour obtenir un bon compromis entre confort et précision lors de la manipulation, la valeur $\alpha_d = 0.05 \cdot 10^6$ est retenue (la course du bras maître correspond alors à un déplacement de 5 µm pour le nanotranslateur). α_f est choisi de telle sorte que le système reste stable, i.e. que le critère de Routh-Hurwitz donné par l'équation (2.35) soit respecté. La valeur utilisée par la suite est $\alpha_f = 0.12 \cdot 10^6$.

Les résultats obtenus (forces envoyées à l'utilisateur) sont représentés sur la figure 2.12(a). Lors de la première phase (C), l'utilisateur applique des forces sur le substrat (la force haptique maximale ressentie est de 0.30 N). Lors du retrait, l'utilisateur doit compenser les forces résultant des effets d'adhésion (D). Il doit appliquer une force de -0.13 N pour décoller la poutre du substrat (E).

Le système reste stable et les forces renvoyées à l'interface haptique sont égales à celles mesurées par la photodiode amplifiées par α_f ($F_h = \alpha_f F_e$ d'après la structure du schéma de commande). L'opérateur ressent donc les différentes forces appliquées sur la poutre. Cependant, compte tenu de l'interface haptique utilisée, les efforts transmis à l'utilisateur sont trop faibles pour améliorer significativement la précision de la tâche accomplie. Le facteur d'amplification en effort doit être augmenté pour obtenir un meilleur retour haptique.

Lors de la seconde expérience, la valeur de α_d est identique à celle de l'expérience précédente, mais α_f est augmenté : $\alpha_f = 6.0 \cdot 10^6$. En prenant ces valeurs : $R = 120 > R_{max}$. Le critère de Routh-Hurwitz n'est plus satisfait. Par conséquent, il est prévu que le système soit instable.

Les résultats expérimentaux sont tracés figure 2.12(b). Les forces sont effectivement amplifiées par rapport à celles de la figure 2.12(a). Il est alors plus simple pour l'utilisateur de détecter les forces répulsives et



Figure 2.12 - Courbes d'approche-retrait pour une poutre de raideur $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, schéma de commande DFF

attractives (C, D), ainsi que la grande variation de force due au *pull-off* (E). Cependant, la stabilité du système est dégradée. Quand la poutre entre en contact avec le substrat, des oscillations de forte amplitude sont créées dans le système (O). L'utilisateur doit agir comme un amortisseur pour absorber l'excès d'énergie responsable de ces instabilités.

Pour un facteur d'échelle en position donné, un compromis entre stabilité et facteur d'amplification en effort doit être trouvé pour utiliser le schéma *DFF*.

2.3.2 Couplage Force Position

Contrairement à l'étude qui a été faite sur le schéma DFF, le résultat du critère de Routh-Hurwitz dans le cas du couplage FP est trop complexe pour être interprété analytiquement et pour mettre en évidence l'influence des différents gains. Une approche différente est donc considérée. Dans un premier temps, des relations entre les gains de ce schéma sont données notamment en considérant des conditions nécessaires de stabilité obtenues pour des cas particuliers. Des valeurs numériques sont ensuite choisies en fonction de ces règles et des critères de transparence énoncés dans la partie 2.2.2. La stabilité du schéma de couplage est ensuite vérifiée numériquement à l'aide du critère de Llewelyn présenté au chapitre 1.

Détermination des gains des correcteurs

Facteurs d'échelle Comme pour le schéma DFF, α_f et α_d sont choisis en fonction des contraintes d'amplification qui dépendent à la fois des caractéristiques des robots maître et esclave utilisés, et des besoins spécifiques liés à la tâche. Selon les expériences, une manipulation précise et/ou une forte amplification des efforts sont nécessaires.

Correcteur C(s) (B_{fp} et K_{fp}) Pour mettre en avant l'influence des gains du correcteur C(s), [Gil 04] propose une simplification du schéma de commande dans les cas d'un contact avec un environnement infiniment rigide. La vitesse V_n est alors nulle, et la fonction de transfert en boucle fermée du système simplifié est :

$$\frac{V_h(s)}{F_{op}(s)} = \frac{H(s)}{1 + H(s)C(s)e^{-sT_e}}$$
(2.36)

Par un développement de Taylor à l'ordre 1 de $x \mapsto e^x$ autour de 0 $(T_e \to 0)$, $e^{-sT_e} \approx 1 - sT_e$. L'équation caractéristique du schéma de commande est alors :

$$(M_h - B_{fp}T_e)s^2 + (B_{fp} + B_h - K_{fp}T_e)s + K_{fp} = 0$$
(2.37)

D'après le critère de Routh-Hurwitz, le système est stable si et seulement si tous les coefficients de cette équation sont de même signe. Deux conditions doivent donc être respectées :

$$M_h > B_{fp}T_e \tag{2.38}$$

$$B_{fp} + B_h > K_{fp}T_e \tag{2.39}$$

Ces relations mettent en avant l'importance de la période d'échantillonnage qui doit être la plus faible possible. La raideur du couplage est limitée par la viscosité de l'interface haptique et celle ajoutée dans le couplage. De plus, la viscosité ajoutée par le couplage (et par conséquent, la raideur maximale du couplage) est limitée par l'inertie du bras maître. Ces conclusions sont en accord avec celles données dans [Gil 04].

Correcteur proportionnel G_n La période d'échantillonnage étant très faible l'étude de la stabilité du schéma de couplage est faite dans le domaine continu. Cependant, les calculs sont réalisés de manière discrète lors de l'implémentation. La force f_h à l'instant k + 1 est déterminée en utilisant les informations de position et de vitesse à l'instant k (cf. figure 2.8) :

$$f_h(k+1) = B_{fp}\Delta \dot{x}(k) + K_{fp}\Delta x(k) \tag{2.40}$$

où :

$$\begin{aligned} \Delta \dot{x}(k) &= \alpha_d \dot{x}_n(k) - \dot{x}_h(k) \\ \Delta x(k) &= \alpha_d x_n(k) - x_h(k) \end{aligned} \tag{2.41}$$

Pour des raisons similaires, le calcul de \dot{x}_n est :

$$\dot{x}_n(k+1) = G_n \left[f_e(k) - \frac{1}{\alpha_f} f_h(k) \right]$$
(2.42)

En considérant les équations (2.40) et (2.42) et le fait que la position x_n est calculée par l'approximation de Tustin, lorsque la poutre est loin du substrat (aucune force appliquée sur la poutre i.e. $f_e = 0$) f_h est donnée par :

$$f_h(k+1) = \lambda_1 f_h(k-1) + \lambda_2 \dot{x}_h(k) + (\lambda_3 + \lambda_4) K_{fp}$$
(2.43)

où :

$$\lambda_1 = -G_n \left[\frac{B_{fp} \alpha_d + K_{fp} \alpha_d \frac{T_e}{2}}{\alpha_f} \right] \qquad \lambda_2 = -\left[B_{fp} + K_{fp} \frac{T_e}{2} \right] \\ \lambda_3 = \alpha_d \left[x_n(k-1) + \frac{\dot{x}_n(k-1)T_e}{2} \right] \qquad \lambda_4 = -\left[x_h(k-1) + \frac{\dot{x}_h(k-1)T_e}{2} \right]$$

Pour que les calculs numériques ne divergent pas, λ_1 est limitée. G_n doit donc être inférieur à une valeur maximale (condition de stabilité nécessaire) :

$$|\lambda_1| < 1 \iff G_n < \frac{\alpha_f}{\alpha_d K_{fp} \frac{T_e}{2} + \alpha_d B_{fp}} = G_{n_{lim}}$$
(2.44)

Cette condition dépend de la manière dont l'implémentation numérique du schéma de couplage est réalisée. Des solutions pour résoudre la boucle algébrique existent, et peuvent être exploitées pour rendre moins contraignante cette condition de stabilité. Compte tenu de l'implémentation choisie ici, il faudra néanmoins que les gains vérifient l'équation 2.44.

	Valeur minimale	Valeur maximale
K_{c}	haute pour garantir un ressenti du	$(2.38) (2.39) \rightarrow \frac{M_h}{M_h} + \frac{B_h}{M_h}$
\mathbf{n}_{fp}	contact raide (sec. $2.2.2$)	$(2.00); (2.00) + T_e^2 + T_e$
		faible pour garantir la transparence en
B_{fn}	$(2.38) \rightarrow K_{fn}T_e - B_h$	non contact (sec. $2.2.2$) et inférieure à
JP		$rac{M_h}{T_e}$ pour la stabilité
C	élevée pour garantir la transparence en	$(2 \Lambda \Lambda) \rightarrow \alpha_f$
G_n	contact et non contact (sec. $2.2.2$)	$(2.44) \rightarrow \frac{1}{\alpha_d K_{fp} \frac{T_e}{2} + \alpha_d B_{fp}}$

Fableau	2.5 -	Valeurs	admissibles	pour le	s gains	des	correcteurs	du	couplage	FP
----------------	-------	---------	-------------	---------	---------	-----	-------------	----	----------	----

Résumé Le choix des gains des correcteurs doit prendre en compte les conclusions sur la transparence données dans la partie 2.2.2 ainsi que celles sur la stabilité énoncées dans les paragraphes précédents. Le tableau 2.5 résume ces conditions, et donne la plage de variation des différents gains.

Comme le montre le paragraphe 2.2.2, G_n doit être élevé pour obtenir un système transparent en phase de contact et de non contact. D'après l'équation (2.44), pour des raisons de stabilité, G_n doit être inférieur à $\frac{\alpha_f}{\alpha_d K_{fp} \frac{T_e}{2} + \alpha_d B_{fp}}$. Donc diminuer B_{fp} et K_{fp} donne une valeur $G_{n_{lim}}$ plus élevée, et augmente la transparence.

 K_{fp} est limité par une valeur maximale pour vérifier le critère de Routh-Hurwitz. Cependant, comme expliqué précédemment, pour obtenir la meilleure transparence possible K_{fp} doit être suffisamment faible pour limiter la viscosité dans les phases de non contact par l'intermédiaire du paramètre $G_{n_{lim}}$.

Dans la limite des possibilités données dans le tableau 2.5, les facteurs homothétiques sont choisis selon des contraintes de mise à l'échelle.

Vérification numérique de la stabilité avec le critère de Llewelyn

Pour vérifier la stabilité du schéma de couplage, le critère de Llewelyn est utilisé. Conformément à l'expression donnée dans la partie 1.2.1 du chapitre 1, la matrice d'admittance \mathbf{Y} du couplage FP est :

$$\begin{bmatrix} V_h \\ -V_e \end{bmatrix} = \mathbf{Y}(z) \cdot \begin{bmatrix} F_{op} \\ F_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_{11}(s) & y_{12}(s) \\ y_{21}(s) & y_{22}(s) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} F_{op} \\ F_e \end{bmatrix}$$
(2.45)

où :

Les inégalités c_1 , c_2 et c_3 que doivent vérifier les coefficients de cette matrice sont données par les équations (1.9), (1.10) et (1.11) du chapitre 1. Elles seront testées numériquement en fonction des gains choisis pour les applications présentées dans les paragraphes suivants.

Validation des conclusions sur un cycle d'approche-retrait

Pour pouvoir comparer les résultats obtenus avec ceux du *DFF*, une première expérience avec une poutre ayant une raideur identique à celle de la partie 2.3.1 ($k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$) est réalisée avec les mêmes facteurs d'échelle ($\alpha_d = 0.05 \cdot 10^6$, $\alpha_f = 6 \cdot 10^6$). Les autres paramètres sont sélectionnés selon les résultats des analyses de transparence et de stabilité (tableau 2.5), et sont donnés dans le tableau 2.6.

Raideur $(N \cdot m^{-1})$	0.05	2.4	48.0
α_f	$200 \cdot 10^{6}$	$6 \cdot 10^{6}$	$0.2 \cdot 10^6$
α_d	$0.05 \cdot 10^{6}$	$0.05 \cdot 10^{6}$	$0.05 \cdot 10^{6}$
$B_{fp} (\mathrm{N} \cdot \mathrm{s} \cdot \mathrm{m}^{-1})$	1.2	2	1.5
$K_{fp} (\mathrm{N} \cdot \mathrm{m}^{-1})$	100	100	100
$G_n (\mathbf{m} \cdot \mathbf{N}^{-1} \cdot \mathbf{s}^{-1})$	2329	48	1.98

Tableau 2.6 - Valeurs des gains du schéma de couplage FP pour les cycles d'approche-retrait

Pour vérifier la stabilité globale du système pour les gains donnés, le critère de Llewelyn est appliqué. Les inégalités c_1 , c_2 et c_3 sont tracées dans le domaine fréquentiel sur la figure 2.13 pour différentes périodes d'échantillonnage. Le critère de Llewelyn est vérifié en basses fréquences. Cependant, en hautes fréquences, certaines inégalités ne sont plus vraies. La fréquence limite pour laquelle le système reste stable est matérialisée par un trait vertical sur la figure 2.13. Plus la période d'échantillonnage augmente, et plus cette limite diminue. Si la période est suffisamment faible (quelques millisecondes), le système reste utilisable car compte tenu de sa bande passante, les hautes fréquences sont atténuées.



Figure 2.13 - Critère de Llewelyn pour la poutre $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. Les valeurs numériques utilisées pour le tracé sont données dans le tableau 2.6. Les conditions de stabilité sont : $c_1 : Re(y_{11}) \ge 0, c_2 : Re(y_{22}) \ge 0$ et $c_3 : 2Re(y_{11})Re(y_{22}) - |y_{12}y_{21}| - Re(y_{12}y_{21}) \ge 0$.

Pour valider ces conclusions expérimentalement et comparer ce schéma de commande avec le couplage *DFF*, la même opération d'approche-retrait est effectuée. Les résultats obtenus (efforts transmis à l'utilisateur, et efforts mesurés et amplifiés par un facteur α_f) sont représentés sur la figure 2.14(a). Ils doivent être comparés à ceux de la figure 2.12(b). Le système reste stable pendant toute l'expérience, contrairement à la manipulation réalisée avec le couplage *DFF*. De plus, même si les forces renvoyées à l'utilisateur sont calculées à l'aide du correcteur *PI* (et non pas directement transmises après amplification), les efforts ressentis par l'opérateur reflètent les mesures puisque les courbes de F_h et $\alpha_f F_e$ sont similaires. Les oscillations présentes sur le tracé de F_h sont dues au couplage virtuel. Cependant, comme leur amplitude est faible elles ne nuisent pas au ressenti. Ainsi, même si ce schéma de commande est moins transparent que le *DFF*, le retour haptique est suffisamment fidèle pour que l'utilisateur puisse ressentir le phénomène de *pull-off* avec un pic de 1 N d'amplitude. L'étude réalisée précédemment apporte des conditions satisfaisantes pour le réglage des gains.



(a) Comparaison de la force d'interaction et de la force haptique pour une poutre de raideur $k_z = 2.4 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$. Force Position et de la méthodologie de réglage des gains par rapport à la raideur de la poutre.

Figure 2.14 - Courbes d'approche-retrait effectuées avec le schéma de commande FP

Pour montrer la robustesse de l'approche choisie par rapport à la raideur de l'environnement, cette expérience est réalisée pour des poutres de différentes raideurs (de 0.05 à 48 N \cdot m⁻¹). Le facteur d'échelle en déplacement est identique pour l'ensemble des expériences, et celui d'amplification des efforts est choisi pour que l'utilisateur puisse ressentir facilement le contact. Les gains des correcteurs sont déterminés en utilisant le tableau 2.5 et vérifiés ensuite numériquement par le critère de Llewelyn. Les paramètres choisis sont détaillés dans le tableau 2.6. Les résultats sont donnés figure 2.14(b). Il convient de noter que les expériences sont effectuées dans un environnement non contrôlé. Les conditions d'humidité et de température peuvent être modifiées entre les différentes expériences. Cependant, l'amplitude du phénomène de *pull-off* est effectivement plus importante pour des poutres souples.

L'étude sur la transparence et la stabilité donne des règles satisfaisantes pour le choix des gains. Ce schéma de couplage est adapté aux téléopérations à l'échelle nanoscopiques puisque le système reste stable malgré la diversité des raideurs des poutres utilisées (de $0.05 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ à 48 $\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$).

3 Applications

Après avoir étudié et comparé les performances des deux couplages haptiques, deux applications, une exploration et une opération, sont proposées pour valider les résultats. L'exploration consiste en un cycle d'approche-retrait dans lequel toutes les interactions doivent être ressenties. Par rapport aux résultats couramment présentés, et à ceux obtenus précédemment, cette contrainte inclut le phénomène de *snap-in*

qui est rarement transmis. Cette exploration nécessite un couplage possédant de bonnes qualités en terme de transparence. Le schéma DFF est donc choisi. L'opération est une tâche de roulement d'une bille de 25 µm de rayon avec un retour haptique bidimensionnel. Le premier critère que doit respecter le schéma de commande est la stabilité. Le schéma FP est ainsi sélectionné. Une stratégie de manipulation simple doit être mise en place pour fournir le retour haptique 2D. Bien que ces expériences soient plus originales que les cycles d'approche-retrait présentés dans les parties 2.3.1 et 2.3.2, leurs applications restent limitées. Leur but principal est la validation des règles et conclusions énoncées précédemment.

3.1 Exploration haptique : ressenti du phénomène de *snap-in* sur un cycle d'approche-retrait

Le *snap-in* (saut au contact) est un phénomène d'attraction de la poutre dû aux forces de van der Waals. Ces forces sont de faible amplitude (10 à 100 fois inférieures à celles du *pull-off*), mais sont très caractéristiques de ces échelles. Il est donc important de pouvoir les transmettre aux utilisateurs.

De par leur faible amplitude (quelques dixièmes de nanonewton), ces forces sont difficiles à faire ressentir. Un couplage adapté, le schéma *DFF*, avec des gains sélectionnés en conséquence doit être utilisé. Le coefficient d'amplification des efforts est fixé à $\alpha_f = 6700 \cdot 10^6$. Pour garantir la stabilité du système l'équation (2.35) ($\frac{\alpha_f k_{eq}}{\gamma_{DFF}} < \alpha_d$) doit être vérifiée. Ainsi : • pour se placer dans des conditions moins restrictives, une poutre de raideur inférieure à celle

- pour se placer dans des conditions moins restrictives, une poutre de raideur inférieure à celle utilisée pour les cycles d'approche-retrait de la partie 2.3.1 est choisie ($k_z = 0.05 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$),
- le rapport maximal des gains homothétiques est de $R_{max} = 1040$. Par rapport aux expériences précédentes, le coefficient en déplacement doit être augmenté pour garantir la stabilité du système $(\alpha_d = 50 \cdot 10^6)$.

Les résultats de cette expérience sont présentés sur la figure 2.15. La force d'interaction amplifiée, ainsi que la force transmise à l'utilisateur (i.e. après saturation) sont tracées. Le phénomène de *snapin* est clairement ressenti par l'utilisateur puisque la force haptique correspondante est d'environ 2 N. Cependant, deux points sont à noter :

- à cause de la différence d'amplitude, il n'est pas possible de transmettre les forces de *snap-in* sans saturer les forces de *pull-off*,
- pour garantir la stabilité, le coefficient en déplacement α_d est augmenté. Les mouvements sont donc très lents, et ce simple cycle d'approche-retrait a duré plus d'une minute et demie.



Figure 2.15 - Courbe d'approche-retrait pour une poutre de raideur $k_z = 0.05 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$, $\alpha_d = 50 \cdot 10^6$, $\alpha_f = 6700 \cdot 10^6$. $R < R_{max}$. Schéma de commande DFF

De par ses grandes qualités en terme de transparence, le schéma DFF est adapté pour des explorations, et des phénomènes de très faible amplitude (*snap-in* d'environ 0.3 nN) ont été ressentis. Cependant, les conditions de stabilité sont contraignantes, et imposent de fortes restrictions sur le choix des facteurs de mise à l'échelle parfois difficilement compatibles avec le profil des efforts d'interaction à l'échelle nanoscopique. Des gains homothétiques variables pourraient apporter une solution à ce problème.

3.2 Opération de roulement sur des microbilles avec retour haptique 2D

Lors de l'exploration présentée dans le paragraphe précédent, le retour haptique avait pour but de transmettre à l'utilisateur les efforts d'interaction s'appliquant sur la poutre. Une deuxième approche est considérée ici. Le retour haptique n'a plus pour but de refléter les forces nanoscopiques, mais de *fournir une aide lors d'une opération*. La mesure des forces appliquées sur la poutre est utilisée pour définir des indications sur l'état du système lors de la manipulation, comme notamment la position de l'objet sous l'outil. Celles-ci sont ensuite transmises par retour haptique à l'opérateur (figure 2.16).



Figure 2.16 - Relation entre la mesure des déformations et le retour haptique pour l'aide à la manipulation

Un exemple de téléopération 2D avec retour d'effort est proposé. Une poutre sans pointe est utilisée pour manipuler des objets par roulement. Cette technique est en effet une manière prometteuse de manipuler les objets (billes, nanotubes de carbone) à cette échelle. Elle est également utilisée pour déposer des objets collés à une poutre [Haliyo 06], ou pour indenter des surfaces [Tafazzoli 06]. Il faut noter que d'autres stratégies de manipulation, de même que des objets de tailles différentes, auraient pu être choisis. Le roulement est une des applications possibles pour étudier le principe de l'utilisation du retour haptique pour fournir des renseignements sur l'état du système lors d'une opération.

3.2.1 Calcul des forces haptiques

Durant l'opération de roulement, l'outil cache l'objet qui n'est alors plus visible sur l'image issue du microscope optique. Les forces haptiques ont donc pour but de fournir à l'utilisateur des indications sur la position $P(x_p, y_p)$ de l'objet par rapport à l'outil. Elles sont basées sur les mesures issues de la photodiode pour une poutre sans pointe. Les expressions reliant efforts et tension de sortie du capteur ont été déterminées dans la partie 1.2.2.

Roulement longitudinal Dans [Haliyo 06], les auteurs démontrent que pour faire rouler des objets sans glissement, un effort du même ordre de grandeur que la force de *pull-off* doit leur être appliqué. Comme la poutre est inclinée de quelques degrés par rapport au plan (x, O, y) (cf. figure 2.4) la déflexion à son extrémité est maintenue constante en asservissant la position de l'origine de la poutre pour appliquer cette force.

La position initiale de la bille sous la poutre est notée $x_p(0)$. Ce point est supposé être connu (estimation de sa position à l'aide du module de vision par exemple). La position de la poutre selon l'axe x à l'instant $k, x_c(k)$, est également connue (indication donnée par le nanotranslateur). Comme le mouvement effectué est un roulement sans glissement, la position de la sphère x_p à l'instant discret k est estimée à partir de l'expression :

$$x_p(k) = x_p(0) + \frac{x_c(k) - x_c(0)}{2}$$
(2.46)

Pour le roulement selon l'axe longitudinal, la bille est située initialement à l'extrémité de la poutre, sur sa ligne médiane (point $E(x_{max} = L, 0)$ figure 2.4). Sa position selon l'axe y est maintenue constante afin que la poutre ne subisse pas de torsion : $\phi(L, 0) = 0$. La poutre est ensuite déplacée selon l'axe x, pour faire rouler la bille. Pour fournir à l'utilisateur des informations sur la position de l'objet manipulé, une force modifiée f_{em}^x est définie de sorte que sa valeur soit minimale lorsque la bille est à l'extrémité de la poutre et qu'elle augmente quand la bille se rapproche de l'origine : l'utilisateur doit fournir un effort pour l'éloigner de l'extrémité de la poutre. Cette force est calculée à partir de la force normale f_e^z appliquée par la bille sur la poutre, déterminée partie 1.2.2, par l'équation (2.11) rappelée ici :

$$f_e^z(x_p, y_p) = k_z(x_p)\delta_z(x_p, y_p)$$
(2.47)

Cependant, comme expliqué au paragraphe 1.2.2, $\delta(L, y_p)$ n'est pas disponible car le laser est focalisé au point (L,0). f_{em}^x est donc calculée par l'équation (2.48):

$$f_{em}^{x}(x_p, y_p) = \frac{2L^3}{x_p^2(3L - x_p)} k_z(L)\delta_z(L, 0)$$
(2.48)

où $\delta_z(L,0)$ est mesurée en utilisant la photodiode (cf. équation (2.3)).

L'allure de la force est donnée sur la figure 2.17(a) (comme précisé ci-dessus, la position de l'origine de la poutre est asservie telle que $\delta(L, 0)$ soit constante).



Figure 2.17 - Profil des efforts fournis à l'utilisateur

Cette force est effectivement minimale à l'extrémité de la poutre. Pour que ce point représente une position d'équilibre pour l'utilisateur, un *offset* sera utilisé pour rendre la force nulle.

Roulement latéral Pour le roulement latéral, la position selon l'axe x est constante, et la poutre est déplacée selon l'axe y. Lors de l'exécution de tâches de roulement, il est important de conserver la bille sur la ligne médiane de la poutre, pour ne pas perdre le contact entre l'objet et l'outil. Pour aider l'utilisateur à maintenir la bille sur cette ligne, une force f_{em}^y lui est envoyée par l'interface haptique. Elle est choisie afin de correspondre à la force qu'il faudrait appliquer avec le bras de levier de longueur $||y_p||$ pour remettre la poutre horizontale⁴, $\frac{M_t(x_p, y_p)}{||y_p||} \dot{D}$ 'après les équations (2.16) et (2.17) déterminées dans la partie 1.2.2, le moment qui correspondrait à l'angle de rotation s'exprime par :

$$M_t(x_p, y_p) = k_{t_{\phi}}(x_p) \left[\frac{f_e^z(x_p, y_p)}{2EI_x} y_p^2 + \phi(x_p, 0) \right]$$
(2.49)

⁴L'origine de l'axe y étant définie sur la ligne médiane de la poutre (figure 2.4), $||y_p||$ correspond à la distance selon l'axe y entre le point P et la ligne médiane de la poutre.
Cependant, d'après l'équation (2.49), la variation de cette force n'est pas facilement interprétable. Nous proposons de linéariser cette expression :

$$f_{em}^y(x_p, y_p) = \frac{M_t(L, 0)}{\frac{w}{2}} = \frac{k_{t_\phi}(L)}{\frac{w}{2}}\phi(L, 0)$$
(2.50)

où $\phi(L,0)$ est la mesure de la rotation donnée par la sortie de la photodiode (cf. équation (2.4)).

Les variations de la force f_{em}^y sont représentées figure 2.17(b). Selon le signe de $\phi(L,0)$, cette force est positive ou négative. Plus $\phi(L,0)$ est important, plus l'amplitude de la force augmente. Envoyée à l'utilisateur à l'aide de l'interface haptique, cette force va en effet l'aider à maintenir la sphère sur la ligne médiane de la poutre (qui est l'ensemble des points pour lesquels la rotation est nulle). Comme l'angle augmente quand le point d'application de la force $f_e^z(x_p, y_p)$ s'éloigne de la ligne médiane, et que f_{em}^y est proportionnelle à l'angle, le retour d'effort peut également aider l'utilisateur à estimer la position de la sphère sous la poutre.

Roulement 2D Les forces f_{em}^x et f_{em}^y transmises à l'utilisateur sont découplées. Des opérations de roulement 2D sont effectuées en utilisant le retour d'effort décrit dans la partie 3.2.1. Les forces données par les équations (2.48) et (2.50) sont alors envoyées sur deux axes différents de l'interface haptique.

3.2.2 Ressenti des efforts

La stratégie décrite partie 3.2.1 est évaluée à l'aide d'expériences de roulement sur des billes de verre ayant un rayon de $25 \ \mu m$.

Roulement longitudinal Dans cette partie, une expérience de roulement selon l'axe x de la poutre est présentée. La position verticale de la poutre est asservie de sorte que la flexion à son extrémité soit constante. La valeur choisie est $\delta(L, 0) = 0.7$ µm. Cette valeur correspond à une force de 1.7 µN quand la bille est au point E.

Au cours de l'expérience, l'utilisateur fait rouler la bille du point $x = x_{max} = L$ (extrémité de la poutre) vers l'origine de la poutre jusqu'au point x_{min} , puis retourne à un point situé entre x_{min} et x_{max} , noté x_{int} (pour x intermédiaire). L'opérateur manipule ensuite la bille d'avant en arrière autour de la position x_{int} . Les résultats sont donnés par la figure 2.18(a). La position de la bille selon l'axe x, ainsi que les forces transmises à l'opérateur f_h^x sont représentées.

Les valeurs des gains des correcteurs sont choisies selon le tableau 2.5. Elles sont précisées dans la légende de la figure 2.18(a) qui présente les résultats expérimentaux. Compte tenu du facteur de déplacement α_d^x utilisé, un mouvement de 1 cm de la poignée de l'interface haptique correspond à un mouvement de 0.2 µm pour la poutre. Au cours de l'expérience, la poutre est manipulée sur environ 40 µm. La poignée de l'interface haptique doit donc être déplacée de 2 m. Comme l'espace de travail du bras maître est limité, (environ 35 cm pour l'axe x), une fonction permettant de recaler la position de l'interface haptique sans bouger la poutre est implémentée. Les paliers apparaissant sur le tracé de la position selon l'axe x sont dus à ce recalage : la poutre est immobile pendant cette opération, et par conséquent, la force renvoyée à l'utilisateur est constante⁵.

Conformément aux conclusions de la partie 3.2.1 (figure 2.17(a)), et aux résultats expérimentaux de la figure 2.18(a), la force envoyée à l'utilisateur augmente lorsque la sphère s'éloigne de l'extrémité de la poutre. Pour $x = x_{max}$, la force est nulle. L'opérateur doit fournir un effort pour éloigner la bille de cette

⁵Cette remarque est également valable pour la figure 2.18(b).



Figure 2.18 - Positions et forces pendant les expériences de roulements longitudinal et latéral

position d'équilibre. Le retour d'effort aide également l'utilisateur à estimer la distance entre la bille et le point $x = x_{max}$, puisque sa valeur augmente quand la bille s'éloigne de ce point.

Roulement latéral Comme pour le roulement sur la longueur, la déflexion verticale de la poutre est maintenue constante. Sa position selon l'axe x est également fixe.

L'utilisateur déplace la poutre selon l'axe y. Commençant sur la ligne médiane (y = 0), il déplace la bille dans le sens négatif (phase 1), puis positif (phase 2). Phase 3, il effectue des alternances rapides entre les sens positif et négatif (cf. figure 2.18(b)). L'utilisateur ressent la force f_h^y , calculée à partir de f_{em}^y (cf. équation (2.50)).

Les valeurs des gains sont données dans la légende de la figure 2.18(b). Le facteur d'échelle en déplacement est identique à celui utilisé pour le roulement longitudinal car la précision désirée pour la manipulation est inchangée. Compte tenu de la stratégie retenue pour le calcul de la force f_{em}^y , son amplitude est environ 10 fois plus importante que celle de f_{em}^x . Comme il est souhaitable de renvoyer à l'utilisateur des forces f_h^x et f_h^y du même ordre de grandeur, le coefficient d'amplification en effort a été diminué d'un facteur 10. Le gain B_{fp}^y doit être augmenté pour ajouter des frottements dans le système. Ces derniers limitent les oscillations dues à l'alternance entre les forces positives et négatives qui a lieu quand la bille passe du côté gauche au côté droit de la poutre et vice-versa. Comme pour le roulement latéral, G_n^y est calculé selon la valeur des autres gains. A cause des différences entre les gains utilisés pour les axes x et y, le gain G_n^y est plus faible que celui pour l'axe x.

Comme prévu dans la partie 3.2.1, l'utilisateur ressent une force qui le guide pour ramener la poutre dans une position d'équilibre (angle de rotation nul). Les forces renvoyées permettent à un utilisateur non entrainé de ressentir distinctement de quel côté de la poutre la sphère est située. De plus, il a été vérifié expérimentalement que le système restait stable même si l'utilisateur créait de petites oscillations (cf. tracé pour t = 22 s environ).

Roulement 2D Cette expérience consiste à combiner les roulements selon la longueur et la largeur, pour effectuer une tâche de roulement 2D avec retour d'effort. Ceci est possible puisque les signaux utilisés sont indépendants : les forces f_{em}^x et f_{em}^y calculées ne sont pas couplées. Elles peuvent donc être retournées à l'utilisateur sur deux axes de l'interface haptique.

Comme pour les roulements longitudinal et latéral, la déflexion $\delta(L, 0)$ est maintenue constante. Le mouvement effectué par l'utilisateur dans le plan (xOy) est représenté figure 2.19(a). La trajectoire est globalement circulaire, mais des formes particulières ont été ajoutées pour mieux distinguer la correspondance entre les forces retournées à l'utilisateur et le mouvement effectué. Le mouvement a été répété trois fois pour vérifier que pour une position de la bille donnée, les forces ressenties par l'utilisateur sont identiques. Les gains utilisés sont ceux donnés pour les expériences précédentes.



Figure 2.19 - Positions et forces dans le plan (xOy) au cours de l'expérience de roulement 2D

Les forces transmises à l'utilisateur au cours de cette expérience sont données figure 2.19(b), où la force latérale est tracée en fonction de la force longitudinale. Comme l'utilisateur a effectué ces trois cercles sans atteindre l'extrémité de la poutre, la force f_h^x n'est jamais nulle. Pour une position donnée, l'opérateur ressent la même force au cours de ces trois expériences, comme souligné par les points caractéristiques P_1 , P_2 et P_3 . Il peut donc estimer la position de la sphère sous la poutre à l'aide de ce retour d'effort.

3.2.3 Analyse de l'opération de roulement

Au cours de ces expériences, les forces ressenties par l'utilisateur apportent des indications sur l'état du système puisqu'il doit fournir un effort pour éloigner la bille de sa position d'équilibre (point E). Ceci est rendu possible grâce à une définition appropriée des efforts retournés, et à l'utilisation d'un schéma de commande et d'une méthodologie de réglage des gains adaptés.

3.3 Analyse des applications

Au cours de cette étude, plusieurs points ont été traités, notamment :

- l'influence de l'environnement sur le couplage haptique. Bien que la modélisation des interactions poutre-substrat par un ressort équivalent soit simplificatrice, elle met en évidence que la stabilité est d'autant plus dure à assurer que la raideur de l'environnement est importante.
- l'influence des spécificités de la téléopération à l'échelle nanoscopique. Les facteurs homothétiques introduits pour mettre à l'échelle les différentes grandeurs rendent la stabilité difficile à garantir. Un compromis entre amplification des efforts, facilité de manipulation et stabilité doit être trouvé. Un deuxième point abordé lors de l'exploration haptique du cycle d'approche-retrait est la grande différence d'ordre de grandeur entre les phénomènes de *snap-in* et de *pull-off*, et des problèmes engendrés par les couplages haptiques à gains constants. Ce sujet sera plus largement traité au chapitre 4.

• la mise en place de règles pour le choix de gains. A partir de critères de transparence et de stabilité, des conditions sur les différents gains des couplage haptiques sont déterminées, puis testées expérimentalement sur un cycle d'approche-retrait. Les résultats sont concluants sur ces exemples.

Il ressort également de cette étude que les deux schémas de couplage présentent des qualités complémentaires. Selon l'application voulue, l'un ou l'autre sera préféré.

4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, deux schémas de couplage largement utilisés à l'échelle macroscopique sont étudiés pour la téléopération à l'échelle nanoscopique. Il sont analysés et comparés en termes de transparence et de stabilité, qui sont les deux outils principaux pour l'étude des schémas de téléopération. L'influence de l'environnement et du changement d'échelle est mise en évidence. Un compromis entre facilité de manipulation, amplification des efforts et stabilité doit être trouvé. Des règles pour le choix des gains des correcteurs sont déterminées, puis testées sur des cycles d'approche-retrait. Les deux schémas de commande présentant des qualités complémentaires (très bonne transparence pour le schéma DFF, et stabilité pour le schéma FP), deux applications sont réalisées. La première est une exploration haptique dans laquelle les phénomènes d'interaction les plus fins sont transmis aux utilisateurs (*snap-in* de quelques dixièmes de nanonewton). La seconde est une opération de roulement de billes de 25 µm de rayon. Le retour haptique est utilisé dans ce cas pour transmettre des informations sur l'état du système, notamment la position de l'objet sous l'outil, qui ne sont pas disponibles par le retour visuel.

Les résultats obtenus sont prometteurs, mais leurs applications restent limitées. Deux points majeurs de la téléopération à l'échelle nanoscopiques devront être traités pour rendre possible des manipulations complexes :

- la limitation due aux couplages haptiques à gains constants. De part la différence d'ordre de grandeurs entre les différents phénomènes caractéristiques à ces échelles et la gamme limitée de forces qu'il est possible de transmettre aux utilisateurs à travers une interface haptique, une amplification constante des efforts ne permet pas de rendre toute la diversité des interactions nanoscopiques.
- la nécessité de mettre en place des stratégies adaptées pour fournir un retour haptique selon plusieurs axes, capable de transmettre des informations précises sur l'état du système.

Ces différents aspects seront détaillés au chapitre 4.

Chapitre 3

Schémas de couplage haptique pour la téléopération virtuelle

Deux schémas de couplage ont été analysés au chapitre précédent pour la téléopération directe à l'échelle nanoscopique. La principale spécificité de ces schémas de couplage vient des facteurs homothétiques introduits pour mettre à l'échelle les variables entre le bras maître et l'outil de manipulation. Ces facteurs se retrouvent dans les schémas de couplage pour la téléopération virtuelle.

Au delà de la mise à l'échelle, d'autres problèmes se posent dans le cadre de la téléopération virtuelle. Au cours de ce chapitre, les difficultés inhérentes à ce type de téléopération sont analysées, et des schémas de commande sont proposés pour obtenir un système avec un large champ d'application. L'exemple de la simulation moléculaire est choisi car les applications, notamment en pharmacologie, sont prometteuses. De plus, cet exemple rend compte des difficultés caractéristiques de ce type de téléopération puisque les molécules sont des sytèmes comportant un grand nombre de degrés de liberté (plusieurs centaines ou milliers), et les temps de calcul sont importants. Le simulateur utilisé, SAMSON, est détaillé. C'est en effet un élément clef car son architecture détermine les schémas de couplage possibles. Les temps de calcul importants seront pris en compte dans l'analyse des schémas. Dans la très grande majorité des simulations moléculaires, l'utilisateur contrôle la position des objets. Cependant, ce mode de manipulation conduit à de fortes instabilités car avant la phase de mise à jour, la validité de cette position n'est pas garantie. Un schéma de commande par lequel l'utilisateur applique un effort sur l'objet est considéré. Bien que déjà introduit pour des systèmes de téléopération moléculaire [Stone 01], ce mode de manipulation n'a pas été étudié en détails pour cette application. Ces deux modes de manipulation et les schémas de commande associés sont comparés en termes d'intégration dans le simulateur, de transparence, et de sensibilité de la stabilité. Cette sensibilité est définie comme la variation de la norme des racines de l'équation caractéristique des schémas de couplage par rapport à un paramètre donné. La diversité des modes de manipulation assure un large champ d'application qui sera détaillé par la suite. Par rapport aux travaux précédents, la variété des expériences possibles font de ce système une première étape vers l'usage de la téléopération pour l'ensemble des étapes de la conception moléculaire interactive.

Dans une première partie, le logiciel de simulation SAMSON est présenté. Grâce à une représentation des molécules sous forme d'arbre, les équations du mouvement sont résolues de manière récursive pour

l'ensemble du système moléculaire. Les efforts d'interaction sont disponibles directement, la flexibilité du système est simulée et les calculs sont rapides (quelques centaines de millisecondes pour les systèmes complexes).

Dans une seconde partie, deux schémas de commande correspondant aux deux modes de manipulation sont analysés en termes d'intégration dans le simulateur, de transparence et de stabilité. Les différences par rapport aux schémas pour la téléopération directe sont mises en évidence. En particulier, les retards liés aux temps de calcul sont considérés.

Grâce à ces deux modes de manipulation, différentes applications sont envisageables, et couvrent une grosse partie des fonctionnalités nécessaires pour l'analyse de nouvelles structures moléculaires. Les principales d'entre elles, le déplacement des molécules, la modification de leur configuration et la recherche de points d'équilibre, sont traitées dans la troisième partie. Elles sont également utilisées pour illustrer les conclusions des paragraphes précédents.

1 Couplage entre la simulation moléculaire et le bras haptique

D'après les utilisateurs des simulateurs moléculaires, en particulier les pharmacologues et les biologistes, le système de téléopération doit remplir plusieurs critères pour être utilisable pour l'analyse de structures moléculaires. Il doit permettre notamment la manipulation de molécules entières, la mesure de leurs propriétés, et une bonne compréhension des interactions moléculaires. En plus de ces différentes qualités, le système de téléopération doit présenter :

- un simulateur rapide et précis, calculant les interactions moléculaires et simulant la flexibilité du système,
- plusieurs modes de manipulation (molécule entière ou un seul atome), différents retours haptiques (force d'interaction interne et externe),
- un schéma de couplage transparent et stable malgré les temps de simulation.

Pour remplir ces critères, deux composantes sont concernées : le logiciel de simulation, et le couplage haptique. Ces deux éléments sont donc analysés dans cette partie.

1.1 Le logiciel de simulation SAMSON

Le logiciel de simulation moléculaire utilisé est SAMSON (figure 3.1), développé par l'INRIA, en collaboration avec le CEA [Rossi 07], [Grudinin 10]. Il est basé sur une méthode quasi-statique, et ses principales caractéristiques sont :

- l'accès à l'équation du mouvement, qui permet d'agir sur la molécule et d'avoir accès aux forces d'interaction.
- la simulation de la flexibilité des molécules en prenant en compte les degrés de liberté internes. Certaines parties du système moléculaire peuvent être rigidifiées pour diminuer les temps de simulation. L'algorithme utilisé minimise alors la perte de précision des résultats (voir partie 1.1.3).
- plusieurs champs de forces sont utilisables. Dans ces travaux, le champ de forces est basé sur le champ de forces moléculaire CHARMM [Brooks 83], qui modélise les interactions en se basant principalement sur les forces de van der Waals et les forces électrostatiques.

Pour résoudre l'équation du mouvement de chaque corps rigide, le simulateur suit les approches traditionnelles : à chaque pas de temps, les forces interatomiques sont calculées. L'accélération du système est ensuite déterminée, et utilisée pour mettre à jour sa configuration et simuler la flexibilité interne. Cette opération est réalisée efficacement grâce à une représentation de la molécule sous forme d'arbre. Les forces et les accélérations sont calculées récursivement depuis la racine jusqu'aux feuilles, après avoir déterminé récursivement les coefficients de l'équation par un parcours de l'arbre dans le sens bas-haut.



Figure 3.1 - Interfaçage du bras haptique avec le logiciel de simulation

Par cette approche, des systèmes possédant des centaines de degrés de liberté sont simulés en quelques dixièmes de seconde. Deux points sont donc particulièrement importants : le choix de la représentation du système moléculaire, et le principe de résolution de l'équation du mouvement. Ils sont détaillés dans les paragraphes suivants.

1.1.1 Représentation et simulation du système moléculaire

Les molécules sont des systèmes flexibles composés de centaines de degrés de liberté. La position de chaque atome par rapport à ses voisins dépend des forces internes et externes appliquées. Pour simplifier les simulations, une approche courante consiste à rigidifier certaines liaisons entre les atomes. Par la suite, le terme *corps rigide* désignera un atome, resp. un groupe d'atomes suivant que les liaisons entre les atomes sont ou non simulées.

Pour déterminer la nouvelle configuration de la molécule, l'équation du mouvement est résolue à chaque pas de temps sur chacun des corps rigides d'inertie \mathbf{I} , de vitesse \mathbf{v} , et soumis à une force $\mathbf{f}_{\mathbf{k}}$ ne dépendant pas de l'accélération. Cette force inclut en particulier les effets des ressorts, amortisseurs, et champs de forces. L'équation du mouvement s'écrit :

$$\mathbf{f} + \mathbf{f}_k = \frac{d}{dt} (\mathbf{I} \mathbf{v}) \tag{3.1}$$

où \mathbf{f} est une force inconnue.

En utilisant la notation spatiale (vecteur \mathbf{f} composé de moments et de forces, et vecteur \mathbf{v} composé de vitesses de rotation et de vitesses linéaires), l'équation (3.1) s'écrit :

$$\mathbf{f} = \mathbf{I}\mathbf{a} + \mathbf{v} \times \mathbf{I}\mathbf{v} - \mathbf{f}_k \tag{3.2}$$

où **a** est l'accélération du corps rigide, et \times représente l'opérateur de produit croisé, comme défini dans [Featherstone 87]. Dans cette équation, les positions et vitesses de chaque corps rigide et les forces indépendantes de l'accélération \mathbf{f}_k sont connues. Les accélérations **a** et les forces dépendant de l'accélération \mathbf{f} sont inconnues.

Soit un corps articulé formé de corps rigides, avec un ensemble de connecteurs¹ (voir figure 3.2). Ces connecteurs correspondent à des points sur lesquels des efforts sont appliqués. L'équation (3.2) s'écrit

¹Le terme anglais handle est traduit ici par connecteur.



Figure 3.2 - Assemblage de deux corps articulés [Redon 05]

alors :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}_{1} \\ \mathbf{a}_{2} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Phi_{1} & \Phi_{12} & \cdots & \Phi_{1m} \\ \Phi_{21} & \Phi_{2} & \cdots & \Phi_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{m1} & \Phi_{m2} & \cdots & \Phi_{m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f}_{1} \\ \mathbf{f}_{2} \\ \vdots \\ \mathbf{f}_{m} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{b}_{1} \\ \mathbf{b}_{2} \\ \vdots \\ \mathbf{b}_{m} \end{bmatrix}$$
(3.3)

où :

$$\mathbf{\Phi}_i = \mathbf{\Phi}_{ij} = \mathbf{I}^{-1} \tag{3.4}$$

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{I}^{-1}(\mathbf{f}_k - \mathbf{v} \times \mathbf{I}\mathbf{v}) \tag{3.5}$$

avec :

- \mathbf{a}_i accélération spatiale 6×1 du connecteur i,
- \mathbf{f}_i force spatiale 6×1 appliquée sur le connecteur i,
- \mathbf{b}_i accélération du connecteur i si toutes les forces appliquées sur les connecteurs du corps articulé sont nulles,
- Φ_i inertie inverse 6×6 du corps articulé du connecteur i,
- Φ_{ij} inertie inverse de couplage mutuel 6×6 entre les connecteurs i et j.

Pour résoudre efficacement ces équations, le système moléculaire est représenté de manière récursive selon l'approche "diviser pour régner" (divide and conquer). Chaque groupe d'atome non rigide est considéré comme étant l'union de deux groupes d'atomes. Le système moléculaire est donc représenté sous forme d'arbre. Chaque feuille est un corps rigide défini par l'utilisateur (atome ou groupe d'atomes), figure 3.3 (a). Ces corps sont liés deux à deux par des liaisons, représentées par les noeuds supérieurs (cf. figures 3.3 (b) - 3.3 (c)). La racine (figure 3.3 (d)) représente le système moléculaire complet. Il est possible de représenter l'ensemble des molécules, y compris celles possédant des boucles internes, sous cette forme [Featherstone 99b].

1.1.2 Principe de résolution de l'équation du mouvement

La résolution de l'équation (3.1) est basée sur l'algorithme de R. Featherstone [Featherstone 99a]. Quatre parcours de l'arbre représentant le système moléculaire sont nécessaires pour résoudre entièrement les équations. Les deux premiers, allant respectivement de bas en haut et de haut en bas, servent à calculer les nouvelles positions et vitesses des corps rigides à partir des accélérations et positions des liaisons. Les matrices de passage entre les différents corps rigides sont également calculées. Les deux parcours suivants sont appelés parcours principal (de bas en haut), et substitution arrière (de haut en bas). Les coefficients de l'équation du mouvement sont calculés lors du parcours principal. Les forces de contrainte, ainsi



Figure 3.3 - Représentation de la molécule de tétra-alanine. (a) : les feuilles représentent les corps rigides définis par l'utilisateur (atomes ou groupe d'atomes), (b)-(c) : les noeuds internes représentent les sous systèmes, (d) : la racine représente le système moléculaire total. Les traits parallèles désignent les degrés de liberté internes [Rossi 07].

que les accélérations de chaque liaison, sont déterminées lors de la substitution arrière. Le détail des calculs effectués est donné en annexe B. Par la représentation particulière du système moléculaire, et les différents parcours de l'arbre correspondant, l'ensemble des accélérations, positions et forces sont connues pour chaque corps rigide. Pour résoudre plus efficacement l'équation du mouvement, il est possible de calculer ces paramètres sur certaines parties de l'arbre uniquement. Cette particularité est détaillée au paragraphe suivant.

Une simplification couramment utilisée pour réduire la complexité des calculs réalisés par le simulateur, et ainsi augmenter la fréquence de mise à jour du système moléculaire, est d'introduire un terme de coupure, ou distance de *cut-off*. Les contributions du potentiel de van der Waals et celles du potentiel électrostatique, dont les portées théoriques sont infinies, sont ainsi limitées, et les termes jugés négligeables ne sont pas considérés. Dans la plupart des simulateurs, cette distance est fixée à une dizaine d'angströmes.

1.1.3 Adaptativité des degrés de liberté simulés

Pour diminuer les temps de calculs, une simplification courante est de rigidifier certaines parties des molécules. Avec la représentation des molécules retenue dans SAMSON, cette approximation revient à calculer les accélérations uniquement dans un certain sous arbre de l'arbre total (région active sur la figure 3.4).

Les accélérations des noeuds non inclus dans cette région active sont considérées comme étant nulles. En activant uniquement une partie de l'arbre, du temps est gagné sur le calcul des accélérations et des forces interatomiques pour le pas de temps suivant, car seules les forces des groupes non rigides sont recalculées.

Cependant, cette approche détériore la précision de la simulation. Pour limiter cette conséquence, SAMSON détermine adaptativement quels sont les degrés de liberté les plus importants au cours de la manipulation (partie des molécules fortement déformées). Ce choix est fait sur une mesure basée sur l'accélération, mise sous la forme d'une somme pondérée des accélérations dans les liaisons d'un corps



Figure 3.4 - Arbre représentant le système moléculaire dans le cas où seuls certains degrés de liberté sont activés [Rossi 07]

articulé [Redon 06] :

$$\mathcal{A}(C) = \sum_{i} \ddot{\mathbf{q}}_{i}^{T} \mathbf{A}_{i} \ddot{\mathbf{q}}_{i}$$
(3.6)

où \ddot{q} est l'accélération articulaire. Quand cette accélération est importante pour un corps articulé donné, l'une au moins de ses liaisons a une accélération importante. Cette somme des normes des accélérations dans les liaisons peut être déterminée lors du parcours principal de l'arbre. Elle est donc déterminée *avant* de calculer la valeur de l'accélération dans chacune des liaisons. Le parcours de l'arbre lors de la phase de substitution arrière est alors limité à un sous arbre.

Ainsi l'algorithme adaptatif se concentre sur les degrés de liberté dont l'accélération est la plus importante, et évite les calculs sur des parties du système moléculaire dont les déplacements sont faibles. Les détails de cet algorithme sont donnés dans [Rossi 07]. Cette spécificité est utilisée dans la partie 3.1 pour diminuer le temps de simulation et observer l'influence de ce paramètre sur la stabilité des schémas de commande.

1.2 Interfaçage du bras haptique avec SAMSON

Un bras à retour d'effort est connecté au logiciel de simulation pour améliorer l'intuitivité du système (voir figure 3.1). L'interface haptique utilisée est un *Phantom Omni* fabriqué par *SensAble*. Ce bras a 6 degrés de liberté de mouvement, et 3 de retour d'effort, avec une inertie $M_h = 0.072$ kg et une viscosité $B_h = 0.005$ N.s.m⁻¹ [Diolaiti 06]. La force maximale qu'il peut retourner est 3.3 N. Dans ce chapitre, les efforts sont saturés à 3 N pour éviter toute déterioration du bras maître. Le kit de développement OpenHaptics est choisi pour la communication avec l'interface. L'ordinateur utilisé possède un processeur Intel de 3 GHz, sous Windows.

SAMSON est un logiciel ouvert. Le couplage entre le bras haptique avec le simulateur est donc directement intégré dans les équations du mouvement. La flexibilité offerte par cette architecture autorise une grande diversité des schémas de couplage pouvant être utilisés. Les possibilités offertes par SAMSON sont détaillées dans les paragraphes suivants.

1.2.1 Modes de manipulation

L'équation du mouvement résolue par l'algorithme de Featherstone (équation (3.2)) se réécrit :

$$\mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext} = \mathbf{I}\mathbf{a} + \mathbf{v} \times \mathbf{I}\mathbf{v} \tag{3.7}$$

où \mathbf{f}_{int} représente la somme des forces internes, et \mathbf{f}_{ext} est la somme des forces appliquées par les autres molécules avec $\mathbf{f}_{int} + \mathbf{f}_{ext} = \mathbf{f} + \mathbf{f}_k$. Pour que l'utilisateur puisse manipuler la molécule (ou l'un des corps

rigides), son action doit être prise en compte lors de la résolution de cette équation. Deux solutions sont possibles :

- Mode position La première solution pour manipuler l'objet sélectionné est de contrôler sa position. Dans l'algorithme, la position instantanée est alors définie par l'utilisateur au lieu d'être déterminée à partir de l'accélération calculée. Les degrés de liberté internes sont simulés à partir de l'équation (3.7). Ce mode de manipulation est intuitif car il correspond à une manière classique de manipuler des objets virtuels (souris d'ordinateur par exemple).
- **Mode force** La seconde solution est d'appliquer un effort sur l'objet à déplacer. Cette force f_i est ajoutée aux forces interatomiques appliquées sur l'objet. La force résultante est utilisée pour déterminer les accélérations du système moléculaire et mettre à jour les positions des corps rigides. L'équation du mouvement correspondante est alors :

$$\mathbf{f}_i + \mathbf{f}_{ext} + \mathbf{f}_{int} = \mathbf{I}\mathbf{a} + \mathbf{v} \times \mathbf{I}\mathbf{v} \tag{3.8}$$

Deux schémas de commande sont utilisés pour exploiter ces deux modes de manipulation. Ils sont détaillés et analysés dans la partie 2.

1.2.2 Forces transmises à l'utilisateur

Le simulateur détermine la force \mathbf{f}_m appliquée sur la molécule manipulée. Elle est composée des forces de van der Waals et des forces électrostatiques dues aux autres molécules \mathbf{f}_{ext} , ainsi que de la force \mathbf{f}_{int} provoquée par les autres corps rigides de la molécule sélectionnée :

$$\mathbf{f}_m = \mathbf{f}_{ext} + \mathbf{f}_{int} \tag{3.9}$$

L'utilisateur ressent donc à la fois les efforts internes et les efforts externes. Dans cette somme, les contributions des corps rigides à l'intérieur de la molécule sélectionnée s'annulent quand l'utilisateur manipule la molécule dans son ensemble ($\mathbf{f}_{int} = \sum \mathbf{f}_{int}^j = 0$). Quand un seul atome est sélectionné la force d'interaction moléculaire \mathbf{f}_m^j appliquée sur le $j^{\text{ème}}$ corps rigide par l'environnement est calculée comme précédemment, mais les contraintes cinématiques, i.e. les forces qui assurent les contraintes cinématiques entre le corps rigide sélectionné et ses voisins topologiques ne s'annulent pas. En particulier, si le corps rigide appartient à une molécule sur laquelle aucune force extérieure n'est appliquée, l'utilisateur ressent uniquement les contraintes cinématiques. Comme aucune modification du couplage haptique n'est nécessaire, l'utilisateur passe facilement d'un mode à l'autre.

Dans ces travaux, le simulateur moléculaire choisi est SAMSON. Cependant, les résultats restent valides pour l'ensemble des simulateurs donnant accès aux variables nécessaires (position, effort, ...). La précision de la simulation (reconfiguration du système, forces transmises à l'utilisateur) dépend du logiciel utilisé.

1.3 Notations

Les *n* corps rigides (atomes ou groupes d'atomes) qui font partie de la molécule manipulée sont notés \mathcal{R}_m^j , j = 1, ..., n et les *q* corps rigides appartenant au reste du système moléculaire sont notés \mathcal{R}_e^l , l = 1, ..., q (voir figure 3.5).

La force appliquée sur chaque corps rigide \mathcal{R}_m^j de la molécule manuipulée par tous les autres corps rigides présents dans la simulation (incluant donc la force interne \mathbf{f}_{int}^j et la force externe \mathbf{f}_{ext}^j) est : $\mathbf{f}_m^j = \mathbf{f}_{int}^j + \mathbf{f}_{ext}^j$. La force totale appliquée sur la molécule manipulée \mathbf{f}_m est : $\mathbf{f}_m = \sum_j \mathbf{f}_m^j$. La position du corps \mathcal{R}_m^j après reconfiguration de la molécule est \mathbf{x}_m^j , et \mathbf{x}_m est la position du centre de masse de la



Figure 3.5 - Notations relatives au simulateur moléculaire

molécule manipulée. De manière similaire, $\mathbf{f}_{sm}^{l} = \mathbf{f}_{int}^{l} + \mathbf{f}_{ext}^{l}$ est la force appliquée sur chacun des corps rigides \mathcal{R}_{e}^{l} par l'ensemble des corps rigides de la simulation, \mathbf{x}_{sm}^{l} est la position après reconfiguration. m_{p} est la masse du $p^{\text{ème}}$ corps rigide. m est la masse totale de la molécule manipulée.

La base de temps de la dynamique moléculaire est différente de celle de l'utilisateur [Stone 01]. Un pas de temps de la simulation est d'environ 100 millisecondes (manipulation de la molécule, reconfiguration du système, transmission des forces d'interaction à l'utilisateur). Le pas de temps correspondant pour l'évolution du système moléculaire est de 2 femtosecondes. Un temps d'intégration moléculaire T_m est donc introduit.

2 Analyse des schémas de couplage pour la téléopération virtuelle

Deux schémas de couplage ont été considérés pour la téléopération directe. Bien que leur structure diffère, leurs entrées/sorties sont identiques : dans les deux cas, une consigne en position est fournie à l'outil. Le coupage DFF est réutilisé pour la simulation moléculaire. C'est en effet le couplage de référence puisque c'est la structure la plus simple pour connecter l'interface haptique avec le logiciel de simulation. Il est donc très utile pour évaluer les performances des schémas de commande. Ses qualités en terme de transparence sont également recherchées ici.

Pour la simulation moléculaire, il peut être intéressant de considérer aussi une consigne en effort. En effet, d'après la partie 1.2 de ce chapitre, le logiciel de simulation laisse la possibilité d'intégrer des forces supplémentaires lors de la résolution des équations du mouvement. Au delà de la simple existence d'un deuxième mode de contrôle, des applications nouvelles en découlent.

La différence principale entre la téléopération directe et la téléopération virtuelle vient de l'importance des retards introduits par les temps de calculs des simulateurs. Leur influence sur la stabilité des schémas de couplage doit être prise en compte. Les fonctions de transfert sont donc discrétisées à la période d'échantillonnage T_e et écrites en fonction de la variable discrète z. Comme les variables provenant du simulateur sont retardées d'une période d'échantillonnage, un retard z^{-1} est introduit entre la simulation et le couplage. Cette période étant susceptible de varier au cours d'une expérience selon les interactions mises en jeu, la valeur la plus grande est considérée ici (cas le plus défavorable). Contrairement au cas continu, il n'est pas équivalent d'étudier la stabilité des schémas de commande entre la force et la vitesse ou la force et la position de la poignée. La fonction de transfert discrète de l'interface haptique est donc calculée entre la force exercée sur l'interface et la position de la poignée. Elle est déterminée à partir de la fonction de transfert continue $H(s) = (s(M_h s + B_h))^{-1}$ en utilisant la transformation en z [Ogata 95], et en prenant en compte les effets de l'échantillonneur et du bloqueur :

$$H(z) = \frac{1}{B_h} \frac{T_e(z-\delta) - (1-\delta)(z-1)\frac{M_h}{B_h}}{(z-1)(z-\delta)}$$
(3.10)

où $\delta = e^{-\frac{B_h T_e}{M_h}}$. M_h et B_h sont respectivement l'inertie et la viscosité du bras maître [Diolaiti 06]. Selon le mode de contrôle choisi, l'utilisateur définit la position instantanée désirée de la molécule, ou lui applique une force. Les schémas de commande associés sont étudiés dans les parties suivantes. Pour simplifier leur analyse, l'étude réalisée est monodimensionnelle (les variables sont des scalaires).

2.1 Contrôle en position

Pour le contrôle en position, le schéma à retour d'effort direct (DFF) présenté au chapitre 2 est conservé pour sa simplicité qui en fait une référence pour la comparaison des autres schémas de couplage. Ses très bonnes qualités en transparence sont également recherchées. Par rapport au chapitre 2, un retard dû aux temps de simulation est introduit. Le schéma résultant est donné sur la figure 3.6. L'utilisateur contrôle la position désirée de la molécule x_i , et reçoit la force haptique f_h .



Figure 3.6 - Schéma de commande DFF

Détails de l'algorithme de contrôle en position Comme mentionné dans la partie 1, le calcul des positions et des efforts est effectué sur chaque corps rigide. Cependant, pour rendre le déplacement des molécules plus aisé pour l'utilisateur, ce dernier contrôle le centre de gravité x_i . Comme détaillé dans la partie 1.2.1, l'utilisateur définit la position instantanée x_i . Les forces internes et externes sont calculées, et utilisées pour mettre à jour l'emplacement des molécules dans l'environnement, ainsi que leurs degrés de liberté internes simulant leur flexibilité. Cette phase de reconfiguration induit une modification de la position des corps rigides, et la position effective du centre de masse de la molécule manipulée x_m est potentiellement différente de celle définie par l'utilisateur x_i à l'aide de l'interface haptique. L'utilisateur ressent la force appliquée sur la molécule manipulée f_m qui est composée des efforts internes et externes (équation (3.9)). Cette méthodologie est résumée dans l'algorithme 1².

²Pour des raisons de clarté, seules les translations sont considérées dans cet algorithme. Les rotations sont implémentées en utilisant la même méthodologie. Cette remarque est également valable pour l'algorithme 2.

Le schéma de couplage DFF présente un inconvénient majeur : dans un premier temps, le système prend la position définie arbitrairement par l'utilisateur à l'aide de l'interface haptique. C'est seulement lors de la phase de remise à jour que le simulateur la corrige pour prendre en compte les interactions moléculaires. De fortes instabilités peuvent alors apparaître, et le retour d'effort peut ne pas être conforme aux interactions moléculaires effectives.

Algorithme 1 Algorithme du mode contrôle en position (notations définies en fin de document)

- 1. Calcul de la position souhaitée du centre de gravité $x_i(k+1)$ définie par l'utilisateur en utilisant le schéma de commande (position de la poignée de l'interface haptique divisée par α_d).
- 2. Modification de la position des corps rigides $x_i^j(k+1)$ calculée en fonction de leur position relative par rapport à x_i .
- 3. Mise à jour de l'ensemble des forces interatomiques $f_m^1(k+1)$, ..., $f_m^n(k+1)$ (resp. $f_{sm}^1(k+1)$ 1), ..., $f_{sm}^q(k+1)$) appliquées aux corps rigides appartenant (resp. n'appartenant pas) à la molécule manipulée en utilisant le simulateur quasi-statique.
- 4. Calcul de la somme $f_m(k+1) = \sum_{j=1}^n f_m^j(k+1)$ des forces appliquées à la molécule, et envoi à l'utilisateur.
- 5. Mise à jour des positions x_m^j (resp. x_{sm}^l) des corps rigides appartenant (resp. n'appartenant pas) à la molécule manipulée en utilisant le simulateur quasi-statique. Dans les équations qui suivent $x_i^j(k+1)$ (resp. $f_m^j(k+1)$ et $f_{sm}^l(k+1)$) sont connues (calculées à l'étape 2 (resp. 3) de l'algorithme) :

$$x_{sm}^{j}(k+1) = x_{i}^{j}(k+1) + \alpha_{j}f_{m}^{j}(k+1)
 x_{sm}^{l}(k+1) = x_{sm}^{l}(k) + \alpha_{l}f_{sm}^{l}(k+1)$$

où les paramètres α_j et α_l sont assimilés respectivement aux facteurs $\frac{T_m^2}{m_j}$ et $\frac{T_m^2}{m_l}$ à un facteur près, T_m représentant le temps d'intégration moléculaire.

2.2Contrôle en force

Le schéma de commande Force-Force (FF) est représenté sur la figure 3.7. L'entrée de la simulation est la force appliquée par l'utilisateur sur la molécule. En plus des facteurs d'échelle, un correcteur proportionnel k_i est introduit. Ce gain est utilisé pour ajuster l'amplitude de la force appliquée sur la molécule. Celle-ci est calculée à partir de la différence entre la position de la molécule et celle de la poignée de l'interface haptique.

Détails de l'algorithme de contrôle en force Contrairement au schéma de couplage DFF, la consigne du simulateur est la force f_i que l'utilisateur souhaite appliquer à la molécule entière. Cette force est définie en ajustant la distance entre la position de la poignée de l'interface haptique et celle de la molécule. Les forces f_i^j correspondantes appliquées sur chacun des corps rigides de la molécule manipulée, ainsi que celles provenant du reste du système moléculaire sont utilisées pour mettre à jour les positions de l'ensemble des corps rigides (appartenant ou non à la molécule manipulée) à l'aide de l'équation (3.8). Comme pour le mode contrôle en position, l'utilisateur ressent la force appliquée sur la molécule manipulée f_m composée des efforts internes et externes (équation (3.9)). Un résumé de ces étapes est donné dans l'algorithme 2.

Que ce soit pour le mode en position ou celui en force, l'intervention même de l'utilisateur sur le système moléculaire est contestable, car elle est très probablement physiquement irréaliste. Cependant, la prise en compte de cette entrée diffère selon le mode choisi. Pour le mode en position, le système prend



Figure 3.7 - Schéma de commande Force-Force FF

la configuration désirée par l'utilisateur, avant que le logiciel de simulation ne corrige cette configuration pour intégrer les contraintes physiques de l'environnement à travers l'équation du mouvement. A l'inverse, pour le contrôle en force, l'entrée donnée par l'utilisateur est directement ajoutée lors de la résolution de l'équation du mouvement (équation (3.8)). Le système réagit donc effectivement comme si ces forces avaient effectivement été appliquées sur la molécule.

2.3 Comparaison des propriétés de transparence et de stabilité

Dans cette partie, les schémas de commande sont comparés en termes de transparence et de sensibilité de la stabilité. Comme au chapitre 2, l'action de l'utilisateur n'est pas prise en compte, et un modèle simplifié de l'environnement est considéré (raideur équivalente k_{eq}). Ces choix sont évidemment trop réducteurs pour modéliser précisément les interactions moléculaires, notamment les variations non linéaires de la force, et la reconfiguration du système qui induit des raideurs variables, mais elles permettent de comparer les schémas de commande.

La transparence est analysée dans le domaine continu, sans considérer les retards. Ce choix est fait de manière à comparer le schéma de commande FF avec les schémas présentés au chapitre 2. La transparence dépendant principalement de la structure du schéma de commande, les résultats obtenus donnent des conclusions exploitables pour la comparaison des couplages.

A l'inverse, la stabilité est étudiée à partir des schémas de commande discrets, car la sensibilité des schémas par rapport à la période d'échantillonnage est importante pour le choix du couplage.

2.3.1 Etude de la transparence

La transparence est étudiée sur le même principe qu'au chapitre 2. L'impédance de l'environnement $Z_e = F_m/V_m$ est comparée avec celle côté opérateur $Z_{op} = F_{op}/V_h$. La transparence est idéale si :

$$Z_{op}(s) = \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(s) \tag{3.11}$$

Ici encore deux modes sont considérés :

1. non-contact : pas d'interaction entre la molécule et son environnement ($Z_e = 0$). En théorie, ce mode n'existe pas (les portées des interactions moléculaires sont infinies, notamment à cause des forces électrostatiques). Cependant, pour simplifier les simulations, les logiciels utilisent des distances de *cut-off* au delà desquelles les interactions sont considérées comme nulles, Algorithme 2 Algorithme du mode contrôle en force (notations définies en fin de document)

- 1. Calcul de la force appliquée par l'utilisateur en utilisant le schéma de couplage : $f_i(k+1) = k_i \left[\frac{x_h(k+1)}{\alpha_d} x_m(k) \right]$.
- 2. Calcul de la force $f_i^j(k+1) = f_i(k+1)/n$ appliquée aux n corps rigides de la molécule manipulée.
- 3. Mise à jour des positions x_m^j (resp. x_{sm}^l) des corps rigides appartenant (resp. n'appartenant pas) à la molécule manipulée en utilisant le simulateur quasi-statique. Dans les équations qui suivent, $f_i^j(k+1)$ est connue (calculée à l'étape 2 de cet algorithme) :

$$\begin{aligned} x_{m}^{j}(k+1) &= x_{m}^{j}(k) + \alpha_{j}(f_{m}^{j}(k) + f_{i}^{j}(k+1)) \\ x_{sm}^{l}(k+1) &= x_{sm}^{l}(k) + \alpha_{l}f_{sm}^{l}(k) \end{aligned}$$

où les paramètres α_j et α_l sont assimilés respectivement aux facteurs $\frac{T_m^2}{m_j}$ et $\frac{T_m^2}{m_l}$ à un facteur près, T_m représentant le temps d'intégration moléculaire.

- 4. Mise à jour de l'ensemble des forces interatomiques $f_m^1(k+1)$, ..., $f_m^n(k+1)$ (resp. $f_{sm}^1(k+1)$, ..., $f_{sm}^q(k+1)$) appliquées aux corps rigides appartenant (resp. n'appartenant pas) à la molécule manipulée en utilisant le simulateur quasi-statique.
- 5. Calcul de la somme $f_m(k+1) = \sum_{j=1}^n f_m^j(k+1)$ des forces appliquées à la molécule, et envoi à l'opérateur à travers l'interface haptique.
- 2. contact : les interactions sont modélisées sous la forme d'une raideur équivalente $(Z_e(s) = \frac{k_{eq}}{s})$.

L'analyse du schéma DFF n'est pas redonnée ici (elle est identique à celle réalisée dans la partie 2.2.1 du chapitre 2). Seuls les résultats sont rappelés dans le tableau récapitulatif 3.1.

Couplage Force Force

Pour le schéma de couplage FF, l'impédance côté utilisateur est :

$$Z_{op}^{FF}(s) = \frac{1}{H(s)} + \frac{\alpha_f k_i}{\alpha_d (ms^2 + k_i + k_{eq})} Z_e(s)$$
(3.12)

<u>**Contact</u>** Quand le contact est établi, $Z_{op,BF}^{FF}$ est calculée en **basses fréquences** :</u>

$$Z_{op,BF}^{FF}(j\omega) \underset{\omega \ll 1}{\approx} \frac{k_i}{k_i + k_{eq}} \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(j\omega) + B_h$$
(3.13)

L'équation (3.13) diffère de l'impédance idéale $\frac{\alpha_f}{\alpha_d}Z_e(j\omega)$ par un gain $\frac{k_i}{k_i+k_{eq}}$, et la viscosité de l'interface haptique.

En hautes fréquences, l'impédance côté utilisateur est l'inertie M_h de l'interface haptique.

<u>Non-contact</u> Quand aucune force n'est appliquée sur la molécule, l'équation (3.12) se simplifie :

$$Z_{op}^{FF}(s)(j\omega) = M_h j\omega + B_h \tag{3.14}$$

En basses fréquences, l'impédance dépend principalement la viscosité de l'interface haptique. En hautes fréquences, l'inertie du bras maître est prédominante.

Comparaison de la transparence des schémas de couplage

Le tableau 3.1 résume les impédances approchées pour les deux schémas de commande. La transparence du schéma FF diffère de celle du schéma DFF uniquement pour le mode contact, en basses fréquences. L'impédance idéale est multipliée par un gain $\frac{k_i}{k_i+k_{eq}}$ pour le schéma de couplage FF. Pour tendre vers la transparence idéale, la valeur de k_i doit être supérieure à celle de k_{eq} . La force appliquée par l'utilisateur est alors supérieure à celle provenant du système moléculaire. Pour une valeur de k_i tendant vers l'infini, la position de la molécule dépend uniquement de la force appliquée par l'utilisateur, et le comportement du mode de manipulation tend vers celui du mode position.

Tableau 3.1 - Etude de la transparence : valeurs approchées de Z_{op} pour les schémas DFF et FF

	Basses fréquences		Hautes fréquences		
	Non contact	Contact	Non contact	Contact	
DFF	B_h	$\frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(j\omega) + B_h$	$M_h j \omega$		
FF		$\frac{k_i}{k_i + k_{eq}} \frac{\alpha_f}{\alpha_d} Z_e(j\omega) + B_h$			

2.3.2 Etude de la stabilité

La passivité est un critère conservatif. Dans le cas de la téléopération pour la simulation moléculaire, respecter les conditions de passivité dégrade fortement la transparence, et rend le système difficilement utilisable [Daunay 09]. C'est pourquoi cette approche n'est pas utilisée ici. C'est la sensibilité de la stabilité des deux schémas de couplage par rapport aux temps de calcul qui est étudiée. L'analyse est donc faite sur les fonctions de transfert discrètes, et les temps de calculs sont modélisés par un retard d'une période d'échantillonnage sur les variables provenant du simulateur (figures 3.6 et 3.7). La sensibilité analysée est la variation de la norme des racines de l'équation caractéristique de chacun des schémas par rapport à un paramètre donné. Ce paramètre est choisi comme étant la période d'échantillonnage.

Equations caractéristiques

La fonction de transfert discrète du schéma DFF est calculée à l'aide de la figure 3.6 :

$$Z\left\{\frac{x_{h}(s)}{F_{op}(s)}\right\} = \frac{X_{h}(z)}{F_{op}(z)} = \frac{T_{e}\frac{z-\delta}{z-1} - (1-\delta)\frac{M_{h}}{B_{h}}}{B_{h}(z-\delta) + \left[T_{e}\frac{z-\delta}{z-1} - (1-\delta)\frac{M_{h}}{B_{h}}\right]\frac{\alpha_{f}}{\alpha_{d}}k_{eq}z^{-1}}$$
(3.15)

où Z est la transformée en Z, et $\delta = e^{-\frac{B_h T_e}{M_h}}$ est le paramètre défini dans l'équation (3.10). L'équation caractéristique correspondante est :

$$a_3 z^3 + a_2 z^2 + a_1 z + a_0 = 0 ag{3.16}$$

où :

$$a_{3} = B_{h} \qquad a_{2} = -B_{h}(1+\delta)$$

$$a_{1} = \delta B_{h} + \left(T_{e} - (1-\delta)\frac{M_{h}}{B_{h}}\right)\frac{\alpha_{f}}{\alpha_{d}}k_{eq} \qquad a_{0} = \left(-\delta T_{e} + (1-\delta)\frac{M_{h}}{B_{h}}\right)\frac{\alpha_{f}}{\alpha_{d}}k_{eq}$$

La fonction de transfert du schéma de couplage FF est calculée à partir de la figure 3.7 :

$$\frac{X_h(z)}{F_{op}(z)} = \frac{H(z)}{1 + H(z)G(z)\frac{\alpha_f}{\alpha_d}}$$
(3.17)

où : $G(z) = \frac{F_m(z)}{X_h(z)} = \frac{k_i k_{eq} T_m^2}{m z(z-1) + k_i T_m^2 + k_{eq} T_m^2}$ et *m* est la masse de la molécule totale. L'équation caractéristique est :

$$b_4 z^4 + b_3 z^3 + b_2 z^2 + b_1 z + b_0 = 0 ag{3.18}$$

où :

Des critères de stabilité analytiques peuvent être obtenus pour ces des schémas de commande en utilisant par exemple le critère de Jury [Ogata 95]. Cependant, les relations obtenues sont complexes, et l'influence des différents paramètres des schémas de commande sur la stabilité n'est pas mise en avant. Dans la partie suivante, une analyse numérique est effectuée.

Comparaison numérique de la stabilité des schémas de commande

Une analyse numérique de l'influence des paramètres de l'environnement k_{eq} et T_e sur chacun des schémas de couplage est réalisée. Les variations de la norme maximale des racines des équations caractéristiques (3.15) et (3.17) ($||r_{max}||$) sont considérées dans la figure 3.8. Les valeurs numériques utilisées pour ce tracé correspondent à celles des expériences de la partie 3.1 (voir tableau 3.3). Les tracés de la figure 3.8 représentent la valeur de $||r_{max}||$ pour chacun des schémas de commande, en fonction de la valeur de k_{eq} et T_e .



Figure 3.8 - Norme maximale des racines de l'équation caractéristique $||r_{max}||$ des couplages DFF et FF en fonction de la raideur des interactions moléculaires k_{eq} et du temps de calcul T_e

La variation du module des racine est particulièrement intéressante. Pour les deux schémas de commande, les calculs longs (grandes valeurs de T_e) et/ou les environnements raides peuvent conduire à des systèmes instables. De plus, le module des racines du schéma de commande DFF augmente rapidement quand T_e ou k_{eq} augmentent. A l'inverse, les racines de l'équation caractéristique du schéma FF restent quasiment constantes. La stabilité du schéma de commande DFF est plus sensible aux variations de ces paramètres que celle du schéma FF. Ces résultats seront confirmés expérimentalement dans la partie suivante.

2.4 Conclusion

Les modes de contrôle en position et en effort présentent des caractéristiques différentes en termes d'adéquation avec la simulation, de transparence et de stabilité (voir parties 2.1 à 2.3) résumées dans le tableau 3.2. Le contrôle en position est plus transparent. Cependant, le contrôle en effort est plus adapté au simulateur puisque la consigne est directement prise en compte lors de la résolution de l'équation du mouvement. De plus, sa stabilité est moins sensible aux conditions environnementales.

	Avantages	Inconvénients		
DFF	Bonne transparence	 Contrôle de la molécule peu adapté à la simulation Grande sensibilité de la stabilité aux conditions environnementales 		
FF	 Contrôle de la molécule bien adapté à la simulation Bonne transparence pour les phases de non-contact Très faible sensibilité de la stabilité aux conditions environnementales 	Transparence idéale modifiée d'un facteur $\frac{k_i}{k_{eq}+k_i}$ pour les phases de contact		

 Tableau 3.2 - Comparaison des schémas de couplage DFF et FF

Ajouter de l'amortissement au couplage DFF améliorerait la stabilité, mais la transparence serait détériorée. Or, les interactions moléculaires mettent en jeu des variations de forces complexes, et des efforts d'amplitude relative faible (notamment des forces attractives). La transparence est donc une condition essentielle pour transmettre à l'utilisateur un retour d'effort de qualité.

3 Applications

Pour que le système de téléopération soit utilisable par des biologistes ou des pharmacologues, un grand nombre d'applications doivent être réalisables. Pour illustrer les possibilités du système développé, les expériences suivantes sont effectuées :

- manipulation de molécules entières pour modifier la structure globale du système,
- déformation des structures moléculaires pour mesurer leurs propriétés,
- détermination de positions d'équilibre, exemple classique des phénomènes d'interaction nanoscopiques que les utilisateurs souhaitent appréhender.

3.1 Manipulation de molécules entières, l'exemple du VIH

L'utilisateur doit pouvoir manipuler la molécule comme un tout dans son environnement. Dans le cas d'une molécule rigide, ce mode de manipulation est aisé. Dans le cas d'une molécule flexible, l'utilisateur manipulera l'objet tel un corps rigide dont la position du centre de gravité est contrôlée. Les interactions dues aux autres molécules seront prises en compte pour modifier la configuration du système et pour simuler sa flexibilité. Ce mode de manipulation a été choisi pour son intuitivité. Deux solutions sont envisageables pour l'obtenir. La première est d'imposer la position du centre de gravité, et la seconde est d'appliquer une force égale sur chaque corps rigide. Pour comparer ces deux modes de manipulation et les schémas de couplage associés, l'exemple de la protéase du VIH et ses inhibiteurs (code PDB : 2AZ8) est choisi (figure 3.9). Ce système est composé de 848 degrés de liberté.



Figure 3.9 - Molécule du VIH et ses inhibiteurs, **848 degrés de liberté**. Avec l'interface haptique, l'utilisateur contrôle les inhibiteurs et ressent les efforts d'interaction.

Les paramètres du simulateur et des schémas de couplage sont regroupés dans le tableau 3.3. Ces valeurs correspondent à celles utilisées pour la comparaison numérique de stabilité de la partie 2.3.2. L'opération consiste à extraire un des inhibiteurs de la molécule, puis à le réinsérer. Toutes les molécules sont flexibles.

Tableau 3.3 - Paramètres du simulateur et du couplage haptique pour l'expérience du VIH

Simulateur	- Masse de la molécule manipulée : $m=7.5\cdot10^{-25}$ kg - Distance de $cut\text{-}of\!f$: $d=8$ Å - Temps d'intégration de l'équation du mouvement : $T_m=2\cdot10^{-15}$ s
Couplage haptique	- Facteur d'échelle en effort : $\alpha_f = 0.3 \cdot 10^9$ - Facteur d'échelle en déplacement : $\alpha_d = 0.25 \cdot 10^9$ - Raideur du couplage FF : $k_i = 100 \text{ N.m}^{-1}$

Cette opération est réalisée pour les deux schémas de commande DFF et FF, pour un nombre de degrés de liberté activés variable : 172 ddl sont actifs pour la première opération, 432 pour la seconde et 848 pour la dernière. Les périodes de simulation correspondantes valent respectivement 92, 104 et 117 ms. Modifier le nombre de degrés de liberté actifs avec une perte de précision réduite est possible grâce au simulateur adaptatif utilisé [Rossi 07], comme détaillé dans la partie 1.1.3.

Pour pouvoir comparer les résultats entre les différentes expériences, le mouvement de l'utilisateur est contraint selon un axe (mais le retour d'effort est tridimensionnel). La force haptique selon l'axe y en fonction de la position du centre de gravité de la molécule selon ce même axe (correspondant à l'axe du déplacement) est représentée sur les figures 3.10, 3.11 et 3.12.

Trois phases peuvent être distinguées. La première est l'extraction d'un des inhibiteurs (tant que la position est inférieure à 16 Å). La seconde est la manipulation de cet inhibiteur à l'extérieur de la struc-



Figure 3.10 - Force haptique lors de la téléopération d'un inhibiteur du VIH (force d'interaction entre les molécules). 172 ddl activés - $T_e = 92 \text{ ms}$



Figure 3.11 - Force haptique lors de la téléopération d'un inhibiteur du VIH (force d'interaction entre les molécules). 432 ddl activés - $T_e = 104 \text{ ms}$

ture moléculaire (distance supérieure à 16 Å). Aucune force ne s'applique sur l'inhibiteur manipulé. La réinsertion a lieu quand la position redevient inférieure à 16 Å.

Les efforts transmis à l'utilisateur avec les schémas DFF et FF sont similaires. Quel que soit le schéma de couplage utilisé, l'amplitude des forces haptiques est de l'ordre du newton : les efforts d'interaction sont aisément ressentis par l'utilisateur. Les différences apparaissant sur les courbes sont dues principalement à la flexibilité des molécules : la déformation des molécules est très sensible aux conditions de manipulation, notamment la vitesse et l'orientation, qui diffèrent en fonction des mouvements de l'utilisateur. Selon la configuration des molécules, les efforts d'interaction varient légèrement.

Comme prévu dans la partie 2.3.2, le schéma DFF est très sensible aux caractéristiques environnementales. Sur la figure 3.10 les petites oscillations n'apparaissent que pour des environnements très rigides. Ces oscillations deviennent plus fréquentes quand la période de simulation augmente (figure 3.12). Au contraire, le schéma FF reste stable même pour des environnements raides, et avec des périodes de simulation longues.



Figure 3.12 - Force haptique lors de la téléopération d'un inhibiteur du VIH (force d'interaction entre les molécules). Les 848 ddl sont activés - $T_e = 117 \text{ ms}$

3.2 Déformation de structures moléculaires

La connaissance des propriétés des molécules, notamment leur raideur et leur inertie, est importante pour le prototypage de nouvelles structures moléculaires [Hamdi 08]. Pour mesurer ces grandeurs, il faut déformer une partie de la structure, et ressentir les efforts internes ainsi que l'inertie de la molécule. Cette contrainte est intuitivement réalisée à l'aide du contrôle en force, à travers le schéma de couplage FF.

A l'aide de l'interface haptique, l'opérateur applique un effort sur un des corps rigides d'un inhibiteur du VIH pour le déplier. Une des extrémité de cette molécule est fixe. Quand la molécule est étirée, l'utilisateur retourne vers sa position initiale, et replie ainsi la molécule. La méthodologie utilisée pour manipuler un corps rigide unique est celle de l'algorithme 2 où la molécule entière est remplacée par un unique corps rigide \mathcal{R}_m^j . Comme seule une molécule est présente pour cette expérience, la force extérieure appliquée aux corps rigides est nulle ($F_{ext} = 0$), et l'utilisateur ressent uniquement les forces internes $F_m = F_{int}$.

La figure 3.13 présente la norme des forces haptiques en fonction de la norme de la position du centre de gravité. La force augmente lorsque la molécule est étirée (partie A). Lorsque la molécule est dépliée, l'utilisateur applique un effort supplémentaire, et les forces internes augmentent (partie B). L'utilisateur replie ensuite la molécule. La force haptique diminue rapidement à cause de la diminution des contraintes internes (partie C). Enfin, le corps rigide est ramené vers sa position d'origine. Les forces d'interaction dues aux autres corps rigides provoquent une force haptique (partie D). Des variations de force de faible amplitude (de l'ordre du nanonewton) sont transmises aux utilisateurs par ce système de téléopération. Le schéma de couplage FF est adapté pour déformer des structures moléculaires en appliquant un effort sur une partie des molécules, et est utilisable pour ressentir leurs propriétés mécaniques.

3.3 Détermination des positions d'équilibre

Lors de la manipulation par le schéma FF, l'utilisateur applique un effort sur le système, qui est pris en compte pour définir l'état d'équilibre global. Or, pour améliorer la compréhension des interactions moléculaires, il est important de pouvoir déterminer la position d'équilibre du système sans intervention



Norme de la position du centre gravité du corps rigide (Å)

Figure 3.13 - Force haptique transmise à l'utilisateur lors du dépliement d'un inhibiteur du VIH (A), du maintien de la molécule en position étirée (B), et du repliement (C et D). L'utilisateur ressent les forces internes. 17 degrés de liberté, $T_e = 14 \ \mu s$, $\alpha_d = 5 \cdot 10^9$, $\alpha_f = 0.1 \cdot 10^9$, $k_i = 20 \ \text{N.m}^{-1}$.

extérieure. En contrôlant les objets en position, il est possible d'obtenir ce résultat.

Une expérience impliquant deux molécules d'eau est réalisée avec le schéma *DFF*. A cause des forces de van der Waals, les deux molécules sont en équilibre lorsqu'elles sont séparées d'environ 2.6 Å. Les forces attractives et répulsives se compensent.

Dans cette expérience, une des molécules est fixe. L'utilisateur manipule la seconde autour de la position d'équilibre, et ressent les efforts d'interaction qui tendent à conserver le système dans la position d'équilibre. Les résultats expérimentaux sont donnés sur la figure 3.14. La position, ainsi que la force haptique, sont représentées en fonction du temps pour évaluer la durée prise par le système pour retrouver une position d'équilibre.

L'utilisateur ressent à la fois les forces attractives et répulsives, et peut donc déterminer aisément la position d'équilibre du système, qui correspond à une force haptique nulle. La compréhension d'un des phénomènes les plus importants à l'échelle nanoscopique, les forces à distance attractives et répulsives, est rendue plus aisée par ce système de téléopération. La grande sensibilité de la stabilité du contrôle en position est peu contraignante pour cette application, car les déplacements sont de faible amplitude, et ont lieu autour de positions d'équilibre.

4 Conclusion

Le simulateur moléculaire SAMSON possède plusieurs caractéristiques qui le rendent particulièrement bien adapté à la téléopération avec retour d'effort :

- le couplage avec une interface haptique est aisé car l'équation du mouvement lie directement la force avec le déplacement. Cette équation est donc compatible avec les entrées et sorties du robot maître,
- le calcul des forces internes et externes rend possible différents retours haptiques, selon la tâche,
- les deux modes de manipulation (position et force) agrandissent le champ d'application.

Pour le connecter à un bras haptique, deux schémas de couplages sont proposés. Par rapport à la téléopération directe, les retards introduits par les temps de calcul du simulateur moléculaire doivent être



Figure 3.14 - Téléopération de deux molécules d'eau. La croix noire localise la position d'équilibre. $T_e = 18 \text{ ms}, \alpha_d = 0.25 \cdot 10^9, \alpha_f = 1.5 \cdot 10^9.$

pris en compte lors du choix des schémas de couplage. Le schéma DFF est très sensible à la période d'échantillonnage, et il est peu adapté au simulateur. Cependant, grâce à sa bonne transparence, il est utilisé pour effectuer des petits déplacements autour d'une position donnée, pour déterminer précisément l'état d'équilibre du système. A l'inverse, le schéma FF est moins transparent, mais plus stable, et mieux adapté à la simulation. Il est donc préféré pour manipuler des molécules entières. Grâce à ce mode de manipulation où l'utilisateur applique un effort, il est possible de déformer intuitivement des structures moléculaires pour étudier leur propriétés.

Ces deux modes de manipulation et les schémas de commande associés sont complémentaires. Par rapport aux travaux effectués précédemment, les applications possibles sont diversifiées, et font de ce système le premier pas vers des manipulations complexes. Pour que l'ensemble des étapes nécessaires à la conception de nouvelles structures moléculaires soient possibles, il faudrait pouvoir notamment ajouter ou supprimer des atomes au sein d'une structure. Le retour haptique servirait alors à assister l'utilisateur lors de la rupture des barrières d'énergie. Pour envisager de telles applications, il est nécessaire de mettre en place des stratégies spécifiques. En particulier, des solutions pour utiliser le schéma *DFF* malgré sa grande sensibilité aux temps de calculs doivent être trouvées.

<u></u>		
(¦h∈	nitro	.,
υne		1
	1	

Stratégies avancées pour la téléopération nanoscopique

Les chapitres précédents montrent l'intérêt de l'haptique pour la téléopération à l'échelle nanoscopique, et la spécificité des schémas de commande. Plusieurs schémas blocs sont comparés et analysés, et des résultats prometteurs sont obtenus. L'intérêt d'utiliser un retour haptique qui ne soit pas directement représentatif des efforts d'interaction est également montré dans le cadre d'une opération simple de roulement. Mais que ce soit en téléopération directe ou virtuelle les applications possibles restent limitées.

Le but de ce chapitre est de **déterminer s'il existe des stratégies apportant une solution satisfaisante pour des applications complexes de téléopération à l'échelle nanoscopique**. L'ensemble des analyses sont basées sur les conclusions des chapitres précédents, et en particulier sur les schémas de couplage étudiés. Les résultats obtenus précédemment sur des exemples simples sont utilisés pour définir les stratégies de ce chapitre et aboutir à des téléopérations complexes. En particulier, il est apparu que la réduction d'échelle entraîne deux modifications majeures par rapport à la téléopération à l'échelle macroscopique :

- des contraintes technologiques rendent les systèmes de micro-manipulation complexes, les outils sont spécifiques et les efforts qu'il est possible de mesurer dépendent des capteurs utilisés,
- un compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation apparaît.

Les contraintes technologiques affectent la téléopération directe, et aucune manipulation complexe avec un retour haptique 3D n'est proposée à ce jour. Des stratégies existent pour effectuer manuellement des opérations complexes par AFM, mais leur adaptation à un système de téléopération n'est pas abordée. En particulier, l'utilisation de l'AFM en mode dynamique (*tapping*), et les systèmes composés de plusieurs poutres AFM n'ont pas été considérés pour des téléopérations.

Le compromis entre stabilité, facilité de manipulation et qualité du retour haptique est sensible sur tous les schémas de couplage. De plus, la grande différence d'amplitude entre les forces attractives et répulsives rend difficile la transmission de l'ensemble des interactions nanoscopiques aux utilisateurs. Ces informations sont pourtant très importantes pour une bonne compréhension des forces à cette échelle. Pour aborder ce problème, la simulation moléculaire est choisie comme exemple. Les expériences sont facilement répétables, et la mise en évidence de ce phénomène est aisée sur des molécules simples, notamment par l'apport du retour visuel. De plus, les temps de calcul importants amplifient cette problématique. Dans une première partie, une stratégie de téléopération directe est élaborée. L'application choisie est une micro-manipulation 3D basée sur des saisies-déposes de microbilles d'un rayon de 2.5 μ m. L'outil est composé de deux poutres AFM formant une pince. Le retour haptique est utilisé pour l'ensemble des étapes : détection de l'objet en mode *tapping*, contrôle de la force de serrage, saisie et dépose de l'objet. Dans une seconde partie, en téléopération virtuelle, un système entièrement adaptatif (simulation et schéma de couplage) est proposé.

Bien que les applications soient spécifiques (téléopération directe et virtuelle), les solutions proposées pourront par la suite être adaptées aux trois types de téléopération (directe, virtuelle et augmentée).

1 Téléopération avec retour haptique 3D pour la manipulation de microsphères

Dans l'ensemble des travaux de téléopération avec un AFM une seule poutre est utilisée, et les mesures sont effectuées en mode statique. Un unique point de contrôle est donc disponible pour l'utilisateur. Pour réaliser des manipulations complexes contrôlées grâce à la mesure des efforts d'interaction, une solution intéressante est l'utilisation de deux poutres AFM indépendantes qui collaborent pour saisir et déposer les objets [Xie 09]. L'utilisation de l'AFM en mode statique limite les applications potentielles par rapport au mode *tapping*. Ce dernier, pour lequel les mesures sont obtenues à partir de variations d'amplitude ou de fréquence d'une poutre en vibration, est généralement considéré comme plus précis que le mode statique, pour lequel la force mesurée est directement proportionnelle à la mesure de la déflexion [Sitti 01]. Cependant, réaliser des téléopérations qui tiennent compte des contraintes technologiques des systèmes nécessite la définition de stratégies adaptées. C'est l'objet de cette partie, dans laquelle une tâche de micro-manipulation 3D entièrement téléopérée est réalisée pour valider la stratégie choisie. Elle consiste en la construction d'une structure pyramidale à deux étages en conditions ambiantes à partir de quatre microsphères de 2.5 ± 0.5 µm de rayon. Bien que les objets soient environ 10 fois plus petits qu'au chapitre 2, leur taille est micrométrique. La dénomination "téléopération nanoscopique" sera cependant conservée, car les forces d'interaction sont nanoscopiques.

Comme l'approche retenue est entièrement basée sur l'interactivité de la manipulation, la phase d'imagerie par AFM généralement réalisée avant toute manipulation est exclue. Elle est remplacée par une exploration initiale contrôlée par l'utilisateur. Durant cette phase, un guide virtuel utilisé pour aider l'opérateur à aligner les poutres AFM avec l'objet est calculé en ligne. Pour compléter ce système, deux schémas de téléopération sont présentés pour la tâche de saisie-dépose. Le premier fournit des informations sur les efforts d'interaction mesurés, et le second assiste l'utilisateur pour améliorer sa dextérité et éviter toute collision entre l'objet et le substrat.

1.1 Le système de téléopération à deux poutres de l'ISIR

Le système de téléopération de l'ISIR est décrit dans la partie 1.1 du chapitre 2. Dans ce paragraphe, seuls les éléments spécifiques à la manipulation à deux doigts sont donnés. Une description plus détaillée est présentée dans [Xie 10a].

La plate-forme de micro-manipulation utilisée (figure 4.1) est composée d'un microscope optique, ainsi que de deux modules de positionnement et de mesure agissant sur deux poutres AFM Nanosensors ATEC-FM (dénommées par la suite I et II). Les pointes de ces poutres sont inclinées vers l'avant. Les poutres sont positionnées face à face de manière à former une pince. La poutre I est fixée sur un module de positionnement X-Y-Z motorisé dont les déplacements sont microscopiques. La poutre II est actionnée par un tube piézoélectrique X-Y-Z fonctionnant en boucle ouverte, lui-même fixé sur un module de déplacement manuel X-Y-Z. Un nanotranslateur X-Y-Z en boucle fermée est utilisé pour manipuler le



Figure 4.1 - Système de téléopération à deux poutres AFM. (gauche) L'interface à retour d'effort est utilisée pour contrôler la manipulation tridimensionnelle tout en bénéficiant d'un retour haptique en temps réel. (droite) La pince est composée de deux poutres AFM dont les pointes sont inclinées vers l'avant.

substrat pendant la micro-manipulation. Les déplacements grossiers des poutres I et II sont réalisés sous microscope optique à l'aide des modules de déplacements de grande amplitude motorisés et manuels. Les spécifications détaillées de chaque module sont données dans le tableau 4.1.

Tableau 4.1 - Spécifications des modules de déplacement					
Module	Actionneur	Course	Résolution		
Déplacements microscopiques	Etage motorisé	$25 \times 25 \times 25$ (mm)	50 nm		
	Etage manuel	$5 \times 5 \times 5 \text{ (mm)}$	$0.5 \ \mu m$		
Déplacements nanoscopiques	Tube piézoélectrique	$10 \times 10 \times 10 \; (\mu m)$	sub-nm		
	Nanotranslateur	$50\times50\times10~(\mu {\rm m})$	$0.1 \mathrm{nm}$		

Chaque poutre dispose de son propre système de mesure, comprenant un laser et une photodiode à quatre quadrants. L'acquisition des données se fait par une carte NI 6289.

Les poutres sont utilisées selon deux modes : tapping et statique. Le mode tapping consiste à exciter la poutre à sa fréquence propre à l'aide d'une céramique piézoélectrique reliée à un Générateur Basse Fréquence (GBF), et à mesurer l'amplitude des oscillations au cours de la manipulation. A l'approche d'un objet, le contact intermittent entre la pointe et l'objet modifie l'amplitude des oscillations. La mesure de l'amplitude A^1 est basée sur les variations de la tension de sortie des photodiodes :

$$A = \beta_a \cdot \Delta u_v$$

où $\beta_a = 10^{-6} \text{ m} \cdot \text{V}^{-1}$ est un facteur de conversion calibré et u_v est la tension de la sortie de la photodiode. En mode statique, la force normale appliquée sur la poutre f_e est mesurée à partir de la tension de sortie des photodiodes comme détaillé dans la partie 1.2 du chapitre 2 :

$$f_e = k_z S_v u_v \tag{4.1}$$

1

¹Pour éviter toute confusion avec les termes des équations caractéristiques, l'amplitude sera notée en majuscule bien qu'elle fasse référence à une variable dans le domaine temporel et non dans le domaine de Laplace.

où la raideur normale de la poutre et la sensibilité de la photodiode valent respectivement $k_z = 2.8 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ et $S_v = 8 \cdot 10^{-7} \text{ m} \cdot \text{V}^{-1}$.

L'interface haptique utilisée est un Omega à 3 degrés de liberté, fabriqué par Force Dimension². L'utilisateur manipule la poignée, et la position correspondante $p_h(x_h, y_h, z_h)$ est utilisée pour contrôler les actionneurs (nanotranslateur et tube piézoélectrique) après une mise à l'échelle. La force haptique f_h transmise à l'utilisateur est calculée à partir de la mesure des tensions de sortie des deux photodiodes $(u_{vI} \text{ et } u_{vII})$. Comme l'indiquent les deux interrupteurs S_1 et S_2 sur la figure 4.1, différents actionneurs et capteurs sont utilisés à chaque étape de la manipulation.

Pour toute cette téléopération, le couplage bilatéral utilisé est issu du schéma DFF, adapté aux contraintes de la micro-manipulation. Ce schéma est choisi pour sa facilité d'utilisation, et notamment du choix des gains, qui le rend adapté à l'évaluation de différentes stratégies. Le retour d'effort ne dépend pas des gains choisis, comme c'est le cas pour le schéma FP avec les correcteurs P et PI.

1.2 Protocole de la micro-manipulation 3D

A l'échelle microscopique, des stratégies complexes sont nécessaires pour manipuler des objets [Savia 09]. La manipulation à l'aide de deux poutres formant une pince est intéressante par rapport aux autres techniques de manipulation 3D, comme la saisie-dépose par adhésion ou à l'aide de pinces monolithiques à deux doigts. La première nécessite des stratégies complexes pour assurer une dépose précise [Dionnet 04]. La seconde souffre de l'absence de mesure d'effort sur la pince [Heriban 08] et du mauvais contrôle des interactions pince/objet. Cette contrainte représente un inconvénient majeur pour des manipulations demandant une précision élevée comme celle présentée ici.

Lors de la manipulation à l'aide de deux poutres AFM, l'aire de contact entre l'objet et la pince est petite. Les problèmes d'adhésion sont donc réduits. Comme chacune des poutres est équipée d'un système de mesure d'effort, l'ensemble des interactions est contrôlé, notamment le contact, les forces d'adhésion et la force de serrage. Cependant, le système de manipulation est complexe. Plusieurs étapes délicates sont nécessaires pour positionner chacune des poutres correctement, et coordonner la saisie et la dépose de l'objet. Une vue d'ensemble du processus de manipulation est représentée sur la figure 4.2.

Pour serrer l'objet entre les deux pointes, les points de contact doivent être situés sur la ligne médiane de la sphère. Compte tenu des tailles relatives des objets et des pointes des poutres AFM, une commande basée sur les images issues d'un microscope optique n'apporte pas la précision nécessaire. Réaliser une image AFM donnerait des informations supplémentaires pour un positionnement précis de la pince, mais cette étape prend un temps important, et réduit la flexibilité du système de manipulation.

L'approche proposée ici est basée sur l'exploration par l'utilisateur de la zone de manipulation. Le retour haptique fournit à l'opérateur une information sur le contact entre la poutre et l'objet. Pendant cette opération, la position verticale des poutres est fixée à quelques micromètres au dessus du substrat. L'utilisateur contrôle uniquement le déplacement dans le plan horizontal. Les informations recueillies pendant cette exploration sont traitées en ligne pour générer un guide virtuel dont le but est d'attirer l'utilisateur vers la ligne médiane sur laquelle les poutres doivent être alignées. L'utilisateur ressent également la force de contact entre la poutre et l'objet, et ajuste l'effort appliqué pour garantir une prise correcte. Lors de la troisième phase de manipulation, les deux poutres placées de chaque côté de l'objet sont immobiles et l'utilisateur contrôle le déplacement du substrat. Le retour haptique est alors calculé à partir des mesures issues des deux photodiodes effectuées en mode statique. Ces différentes étapes sont détaillées dans les paragraphes suivants. Elles sont réalisées en conditions ambiantes, à 20°C, avec une humidité relative de 48%.

²http://www.forcedimension.com



Figure 4.2 - Etapes de la manipulation par saisie-dépose à l'aide de deux poutres AFM. La zone de manipulation est déterminée à l'aide d'une vue obtenue par microscope optique, et un positionnement grossier des poutres est réalisé. L'utilisateur place ensuite les poutres de chaque côté de l'objet avec l'aide de l'interface haptique. Il contrôle la position de l'échantillon avec le nanotranslateur, et celle de la poutre II par le tube piézoélectrique. Pour chaque étape, un retour haptique basé sur la mesure des variations d'amplitude de chaque poutre en mode tapping est transmis à l'utilisateur. Quand l'objet est maintenu entre les deux poutres, il est soulevé puis redéposé en contrôlant le déplacement du substrat à l'aide de l'interface haptique. Le retour haptique est basé sur des mesures réalisées en mode statique.

Ces phases sont indépendantes, et les transitions sont clairement marquées (arrêt de certains translateurs et capteurs, initialisation de ceux nécessaires l'étape suivante, réinitialisation de l'interface haptique). Il est donc possible d'utiliser différents schémas de commande, et différents retours d'effort, sans que la stabilité du couplage ne soit affectée par ces transitions.

1.3 Assistance au positionnement de la pince

L'alignement de la pince est contrôlé par l'utilisateur : il déplace chacune des pointes, et reçoit un retour haptique basé sur la mesure de l'amplitude des oscillations des poutres AFM. Lors de la phase d'exploration initiale, avant que le guide virtuel n'ait été généré, le retour haptique n'est disponible que selon l'axe x (figure 4.3(a)). Pendant que l'utilisateur parcourt manuellement la surface et l'objet qui doit être manipulé, des informations sont recueillies pour reconstruire la forme de la sphère et créer le guide virtuel. Le retour haptique selon l'axe y est alors disponible, et attire la poutre vers la ligne médiane y_0 calculée (figure 4.3(a)).

1.3.1 Mesures d'amplitude en mode tapping

En mode tapping, chaque poutre est excitée à sa fréquence propre. Lorsque les poutres sont maintenues à une position verticale constante par rapport au substrat, loin des objets, les oscillations résultantes sont d'amplitude constante A_0 . Quand la poutre est approchée d'un objet, à moins de quelques centaines de nanomètres, elle touche l'objet de manière intermittente, et l'amplitude A_t diminue jusqu'à une valeur minimale A_{CP} atteinte lors du contact total entre la pointe et l'objet.

La figure 4.3 illustre le principe de la détection d'objets à partir des variations d'amplitude. La poutre est préalablement positionnée à une hauteur h_0 par rapport au substrat. Pendant l'alignement de la pince, cette position est fixe. L'utilisateur contrôle la poutre dans le plan (x, y) parallèle au substrat. Quand la poutre est déplacée en direction de l'objet selon la ligne médiane (axe x), son amplitude diminue jusqu'au contact (figure 4.3(b)). Selon l'axe y, les poutres doivent être positionnées sur la ligne passant par le centre de la sphère. Pour une position x fixée, cette ligne correspond à l'amplitude minimale selon l'axe y (figure 4.3(c)).



Figure 4.3 - Schéma représentant l'exploration de la demi-sphère inférieure en utilisant une poutre en oscillation. (a) Vue de dessus de la configuration désirée pour la saisie de l'objet. (b) Vue de face montrant la poutre s'approchant de l'objet selon l'axe x, et le touchant de manière intermittente. (c) Vue de côté représentant la poutre touchant l'objet de manière intermittente lors d'un déplacement selon l'axe y pour une position x fixée. (c) Les n points de contact de coordonnées x_t^i et y_t^i enregistrés pendant la phase d'exploration puis utilisés pour la génération du guide virtuel, et leur amplitude A_t^i correspondante. (e) Notations utilisées pour repérer les différents points caractéristiques.

1.3.2 Retour haptique pour l'alignement des poutres

Le retour visuel issu du microscope optique n'est pas suffisant pour positionner précisemment la pince par rapport à l'objet. Le but du retour d'effort est donc de compenser ce manque d'information. Le couplage haptique utilisé correspond au schéma *DFF*, adapté pour prendre en compte les contraintes de la manipulation (figure 4.4). En particulier, les poutres sont positionnées l'une après l'autre, puis mises en contact avec l'objet. Le retour haptique est calculé en fonction de la mesure de la variation d'amplitude des oscillations.



Figure 4.4 - Couplage haptique DFF adapté pour le positionnement de la pince. L'utilisateur contrôle la position des actionneurs à l'aide de l'interface à retour d'effort. Le calcul de la force haptique est basé sur les mesures de l'amplitude des oscillations des poutres. Selon la pointe considérée, l'utilisateur manipule le nanotranslateur ou le tube piézoélectrique. La mesure d'amplitude est réalisée par la photodiode correspondante.

Axe x Le retour haptique selon l'axe x doit transmettre les informations suivantes :

- force nulle quand la pointe est loin de l'objet,
- force croissante quand la pointe s'approche de l'objet,
- force croissante quand la pointe applique un effort sur l'objet.

D'après le profil de la variation d'amplitude décrit précédemment, le retour haptique f_h^x suivant remplit les conditions précédentes :

$$f_{h}^{x} = \begin{cases} -\alpha_{a}(A - A_{0}) & \text{si } A > A_{CF} \\ -\alpha_{a}(A - A_{0}) + k_{h}^{x}(x - x_{CP}) & \text{sinon} \end{cases}$$

où α_a est un facteur homothétique, et x_{CP} est la position du point de contact (figure 4.3(e)). L'amplitude A_0 est mesurée au début de l'expérience, alors que la poutre oscille à sa fréquence propre. Deux cas sont distingués :

- avant contact (première équation) : comme l'amplitude diminue alors que la poutre s'approche de l'objet, une force répulsive croissante est transmise à l'utilisateur pour l'informer de la présence de l'objet, et diminuer la vitesse à laquelle il s'approche de l'objet,
- pendant le contact (deuxième équation) : un ressort k_h^x entre la position du point de contact x_{CP} et la position courante de la pointe x est ajouté au retour haptique de la première équation. Il simule la force appliquée par la poutre sur la sphère. La position du point de contact x_{CP} est enregistrée lors du contact total, lorsque l'amplitude atteint A_{CP} .

Axe y La force transmise selon l'axe y doit aider l'utilisateur à aligner la pince avec l'objet, en plaçant les deux poutres sur la ligne médiane de la sphère. Le retour haptique n'est possible qu'après l'enregistrement des points nécessaires au guide virtuel, et à son calcul effectué selon la methodologie détaillée dans le paragraphe suivant. Pendant la phase d'exploration préalable au calcul de y_0 , le retour d'effort selon l'axe x est transmis à l'utilisateur pour qu'il perçoive la position de la sphère.

Lorsque y_0 est déterminé, le retour haptique f_h^y simulant un ressort k_h^y entre y_0 et la position courante y de la pointe est transmis à l'utilisateur :

$$f_h^y = k_h^y (y - y_0) \tag{4.2}$$

1.3.3 Détermination du guide virtuel

Pendant la phase d'exploration initiale en mode tapping n points de contact (x_t^i, y_t^i) et les amplitudes correspondantes A_t^i (i = 1..n) sont enregistrés (figure 4.3(d)). Pour garantir la précision des mesures, les points de contact sont conservés uniquement si leur amplitude A_t est dans l'intervalle $[15\%A_0, 70\%A_0]$. Pour calculer la position verticale relative z_t^i , l'approximation $z_t^i = A_t^i/2$ est proposée (figure 4.3(e)). Cette position est relative car la poutre oscille autour de la position h_0 définie initialement. La coordonnée z_0 de la sphère est donc connue par rapport à h_0 mais n'est pas définie précisément par rapport au substrat. Cependant, comme le seul paramètre utile pour le retour d'effort est y_0 , cette approximation est acceptable.

La figure 4.3(d) représente les n points enregistrés $(t_1, ..., t_n)$ durant l'exploration. Ces points sont utilisés pour reconstruire la sphère manipulée, calculer la ligne médiane, et définir le retour haptique selon l'axe y. Connaissant l'équation de la surface, la sphère est reconstruite à partir des n points selon :

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 = R^2$$
(4.3)

où R est le rayon de la sphère, et x_0 , y_0 et z_0 sont les coordonnées de son centre. Cette équation prend la forme :

$$x^{2} + y^{2} + z^{2} - C_{a}x - C_{b}y - C_{c}z + C_{d} = 0$$

$$(4.4)$$

où : $C_a = 2x_0$, $C_b = 2y_0$, $C_c = 2z_0$ et $C_d = x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 - R^2$. Les coordonnées du centre de la sphère et son rayon sont aisément déduits à partir des coefficients C_a , C_b , C_c et C_d . Pour calculer ces derniers, l'équation qui passe au mieux par les n points enregistrés est déterminée par un algorithme des moindres carrés³. Le système d'équation suivant est donc résolu :

$$\begin{bmatrix} x_t^1 & y_t^1 & z_t^1 & -1 \\ x_t^2 & y_t^2 & z_t^2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_t^n & y_t^n & z_t^n & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_a \\ C_b \\ C_c \\ C_d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_t^1)^2 + (y_t^1)^2 + (z_t^1)^2 \\ (x_t^2)^2 + (y_t^2)^2 + (z_t^2)^2 \\ \vdots \\ (x_t^n)^2 + (y_t^n)^2 + (z_t^n)^2 \end{bmatrix}$$
(4.5)

Les coefficients C_a , C_b , C_c et C_d sont déduits à partir de : $\begin{bmatrix} C_a & C_b & C_c & C_d \end{bmatrix}^T = \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{N}$ où :

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \sum(x_t^i)^2 & \sum x_t^i y_t^i & \sum x_t^i z_t^i & -\sum x_t^i \\ \sum x_t^i y_t^i & \sum(y_t^i)^2 & \sum y_t^i z_t^i & -\sum y_t^i \\ \sum x_t^i z_t^i & \sum y_t^i z_t^i & \sum(z_t^i)^2 & -\sum z_t^i \\ -\sum x_t^i & -\sum y_t^i & -\sum z_t^i & n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{N} = \begin{bmatrix} \sum x_t^i [(x_t^i)^2 + (y_t^i)^2 + (z_t^i)^2] \\ \sum y_t^i [(x_t^i)^2 + (y_t^i)^2 + (z_t^i)^2] \\ \sum z_t^i [(x_t^i)^2 + (y_t^i)^2 + (z_t^i)^2] \\ -\sum [(x_t^i)^2 + (y_t^i)^2 + (z_t^i)^2] \end{bmatrix}$$

La position de la ligne médiane de l'objet est calculée par $y_0 = \frac{C_b}{2}$. Comme l'ensemble des points enregistrés sont du même côté de la sphère selon l'axe x (x < 0 pour la poutre I et inversement pour la poutre II), le calcul de la coordonnée x_0 n'est pas précis. Cependant, comme expliqué précédemment, le seul paramètre utilisé pour le guide virtuel est y_0 .

La précision du guide virtuel généré dépend du nombre de points n et de leur position relative. Une analyse empirique de la valeur minimale du nombre de points nécessaires et de leur répartition est présentée dans la suite de ce chapitre.

1.3.4 Validation expérimentale de l'alignement des poutres

Les objets manipulés sont des microsphères, d'un rayon de $2-3 \mu m$ (figure 4.5). Avant d'aligner la pince avec les sphères, les poutres sont préalablement placées manuellement à une hauteur donnée par

³Cet algorithme n'est pas le plus robuste. En particulier, les termes des matrices étant d'ordre 1 et 2, leur conditionnement dépend de l'origine choisie pour définir x_t^i , y_t^i et z_t^i . Cependant, comme les paragraphes suivants le montrent, les résultats obtenus en pratique sont satisfaisants pour l'application considérée.

rapport au substrat (environ 500-600 nm)⁴. Les poutres sont ensuite placées l'une après l'autre de chaque côté de l'objet. Pour la poutre I, l'utilisateur contrôle la position du substrat avec le nanotranslateur. Ce dernier possède un contrôleur en position en boucle fermée. L'interface haptique fournit donc les positions désirées pour son déplacement. Pour l'alignement de la poutre II, le tube piézoélectrique est utilisé. Comme cet actionneur est contrôlé en boucle ouverte, son positionnement est moins précis. Cependant, coupler ce tube piézoélectrique avec l'interface haptique est équivalent à un schéma à retour d'effort en boucle fermée, où l'opérateur est le contrôleur. Toutes les expériences présentées ci dessous ont été réalisées avec le nanotranslateur pour bénéficier de sa précision, mais des résultats similaires ont été obtenus en utilisant le tube piézoélectrique.



Figure 4.5 - Image d'une microsphère provenant (a) d'un microscope optique avec un agrandissement $100 \times$ (la barre d'échelle représente 5 µm), et (b) d'un AFM.

Retour haptique selon l'axe x Les résultats expérimentaux obtenus lors du déplacement de la poutre selon l'axe x sont représentés sur la figure 4.6. La position de la poutre est représentée sur la figure 4.6(a), la mesure d'amplitude est donnée sur la figure 4.6(b) et le retour haptique sur la figure 4.6(c). Lors de la phase 1, la poutre est loin de l'objet, et le retour haptique est nul. Phase 2, la poutre s'approche de la sphère et un contact intermittent entre la pointe et la sphère se produit. L'utilisateur perçoit distinctement le retour haptique correspondant. Un effort supplémentaire lui est transmis lorsque la poutre applique un effort sur la sphère (phase 3), et la raideur perçue augmente.

Selon l'axe x, la mesure d'amplitude réalisée en mode tapping possède une plus grande sensibilité que la mesure d'effort réalisée en mode statique. En effet, en mode statique, la direction des efforts devant être mesurés est quasiment alignée avec la longueur de la poutre, et la raideur équivalente est donc très grande par rapport à la raideur normale k_z . Des efforts sont mesurés selon l'axe x uniquement si une force importante est appliquée à l'objet (voir partie 1.2.1 du chapitre 2). A l'inverse, la détection de l'objet est très rapide en mode tapping car un contact même intermittent entre la pointe et l'objet produit un signal détectable. L'utilisateur est donc informé de la présence de la sphère avant de lui appliquer un effort. Les poussées involontaires de l'objet sont donc évitées.

Génération du guide virtuel Comme expliqué précédemment, un ensemble de points est enregistré au cours de l'exploration préliminaire pour générer le guide virtuel et le retour haptique associé selon l'axe y. L'influence de deux paramètres, le nombre de points n utilisés pour résoudre l'équation (4.5), et la distance minimale entre deux points (notée d) est analysée expérimentalement pour optimiser la génération du guide virtuel. Le tableau 4.2 résume les différents cas de figure traités. Pour chaque couple (n, d), l'expérience est répétée 5 fois.

 $^{^4}$ Pour cette étape, une solution utilisant le retour haptique est proposée dans le chapitre 2 sur des cycles d'approcheretrait.



Figure 4.6 - Retour haptique selon l'axe x lors de l'exploration de la sphère devant être manipulée; (a) position de la poutre, (b) mesure de l'amplitude, et (c) force transmise à l'utilisateur. Pour le retour haptique, les coefficients utilisés sont : $\alpha_a = 3 \cdot 10^6 \text{ N.m}^{-1}$, $k_h^x = 10 \cdot 10^6 \text{ N.m}^{-1}$ et $A_{CP} = 0.1 \text{ } \mu\text{m}$.

		Dista	ance	minimale		e d
		entre deux points (μ m)			ım)	
		0.05	0.1	0.2	0.3	0.4
le	12	x	x	x	х	х
	20	х	X	х	х	
bro	25	x	X	х	х	
ii n	30	х	X			
Z	40	х				

Tableau 4.2 - Paramètres utilisés pour générer le guide virtuel

La figure 4.7 compare une image AFM de référence et la position de y_0 obtenue en reconstruisant la sphère pour les différents couples (n, d). La déviation standard est donnée sur la figure 4.7(c). Les résultats obtenus dépendent en partie de la trajectoire choisie par l'utilisateur lors de l'exploration initiale. Ils doivent donc être considérés uniquement de manière qualitative.

La première observation est que le nombre de points n a peu d'impact sur la précision du guide virtuel si ces points sont regroupés. Si le nombre n est trop élevé, certains points doivent être enregistrés sur les bords de la demi sphère. Comme ces mesures d'amplitude sont moins précises, la déviation standard augmente. Fixer une distance minimale d entre deux points garantit une meilleure distribution et améliore l'estimation de y_0 (figure 4.8) comme le confirme la diminution de la déviation standard.



Figure 4.7 - Résultats des calculs du guide virtuel. (a) Image AFM de référence effectuée pour plusieurs positions x (la ligne en pointillés représente la position de y_0). (b) Estimation de la position de y_0 . (c) Déviation standard des résultats de l'estimation de y_0 . (d) Temps nécessaire pour localiser y_0 .



Figure 4.8 - Sphère reconstruite à partir de n = 12 et d = 0.4 µm. Les croix rouges représentent les points enregistrés pendant la phase d'exploration.

La figure 4.7 indique également que sauf pour les très petites valeurs de d, augmenter le nombre de points augmente significativement le temps nécessaire au calcul du guide virtuel. De plus, comme seule la demi sphère face à la poutre est accessible, et que la position de la pointe est contrainte selon l'axe vertical, le nombre de points qu'il est possible d'enregistrer est limité, et diminue lorsque la distance minimale d entre deux points augmente. Il est alors plus difficile d'obtenir le nombre de points fixés pour
la génération du guide virtuel. Prendre $d = 0.3 \ \mu\text{m}$ et n = 12 est un bon compromis entre la précision du résultat (déviation standard d'environ 0.05 $\ \mu\text{m}$) et le temps nécessaire pour le calcul du guide virtuel (environ 40 s). Ces valeurs sont utilisées pour les expériences suivantes.

Retour haptique selon l'axe y Le retour haptique selon l'axe y est disponible dès que la génération du guide virtuel est terminée. Sa valeur est calculée en utilisant l'équation (4.2). La figure 4.9 représente la force transmise à l'utilisateur. La position courante de la poutre ainsi que la valeur de y_0 sont également données.



Figure 4.9 - Retour haptique selon l'axe y lors de l'alignement de la poutre avec la sphère : position de la poutre et force calculée avec $k_h^y = 10 \cdot 10^6 \text{ N.m}^{-1}$.

Comme y_0 correspond au point d'équilibre du ressort virtuel, le retour haptique selon l'axe y aide l'utilisateur à aligner la poutre par rapport à la sphère.

Le positionnement précis de la pointe au contact de la sphère est garanti par le retour haptique f_h^x qui transmet à l'utilisateur des informations sur les interactions entre la poutre et l'objet. L'alignement est assuré par le guide virtuel utilisé dans le calcul de f_h^y .

Après avoir saisi l'objet entre les deux poutres il faut le soulever, le transporter à la position désirée, et le déposer. Ces étapes font l'objet de la partie suivante

1.4 Saisie-dépose par téléopération avec retour haptique

Pour soulever, transporter et déposer l'objet, deux stratégies différentes sont proposées, et conduisent à deux retours haptiques. Le premier transmet à l'utilisateur les efforts mesurés, après une mise à l'échelle adéquate. Il se rapproche beaucoup des opérations d'approche-retrait effectuées dans le chapitre 2 puisqu'il consiste à faire ressentir les forces d'interaction nanoscopiques. Le second retour haptique calcule un guide virtuel, basé sur les efforts mesurés, pour aider l'utilisateur à soulever l'objet jusqu'à une position donnée pour éviter tout contact involontaire avec le substrat ou les objets environnants. Il garantit également que la dépose est volontaire. Pour ces deux retours haptiques, les poutres sont immobiles et le substrat est manipulé à l'aide du bras maître comme représenté sur la figure 4.10. Les mesures de force sont faites en mode statique, à partir des mesures fournies par les photodiodes pour calculer la flexion



Figure 4.10 - Couplage haptique DFF adapté pour des opérations de saisie-dépose. Les deux poutres restent fixes, et l'utilisateur manipule le nanotranslateur à l'aide de l'interface haptique pour déplacer le substrat par rapport aux pointes. Le retour haptique est calculé en fonction de la force mesurée sur les deux poutres par les photodiodes.

des poutres d'après l'équation (4.1).

Le retour haptique est transmis selon l'axe vertical z ascendant. Une force positive pousse la poignée de l'interface haptique vers le haut, et donc éloigne les poutres du substrat. Ce retour d'effort sera donc appelé "répulsif". A l'inverse, une valeur négative tire la poignée vers le bas et rapproche les poutres du substrat. Il sera donc qualifié d'"attractif".

1.4.1 Retour haptique des interactions nanoscopiques

Le but de ce premier retour haptique est de transmettre à l'utilisateur aussi fidèlement que possible les interactions nanoscopiques lors d'une téléopération de saisie-dépose. Cette expérience se rapproche fortement des cycles d'approche-retrait présentés au chapitre 2 puisque les interactions mesurées sont très similaires. Les phénomènes de *snap-in* et de *pull-off* notamment seront présents.

Le retour haptique est calculé à partir des forces mesurées f_e sur les pointes I et II. Comme détaillé dans [Xie 09], les forces d'adhésion f_{ao} entre la sphère et le substrat sont estimées par :

$$f_{ao} = f_{e,I} + f_{e,II} \tag{4.6}$$

où $f_{e,I}$ (resp. $f_{e,II}$) est la force appliquée sur la poutre I (resp. II). La force haptique est donc calculée par :

$$f_{h,fe}^z = \alpha_f (f_{ao} - f_0) \tag{4.7}$$

$$= \alpha_f [(f_{e,I} - f_{e,I_0}) + (f_{e,II} - f_{e,II_0})]$$
(4.8)

où $f_0 = f_{e,I_0} + f_{,eII_0}$ est la force mesurée quand la pince serre l'objet avant de le soulever, et est naturellement proportionnelle à la force de serrage appliquée par les pointes sur l'objet. En supprimant cet offset du retour haptique, l'utilisateur se concentre sur les efforts d'interaction lors de la saisie-dépose et non sur cette force de serrage. De plus, dans le cas où l'objet est lâché accidentellement, les forces mesurées $f_{e,I}$ $f_{e,II}$ reviennent à zéro et l'équation (4.8) donne un résultat négatif. Les poutres sont alors tirées vers le bas.

 α_f est le facteur qui amplifie les efforts mesurés pour les transformer en force haptique. La valeur utilisée ici est $\alpha_f = 2.0 \cdot 10^6$. Ce coefficient est choisi en fonction de l'amplitude des efforts d'interaction qui sont

transmis à l'utilisateur, en particulier celle de la force de pull-off. Le choix de ce facteur est détaillé au chapitre 2.

La figure 4.11 représente la force haptique lors d'une téléopération de saisie-dépose de microsphères de 5 μ m de diamètre sur un substrat de verre. Les forces mesurées sur les poutres sont données dans l'insert.



Figure 4.11 - Force haptique et efforts mesurés par les deux poutres lors d'une manipulation de saisiedépose de microsphères : (i) Saisie; (ii) La microsphère est détachée du substrat après le pull-off; (iii) La microsphère colle au substrat (snap-in); (iv) La pince se détache de la microsphère (pull-off); (v) La pince colle au substrat (snap-in); (vi) A la fin de l'opération les poutres sont légèrement pliées.

La courbe commence alors que la sphère est posée sur le substrat. Le nanotranslateur descend. L'objet maintenu entre les deux poutres est alors soulevé par rapport au substrat. Les poutres sont donc courbées, et une force négative est mesurée (insert (i)). Lors de cette saisie, quand le nanotranslateur atteint environ -900 nm, la sphère se détache du substrat (*pull-off*). La force nécessaire pour contrer les forces d'adhésion est de -1125 nN. Après le *pull-off*, la force mesurée est de -550 nN, et ne correspond pas à la force mesurée avant la saisie (insert (ii)). Comme les points de contact entre les pointes et l'objet sont dans l'hémisphère inférieur l'objet glisse dans la pince pendant la saisie. La force de serrage augmente alors. Pendant la phase de transport, une modification de la force mesurée se produit. Ce phénomène est également dû à un glissement de la sphère dans la pince. Cette hypothèse est confirmée par la différence de position d'environ 0.2μ m selon l'axe vertical z entre les positions de saisie et celle de dépose.

Pendant la phase de dépose, la microsphère colle au substrat (snap-in) comme représenté sur l'insert (iii). Alors que l'objet est poussé vers le substrat, entre (iii) et (iv), la force de contact compense la force de serrage jusqu'à ce que les poutres glissent de la sphère (pull-off), insert (iv), et touchent le substrat, insert (v). La manipulation se termine en ouvrant la pince pour relâcher l'objet. Comme la surface de contact entre l'objet et les poutres est très inférieure à celle entre l'objet et le substrat grâce à la finesse des pointes utilisées, le problème d'adhésion avec l'outil est limité.

1.4.2 Retour haptique pour l'assistance

Le retour haptique décrit précédemment transmet à l'utilisateur les interactions nanoscopiques, notamment les phénomènes d'adhésion et de *pull-off*. Cependant, l'amélioration de la dextérité lors d'une téléopération utilisant ce type de retour est discutable. Il peut être intéressant de cacher à l'utilisateur ces phénomènes physiques non intuitifs, et de les remplacer par des guides virtuels [Millet 09a]. Un retour haptique pour l'assistance, aidant l'opérateur lors de la manipulation, doit remplir les critères suivants :

- les efforts fournis par l'utilisateur pour soulever la sphère doivent être limités,
- la sphère doit être maintenue à une position z donnée durant le transport pour éviter tout contact avec le substrat ou d'autres objets,
- la sphère doit être déposée volontairement, et non par contact involontaire avec le substrat,
- lors de la dépose de la sphère, les efforts appliqués doivent être minimisés pour faciliter l'ouverture de la pince. Un retour haptique doit être transmis à l'utilisateur pour qu'il sache que la sphère est déposée.

Dans l'approche proposée, le calcul de la force haptique est basé sur l'opposé de la force d'interaction mesurée. Par exemple, la force de *pull-off* provoque un effort positif sur la poignée de l'interface haptique, et va donc repousser l'objet par rapport au substrat. Soulever la sphère sera alors plus aisé.

Comme précédemment, le retour haptique est calculé à partir de la mesure obtenue par les deux photodiodes. Pour respecter les critères énoncés ci dessus, la sortie des photodiode est convertie en force haptique $f_{h,as}^z$ par :

$$f_{h,as}^{z} = \begin{cases} -\alpha_{f}(f_{ao} - f_{0}) & \text{si } z < z_{PO} \\ -\alpha_{f}(f_{ao} - f_{0}) + k_{h}^{z}(z - z_{PO}) & \text{sinon} \end{cases}$$

où α_f est un facteur d'amplification d'effort, f_{ao} est la force mesurée par les photodiodes et f_0 est la force de serrage comme définies précédemment. z est la position courante du nanotranslateur selon l'axe vertical et z_{PO} correspond à la position à laquelle a lieu le *pull-off*. Cette valeur est détectée au cours de la manipulation, par la soudaine diminution de la norme de la force mesurée. k_h^z est la raideur du guide virtuel qui attire l'objet au dessus de z_{PO} et le maintient à une position verticale constante.



Figure 4.12 - Retour haptique pour l'assistance lors d'une manipulation de saisie-dépose. A : Début de l'opération de saisie-dépose, la sphère est sur le substrat. B-C : Pull-off. D : La sphère est maintenue au dessus du substrat, à une hauteur donnée. E : La sphère est déplacée vers le substrat. F : La sphère est déposée. Les paramètres utilisés pour le calcul de la force haptique sont : $\alpha_f = 2.5 \cdot 10^6$, $k_h^z = 1 \cdot 10^6$ N.m⁻¹. Les forces supérieures à 3 N sont saturées.

Le résultat obtenu par ce schéma de couplage lors d'une manipulation de saisie-dépose sur le substrat est représenté sur la figure 4.12. Une force répulsive proportionnelle à l'opposé de la force d'adhésion mesurée aide l'utilisateur à soulever l'objet. Après le *pull-off*, la force mesurée ne retourne pas à sa valeur initiale à cause du glissement de la sphère dans la pince comme expliqué précédemment. Une force répulsive résiduelle est mesurée pour $z \ge z_{PO}$. Comme le ressort virtuel k_h^z est activé à z_{PO} , cette force est équilibrée par le guide virtuel à z_D . L'utilisateur déplace librement la sphère au dessus du substrat dans le plan horizontal, le ressort virtuel garantissant une hauteur constante selon l'axe z. Pour déposer la sphère sur le substrat, l'utilisateur doit contrer la raideur virtuelle k_h^z entre z_D et z_{PO} , puis la force résiduelle après z_{PO} . L'objet ne peut donc pas être déposé par erreur.

Lorsque la force mesurée est inférieure à f_0 , le déplacement vertical est automatiquement arrêté pour éviter qu'un effort supplémentaire ne soit appliqué sur l'objet. L'ouverture de la pince est facilitée, et les objets fragiles ainsi que les outils sont protégés. La force haptique devenant nulle, l'utilisateur ressent distinctement la dépose.

Le tableau 4.3 détaille les différentes étapes et transitions de l'opération de saisie-dépose avec le guide virtuel, ainsi que la perception de l'utilisateur.

Etape	Retour haptique	Position des
		poutres : équa- tion utilisée
A : Début de la saisie	f_0 est enregistrée, $f_{h,as}^z$ est nulle	$z < z_{PO} : 1$
A-B : La sphère est tirée pour vaincre les forces d'adhésion	$f^z_{h,as}$ répulsive, augmente : aide l'utilisateur à soulever la sphère	$z < z_{PO} : 1$
B-C : Pull-off	Détection du <i>pull-off</i> , la valeur de z_{PO} est enregistrée, passage de l'équation 1 à l'équa- tion 2	$z = z_{PO} : 1 \to 2$
C-D : La sphère est détachée du substrat	$f^z_{h,as}$ répulsive, commence à être équilibrée par le ressort virtuel k^z_h	$z > z_{PO} : 2$
D : Sphère autour de z_D	$f_{h,as}^z = 0$ le ressort virtuel équilibre la force résiduelle répulsive à $z_D(>z_{PO})$	$z = z_D : 2$
D-E : Début de l'opération de dépose	$f_{h,as}^z$ répulsive, augmente : l'utilisateur four- nit un effort pour pousser la sphère vers le substrat	$z_D > z > z_{PO} : 2$
E : La sphère atteint z_{PO}	Passage de l'équation 2 à l'équation 1	$z = z_{PO} : 2 \to 1$
E-F : La sphère est déplacée vers le substrat	$f^z_{h,as}$ diminue, la résistance ressentie par l'utilisateur est moins importante	$z < z_{PO} : 1$
$\mathbf{F}: f = f_0$	Le déplacement vertical est arrêté. $f^z_{h,as} = 0$	$z < z_{PO} : 1$

Tableau 4.3 - Retour d'effort pour l'assistance pour une téléopération de saisie-dépose.

Avec ce retour haptique, la force transmise à l'opérateur l'aide à réaliser les différentes étapes correctement, et l'opération de saisie-dépose est rendue plus aisée et plus sûre.

1.4.3 Bilan sur le retour haptique pour la phase de saisie-dépose

Pour ces deux retours haptiques, les forces transmises aux utilisateurs présentent des transitions nettement marquées, et ces derniers non aucun mal à les discerner. Bien qu'il soient appliqués sur une même tâche (saisie-dépose d'une sphère), ces deux retours haptiques ont des buts très différents. Le premier cherche à rendre compte des phénomènes d'interaction. L'utilisateur ressent alors très nettement les phénomènes d'adhésion, de détachement, et de contact avec le substrat. Il rend plus aisée la compréhension de ces phénomènes. Le second retour haptique proposé n'est pas conçu pour rendre compte des efforts physiques. Son but est d'améliorer la précision et la dextérité des opérateurs en diminuant le temps nécessaire pour réaliser la téléopération. Il est considéré comme déroutant par les personnes ayant une bonne connaissance des interactions à l'échelle nanoscopique. En particulier, ressentir l'opposé du phénomène de *pull-off* est particulièrement étonnant. Cependant, il est apprécié des personnes non expérimentées, qui souhaitent réaliser facilement la tâche demandée. Pour les utilisateurs familiers avec les phénomènes à ces échelles, un temps d'apprentissage semble nécessaire.

1.5 Construction d'une pyramide à deux étages

Pour valider la faisabilité des manipulations 3D par téléopération, une micropyramide à deux étages est construite avec quatre microsphères en nylon ayant des rayons de $2-3 \mu m$ [Saito 02]. Les microsphères sont déposées sur un substrat en verre nettoyé. La zone expérimentale est sélectionnée sous un microscope optique avec un objectif $20\times$. La partie choisie est représentée sur la figure 4.13, et l'insert montre la séquence de manipulation. Après un positionnement grossier des deux pointes à l'aide du microscope optique, le temps total de la manipulation (incluant l'alignement des pointes et l'opération de saisie-dépose) est de moins de 5 minutes par sphère.



Figure 4.13 - Planification de la manipulation des quatre sphères en une micropyramide. Le diagramme de droite montre le protocole de la manipulation, dans lequel les microsphères 1, 2 et 4 sont manipulées par saisie-dépose, alors que la microsphère 3 est poussée vers sa position finale.

La micropyramide en 3D est construite par saisie-dépose. La figure 4.14 montre les différentes étapes de cette micro-manipulation. Les figures 4.14(a) et 4.14(b) sont prises lorsque la première sphère est saisie et déposée. La figure 4.14(c) montre le résultat de la manipulation de la seconde sphère. Le premier étage est terminé après que la troisième sphère ait été poussée à sa position finale (figure 4.14(d)). Les figures 4.14(e) et 4.14(f) représentent la manipulation de la dernière microsphère qui termine la micromanipulation. Le résultat final est donné par la figure 4.14(f), et est agrandi ($\times 100$) dans la figure 4.14(g).

Le retour haptique utilisé pour cette opération est celui rendant compte des interactions à l'échelle nanoscopique. La force transmise à l'utilisateur ainsi que les efforts d'interaction lors de la manipulation de la quatrième sphère sont tracés sur la figure 4.15. Comme cette sphère est placée au sommet du premier étage de la pyramide, la dépose a lieu $\sim 4 \ \mu m$ au dessus de la position initiale.

Dans le cas où le retour haptique pour l'assistance serait utilisé pour la dernière sphère, deux points seraient à considérer :



Figure 4.14 - Construction d'une micropyramide par téléopération. (a)–(d) quatre photos de l'assemblage du premier étage de la micropyramide. (e) et (f) représentent l'assemblage du second étage (quatrième microsphère). Les images (a)–(f) sont prises avec un zoom $20 \times .$ (g) est le résultat de la micro-manipulation zoomé $100 \times .$



Figure 4.15 - Retour haptique rendant compte des interactions physiques lors de la manipulation de la dernière sphère : (i) Saisie; (ii) La microsphère est détachée du substrat; (iii) La microsphère colle au premier étage de la pyramide; (iv) La pince est détachée de la sphère; (v) La pince colle au premier étage de la pyramide.

- la position verticale à laquelle la sphère serait maintenue lors de la phase de transport par un retour haptique nul devrait être supérieure à la hauteur du premier étage de la pyramide. Un ajustement de la raideur k_h^z serait nécessaire (cette valeur devrait être diminuée pour augmenter la hauteur de la position d'équilibre).
- lors de la dépose de la sphère, la position z serait supérieure à z_{PO} . Le retour haptique ne diminuerait pas progressivement avant la dépose. Lorsque la force mesurée serait telle que $f \leq f_0$ (dépose de la sphère sur la pyramide), le déplacement vertical de la sphère serait arrêté, et le retour haptique deviendrait nul.

1.6 Conclusion

Malgré la complexité du système de manipulation due à des contraintes technologiques spécifiques à ces échelles, une tâche de manipulation 3D a été réalisée par téléopération grâce à une stratégie adaptée. En particulier, l'usage de deux poutres et l'utilisation de l'AFM en mode dynamique pour détecter précisément la sphère ont été pris en compte lors de la définition de la stratégie.

La méthodologie présentée dans cette partie est applicable à d'autres types d'objets, comme des nanotubes de carbone. Seul le guide virtuel selon l'axe y est spécifique à des objets sphériques, mais il peut être étendu à des objets non sphériques en prenant en compte leur géométrie lors de sa génération. Pour utiliser cette stratégie sur une nanomanipulation, il serait aussi souhaitable de générer parallèlement au guide virtuel une scène virtuelle, projetée en 3D, pour compenser l'absence totale de retour visuel par microscope optique.

2 Gains adaptatifs pour la simulation moléculaire

doit être adapté en fonction des interactions moléculaires.

A l'échelle nanoscopique, deux problèmes majeurs se posent : la complexité des systèmes de manipulation due à des contraintes technologiques, et le compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation. Le premier point a été abordé dans la partie précédente. Le second point fait l'objet de cette partie. Bien que ce problème se pose quel que soit le type de téléopération, il sera illustré ici sur l'exemple de la téléopération virtuelle. Ce type de téléopération est en effet bien adapté à la comparaison des stratégies de manipulation car les expériences sont répétables, contrairement à la téléopération directe ou l'influence des conditions environnementales est importante.

Plusieurs approches sont actuellement utilisées pour obtenir des systèmes stables pour la téléopération moléculaire. En particulier, la simplification des simulations est envisagée, notamment en rigidifiant certaines parties des objets. Cependant, elle détériore la précision des résultats. Pour limiter cette détérioration, les degrés de liberté simulés devraient être choisis en fonction des interactions moléculaires. La stabilité est aussi affectée par la différence d'échelle. Cependant, si l'amplification des efforts est trop faible, les forces attractives ne sont pas perceptibles par l'utilisateur. Si elle est trop importante, le système devient instable et la force doit être saturée, avec pour conséquence une perte d'information. Avec un facteur d'échelle en effort constant il n'est donc pas possible de transmettre à la fois les forces d'interaction attractives suffisamment amplifiées, et les forces répulsives non tronquées. Ce paramètre

Le facteur d'échelle en déplacement peut être à l'origine d'instabilités si les déplacements sont trop importants. S'ils sont limités, la facilité de manipulation est détériorée. Une solution serait de modifier en ligne la valeur du facteur en déplacement en fonction de la situation.

Une simulation et un schéma de couplage adaptatif semble être une solution prometteuse pour répondre au problème du compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation. Cette stratégie est détaillée dans cette partie. Elle est basée sur le schéma DFF et l'étude correspondante faite au chapitre 3. Le choix de ce schéma est motivé par ses qualités en terme d'intuitivité de manipulation. Appliquer un effort pour manipuler précisément un objet jusqu'à une position donnée se révèle parfois délicat. Cette remarque est également vraie pour définir l'orientation de l'objet par l'application d'un moment.

Quelques travaux ont été effectués sur les gains adaptatifs pour garantir la stabilité des systèmes de téléopération ou améliorer la précision de la manipulation pour que les trajectoires ne soient pas inutilement perturbées par le retour d'effort [Mobasser 06], [Zhu 00], [Vander Poorten 08], [Farkhatdinov 10]. Cependant, il semblerait qu'aucun ne traite de l'amélioration de la qualité du retour haptique pour des applications nanoscopiques.

Dans cette partie, les spécificités de la téléopération pour des applications moléculaires sont rappelées et mises en évidence sur un exemple monodimensionnel composé de deux molécules d'eau. Dans ce cas, le profil des interactions est aisément interprétable. L'influence des paramètres principaux de la simulation et du couplage est ensuite analysée. A partir de des conclusions tirées, un système entièrement adaptatif est proposé, puis testé.

2.1 Interactions moléculaires et schéma haptique

Un équipement similaire à celui du chapitre 3 est utilisé ici. En particulier, l'interface haptique est un *Phantom Omni*. L'utilisateur a la possibilité de dissocier le déplacement de l'interface haptique pour repositionner la poignée sans déplacer l'objet virtuel (des explications détaillées sur cette technique sont données dans [Dominjon 05]). Pour éviter toute détérioration du bras maître les efforts transmis sont saturés à 3 N. Ce choix est primordial car il signifie que toutes les variations de forces au delà de cette limite sont tronquées, et ne sont pas transmises à l'utilisateur. Le retour haptique est donc déterioré. Comme dans le chapitre 3, le logiciel de simulation utilisé est SAMSON. Tout autre simulateur donnant accès aux mêmes paramètres auraient pu être utilisé, mis à part pour la partie concernant l'adaptativité de la simulation qui est spécifique.

2.1.1 Spécificités des interactions moléculaires

Pour mettre en avant les spécificités des interactions moléculaires, une expérience monodimensionnelle comportant uniquement deux molécules d'eau est choisie. Cet exemple est sélectionné car les interactions sont facilement interprétables. Mais les conclusions restent vraies pour des molécules plus complexes, ou pour des objets différents. En particulier, l'interaction entre une poutre AFM et un substrat présente de très fortes similarités puisque dans les deux cas le comportement des systèmes est principalement régi par les forces de van der Waals.

Dans l'exemple sélectionné, la première molécule est fixe. L'utilisateur contrôle le mouvement de la seconde grâce à l'interface haptique. Pour que l'expérience soit facilement répétable, dans le but de comparer les résultats entre les différentes stratégies de téléopération retenues, le mouvement est contraint selon un axe

La force d'interaction moléculaire est représentée sur la figure 4.16 en fonction du temps⁵. Un tracé de la force en fonction de la position relative des deux molécules semblerait plus adapté, mais ne mettrait pas en évidence la durée des expériences. Ce paramètre étant important pour évaluer la facilité de manipulation, tous les tracés sont représentés en fonction du temps.

Sur cette courbe il apparaît clairement que les forces attractives sont limitées, alors que les forces répulsives

⁵Dans cet exemple, aucune force haptique n'est transmise à l'utilisateur, pour que le profil d'effort obtenu ne soit pas perturbé par ce retour. Par contre, dans toute la suite le retour haptique sera activé.

sont arbitrairement grandes, selon le mouvement choisi par l'utilisateur. Cette différence est un point clef pour le rendu des efforts, car ces deux phénomènes doivent être transmis fidèlement à l'utilisateur. En plus du rendu de la diversité des efforts, la stabilité et la facilité de manipulation doivent être considérées.



Figure 4.16 - Interactions moléculaires entre deux molécules d'eau

2.1.2 Spécificités du couplage haptique pour la simulation moléculaire

Dans ce paragraphe, l'influence des paramètres principaux α_f , α_d et T_e , évoquée au cours des chapitres précédents, est rappelée et mise en évidence sur l'expérience précédente. Ces courbes serviront de référence pour évaluer le retour haptique adaptatif présenté par la suite.

Influence du coefficient en effort α_f L'expérience précédente est réalisée pour une amplification faible et une amplification forte de la force d'interaction moléculaire. La force haptique correspondante est représentée sur la figure 4.17 :

- pour une amplification faible, l'utilisateur ressent les forces attractives avec une amplitude de 0.1 N. Cette amplification n'est pas suffisante pour que des utilisateurs inexpérimentés puissent les ressentir distinctement. Même si la valeur de l'effort minimal perceptible dépend de l'interface haptique utilisée, les conclusions données ici restent inchangées.
- pour une amplification importante, des oscillations apparaissent pour les forces répulsives. L'utilisateur doit les amortir en tenant fermement la poignée de l'interface. De plus, les forces supérieures au maximum admissible par le bras maître sont saturées. Les variations d'effort ne sont pas transmises à l'utilisateur au dessus de cette limite.

Il n'est pas possible de transmettre les forces attractives suffisamment amplifiées sans devoir saturer les forces répulsives en conservant une valeur constante pour le coefficient d'amplification en effort. La partie 2.2.2 considère des coefficients adaptatifs pour résoudre ce problème.

Influence du coefficient en déplacement α_d Deux coefficients en déplacement différents sont utilisés pour les expériences présentées sur la figure 4.18 :



Figure 4.17 - Influence du coefficient en effort α_f sur la force haptique, $\alpha_d = 0.5 \cdot 10^9$

- pour un coefficient en déplacement élevé, la molécule se déplace lentement. La durée nécessaire pour réaliser les expériences est importante (supérieure à 20 s), et rend moins aisée la manipulation. L'interprétation des interactions moléculaires est plus difficile car l'utilisateur doit se concentrer sur le déplacement.
- pour un coefficient en déplacement faible, le système est instable. L'utilisateur est finalement parvenu à séparer les deux molécules en tenant fermement la poignée de l'interface haptique.



Figure 4.18 - Influence du coefficient en déplacement α_d sur la force haptique, $\alpha_f = 1.5 \cdot 10^9$

La facilité de manipulation et la stabilité sont limitées par les facteurs en déplacement constants. Des coefficients adaptatifs sont donc introduits dans la partie 2.2.2. D'autres solutions, basées notamment sur le contrôle en vitesse, ont été développées. Cependant, compte tenu de la complexité des systèmes moléculaires, une solution qui adapte automatiquement le facteur d'échelle à la situation en fonction des interactions semble intéressante.

Influence du temps de calcul Les analyses numériques présentées partie 2.3.2 du chapitre 3 sur la stabilité du schéma DFF, ainsi que les résultats des expériences précédentes laissent penser que la stabilité du schéma de couplage dépend des facteurs d'échelle. Pour le vérifier, il est nécessaire d'étudier analytiquement le schéma de commande. Cependant, comme cela a été souligné au chapitre 3, les conditions nécessaires et suffisantes de stabilité sont difficilement interprétables. C'est pourquoi seule une condition

nécessaire est donnée ici par l'analyse d'une des conditions du critère de Jury. L'équation caractéristique de la fonction de transfert (équation (3.16) calculée dans le chapitre 3) est rappelée ici :

$$a_3 z^3 + a_2 z^2 + a_1 z + a_0 = 0 \tag{4.9}$$

avec :

En appliquant le critère de Jury à ce système linéaire invariant dans le temps, les conditions nécessaires et suffisantes de stabilité sont déterminées. La condition $a_0 + a_1 + a_2 + a_3 > 0$ est toujours satisfaite. Les conditions $a_0^2 - a_3^2 < a_0a_2 - a_1a_3$ et $a_0 - a_1 + a_2 - a_3 < 0$ ne sont pas facilement interprétables analytiquement. Des analyses numériques doivent être réalisées, sur le modèle de celles du chapitre 3. La dernière condition, $|a_0| < a_3$, se simplifie par :

$$\frac{\alpha_f}{\alpha_d} T_e^2 k_{eq} < M_h \tag{4.10}$$

en considérant l'approximation $\delta \approx 1 - \frac{B_h T_e}{M_h}$ car T_e tend vers zéro. Cette condition nécessaire met en évidence l'influence de la période d'échantillonnage et du rapport des facteurs d'échelle sur la stabilité. Elle explique notamment pourquoi des oscillations apparaissent sur la figure 4.17(b) pour un facteur d'amplification en effort important et sur la figure 4.18(b) pour un facteur en déplacement faible. Comme montré dans la partie 2.1.2, le facteur d'échelle en effort (resp. déplacement) détermine la qualité du retour d'effort (resp. la facilité de manipulation). Pour avoir un système stable sans modifier les facteurs d'échelle, la période d'échantillonnage doit être diminuée sans détériorer de manière trop importante la précision de la simulation. Ceci est le sujet de la partie 2.2.1. Ajouter de l'amortissement pourrait également améliorer la stabilité. Cependant, comme la transparence est un critère important pour transmettre à l'utilisateur les petites variations des interactions moléculaires, cette solution n'est pas retenue.

2.2 Système adaptatif

2.2.1 Simulation moléculaire adaptative

Pour réduire le temps de simulation, une simplification classique consiste à diminuer le nombre de degrés de liberté, en rigidifiant certaines parties des molécules. L'algorithme adaptatif de SAMSON adapte les degrés de liberté simulés en fonction des interactions moléculaires pour minimiser la perte de précision (voir chapitre 3). Dans ce chapitre, l'adaptativité de l'algorithme est utilisée pour améliorer le retour haptique. L'avantage principal est que le temps de simulation T_e est diminué, mais la précision des forces calculées n'est que peu détériorée. Il est donc possible d'atteindre un rapport plus élevé sur les facteurs d'échelle tout en conservant un système stable (équation (4.10)). L'utilisateur a donc accès à un paramètre supplémentaire, le temps de simulation, pour régler le système en fonction du compromis précision et stabilité.

2.2.2 Couplage haptique adaptatif

Comme les performances des schémas de couplage sont limitées par l'utilisation de gains constants, un schéma de couplage adaptatif est proposé. Dans les parties suivantes les gains adaptatifs sont représentés par le symbole "~".

Coefficient en effort adaptatif $\tilde{\alpha}_f$ Un facteur d'amplification en effort non constant est proposé pour augmenter de manière importante les forces attractives (forces de faible amplitude). A l'inverse, les

forces répulsives sont peu amplifiées pour éviter la saturation. La force haptique est calculée à partir des efforts d'interaction moléculaire :

$$F_{h} = \beta_{1} \ atan(\delta_{1}F_{m}) + \beta_{2} \ atan(\delta_{2}(F_{m} - F_{m}^{0})) + \beta_{2} \ atan(\delta_{2}(F_{m} + F_{m}^{0}))$$
(4.11)

où $\beta_1 = \frac{F_{h1}}{\pi/2}, \beta_2 = \frac{F_{h2} - F_{h1}}{\pi}, \delta_1 = \frac{\alpha_{f_{max}}}{\beta_1}, \delta_2 = \frac{\alpha_{f_{min}}}{2\beta_2}$. F_{h1} (resp. F_{h2}) est la valeur de la force haptique vers laquelle les efforts d'interaction de faible amplitude (resp. de grande amplitude) tendent après amplification. F_m^0 est la limite entre les efforts d'interaction de faible et ceux de grande amplitude. Le profil de la force résultante est donné sur la figure 4.19 :

- pour $F_m \to 0$: $F_h = \alpha_{f_{max}} F_m$. Pour des faibles forces d'interaction, l'amplification est constante et vaut : $\tilde{\alpha_f} = \alpha_{f_{max}}$.
- pour $F_m \to F_m^0$: $F_h = F_{h1} + \alpha_{f_{min}} F_m$. Pour des efforts d'interaction proches de F_m^0 , l'amplification est constante. Même si la force haptique n'est pas proportionnelle aux efforts d'interaction à un effort résiduel près, l'utilisateur a accès de manière précise aux variations d'efforts.
- pour $F_m \to +\infty$ (resp. $F_m \to -\infty$): $F_h \to F_{h2}$ (resp. $F_h \to -F_{h2}$). Pour des efforts d'interaction importants, la force haptique tend vers une valeur maximale choisie de manière à correspondre à la force maximale admissible par le bras maître. Même si les variations des forces de grande amplitude sont atténuées, elles ne sont pas tronquées.



Figure 4.19 - Profil de l'amplification des efforts en utilisant une fonction non linéaire (équation (4.11)). $F_{h1} = 1 \text{ N}, F_{h2} = 3 \text{ N}, F_m^0 = 1.5 \cdot 10^{-9} \text{ N}, \alpha_{f_{min}} = 0.64 \cdot 10^9, \alpha_{f_{max}} = 5.1 \cdot 10^9.$

D'autres fonctions pourraient être utilisées pour obtenir un profil similaire, ou d'autres profils pourraient être considérés. La fonction proposée correspond à l'une des solutions possibles. Son avantage est de posséder deux plages d'amplification constantes des efforts.

Une expérience identique à celle de la partie 2.1.1 est réalisée. Les valeurs numériques des paramètres F_{h1} , F_{h2} , F_m^0 , $\alpha_{f_{min}}$ et $\alpha_{f_{max}}$ sont les mêmes que pour la figure 4.19. La force haptique F_h ainsi que la force d'interaction moléculaire F_m sont tracées sur la figure 4.20.

Les forces attractives sont suffisamment amplifiées pour qu'un utilisateur inexpérimenté puisse les distinguer aisément, et les forces répulsives restent dans l'intervalle admissible par l'interface haptique.

Coefficient en déplacement adaptatif $\tilde{\alpha_d}$ Pour éviter le compromis entre aisance de manipulation et stabilité mis en évidence dans la partie 2.1.2, un facteur en déplacement adaptatif est utilisé pour faciliter la manipulation lorsque la force d'interaction moléculaire est faible. Le coefficient utilisé est le suivant :

$$\tilde{\alpha_d} = \alpha_{d_{min}} + \beta \ atan((\|F_m\| - F_m^{off})\gamma) - \beta \ atan(-F_m^{off}\gamma)$$

$$(4.12)$$



Figure 4.20 - Retour haptique des interactions entre deux molécules d'eau en utilisant un facteur d'amplification en effort non linéaire, $T_e = 14$ ms. Les valeurs des paramètres utilisés sont les suivantes : $F_{h1} = 1$ N, $F_{h2} = 3$ N, $F_m^0 = 1.5 \cdot 10^{-9}$ N, $\alpha_{f_{min}} = 0.64 \cdot 10^9$, $\alpha_{f_{max}} = 5.1 \cdot 10^9$. Coefficient en déplacement : voir figure 4.21.

où $\beta = \frac{\alpha_{d_{max}} - \alpha_{d_{min}}}{\pi/2 - atan(-\gamma F_m^{off})}$. $\alpha_{d_{min}}$ (resp. $\alpha_{d_{max}}$) est la valeur minimale (resp. maximale) du facteur en déplacement. Plusieurs points sont notables :

- pour $F_m \to 0$: $\tilde{\alpha}_d = \alpha_{d_{min}}$. Pour des efforts d'interaction moléculaire faibles, des déplacements importants sont possibles. La manipulation est donc facilitée.
- pour $F_m \to +\infty$ ou $F_m \to -\infty$: $\tilde{\alpha}_d = \alpha_{d_{max}}$. Pour des efforts d'interaction moléculaire importants, les déplacements sont limités pour conserver la stabilité (voir équation (4.10)).
- γ détermine la pente de variation du facteur en déplacement entre les valeurs maximales et minimales. Plus γ est élevé, plus cette transition est rapide.
- F_m^{off} est l'amplitude de la force d'interaction moléculaire pour laquelle la transition entre faible et forte amplification des déplacements intervient.

Là encore, d'autres fonctions pourraient être utilisées.

L'expérience comportant les deux molécules d'eau est réalisée avec le facteur en déplacement adaptatif $\tilde{\alpha}_d$ (voir figure 4.21).

Contrairement à l'expérience représentée sur la figure 4.18, le système reste stable. La facilité de manipulation est garantie par des déplacements importants quand les interactions entre molécules sont faibles. Pour éviter de détériorer la perception de l'utilisateur (notamment la perception de raideur qui est la variation de la force pour un déplacement donné), le coefficient en déplacement est constant dans le voisinage de la deuxième molécule d'eau. La transition entre faible et forte valeur du coefficient en déplacement est faite dès que l'influence mutuelle des molécules n'est plus négligeable.

2.3 Téléopération adaptative

2.3.1 Exemple du VIH

Un premier exemple simple comprenant uniquement deux molécules a mis en avant l'intérêt des facteurs d'échelle adaptatifs. Une téléopération entièrement adaptative, comprenant également une simulation adaptative, est maintenant testée. Comme au chapitre 3, l'exemple du VIH et ses inhibiteurs est choisi, et la téléopération consiste à extraire un des inhibiteurs, puis à le réinsérer. L'adaptativité de



Figure 4.21 - Retour haptique des interactions entre deux molécules d'eau en utilisant un facteur d'amplification en déplacement non linéaire $\tilde{\alpha_d}$, $T_e = 14$ ms. Les valeurs des paramètres utilisés sont les suivantes : $\gamma = 10 \cdot 10^{11}$, $F_m^{off} = 20 \cdot 10^{-12}$ N, $\alpha_{d_{min}} = 0.005 \cdot 10^9$, $\alpha_{d_{max}} = 0.25 \cdot 10^9$. Coefficient en effort : voir figure 4.20.

l'algorithme est utilisée pour limiter les temps de calcul à quelques dizaines de millisecondes. 40 degrés de liberté sont activés sur un total de 848. Le temps de simulation est alors de $T_e = 83$ ms. La force haptique et la force d'interaction moléculaire sont représentées sur la figure 4.22(a). Le système reste stable pendant toute l'expérience, et les forces de faible amplitude sont fortement amplifiées. La position de la molécule et le facteur adaptatif en déplacement sont représentées sur la figure 4.22(b) en fonction du temps. Loin du système moléculaire, le déplacement de l'inhibiteur est rendu plus aisé par un facteur en déplacement faible.

2.3.2 Discussion

Une stratégie basée sur la téléopération adaptative a été proposée dans les paragraphes précédents. Même si d'autres expériences sont nécessaires pour en définir précisément les bénéfices, les conclusions suivantes sont tirées :

- la période d'échantillonnage doit être faible pour que le coupage haptique soit stable. Ce problème se pose principalement lorsqu'un logiciel de simulation est utilisé (téléopérations virtuelle et augmentée). Une solution largement utilisée est de simplifier les simulations, et dans le cas de la téléopération moléculaire, de rigidifier des parties du système. Pour limiter la perte de précision induite par cette opération, un algorithme adaptatif est utilisé.
- les forces de faible amplitude sont de la plus grande importance pour la compréhension et la maîtrise des interactions à l'échelle nanoscopique, notamment pour étudier les propriétés des systèmes moléculaires, ou pour analyser les interactions entre deux objets, comme une poutre AFM et une bille. Pour transmettre haptiquement ces interactions sans perte d'information due à la saturation des efforts de grande amplitude, un facteur en effort adaptatif est proposé. La fonction utilisée présente deux plages d'amplification constante, pour les forces de faible amplitude et celles proche d'une valeur F_m^0 donnée. La comparaison quantitative des efforts n'est pas possible car l'amplification n'est pas constante hors de ces deux plages. Mais la comparaison qualitative est maintenant possible, et des phénomènes d'interaction jusque là non perçus sont maintenant transmis en téléopération virtuelle. Des tests utilisateurs devront être effectués pour évaluer le gain ou la perte induits sur la perception des opérateurs.



(a) Paramètres utilisés pour le facteur en effort : $F_{h1} = 1$ N, $F_{h2} = 3$ N, $F_m^0 = 1.5 \cdot 10^{-9}$ N, $\alpha_{f_{min}} = 0.25 \cdot 10^9$, $\alpha_{f_{max}} = 5.1 \cdot 10^9$.



(b) Paramètres utilisés pour le facteur en déplacement : $\gamma = 10 \cdot 10^{11}$, $F_m^{off} = 20 \cdot 10^{-12}$ N, $\alpha_{d_{min}} = 0.005 \cdot 10^9$, $\alpha_{d_{max}} = 0.25 \cdot 10^9$.

Figure 4.22 - Exemple du VIH, extraction et réinsertion de l'inhibiteur : 40 des 848 degrés de liberté sont activés. (a) : Forces haptique et moléculaire. (b) : Position de l'inhibiteur du VIH et facteur en déplacement.

• un compromis entre facilité et précision de manipulation ainsi que stabilité du système doit être trouvé quand un facteur en déplacement constant est utilisé. Un facteur adaptatif est donc proposé, basé sur l'amplitude des interactions nanoscopiques. Les valeurs numériques des paramètres sont choisies pour que la transition entre faible et forte mise à l'échelle soit clairement marquée, et qu'elle ait lieu dès le début de l'influence mutuelle des objets. La détérioration de la perception de l'utilisateur est limitée car le facteur en déplacement est quasiment constant à l'exception de cette transition. La notion de raideur des interactions n'est donc pas modifiée par $\tilde{\alpha}_d$. Cette stratégie doit être comparée avec les solutions existantes basées sur le contrôle en vitesse.

Bien que ces stratégies aient été testées sur une téléopération virtuelle, le problème du compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation se pose pour tous les types de téléopération. Ces conclusions sont donc génériques.

2.4 Analyse de la stratégie

Grâce à une stratégie basée sur l'adaptativité, des interactions moléculaires non perceptibles par les utilisateurs sont maintenant transmises. La simulation adaptative assure la stabilité en diminuant les temps de calcul, et les facteurs d'échelle adaptatifs garantissent la variété des efforts transmis et la facilité de manipulation. Ces travaux sont un premier pas, et beaucoup de points doivent être traités. En particulier, l'influence du changement de gains sur la perception de l'utilisateur doit être analysée en détail, avec des tests utilisateurs. Le choix des fonctions les plus adaptées doit être considéré, et les analyses de stabilité prenant en compte ces gains variables doivent être réalisées pour choisir la valeur des différents gains selon l'application.

Par des stratégies adaptées aux spécificités des échelles nanoscopiques de nouvelles applications sont possibles, notamment ici avec l'exploitation de la très bonne transparence du schéma DFF sur des applications complexes grâce à un système adaptatif. Cette stratégie peut être directement appliquée en téléopération directe, où les mêmes problèmes se posent, en particulier avec l'exploration haptique dans laquelle le *snap-in* de la poutre AFM sur le substrat était transmis, mais le *pull-off* avait dû être saturé et la durée de la tâche avait été augmentée (partie 3.1 du chapitre 2).

3 Conclusion

Basé sur les études des couplages préalables, ce chapitre traite des deux principales modifications induites par la réduction d'échelle par rapport à la téléopération à l'échelle macroscopique, à savoir l'adaptation nécessaire des systèmes de téléopération aux contraintes technologiques des plate-formes de micro-manipulation, et le compromis fort entre stabilité, qualité du retour d'effort et facilité de manipulation. Dans ces deux cas, des stratégies adaptées sont proposées.

Le problème de l'adaptation aux contraintes technologiques est abordé à travers la téléopération directe. Une micro-manipulation de billes en une pyramide est réalisée avec un retour haptique 3D. Malgré la complexité du système de manipulation, des utilisateurs non expérimentés ont pu saisir et déposer les billes de manière interactive.

Le compromis entre stabilité, qualité du retour d'effort et aisance de manipulation est traité sur l'exemple de la téléopération virtuelle. Des interactions moléculaires habituellement non perceptibles par les utilisateurs ont été transmises haptiquement grâce à l'utilisation de gains variables.

Bien que ces stratégies soient proposées respectivement sur une téléopération directe et une téléopération virtuelle, ces exemples sont facilement adaptables aux trois types de téléopération (directe, virtuelle et augmentée) puisque les problématiques en terme de manipulation sont similaires.

Ce travail est le premier pas vers un usage généralisé de la téléopération pour les manipulations à l'échelle nanoscopique. Beaucoup de problèmes restent à résoudre pour mettre en place des stratégies adaptées à l'ensemble des situations, pour les trois types de téléopération. Il faut notamment compléter ce travail par un nombre plus important d'expériences type. Des tests utilisateurs pour définir au mieux le retour haptique par rapport aux attentes des opérateurs, selon l'application considérée, sont également nécessaires. Cependant, ce chapitre montre qu'avec des schémas de couplage adaptés et des stratégies adéquates, la téléopération est une solution possible pour des applications complexes à l'échelle nanoscopique.

Conclusions et Perspectives

La téléopération avec retour d'effort est une solution prometteuse pour réaliser des tâches à l'échelle nanoscopique en bénéficiant de l'expertise des opérateurs. Cependant, jusqu'à présent, les applications possibles étaient limitées, et seules quelques explorations et opérations simples avaient été effectuées. Pour pouvoir réaliser des tâches plus complexes, plusieurs points ont été abordés au cours de cette thèse :

- l'influence de la réduction d'échelle sur les schémas de commande a été étudiée. En particulier, l'impact des facteurs homothétiques sur la transparence et la stabilité des couplages a été déterminé. Des règles pour le choix de ces facteurs, mais également pour le choix des autres gains présents dans les schémas de commande ont été énoncées pour les couplages considérés en prenant en compte la réduction d'échelle.
- plusieurs couplages ont été considérés, pour pouvoir adapter le choix du schéma de commande selon l'application recherchée. Les performances demandées en termes de transparence et de stabilité diffèrent selon la tâche à accomplir. L'une ou l'autre de ces caractéristiques sera donc privilégiée. Le mode de manipulation retenu (fournir une position ou un effort comme consigne pour l'outil) élargit également le champ d'application. Grâce à plusieurs structures de couplage issues de la téléopération à l'échelle macroscopique, adaptées à l'échelle nanoscopique, et à l'étude de leurs performances en termes de transparence et de stabilité, des schémas de commande spécifiques ont été proposés.
- les contraintes technologiques de manipulation d'objets microscopiques ont été prises en compte lors de la définition de stratégies pour la téléopération. En particulier, l'outil le plus employé pour la micro-manipulation, l'AFM, est généralement utilisé en mode dynamique. Des mesures de variations d'amplitude sont réalisées pour détecter des objets. Un schéma de téléopération adapté à cette spécificité, et intégrant les mesures d'amplitude pour définir un retour haptique est proposé.
- les limitations induites par l'utilisation de facteurs homothétiques constants ont été repoussées. Des gains adaptatifs ont été proposés pour éviter le compromis fort entre stabilité, facilité de manipulation et qualité du retour d'effort présent à l'échelle nanoscopique.

Les téléopérations effectuées au cours de cette thèse s'appuient sur la plate-forme de micro-manipulation de l'ISIR pour la téléopération directe, et le logiciel de simulation moléculaire SAMSON développé par l'INRIA pour la téléopération virtuelle. La téléopération augmentée n'a pas été considérée dans cette thèse, car elle apparaît comme une extension des types précédents. Une bonne maîtrise des téléopérations directe et virtuelle est donc un prérequis nécessaire pour l'aborder. Plusieurs téléopérations ont été effectuées, basées sur l'étude préalable des schémas de commande :

- à l'aide d'un schéma possédant de bonnes qualités de transparence, une exploration en téléopération directe a été effectuée sur un cycle d'approche-retrait. Un phénomène d'interaction d'une amplitude de quelques dixièmes de nanonewton rarement transmis aux utilisateurs, le *snap-in*, a été ressenti.
- une manipulation complexe de microbilles d'un rayon de $2-3 \mu m$ a été effectuée. Les contraintes technologiques de la micro-manipulation (pince formée de deux poutres AFM utilisées en mode dynamique) ont été prises en compte. Un retour haptique a été défini pour chacune des étapes de la manipulation, à l'aide d'une stratégie adaptée. A notre connaissance, il semblerait qu'il s'agisse de la première téléopération directe 3D avec retour haptique à l'échelle nanoscopique.
- un système de téléopération virtuelle avec un large champ d'application a été développé pour la simulation moléculaire. Ce système s'appuie sur les bonnes qualités du simulateur SAMSON pour le calcul rapide des forces d'interaction et la simulation de la flexibilité des molécules, mais les résultats sur les schémas de couplage restent néanmoins génériques. La manipulation en position ou en force permet de déformer intuitivement le système moléculaire, ou au contraire d'étudier ses propriétés sans prendre en compte l'influence de l'utilisateur. L'emploi de gains adaptatifs augmente les performances de la manipulation en position puisque des interactions jusque là non perceptibles par les utilisateurs ont été transmises haptiquement.

Par une bonne connaissance de l'influence de la réduction d'échelle sur les schémas de couplage, une définition précise de leur domaine d'application en fonction de leurs performances en termes de transparence et de stabilité, et des stratégies adaptées aux spécificités de l'échelle nanoscopique, **il est possible de réaliser des téléopérations complexes avec retour d'effort à l'échelle nanoscopique**. Ce travail n'est que le premier pas vers l'usage généralisé de la téléopération à cette échelle. Mais il démontre la faisabilité de cette approche pour des manipulations complexes.

Ce travail ouvre de nombreuses perspectives dans le domaine de la téléopération pour les nanosciences, avec des schémas de couplage adaptés, dont les particularités sont connues et maîtrisées, et des stratégies spécifiques pour la téléopération à l'échelle nanoscopique.

Le premier domaine dans lequel il serait possible d'étendre ces travaux est celui de la manipulation d'objets réels. Le travail de cette thèse est axé sur la téléopération par AFM d'objets microscopiques. De par leur taille, les objets sont visibles par microscope optique, et de par l'outil utilisé, la mesure des efforts d'interaction est disponible. Mais pour aller plus loin dans la manipulation, l'utilisation d'outils plus efficaces, moins contraignants en terme de manipulation, serait nécessaire. Cependant, les pinces commercialement disponibles, et largement utilisées à l'échelle microscopique, ne possèdent pas de mesure de force avec une résolution inférieure au micronewton. En les couplant avec un système de vision, tel un microscope optique ou électronique, des informations sur les interactions seraient obtenues. Elles seraient utilisées pour calculer un retour haptique. Il s'agirait là de **réalité augmentée en effort**.

Les objets considérés dans cette thèse, de l'ordre de quelques micromètres, sont à la limite de la résolution des microscopes optiques. La manipulation d'objets de quelques centaines de nanomètres est donc compliquée par l'absence de retour visuel en temps réel. Cependant, les outils de manipulation pour des objets nanoscopiques, généralement composés de poutres AFM, donnent accès à la mesure des efforts d'interaction. Le retour haptique serait donc utilisé pour transmettre à l'utilisateur des informations sur la manipulation, notamment la position respective des objets. Le manque de retour visuel serait donc compensé par le retour haptique, pour une téléopération de **réalité augmentée en vision**.

En permettant l'utilisation d'outils de manipulation plus efficaces et mieux adaptés, et en rendant possible la manipulation d'objets d'un ordre de grandeur plus petit, tout en cachant les problèmes technologiques à l'utilisateur, la réalité augmentée serait une solution séduisante pour les nanosciences.

Le second domaine est celui de l'évaluation de stratégies spécifiques mises en place pour la téléopération à l'échelle nanoscopique. L'outil de simulation moléculaire avec retour d'effort développé serait en effet adapté à la réalisation de tests utilisateurs détaillés, pour analyser différents retours d'effort en fonction de tâches précises à accomplir. Cette opération serait réalisée en particulier selon les besoins exprimés par des pharmacologues de la société *Sanofi-Aventis* de manière à répondre au mieux aux

attentes des professionnels utilisant quotidiennement la simulation moléculaire. La démonstration formelle de la stabilité des couplages à gains variables, ainsi que la définition de règles pour le choix des gains des correcteurs seraient également des perspectives intéressantes en vue de l'utilisation systématique de cette stratégie. L'approche de la passivité pourrait être considérée.

Enfin, les deux approches présentées dans ce travail, la manipulation d'objets et l'outil de simulation, seraient utilisés conjointement pour aboutir à un système complet et polyvalent de **téléopération augmentée**. Deux applications principales fortement liées aux travaux précédents apparaîtraient :

- quand la capacité de calcul sera suffisante, le comportement des pointes AFM pourrait être simulé à partir de leur décomposition au niveau atomique. La scène virtuelle serait couplée à la scène réelle, et bénéficierait des mesures disponibles. Les autres efforts seraient estimés par la simulation. En particulier, les interactions entre l'objet et l'outil ou son environnement seraient précisemment connues. Le retour haptique serait alors utilisé pour transmettre ces informations à l'utilisateur. Pour des applications où le retour visuel sera insuffisant, la parfaite maîtrise de l'ensemble des interactions sera nécessaire pour réaliser des manipulations précises et contrôlées.
- l'outil logiciel SAMSON serait couplé à une plate-forme de nano-manipulation pour des opérations sur des objets biologiques. Une des applications possibles serait l'interaction avec des brins d'ADN. L'outil de manipulation pourrait être une pince optique, ou magnétique, et la simulation serait utilisée pour calculer les efforts d'interaction. Cette opération se rapprocherait du dépliement de molécules virtuelles, présenté dans cette thèse. Le retour d'effort simulé apporterait les informations nécessaires à la manipulation, qu'il ne serait pas possible d'obtenir à l'aide de mesures ou de retour visuel.

Ces opérations s'appuieraient sur la plate-forme robotique de l'ISIR, qui comporte deux salles principales. La première est équipée pour la réalité virtuelle. La seconde est une salle contrôlée composée de deux systèmes de micro nano-manipulation, pour des applications dans l'air ou sur des objets biologiques.

Basée sur des schémas de couplages et des stratégies adaptées, ainsi que sur l'utilisation conjointe de plate-forme de micro nano-manipulation et d'outils de simulation, la téléopération serait une solution efficace et interactive pour la micro et la nanomanipulation.

Notations et abréviations

Cette section regroupe l'ensemble des notations et des abréviations. Ces dernières sont valables pour l'ensemble du manuscrit, sauf indication contraire.

Les variables en minuscule (x, \dot{x}, f) représentent respectivement les position, vitesse et force dans le domaine temporel (continu ou discret). Leur équivalent dans le domaine de Laplace (continu ou discret) est donné en majuscule (X, V, F).

Notations :

Haptique :

t,k	Variable temporelle continue, discrète
s, z	Variable de Laplace continue, variable discrète
f_{op}, f_h	Force de l'opérateur, haptique
Н	Fonction de transfert de l'interface haptique
x_h	Position de l'interface haptique
\dot{x}_h	Vitesse de l'interface haptique
\dot{x}_n	Vitesse de consigne du nanotranslateur
$\alpha_f, \alpha_d, \alpha_a$	Homothétie en effort, déplacement et amplitude
Z_{op}, Z_e	Impédance de l'utilisateur, de l'environnement
$\mathbf{Z},\mathbf{Y},\mathbf{G}$	Matrice impédance, admittance, hybride
C, G_n	Correcteurs Proportionnel Intégral et Proportionnel du schéma de couplage FP
B_{fp}, K_{fp}	Amortissement, raideur du schéma de couplage FP
k_i	Raideur du schéma de couplage FF
T_e	Période d'échantillonnage
k_h^x, k_h^y, k_h^z	Raideurs des guides virtuels selon les axes x, y et z

k_{eq} Raideur équivalente de l'environneme

Plate forme de micro-manipulation :

u_v, u_h	Tension de sortie de la photodiode selon l'axe vertical, horizontal
N	Fonction de transfert du nanotranslateur
$ au_i$	$i^{\rm ème}$ constante de temps du nanotranslateur
S_v, S_h	Sensibilité de la photodiode selon l'axe vertical, horizontal
β_a	Facteur de conversion entre la tension de la photodiode et l'am- plitude des oscillations d'une poutre en mode dynamique
k_z,k_{t_ϕ}	Raideur normale, de torsion de la poutre
k_s	Raideur du substrat
f_e, A	Mesure de la force, de l'amplitude (bien que cette variable soit exprimée dans le domaine temporel, elle sera notée en majuscule pour éviter toute confusion avec la notation des coefficients des équations caractéristiques des schémas de commande).

Simulation moléculaire :

T_m	Temps d'intégration moléculaire
m, m_p	Inertie de la molécule, du $p^{\text{ème}}$ corps rigide
x_m, x_m^j	Position effective de la molécule, du $j^{\text{ème}}$ corps rigide
x_i, x_i^j	Position désirée de la molécule, du $j^{\text{ème}}$ corps rigide
f_m, f_m^j	Force appliquée à la molécule, au $j^{\text{ème}}$ corps rigide
x^l_{sm} , f^l_{sm}	Position et force du $l^{\rm ème}$ corps rigide, non inclus dans la molécule manipulée
f_i, f_i^j	Force appliquée par l'utilisateur sur la molécule, le $j^{\text{ème}}$ corps rigide
k_{eq}	Raideur équivalente de l'environnement

Abréviations :

Microscopes :

AFM	Atomic Force Microscope (Microscope à force atomique)
SEM ou MEB	Scanning Electron Microscope (Microscope Electronique à Ba- lavage)
SPM	Scanning Probe Microscope (Microscope à sonde locale)
STM	Scanning Tunneling Microscope (Microscope à effet tunnel)

Objets :

ADN	Acide désoxyribonucléique
VIH	Virus de l'Immunodéficience Humaine

Schémas de commande :

DFF	Direct Force Feedback (Retour d'effort direct)
FP	Force Position
FF	Force Force
HF, BF	Hautes, Basses fréquences
ddl	Degrés de liberté
EBSB	Entrée Bornée, Sortie Bornée
LTI	Linéaire, Invariant dans le Temps
Р	Correcteur Proportionnel
PI	Correcteur Proportionnel Intégral

Annexe $_{\perp}$	<u>^</u>
-------------------	----------

Calcul de l'angle de rotation de la poutre

Cette annexe détaille le calcul de l'angle de rotation d'une poutre sans pointe provoqué par un effort ponctuel f_e^z appliqué en $P(y_P)$. L'hypothèse d'un problème monodimensionnel est faite. Une poutre d'axe y et de centre O est donc considérée (voir figure A.1).



Figure A.1 - Calcul de l'angle de rotation d'une poutre sans pointe

Dans un premier temps, les torseurs des efforts sont déterminés. L'expression reliant la flèche au moment de flexion est ensuite intégrée pour calculer l'angle de rotation.

Torseurs des efforts

Soit G un point courant, de coordonnées y.

Tronçon OP:

$$\{\tau_{eff_{int}}\} = \{\tau_P\} = \left\{\begin{array}{c} f_e^z \overrightarrow{z} \\ \overrightarrow{0} \end{array}\right\}_P = \left\{\begin{array}{c} f_e^z \overrightarrow{z} \\ (y_P - y) \overrightarrow{y} \wedge f_e^z \overrightarrow{z} \end{array}\right\}_G = \left\{\begin{array}{c} f_e^z \overrightarrow{z} \\ (y_P - y) f_e^z \overrightarrow{x} \end{array}\right\}_G$$
(A.1)

Tronçon PB :

$$\{\tau_{eff_{int}}\} = \{\overrightarrow{0}\} \tag{A.2}$$

Calcul de l'angle de rotation

La flèche v est reliée au moment de flexion par :

$$\frac{d^2v}{dy^2} = \frac{M_z(y)}{EI_x} = \begin{cases} \frac{(y_P - y)f_e^z}{EI_x} & \text{si } 0 \le y \le y_P\\ 0 & \text{si } y_P \le y \end{cases}$$
(A.3)

L'angle de rotation est obtenu par intégration de cette expression :

$$\phi(y) = \frac{M_z(y)}{EI_x} = \begin{cases} \frac{f_e^2}{EI_x} \left(y_P \cdot y - \frac{1}{2} y^2 \right) + \phi(0) & \text{si } 0 \le y \le y_P \\ \frac{f_e^2}{2EI_x} y_P^2 + \phi(0) & \text{si } y_P \le y \end{cases}$$
(A.4)

Au point P, l'angle de rotation vaut donc :

$$\phi(y_P) = \frac{f_e^z}{2EI_x} y_P^2 + \phi(0)$$
 (A.5)

Une étude similiaire pour $y_P < 0$ donne un résultat identique.

Résolution de l'équation du mouvement pour la simulation moléculaire

L'algorithme de résolution de l'équation du mouvement est basé sur l'algorithme de R. Featherstone [Featherstone 99a]. Il est détaillé dans [Rossi 07]. Le principe est donné dans cette annexe.

Soit C un corps articulé formé par l'assemblage de deux corps articulés A et B (voir figure 3.2 du chapitre 3). Le corps A (resp. B) possède m + 1 (resp. n + 1) connecteurs $H_{1_1}^A, ..., H_{1_m}^A, H_2^A$ (resp. $H_1^B, H_{1_1}^B, ..., H_{1_n}^B$). Ces deux corps sont assemblés en connectant le connecteur H_2^A de A, et H_1^B de B. Les autres connecteurs sont non connectés. En isolant le connecteur H_2^A de A, l'équation (3.3) donnée dans le chapitre 3 s'écrit :

$$\mathbf{a}_{1}^{A} = \mathbf{\Phi}_{1}^{A} \mathbf{f}_{1}^{A} + \mathbf{\Phi}_{12}^{A} \mathbf{f}_{2}^{A} + \mathbf{b}_{1}^{A}$$
(B.1)

$$\mathbf{a}_2^A = \mathbf{\Phi}_{21}^A \mathbf{f}_1^A + \mathbf{\Phi}_2^A \mathbf{f}_2^A + \mathbf{b}_2^A \tag{B.2}$$

où la première équation se rapporte aux connecteurs $H_{1_1}^A, ..., H_{1_m}^A$, et la seconde au connecteur H_2^A . $\Phi_1^A = mat(\Phi_{1_{ij}}^A)$ est une matrice $6m \times 6m$ composée des inerties inverses de couplage mutuel des corps articulés correspondant aux connecteurs non connectés de A, $\Phi_{12}^A = (\Phi_{21}^A)^T$ est une matrice $6m \times 6$ composée des inerties inverses de couplage mutuel entre les connecteurs non connectés de A et le connecteur connecté H_2^A , et Φ_2^A est une matrice 6×6 correspondant à l'inertie inverse du corps articulé du connecteur H_2^A . L'équation du corps articulé s'écrit de manière similaire en isolant le connecteur H_1^B :

$$\mathbf{a}_1^B = \mathbf{\Phi}_1^B \mathbf{f}_1^B + \mathbf{\Phi}_{12}^B \mathbf{f}_2^B + \mathbf{b}_1^B \tag{B.3}$$

$$\mathbf{a}_2^B = \boldsymbol{\Phi}_{21}^B \mathbf{f}_1^B + \boldsymbol{\Phi}_2^B \mathbf{f}_2^B + \mathbf{b}_2^B \tag{B.4}$$

A partir des équations des enfants, l'équation du parent commun s'écrit :

$$\mathbf{a}_{1}^{A} = \mathbf{\Phi}_{1}^{C} \mathbf{f}_{1}^{C} + \mathbf{\Phi}_{12}^{C} \mathbf{f}_{2}^{C} + \mathbf{b}_{1}^{C}$$
(B.5)

$$\mathbf{a}_{2}^{B} = \Phi_{21}^{C} \mathbf{f}_{1}^{C} + \Phi_{2}^{C} \mathbf{f}_{2}^{C} + \mathbf{b}_{2}^{C}$$
(B.6)

Pour résoudre ces équations, il faut tout d'abord déterminer Φ_1^C , Φ_{12}^C , Φ_2^C , Φ_{21}^C , \mathbf{b}_1^C et \mathbf{b}_2^C en fonctions des termes des enfants. Cette opération est réalisée lors du parcours principal. Trois équations sont

nécessaires :

$$\mathbf{v}_1^B - \mathbf{v}_2^A = \mathbf{S}\dot{\mathbf{q}} \tag{B.7}$$

$$\mathbf{f}_1^B = -\mathbf{f}_2^A \tag{B.8}$$

$$\mathbf{S}^T \mathbf{f}_1^B = \mathbf{Q} \tag{B.9}$$

L'équation (B.7) exprime la contrainte cinématique entre les connecteurs H_2^A et H_1^B . \mathbf{v}_1^B et \mathbf{v}_2^A sont les vitesses spatiales des deux connecteurs, et $\mathbf{S}\dot{\mathbf{q}}$ est la vitesse spatiale à travers la liaison. \mathbf{S} est l'espace des déplacements, et $\dot{\mathbf{q}}$ la vitesse articulaire. L'équation (B.8) est issue de la troisième loi de Newton. L'équation (B.9) provient de considérations énergétiques. \mathbf{Q} est le vecteur des forces de liaison.

En utilisant les équations (B.7) à (B.9), les coefficients des équations de mouvement du corps C sont exprimés en fonctions de ceux des corps A et B :

où :

$$\mathbf{w} = \mathbf{V} - \mathbf{V}\mathbf{S}(\mathbf{S}^T\mathbf{V}\mathbf{S})^{-1}\mathbf{S}^T\mathbf{V}$$
(B.11)

$$= (\Phi_1^B + \Phi_1^A)^{-1}$$
(B.12)

$$\gamma = \mathbf{w}\beta + \mathbf{VS}(\mathbf{S}^{T}\mathbf{VS})^{-1}\mathbf{Q}$$
(B.13)

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{b}_2^A - \mathbf{b}_1^B + \mathbf{S}\dot{\mathbf{q}} \tag{B.14}$$

Le parcours principal se termine lorsque la racine de l'arbre est atteinte (noeud ne possédant qu'un unique enfant). Il reçoit donc de son unique enfant les équations suivantes (copies des équations (B.4) et (B.4)) :

V

$$\mathbf{a}_{1}^{B} = \mathbf{\Phi}_{1}^{B} \mathbf{f}_{1}^{B} + \mathbf{\Phi}_{12}^{B} \mathbf{f}_{2}^{B} + \mathbf{b}_{1}^{B}$$
(B.15)

$$\mathbf{a}_{2}^{B} = \mathbf{\Phi}_{21}^{B}\mathbf{f}_{1}^{B} + \mathbf{\Phi}_{2}^{B}\mathbf{f}_{2}^{B} + \mathbf{b}_{2}^{B}$$
(B.16)

Les coefficients de cette équation sont connus car ils ont été calculés récursivement à partir des coefficients de chaque corps rigide (figure B.1(a)). Il faut alors calculer \mathbf{a}_1^B , puis \mathbf{f}_1^B et \mathbf{f}_2^B avant de commencer la phase de substitution arrière.



Figure B.1 - Principe de l'algorithme de R. Featherstone

L'équation (B.16) n'est pas utilisée, car elle fait référence au connecteur non connecté du noeud. \mathbf{f}_2^B vaut zéro car elle correspond à la force d'interaction entre le noeud racine et le noeud d'un corps rigide

non existant. L'équation (B.16) devient alors :

$$\mathbf{a}_1^B = \mathbf{\Phi}_1^B \mathbf{f}_1^B + \mathbf{b}_1^B \tag{B.17}$$

Deux cas se présentent alors : le système est libre, ou il est fixé à une base. Si le système est libre, alors \mathbf{f}_1^B est nulle, et $\mathbf{a}_1^B = \mathbf{b}_1^B$ et $\mathbf{f}_1^B = \mathbf{f}_2^B = 0$. S'il fixé à une base, en utilisant les équations liant les enfants aux parents, l'accélération est calculée à l'aide des équations (B.7) à (B.9) :

$$\ddot{\mathbf{q}} = (\mathbf{S}^T \mathbf{V} \mathbf{S})^{-1} (\mathbf{Q} - \mathbf{S}^T \mathbf{V} (\boldsymbol{\Phi}_{21}^A \mathbf{f}_1^A - \boldsymbol{\Phi}_{12}^B \mathbf{f}_2^B + \beta))$$
(B.18)

La phase de substitution arrière peut alors commencer. Pendant cette phase, les valeurs de \mathbf{f}_1^A et \mathbf{f}_2^B sont transmises aux enfants (figure B.1(b)), et les forces \mathbf{f}_1^B et \mathbf{f}_2^A sont calculées à l'aide de l'équation (B.18) par :

$$\mathbf{f}_1^B = \mathbf{w} \mathbf{\Phi}_{12}^A \mathbf{f}_1^A - \mathbf{w} \mathbf{\Phi}_{12}^B \mathbf{f}_2^B + \gamma \tag{B.19}$$

$$\mathbf{f}_2^A = -\mathbf{f}_1^B \tag{B.20}$$

Les variables sont ensuite transmises aux enfants. De manière récursive, l'ensemble des paramètres pour chacun des corps rigide est déterminé.

Bibliographie

[Adams 99]	R.J. Adams et B. Hannaford . Stable haptic interaction with virtual environments. IEEE Transactions on Robotics and Automation, vol. 15, n° 3, pages 465–474, 1999.
[Agnus 09]	J. Agnus, D. Hériban, M. Gauthier et V. Pétrini. Silicon end-effectors for microgripping tasks. Precision Engineering, vol. 33, n° 4, pages 542–548, 2009.
[Alvo 10]	S. Alvo, P. Lambert, M. Gauthier et S. Régnier. A van der Waals force based adhesion model for micromanipulation. Journal of Adhesion Science and Technology, 2010.
[Ammi 07]	M. Ammi et A. Ferreira . Robotic assisted micromanipulation system using virtual fixtures and metaphors. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 454–460, 2007.
[Andersen 09]	K.N. Andersen, D.H. Petersen, K. Carlson, K. Molhave, O. Sardan, A. Horsewell, V. Eichhorn, S. Fatikow et P. Boggild. Multimodal electro- thermal silicon microgrippers for nanotube manipulation. IEEE Transactions on Nanotechnology, vol. 8, n° 1, pages 76–85, 2009.
[Anderson 73]	B. D. O. Anderson et S. Vongpanitlerd . Network analysis and synthesis - a modern systems theory approach. Prentice Hall, 1973.
[Anderson 89]	R.J. Anderson et M.W. Spong . Bilateral control of teleoperators with time delay. IEEE Transactions on Automatic Control, vol. 34, n° 5, pages 494–501, 1989.
[Artigas 09]	J. Artigas, C. Preusche, G. Hirzinger, Borghesan G. et C. Melchiorri. Bilateral energy transfer for high fidelity haptic telemanipulation. In Third Joint Eurohaptics Conference and Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Envi- ronment and Teleoperator Systems, pages 488–493, 2009.
[Boukhnifer 06]	M. Boukhnifer et A. Ferreira. Wave-based passive control for transparent micro-teleoperation system. Robotics and Autonomous Systems, vol. 54, n° 7, pages $601 - 615$, 2006.

[Boukhnifer 07]	M. Boukhnifer et A. Ferreira . H_{∞} loop shaping bilateral controller for a two- fingered tele-micromanipulation system. IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 15, n° 5, pages 891–905, 2007.
[Brooks Jr. 90]	F. P. Brooks Jr., M. Ouh-Young, J. J. Batter et P. J. Kilpatrick . Project GROPE - Haptic displays for scientific visualization. In Conference on Computer graphics and interactive techniques, pages 177–185, 1990.
[Brooks 83]	B.R. Brooks, R.E. Bruccoleri, D.J. Olafson, D.J. States, S. Swamina- than et M. Karplus. CHARMM : A program for macromolecular energy, mini- mization, and dynamics calculations. Journal of Computational Chemistry, vol. 4, pages 187–217, 1983.
[Coiffet 02]	P. Coiffet et A. Kheddar. Téléopération et télérobotique. Hermès Science, 2002.
[Colgate 93]	J.E. Colgate . Robust impedance shaping telemanipulation. IEEE Transactions on Robotics and Automation, vol. 9, n° 4, pages 374–384, 1993.
[Colgate 94]	J.E. Colgate et J.M. Brown . Factors affecting the Z-Width of a haptic display. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, volume 4, pages 3205–3210, 1994.
[Daunay 07a]	B. Daunay . Couplage haptique pour des applications de docking moléculaire. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2007.
[Daunay 07b]	B. Daunay, A. Micaelli et S. Régnier . Energy-field reconstruction for haptic- based molecular docking using energy minimization processes. In IEEE/RSJ In- ternational Conference on Intelligent Robots and Systems, pages 2704 -2709, 2007.
[Daunay 09]	B. Daunay et S. Régnier. Stable six degrees of freedom haptic feedback for
	flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886–895, 2009.
[De Gersem 05]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886-895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005.
[De Gersem 05] [Derjaguin 75]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886-895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005. B.V. Derjaguin, V. Muller et Y.P Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 53, n° 2, pages 314-326, 1975.
[De Gersem 05] [Derjaguin 75] [Diolaiti 06]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886-895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005. B.V. Derjaguin, V. Muller et Y.P Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 53, n° 2, pages 314-326, 1975. N. Diolaiti, G. Niemeyer, F. Barbagli et J.K. Salisbury. Stability of Haptic Rendering : Discretization, Quantization, Time Delay, and Coulomb Effects. IEEE Transactions on Robotics, vol. 22, n° 2, pages 256-268, 2006.
[De Gersem 05] [Derjaguin 75] [Diolaiti 06] [Dionnet 04]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886-895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005. B.V. Derjaguin, V. Muller et Y.P Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 53, n° 2, pages 314-326, 1975. N. Diolaiti, G. Niemeyer, F. Barbagli et J.K. Salisbury. Stability of Haptic Rendering : Discretization, Quantization, Time Delay, and Coulomb Effects. IEEE Transactions on Robotics, vol. 22, n° 2, pages 256-268, 2006. F. Dionnet, S. Haliyo et S. Régnier. Autonomous Manipulation using a new strategy of accurate release by rolling. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 5019-5024, 2004.
[De Gersem 05] [Derjaguin 75] [Diolaiti 06] [Dionnet 04] [Dionnet 05]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886-895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005. B.V. Derjaguin, V. Muller et Y.P Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 53, n° 2, pages 314-326, 1975. N. Diolaiti, G. Niemeyer, F. Barbagli et J.K. Salisbury. Stability of Haptic Rendering : Discretization, Quantization, Time Delay, and Coulomb Effects. IEEE Transactions on Robotics, vol. 22, n° 2, pages 256-268, 2006. F. Dionnet, S. Haliyo et S. Régnier. Autonomous Manipulation using a new strategy of accurate release by rolling. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 5019-5024, 2004. F. Dionnet. Télé-micromanipulation par adhésion. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2005.
[De Gersem 05] [Derjaguin 75] [Diolaiti 06] [Dionnet 04] [Dionnet 05] [Dominjon 05]	 flexible ligand-protein docking. Computer Aided Design, vol. 41, n° 12, pages 886–895, 2009. G. De Gersem. Kinaesthetic feedback and enhanced sensitivity in robotic endoscopic telesurgery. Thèse de doctorat, Katholieke Universiteit Leuven, 2005. B.V. Derjaguin, V. Muller et Y.P Toporov. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 53, n° 2, pages 314–326, 1975. N. Diolaiti, G. Niemeyer, F. Barbagli et J.K. Salisbury. Stability of Haptic Rendering : Discretization, Quantization, Time Delay, and Coulomb Effects. IEEE Transactions on Robotics, vol. 22, n° 2, pages 256–268, 2006. F. Dionnet, S. Haliyo et S. Régnier. Autonomous Manipulation using a new strategy of accurate release by rolling. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 5019–5024, 2004. F. Dionnet. Télé-micromanipulation par adhésion. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2005. L. Dominjon, A. Lécuyer, JM. Burkhardt, G. Andrade-Barroso et S. Richir. The "Bubble" technique : interacting with large virtual environments using haptic devices with limited workspace. In First Joint Eurohaptics Conference and Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems, pages 639–640, 2005.

	$characterization\ of\ carbon\ nanotubes.\ In\ IEEE/RSJ\ International\ Conference\ on\ Intelligent\ Robots\ and\ Systems,\ pages\ 291\ -296,\ 2007.$
[Fahlbusch 02]	S. Fahlbusch, A. Shirinov et S. Fatikow. <i>AFM-based micro force sensor and haptic interface for a nanohandling robot</i> . In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and System, volume 2, pages 1772–1777, 2002.
[Falvo 99]	M. Falvo, G. Clary, A. Helser, S. Paulson, R.M. Taylor II, V. Chi, F.P. Brooks Jr. S. Washburn et R. Superfine. Nanomanipulation experiments exploring frictional and mechanical properties of carbon nanotubes. Journal of Microscopy and Microanalysis, vol. 4, pages 504–512, 1999.
[Farkhatdinov 10]	I. Farkhatdinov et JH. Ryu. Stability analysis of mobile robot teleoperation with variable force feedback gain. In EuroHaptics, à paraître, 2010.
[Fatikow 03]	S. Fatikow et A. Shirinov. Haptic Interface for a Microrobot Cell. In Euro-Haptics, pages 68–79, 2003.
[Fearing 95]	R.S. Fearing . Survey of sticking effects for micro parts handling. In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, volume 2, pages 212–217, 1995.
[Featherstone 87]	R. Featherstone . Robot dynamics algorithms. Kluwer Academic Publishers, 1987.
[Featherstone 99a]	R. Featherstone . A divide-and-conquer articulated-body algorithm for paral- lel $O(log(n))$ calculation of rigid-body dynamics. Part 1 : basic algorithm. The International Journal of Robotics Research, vol. 18, n° 9, pages 867–875, 1999.
[Featherstone 99b]	R. Featherstone . A divide-and-conquer articulated-body algorithm for parallel $O(log(n))$ calculation of rigid-body dynamics. Part 2 : trees, loops and accuracy. The International Journal of Robotics Research, vol. 18, n° 9, pages 876–892, 1999.
[Ferreira 06]	A. Ferreira et C. Mavroidis . Virtual reality and haptics for nanorobotics. IEEE Robotics and Automation Magazine, vol. 13, n° 3, pages 78–92, 2006.
[Fok 05]	L.M. Fok, Y.H. Liu et W.J. Li. Modeling of nanomanipulation with an in- tegrated teleoperated system. In IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics, pages 83–88, 2005.
[Gil 04]	J. J. Gil, A. Avello, A. Rubio et J. Flórez . Stability analysis of a 1 DOF haptic interface using the Routh-Hurwitz criterion. IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 12, n° 4, pages 583–588, 2004.
[Goethals 07]	P. Goethals, G. De Gersem, M. Sette, D. Reynaerts et H. Van Brussel. Accurate haptic teleoperation on soft tissues through slave friction compensation by impedance reflection. In Second Joint EuroHaptics Conference and Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems, 2007.
[Grange 01]	S. Grange, F. Conti, P. Helmer, P. Rouiller et C. Baur. The Delta Haptic Device as a nanomanipulator. In SPIE Microrobotics and Microassembly III, 2001.
[Grudinin 10]	S. Grudinin et S. Redon. Practical modeling of molecular systems with symmetries. Journal of Computational Chemistry, à paraître, 2010.
[Guthold 00]	M. Guthold, M.R. Falvo, W.G. Matthews, S. Paulson, S. Washburn, D.A. Erie, R. Superfine, F.P. Brooks Jr. et R.M. Taylor II. Control- led manipulation of molecular samples with the nanoManipulator. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 5, n° 2, pages 189–198, 2000.

[Haddadi 09]	A. Haddadi et K. Hashtrudi-zaad. Least conservative robust stability condi- tion for linear bilateral teleoperation control systems. In Third Joint Eurohaptics Conference and Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems, pages 220–225, 2009.
[Haliyo 02]	D.S. Haliyo . Les forces d'adhésion et les effets dynamiques pour la micromani- pulation. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2002.
[Haliyo 06]	D. S. Haliyo , F. Dionnet et S. Régnier . Controlled rolling of micro objects for autonomous micro manipulation. International Journal of Micromechatronics, vol. 3, n° 2, pages 75–101, 2006.
[Hamdi 05]	M. Hamdi, G. Sharma, A. Ferreira et C. Mavroidis. Molecular mechanics simulation of bio-nanorobotic components using force feedback. In IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics, pages 105–110, 2005.
[Hamdi 08]	M. Hamdi, A. Ferreira, G. Sharma et C. Mavroidis. Prototyping bio- nanorobots using molecular dynamics simulation and virtual reality. Microelec- tronics Journal, vol. 39, n° 2, pages 190–201, 2008.
[Hannaford 89]	B. Hannaford . A design framework for teleoperators with kinesthetic feedback. IEEE Transactions on Robotics and Automation, vol. 5, n° 4, pages 426–434, 1989.
[Hannaford 02]	B. Hannaford et JH. Ryu . <i>Time-domain passivity control of haptic inter-</i> <i>faces.</i> IEEE Transactions on Robotics and Automation, vol. 18, 2002.
[Hatamura 90]	Y. Hatamura et H. Morishita. Direct coupling system between nanometer world and human world. In IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, pages 203–208, 1990.
[Heriban 08]	D. Heriban et G. Gauthier . Robotic micro-assembly of microparts using a piezogripper. In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, pages 4042–4047, 2008.
[Hogan 89]	N. Hogan . Controlling impedance at the man/machine interface. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, volume 3, pages 1626–1631, 1989.
[Hokayem 06]	P. F. Hokayem et M. W. Spong . Bilateral teleoperation : an historical survey. Automatica, vol. 42, n° 12, pages 2035–2057, 2006.
[Hollis 90]	R.L. Hollis , S. Salcudean et D.W. Abraham . Toward a tele-nanorobotic manipulation system with atomic scale force feedback and motion resolution. In IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems, pages 115–119, 1990.
[Johnson 71]	K.L. Johnson, K. Kendall et A.D. Roberts. Surface energy and the contact of elastic solids. In Royal Society, volume A, pages 301–313, 1971.
[Khalil 02]	H. K. Khalil. Nonlinear systems. Prentice Hall, 3 ^{ème} edition, 2002.
[Kim 06]	SG. Kim et M. Sitti. Task-based and stable telenanomanipulation in a nanoscale virtual environment. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, vol. 3, n° 3, pages 240–247, 2006.
[Lai-Yuen 06]	S.K. Lai-Yuen et YS. Lee . Energy-field optimization and haptic-based mo- lecular docking and assembly search system for computer-aided molecular design (CAMD). In Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Te- leoperator Systems, pages 233 – 240, 2006.

[Lawrence 93]	D.A. Lawrence . Stability and transparency in bilateral teleoperation. IEEE Transactions on Robotics and Automation, vol. 9, n° 5, pages 624–637, 1993.
[Lee 04]	YG. Lee et K. W. Lyons . Smoothing haptic interaction using molecular force calculations. Computer-Aided Design, vol. 36, n° 1, pages 75 – 90, 2004.
[Letier 03]	P. Letier , T. Saive et I. Burda . Interface haptique pour nanomanipulateur AFM. National Congress on Theoretical and Applied Mechanics, vol. Ghent, 2003.
[Li 04]	G. Li, N. Xi, M. Yu et WK. Fung. Development of augmented reality system for AFM-based nanomanipulation. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 9, n° 2, pages 358-365, 2004.
[Liu 06]	L. Liu, N. Jiao, X. Tian, Z. Dong, N. Xi, W.J. Li et Y. Wang. Development of a haptic user interface for surface sensing and nanomanipulation based on atomic force microscope. In IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems, pages 900–904, 2006.
[Llewellyn 52]	F.B. Llewellyn . Some fundamental properties of transmission systems. IRE, vol. 40, n° 3, pages 271–283, 1952.
[Marchi 10]	F. Marchi, J. Castet, S. Marlière, N. Castagné, J. Chevrier, A. Luciani et J.L. Florens. Le concept du NanoLearner : les mains dans le Nanomonde du grand public à l'Université. In Colloque sur l'enseignement des Technologies et des Sciences de l'Information et des Systèmes, 2010.
[Marliere 04]	S. Marliere, D. Urma, J.L. Florens et F. Marchi. Multi-sensorial interaction with a nano-scale phenomenon : the force curve. In Eurohaptics, pages 246–252, 2004.
[Marliere 06]	S. Marliere . Conception et réalisation d'un nouvel outil à réalité mixte et retour d'effort pour toucher et créer les nanomondes. NanoManipulateur multisensoriel. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 2006.
[Maugis 92]	D. Maugis . Adhesion of spheres : the JKR-DMT transition using a Dugdale model. Journal of Colloid and Interface Science, vol. 150, n° 1, pages 243–269, 1992.
[Menciassi 04]	A. Menciassi, A. Eisinberg, I. Izzo et P. Dario. From "macro" to "micro" manipulation : models and experiments. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 9, n° 2, pages 311–320, 2004.
[Micaelli 02]	A. Micaelli . Téléopération et télérobotique, chapitre 6, Asservissements et lois de couplage en téléopération. Hermès Science, 2002.
[Millet 08]	G. Millet, A. Lécuyer, J.M. Burkhardt, D.S. Haliyo et S. Régnier. Improving perception and understanding of nanoscale phenomena using haptics and visual analogy. In Eurohaptics, pages 847–856. Springer-Verlag, 2008.
[Millet 09a]	G. Millet . <i>Perception et interface haptique pour les nanosciences</i> . Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2009.
[Millet 09b]	G. Millet, S. Haliyo, S. Régnier et V. Hayward. The Ultimate haptic device : first step. In Third Joint Eurohaptics Conference and Symposium on Haptic Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems, pages 273–278, 2009.
[Mobasser 06]	F. Mobasser et K. Hashtrudi-Zaad . Adaptive teleoperation control using online estimate of operator's arm damping. In IEEE Conference on Decision and Control, pages 2032–2038, 2006.
[Murayama 07]	J. Murayama, H. Shimizu, C. S. Nam, H. Satoh et M. Sato. An educatio- nal environment for chemical contents with haptic interaction. In International Conference on Cyberworlds, pages 346–352, 2007.
-----------------------	--
[Nagata 02]	H. Nagata, H. Mizushima et H. Tanaka. Concept and prototype of protein- ligand docking simulator with force feedback technology. Bioinformatics, vol. 18, n° 1, pages 140–146, 2002.
[Niemeyer 96]	G. Niemeyer . Using wave variables in time delayed force reflecting teleoperation. Thèse de doctorat, Massachusetts Institute of Technology, 1996.
[Ogata 95]	K. Ogata. Discrete-time control systems. Prentice Hall, $2^{\text{ème}}$ edition, 1995.
[Onal 09]	C. D. Onal et M. Sitti. A scaled bilateral control system for experimental one-dimensional teleoperated nanomanipulation. The International Journal of Robotics Research, vol. 28, n° 4, pages 484–497, 2009.
[Onal 10]	C. D. Onal et M. Sitti. Teleoperated 3-D force feedback from the nanoscale with an atomic force microscope. IEEE Transactions on nanotechnology, vol. 9, n° 1, pages 46–54, 2010.
[Ostertag 04]	${\bf E.~Ostertag.}$ Systèmes et asservis sements continus. Modélisation, analyse, synthèse des lois de commande. Ellipses, 2004.
[Ouh-Young 88]	M. Ouh-Young, M. Pique, J. Hughes, N. Srinivasan et F.P. Brooks Jr. Using a manipulator for force display in molecular docking. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, volume 3, pages 1824–1829, 1988.
[Pacoret 09]	C. Pacoret, Bowman R., Gibson G., S. Haliyo, D. Carberry, A. Bergander, S. Régnier et M. Padgett. Touching the microworld with force-feedback optical tweezers. OPTICS EXPRESS, vol. 17, n° 12, pages 10259–10264, 2009.
[Persson 07]	P.B. Persson, M.D. Cooper, L.A.E. Tibell, S. Ainsworth, A. Ynnerman et BH. Jonsson. Designing and evaluating a haptic system for biomolecular education. In IEEE Virtual Reality Conference, pages 171–178, 2007.
[Rakotondrabe 09]	M. Rakotondrabe, C. Clévy et P. Lutz. Complete open loop control of hysteretic, creeped and oscillating piezoelectric cantilever. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2009.
[Redon 05]	S. Redon , N. Galoppo et M. C. Lin . Adaptive dynamics of articulated bodies. ACM Transactions on Graphics, vol. 24, n° 3, pages 936–945, 2005.
[Redon 06]	M. C. Redon S. Lin. An efficient, error-bounded approximation algorithm for simulating quasi-statics of complex linkages. Computer-Aided Design, vol. 38, pages 300–314, 2006.
[Régnier 08]	S. Régnier et N. Chaillet . La microrobotique applications à la micromanipulation. Hermès Science, 2008.
[Rossi 07]	R. Rossi, M. Isorce, S. Morin, J. Flocard, K. Arumugam, S. Crouzy, M. Vivaudou et S. Redon . Adaptive torsion-angle quasi-statics : a gene- ral simulation method with applications to protein structure analysis and design. Bioinformatics, vol. 23, n° 13, pages i408–417, 2007.
[Saito 02]	S. Saito , H. T. Miyazaki et T. Sato . <i>Micro-object pick and place operation un-</i> der SEM based on micro-physics. Journal of Robotics and Mechatronics, vol. 14, n° 3, pages 227–237, 2002.
[Sankaranarayanan 03]	G. Sankaranarayanan, S. Weghorst, M. Sanner, A. Gillet et A. Olson. Role of haptics in teaching structural molecular biology. In Symposium on Haptic

	Interfaces for Virtual Environment and Teleoperator Systems, pages 363–366, 2003.
[Savia 09]	M. Savia et H.N. Koivo. Contact Micromanipulation - Survey of Strategies. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 14, n° 4, pages 504–514, 2009.
[Shirinov 04]	A. Shirinov , J. Kamenik et S. Fatikow . <i>Haptic interface for a nanohandling robot</i> . Assembly Automation, vol. 24, n° 1, pages 78–87, 2004.
[Sitti 98a]	M. Sitti et H. Hashimoto. Macro to nano tele-manipulation through nanoe- lectromechanical systems. In IEEE Industrial Electronics Society, pages 98–103, 1998.
[Sitti 98b]	M. Sitti et H. Hashimoto. <i>Tele-nanorobotics using atomic force microscope</i> . In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, volume 3, pages 1739–1746, 1998.
[Sitti 01]	M. Sitti . Survey of nanomanipulation systems. In IEEE Conference on Nano- technology, pages 75–80, 2001.
[Sitti 03]	M. Sitti et H. Hashimoto . Teleoperated touch feedback from the surfaces at the nanoscale : modeling and experiments. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 8, n° 2, pages 287–298, 2003.
[Sitti 04]	M. Sitti. Atomic force microscope probe based controlled pushing for nanotribo- logical characterization. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, vol. 9, n° 2, pages 343-349, 2004.
[Sourina 08]	O. Sourina , J. Torres et J. Wang . Visual haptic-based biomolecular docking. In International Conference on Cyberworlds, pages 240–247, 2008.
[Stone 01]	John E. Stone, Justin Gullingsrud et Klaus Schulten. A system for inter- active molecular dynamics simulation. In Symposium on Interactive 3D graphics, pages 191–194, 2001.
[Subasi 08]	E. Subasi et C. Basdogan . A new haptic interaction and visualization approach for rigid molecular docking in virtual environments. Presence : Teleoperators and Virtual Environments, vol. 17, n° 1, pages 73–90, 2008.
[Tafazzoli 06]	A. Tafazzoli, C. Pawashe et M. Sitti. Force-controlled microcontact printing using microassembled particle templates. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 263–268, 2006.
[Taylor II 97a]	R.M. Taylor II . Programming force feedback devices in computer graphics systems. In Course notes for "Programming Virtual Worlds", SIGGRAPH, 1997.
[Taylor II 97b]	R.M. Taylor II, J. Chen, S. Okimoto, N. Llopis-Artime, V. L. Chi, F. P. Brooks Jr., M. Falvo, S. Paulson, P. Thiansathaporn, D. Glick, S. Washburn et R. Superfine. <i>Pearls found on the way to the ideal interface</i> for scanned-probe microscopes. In 8th conference on Visualization, pages 467–ff., 1997.
[Vander Poorten 08]	E. Vander Poorten , T. Kanno et Y. Yokokohji . <i>Robust variable-scale bilate-ral control for micro teleoperation</i> . In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 655–662, 2008.
[Venture 06]	G. Venture , D. S. Haliyo , A. Micaelli et S. Régnier . Force-feedback micromanipulation with inconditionnally stable coupling. International Journal of Micromechatronics, special issue on Micro-handling, vol. 3, n° 3, pages 307–327, 2006.

[Vitard 08]	J. Vitard . Manipulation submicronique interactive sous différents environne- ments de microscopie. Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2008.
[Vogl 06]	W. Vogl, B. KL. Ma et M. Sitti. Augmented reality user interface for an atomic force microscope-based nanorobotic system. IEEE Transactions on Nano-technology, vol. 5, n° 4, pages 397–406, 2006.
[Wollacott 07]	A. M. Wollacott et K. M. Merz Jr. Haptic applications for molecular struc- ture manipulation. Journal of Molecular Graphics and Modelling, vol. 25, n° 6, pages 801 – 805, 2007.
[Xie 08a]	H. Xie, J. Vitard, D. S. Haliyo, S. Régnier et M. Boukallel. Calibration of lateral force measurements in atomic force microscopy with a piezoresistive force sensor. Review of Scientific Instrument, vol. 79, page 033708 (6pp), 2008.
[Xie 08b]	H. Xie, J. Vitard, S. Haliyo et S. Régnier. Calibration and nonlinearity com- pensation for force application in AFM based nanomanipulation. In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, pages 4024–4029, 2008.
[Xie 08c]	H. Xie, J. Vitard, S. Haliyo et S. Régnier . Enhanced accuracy of force application for AFM nanomanipulation using nonlinear calibration of the optical lever. IEEE Sensors Journal, vol. 8, n° 8, pages 1478 – 1485, 2008.
[Xie 09]	H. Xie et S. Régnier . Three-dimensional automated micromanipulation using a nanotip gripper with multi-feedback. Journal of Micromechanics and Microengineering, vol. 19, n° 7, page 075009 (9pp), 2009.
[Xie 10a]	H. Xie et S. Régnier . Development of a flexible robotic system for multis- cale applications of micro/nanoscale manipulation and assembly. IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, à paraître, 2010.
[Xie 10b]	H. Xie et S. Régnier . High-efficiency automated nanomanipulation with parallel imaging/manipulation force microscopy. IEEE Transactions on Nanotechnology, 2010.
[Zarrad 07]	W. Zarrad, P. Poignet, R. Cortesao et O. Company. Towards teleopera- ted needle insertion with haptic feedback controller. In IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, pages 1254–1259, 2007.
[Zhang 05]	J. Zhang , G. Li et N. Xi . Modeling and control of active end effector for the AFM based nano robotic manipulators. In IEEE International Conference on Robotics and Automation, pages 163–168, 2005.
[Zhu 00]	WH. Zhu et S.E. Salcudean. Stability guaranteed teleoperation : an adaptive motion/force control approach. IEEE Transactions on Automatic Control, vol. 45, n° 11, pages 1951–1969, 2000.

Liste des publications

Revues internationales avec comité de lecture :

- A. Bolopion, B. Cagneau, S. Redon et S. Régnier Comparing position and force control for interactive molecular simulators with haptic feedback. JMGM : Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2010, à paraître.
- A. Bolopion, B. Cagneau, D. S. Haliyo et S. Régnier Analysis of stability and transparency for nanoscale force feedback in bilateral coupling. JMNM: Journal of Micro-Nano Mechatronics, n° 4, pages 145-158, 2009.

Revues francophones avec comité de lecture :

3. A. Bolopion, B. Cagneau, D. S. Haliyo et S. Régnier Analyse d'un schéma de commande pour des couplages haptiques entre le macro et le nano monde. JESA : Journal Européen des Systèmes Automatisés, numéro spécial de «Commande dans le micromonde», 2010.

Communications avec actes (conférences internationales) :

- A. Bolopion, H. Xie, D.S. Haliyo et S. Régnier Haptic Teleoperation for 3D Microassembly of Spherical Objects. Actes de IROS'10 : IEEE International Conference on Intelligent RObots and Systems. Taipei, Taiwan, 2010.
- A. Bolopion, B. Cagneau, S. Redon et S. Régnier Haptic molecular simulation based on force control. Actes de AIM'10 : IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics. Montréal, Canada, 2010.
- 6. A. Bolopion, B. Cagneau et S. Régnier 2D micro teleoperation with force feedback. Actes de IROS'09 : IEEE International Conference on Intelligent RObots and Systems. Saint Louis, MO, USA, pages 3265-3270, 2009.
- 7. A. Bolopion, B. Cagneau, S. Redon et S. Régnier Haptic feedback for molecular simulation.

Actes de IROS'09 : IEEE International Conference on Intelligent RObots and Systems. Saint Louis, MO, USA, pages 237-241, 2009.

 A. Bolopion, B. Cagneau, D. S. Haliyo et S. Régnier *Tuning the gains of haptic couplings to improve force feedback stability in nanorobotics.* Actes de ICRA'09 : IEEE International Conference on Robotics and Automation. Kobe, Japon, pages 4320-4325, 2009.

Communications avec actes (conférences francophones) :

9. B. Daunay, A. Bolopion et S. Régnier

Plate-forme de téléopération à six degrés de liberté pour des applications de docking moléculaire flexible.

Actes de CIFA'08 : Conférence Internationale Francophone d'Automatique. Bucarest, Roumanie, 2008.