

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação

**Locomoção de Micronadadores Sintéticos Simulados pelo  
Método dos Elementos Finitos**

**Paula Jaíne Alves da Silva**

Dissertação de Mestrado do Programa de Pós-Graduação em Ciências  
de Computação e Matemática Computacional (PPG-CCMC)



SERVIÇO DE PÓS-GRADUAÇÃO DO ICMC-USP

Data de Depósito:

Assinatura: \_\_\_\_\_

**Paula Jaíne Alves da Silva**

## Locomoção de Micronadadores Sintéticos Simulados pelo Método dos Elementos Finitos

Dissertação apresentada ao Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestra em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional. *EXEMPLAR DE DEFESA*

Área de Concentração: Ciências de Computação e Matemática Computacional

Orientador: Prof. Dr. Roberto Federico Ausas

**USP – São Carlos**  
**Fevereiro de 2024**

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Prof. Achille Bassi  
e Seção Técnica de Informática, ICMC/USP,  
com os dados inseridos pelo(a) autor(a)

A5861      Alves da Silva, Paula Jaíne  
              Locomoção de Micronadadores Sintéticos Simulados  
              pelo Método de Elementos Finitos / Paula Jaíne Alves  
              da Silva; orientador Roberto Federico Ausas. -- São  
              Carlos, 2024.  
              118 p.

              Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação  
              em Ciências de Computação e Matemática  
              Computacional) -- Instituto de Ciências Matemáticas  
              e de Computação, Universidade de São Paulo, 2024.

              1. Locomoção de Micronadadores. 2. Aprendizado  
              por Reforço. 3. Método de Elementos Finitos . 4.  
              Computational Fluid Dynamics. I. Federico Ausas,  
              Roberto, orient. II. Título.

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de catalogação da publicação de acordo com a AACR2:  
Gláucia Maria Saia Cristianini - CRB - 8/4938  
Juliana de Souza Moraes - CRB - 8/6176

**Paula Jaíne Alves da Silva**

**Locomotion of Synthetic Microswimmers Simulated by the  
Finite Element Method**

Dissertation submitted to the Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação – ICMC-USP – in accordance with the requirements of the Computer and Mathematical Sciences Graduate Program, for the degree of Master in Science. *EXAMINATION BOARD PRESENTATION COPY*

Concentration Area: Computer Science and Computational Mathematics

Advisor: Prof. Dr. Roberto Federico Ausas

**USP – São Carlos**  
**February 2024**



# AGRADECIMENTOS

---

---

Os agradecimentos principais são direcionados à Deus que na sua infinita bondade permitiu que a finalização deste trabalho fosse possível. Aos meus pais Mariza e Jair por todo apoio e dedicação à mim e aos meus sonhos. Aos meus amigos e amigas, em especial aos que me acompanharam durante a realização deste trabalho. Aos meus professores e funcionários da UFLA e do ICMC- USP, e demais professores do ensino básico por intermediar a construção de conhecimento e pela sua dedicação à educação.

Agradecimentos especiais são direcionados ao grupo de pesquisa em Microfluidica do ICMC-USP, em especial aos professores Roberto Ausas (orientador deste trabalho), Gustavo Buscaglia e Stevens Paz.

À Capes e CNPq pelo apoio financeiro.



# RESUMO

SILVA, P. J. A. **Locomoção de Micronadadores Sintéticos Simulados pelo Método dos Elementos Finitos**. 2024. 118 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2024.

O estudo dos micronadadores sintéticos tem sido um grande impulsionador da pesquisa científica, marcando um avanço significativo na tecnologia. Visando replicar o comportamento dos modelos biológicos, uma variedade de modelos artificiais está sendo desenvolvida, demandando esforços consideráveis no desenvolvimento de técnicas de fabricação, design e estratégias de propulsão eficientes. A capacidade de se locomoverem em ambientes biológicos com propriedades diversas desperta interesse devido às suas amplas aplicações biomédicas, como entrega de drogas e microcirurgias. Neste estudo, realizamos o acoplamento do problema da interação fluido-nadador, descrito pela equação de Stokes, e as equações de movimento para sólidos rígidos, à técnicas de aprendizagem por reforço. Realizamos um estudo exploratório do método aplicado a alguns problemas de interesse, visando compreender o potencial dessa abordagem no controle dos micronadadores.

**Palavras-chave:** Micronadadores, Aprendizado por Reforço, CFD, MEF..



# ABSTRACT

SILVA, P. J. A. **Locomotion of Synthetic Microswimmers Simulated by the Finite Element Method**. 2024. 118 p. Dissertação (Mestrado em Ciências – Ciências de Computação e Matemática Computacional) – Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos – SP, 2024.

The study of synthetic microswimmers has been a major driver of scientific research, marking a significant advancement in technology. Aimed at replicating the behavior of biological models, a variety of artificial models is being developed, demanding considerable efforts in the development of manufacturing techniques, design, and efficient propulsion strategies. The ability to move in biological environments with diverse properties is of interest due to their wide biomedical applications, such as drug delivery and microsurgeries. In this study, we coupled the fluid-swimmer interaction problem, described by the Stokes equation, and the equations of motion for rigid solids, with reinforcement learning techniques. We conducted an exploratory study of the method applied to some problems of interest, aiming to understand the potential of this approach in controlling microswimmers.

**Keywords:** Microswimmers, Reinforced Learning, FEM.



# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

---

---

Figura 1 – Micronadadores biológicos e artificiais: a) Espermatozoide ( $10\mu\text{m}$ ); b) Bactérias em Biofilm ( $0,2$ a $1,5\mu\text{m}$ ); c) Micro nadador em corrente sanguínea; d) Nadador de forma esférica em ambiente biológico. . . . .	21
Figura 2 – Purcell’s swimming scallop. O nadador realiza o movimento de abertura e fechamento, transitando entre os estados A e B, realizando um movimento reversível no tempo, o que não gera seu deslocamento no fluxo viscoso. . . . .	22
Figura 3 – Mapa de deslocamento $\varphi_q$ . . . . .	28
Figura 4 – Deformações experimentadas pelos triângulos da partição de elementos finitos próximo ao corpo de um nadador, no início ( $t_0$ ), metade ( $t_m$ ) e ao final ( $t_f$ ) de um movimento. . . . .	35
Figura 5 – Exemplos de triangulação . . . . .	37
Figura 6 – Malha computacional antes e depois do remalhamento, respectivamente, próximo ao corpo de um nadador. . . . .	38
Figura 7 – Sistema configuracional para um nadador de três esferas. . . . .	51
Figura 8 – Modelo de micronadador de três esferas. . . . .	52
Figura 9 – Geometria do domínio de solução . . . . .	53
Figura 10 – Malha, Linhas de corrente e contorno encontrados em uma simulação de caso axissimétrico, para um nadador de 3 esferas. . . . .	53
Figura 11 – Magnitude da velocidade para um fluido newtoniano de viscosidade $\mu = 1$ , para os quatro estados possíveis de um nadador de três esferas. . . . .	54
Figura 12 – Pressão para um fluido newtoniano. . . . .	55
Figura 13 – Deslocamento do nadador após realizar um ciclo ótimo, $\Delta$ em função da amplitude de braçada, $\epsilon$ . A inserção mostra uma ampliação da região do gráfico para valores abaixo de $\epsilon/l_{\text{max}} = 0.4$ . . . . .	56
Figura 14 – Caption . . . . .	57
Figura 15 – Viscosidade, Magnitude de velocidade e pressão para um fluido não newtoniano em torno do nadador de 3 esferas, no início de uma transição. . . . .	57
Figura 16 – Viscosidade, Magnitude de velocidade e pressão para um fluido não newtoniano em torno do nadador de 3 esferas, ao final de uma transição. . . . .	58
Figura 17 – Convergência em malha do deslocamento do corpo de referência $\Delta x$ de um nadador de três esferas, considerando a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha (MeshQuality), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado. . . . .	60

Figura 18 – Convergência em malha do deslocamento do corpo de referência $\Delta x$ de um nadador de três esferas, considerando o remalhamento em todos os passos de tempo (AllTime), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.	61
Figura 19 – Ajuste dos dados do deslocamento $\Delta x$ do corpo de referência, de uma nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado, utilizando duas abordagens de remalhamento. As retas obtidas tem inclinação $\alpha$ .	61
Figura 20 – Convergência em malha do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (MeshQuality) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.	62
Figura 21 – Convergência em malha do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (AllTime) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.	62
Figura 22 – Ajuste dos dados da velocidade de translação do corpo de referência, de um nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado. As retas obtidas tem inclinação $\alpha$ .	63
Figura 23 – Convergência em malha do erro relativo para o deslocamento total de um ciclo ótimo de nado. As retas obtidas pelo Método dos Mínimos Quadrados tem inclinação $\alpha$ .	64
Figura 24 – Convergência em passo de tempo do deslocamento do corpo de referência $\Delta x$ de um nadador de três esferas, considerando a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha (MeshQuality), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.	65
Figura 25 – Convergência em passo de tempo do deslocamento do corpo de referência $\Delta x$ de um nadador de três esferas, considerando o remalhamento em todos os passos de tempo (AllTime), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.	65
Figura 26 – Ajuste dos dados do deslocamento $\Delta x$ do corpo de referência, de uma nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado, utilizando duas abordagens de remalhamento. As retas obtidas tem inclinação $\alpha$ .	66
Figura 27 – Convergência em passo de tempo do erro relativo para o deslocamento total de um ciclo ótimo de nado. As retas obtidas pelo Método dos Mínimos Quadrados tem inclinação $\alpha$ .	66
Figura 28 – Convergência em passo de tempo do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (MeshQuality) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.	67

Figura 29 – Convergência em passo de tempo do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (AllTime) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado. . . . .	67
Figura 30 – Ajuste dos dados da velocidade de translação do corpo de referência, de um nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado. As retas obtidas tem inclinação $\alpha$ . . . . .	68
Figura 31 – Modelo de micronadador de quatro corpos mostrando as coordenadas posicionais e configuracionais. O corpo de referência possui um tamanho 0.5 (eixo maior) e 0.05 (eixo menor) maior em relação aos demais corpos. . . . .	68
Figura 32 – . . . . .	69
Figura 33 – Velocidade próximo ao corpo de um nadador de quatro corpos no início, meio e final de um movimento (transição $s_7a_2$ ), para três valores de $\xi$ . . . . .	70
Figura 34 – Malha computacional não uniforme com 23244 elementos triangulares e 11841 pontos. O refinamento é realizado próximo ao corpo do nadador onde espera-se um maior gradiente das variáveis dependentes. As variáveis que controlam o espaçamento, ... . . . . .	72
Figura 35 – Gráfico de $\Delta x_c$ em função do ângulo $\xi$ para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos. . . . .	72
Figura 36 – Gráfico de $\Delta y_c$ em função dos ângulos para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos. . . . .	73
Figura 37 – . . . . .	74
Figura 38 – . . . . .	74
Figura 39 – Gráfico de $\Delta \theta$ em função do ângulo $\xi$ , para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos. . . . .	75
Figura 40 – Dissipação viscosa em função do ângulo $\xi$ , para as 24 transições possíveis para um nadador <i>Snake</i> de 4 corpos. . . . .	76
Figura 41 – Erro relativo para $\Delta \theta$ . . . . .	77
Figura 42 – Erro relativo para $\Delta x_c$ . . . . .	78
Figura 43 – Erro relativo para $\Delta y_c$ . . . . .	78
Figura 44 – Erro relativo em passo de tempo para um ciclo de ações. O ciclo é composto pela realização das ações: $s_1a_0$ , $s_5a_2$ , $s_4a_0$ e $s_0a_2$ , nesta ordem. . . . .	80
Figura 45 – Erro relativo em passo de tempo para um ciclo de ações. O ciclo é composto pela realização das ações: $s_0a_2$ , $s_1a_1$ , $s_3a_2$ e $s_2a_1$ , nesta ordem. . . . .	81
Figura 46 – Recompensa para o nadador de Najafi-Golestanian de 3, 5 e 7 corpos. Posição horizontal do corpo da esquerda ao longo das iterações. . . . .	90
Figura 47 – Detalhe da figura 46. . . . .	91
Figura 48 – Recompensa para o nadador de Najafi-Golestanian de 3, 5 e 7 corpos. Posição horizontal do centro de massas ao longo das iterações. . . . .	92

Figura 49 – Detalhe da figura 48. . . . .	93
Figura 50 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 3 corpos. . .	93
Figura 51 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 5 corpos. . .	94
Figura 52 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 7 corpos. . .	94
Figura 53 – Rotação do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[0,2,0,2]$ . . . . .	96
Figura 54 – Rotação do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[0,2,0,2]$ . . . . .	97
Figura 55 – Rotação do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[1,3,1,3]$ . . . . .	98
Figura 56 – Rotação do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[1,3,1,3]$ . . . . .	99
Figura 57 – Rotação do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[1,3,5,7,1,3,5,7]$ . . . . .	100
Figura 58 – Rotação do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[1,3,5,7,1,3,5,7]$ . . . . .	101
Figura 59 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[0,2,0,2]$ . A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 0.2. . . . .	102
Figura 60 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações $[1,3,1,3]$ . A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 1. . . . .	103

Figura 61 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,5,7]. A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 4. . . . .	104
Figura 62 – Trajetórias seguidas pelo nadador de 6 corpos em diferentes realizações do experimento de aprendizado de uma tarefa composta, a qual consiste de um movimento de rotação até um ângulo alvo e posterior translação. . . . .	106
Figura 63 – Detalhe da figura 62. . . . .	107
Figura 64 – Evolução do ângulo como função das iterações para diferentes condições iniciais. . . . .	108
Figura 65 – Detalhe da 64. . . . .	109
Figura 66 – Recompensa ao longo das iterações variando o parâmetro $\gamma$ . . . . .	110
Figura 67 – Recompensa ao longo das iterações variando o parâmetro $\epsilon$ . . . . .	110
Figura 68 – Recompensa ao longo das iterações para $\epsilon = 0.1$ considerando diferentes realizações do experimento. . . . .	111



# LISTA DE ALGORITMOS

---

---

Algoritmo 1 – Algoritmo Q-learning - Atualização da Matriz. . . . .	85
Algoritmo 2 – Algoritmo Q-learning $\epsilon$ -greedy . . . . .	86



# SUMÁRIO

---

---

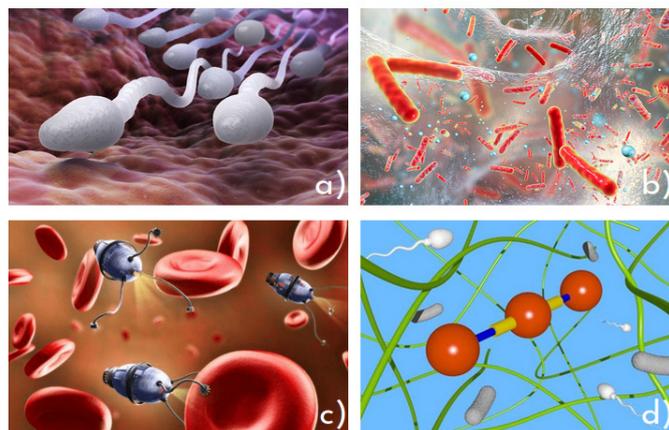
1	INTRODUÇÃO . . . . .	21
1.1	Objetivos . . . . .	24
1.1.1	<i>Objetivos Específicos</i> . . . . .	25
1.2	Organização deste trabalho . . . . .	25
2	EQUAÇÕES DE GOVERNO . . . . .	27
2.1	Cinemática do nadador . . . . .	28
2.2	Interação Fluido-Nadador . . . . .	29
2.3	Formulação Variacional do problema . . . . .	30
2.3.1	<i>Formulação Variacional Continua</i> . . . . .	31
2.3.2	<i>Formulação variacional semidiscreta</i> . . . . .	31
2.3.3	<i>Formulação axisimétrica</i> . . . . .	33
2.4	Tratamento das malhas de elementos finitos . . . . .	34
2.4.1	<i>Movimentação da Malha Computacional</i> . . . . .	35
2.4.2	<i>Estratégias de Remalhamento</i> . . . . .	37
2.5	Discretização Temporal . . . . .	39
2.6	Estimativas a priori do erro . . . . .	41
3	IMPLEMENTAÇÃO E EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA . . . . .	43
3.1	Implementação em Fenics . . . . .	43
3.1.1	<i>Um exemplo de implementação em FEniCS</i> . . . . .	44
3.1.2	<i>Implementação do problema de Interação Fluido-Nadador em FEniCS</i> . . . . .	48
3.2	Modelagem Geométrica e Experimentação Numérica . . . . .	50
3.2.1	<i>Nadador de Najafi-Golestanian</i> . . . . .	51
3.2.2	<i>Estudos da precisão numérica</i> . . . . .	58
3.2.3	<i>Nadador do tipo Snake</i> . . . . .	68
3.2.4	<i>Análises de convergência</i> . . . . .	76
4	APRENDIZADO POR REFORÇO PARA LOCOMOÇÃO DE MICRONADADORES . . . . .	83
4.1	O algoritmo de Q-learning . . . . .	84
4.1.1	<i>AR determinístico - Algoritmo Off-policy</i> . . . . .	85
4.1.2	<i>AR estocástico - Algoritmo on-policy</i> . . . . .	85
4.2	Resultados para o nadador do tipo Najafi-Golestanian . . . . .	86

4.3	Resultados para o nadador do tipo Snake . . . . .	91
4.3.1	<i>Movimento de rotação - Aplicação do Algoritmo (off-policy)</i> . . . . .	92
4.3.2	<i>Movimentos compostos - Aplicação do algoritmo on-policy</i> . . . . .	95
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS . . . . .	113
	REFERÊNCIAS . . . . .	115

## INTRODUÇÃO

Micronadadores são organismos biológicos ou artificiais de tamanho micro ou nano métrico com a capacidade de se locomover em um ambiente fluido. Essa habilidade de natação é adquirida por meio de forças externas ou internas resultantes da interação do micronadador com o fluido no qual está imerso. Alguns exemplos de micronadadores encontrados na natureza incluem bactérias em biofilmes (STEWART, 2002) e espermatozoides (KAPRALOS *et al.*, 2018). Esses micro-organismos movem-se por meio de apêndices helicoidais finos, conhecidos como flagelos, ou propagando ondas de deformação ao longo da flagela através de ações de motores moleculares.

Figura 1 – Micronadadores biológicos e artificiais: a) Espermatozoide ( $10\mu\text{m}$ ); b) Bactérias em Biofilme ( $0,2$  a  $1,5\mu\text{m}$ ); c) Micro nadador em corrente sanguínea; d) Nadador de forma esférica em ambiente biológico.



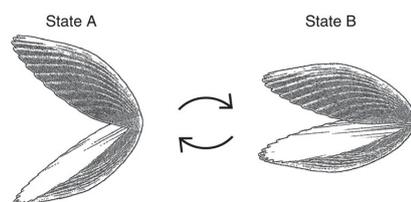
Em meio ao cenário científico, o interesse no estudo de micronadadores sintéticos emerge como uma área promissora, impulsionando pesquisas e marcando um avanço significativo da tecnologia. Com o objetivo de reproduzir o comportamento de micronadadores biológicos, uma variedade de micronadadores artificiais está sendo desenvolvida e projetada para desempenhar

uma ampla gama de tarefas, desde as mais simples até as mais complexas. Esse processo demanda esforços significativos no desenvolvimento de técnicas de fabricação, designer e estratégias de propulsão eficientes.

Neste contexto, existe um grande interesse na capacidade efetiva de locomoção de micronadadores em ambientes biológicos com propriedades muito distintas e fatores ambientais imprevisíveis já que, estratégias de propulsão ótimas em um meio podem se tornar ineficazes em um meio diferente, como é o exemplo do sangue-cérebro, barreiras da mucosa gástrica e microambientes tumorais (NASSIF *et al.*, 2002) (MIRBAGHERI; FU, 2016). Essa habilidade oferece amplas aplicações médicas, como microcirurgia (NELSON; KALIAKATSOS; ABBOTT, 2010), entrega direcionada de medicamentos (GAO; WANG, 2014), diagnósticos localizados, precisos e eficientes, e desintoxicação para neutralizar e eliminar toxinas (LI *et al.*, 2017), etc. Há também a possibilidade de aplicações como perfuração de matéria mole (SOLOVEV *et al.*, 2012); transporte de carga e células (SANCHEZ *et al.*, 2011); biossensores; processos de descontaminação (VILELA *et al.*, 2016); limpeza de águas poluídas (SOLER *et al.*, 2013).

Entretanto, estudar a locomoção de micronadadores não é uma tarefa simples, e têm se mostrado desafiadora. A física que rege o movimento na escala micrométrica difere da física da natação na escala macroscópica. Em microescala há um domínio das forças viscosas sobre as inerciais, caracterizado por escoamentos em baixo número de Reynolds ( $Re \ll 1$ ) constituídos por fluxos instantâneos e reversíveis no tempo. Logo, para permitir um deslocamento líquido no fluxo viscoso, o movimento do nadador não deve ser simétrico no tempo como afirma o chamado teorema do scallop de E. M. Purcell (Figura 2), o que impõe restrições hidrodinâmicas aos padrões e formas de braçada dos micronadadores. Assim, estratégias comuns de propulsão macroscópica, empregadas por organismos maiores que operam em alto número de Reynolds, como peixes, pássaros ou insetos, são ineficazes em pequena escala e qualquer tentativa de mover dando impulso ao fluido, como é feito no remo, será frustrada pelo grande amortecimento viscoso.

Figura 2 – Purcell's swimming scallop. O nadador realiza o movimento de abertura e fechamento, transitando entre os estados A e B, realizando um movimento reversível no tempo, o que não gera seu deslocamento no fluxo viscoso.



Fonte: Purcell (1977).

Esforços extensivos nas últimas décadas têm procurado elucidar os princípios físicos que fundamentam a motilidade celular (YEOMANS; PUSHKIN; SHUM, 2014) (SAINTILLAN, 2018) (LAUGA, 2016), o que melhorou a compreensão geral da locomoção em baixo  $Re$ . As

técnicas mais abrangentes na literatura, para o tratamento destes problemas são aquelas baseadas no método de elementos de contorno, que lidam, principalmente, com nadadores esféricos, para os quais técnicas analíticas ou semi-analíticas, podem ser aplicadas (Lighthill, 1952; Blake, 1971; Pedley, 2016), utilizando por exemplo aproximações assintóticas (não resolvem as Equações de Navier-Stokes). A principal vantagem desse método é que ele exige pouca necessidade de remalhamento, isto é, de refazer a malha computacional ao longo da evolução do nadador, porém se limita à linearidade do problema, não permitindo homogeneidades, e conseqüentemente impondo restrições a geometria do nadador. Em contrapartida em (AUSAS; GEBHARDT; BUSCAGLIA, 2022) os autores propõe um método de elementos finitos para simular modelos sólidos unidimensionais que se movem e sofrem grandes deformações enquanto estão imersos em fluidos newtonianos generalizados. O método é demonstrado em vários exemplos desafiadores como o enrolamento de uma haste em formato circular e posterior liberação repentina, a interação de uma haste macia com um jato de fluido e a auto locomoção ativa de uma haste semelhante a um espermatozoide, sendo orientado para aplicações envolvendo dispositivos microscópicos ou organismos no domínio da biomatéria mole.

Em relação ao desenvolvimento de estratégias eficientes de motilidade microscópica, que permitem treinar nadadores para realizar tarefas de longo prazo, existem muitas abordagens que utilizam-se do Princípio Máximo de Pontryagin (PMP), ou equivalentemente as equações de Euler-Lagrange. Isso é evidenciado no trabalho de Oren Wiezel et. al. (WIEZEL *et al.*, 2023) no qual os pesquisadores investigam políticas de nado para maximizar o deslocamento por ciclo em dois modelos de nadadores cinemáticos de três elos, utilizando o PMP. A pesquisa conclui que, em alguns cenários, o método PMP falha em identificar essa política e ressalta a necessidade de impor limites às variáveis de forma, como os ângulos de abertura, para alcançar a solução ótima nesses casos. No entanto, recentemente, o aprendizado de máquina têm se mostrado oportuno na exploração da locomoção de micronadadores em ambientes fluidos complexos, ao possibilitar o projeto de sistemas inteligentes artificiais que podem realizar tarefas de alta complexidade sem serem explicitamente programados. No trabalho de Benedikt Hartla et. al. (HARTL *et al.*, 2021), como exemplo, é investigado como a tomada de decisão baseada em quimiotaxia (mover-se em direção e permanecer em altas concentrações de nutrientes) pode ser aprendida e realizada em um ambiente viscoso, utilizando redes neurais artificiais que controlam o movimento do micronadador. O estudo demonstra que estratégias complexas de locomoção e navegação em ambientes químicos podem ser alcançadas, o que contribui para o desenvolvimento de mecanismos intracelulares de detecção bioquímica de células individuais ou para o sistema nervoso simples de organismos multicelulares pequenos, como o *Caenorhabditis elegans*. Outro exemplo pode ser visto no trabalho de Zonghao Zou et. al. (ZOU *et al.*, 2022) em que os autores combinam Aprendizado por Reforço (AR) com uma rede neural artificial para permitir que um sistema reconfigurável simples realize manobras complexas em um ambiente de baixo número de Reynolds.

Neste trabalho, a configuração de um corpo microscópico, dado pelas equações de

movimento para sólidos rígidos, é transformada em um conjunto de incógnitas para o problema que chamamos de interação fluido-nadador, correspondente, acoplado às equações que descrevem a dinâmica do fluido ambiente expressas através das Equações de Navier Stokes reduzidas ao caso inercial conhecido como problema de Stokes. O problema matemático resultante será resolvido utilizando o Método de Elementos Finitos MEF com FEniCS. A principal vantagem do MEF é que diferente do método de elementos de contorno, ele permite que reologias não newtonianas sejam abordadas naturalmente (problemas não lineares) e também problemas com número de Reynolds não tão baixo. Apesar de requer estratégias eficientes de remalhamento, o método proposto se mostra uma opção interessante para aplicações como o aprendizado de micronadadores, permitindo conhecer precisamente os campos de velocidade e pressão do fluido ambiente juntamente com as forças de interação, o que é crucial para alimentar algoritmos de aprendizado. Por fim, apresentamos uma abordagem de aprendizagem por reforço que permite que o nadador desenvolva sua própria estratégia de propulsão com base em suas iterações com o meio circundante, a qual pode ser modificada em resposta à diferentes meios, sem a necessidade de um conhecimento prévio sobre a locomoção em baixo Reynolds. Realizamos um estudo exploratório do método em alguns problemas de interesse para entender o potencial da metodologia no controle dos micronadadores. Em (PAZ *et al.*, 2023) esse potencial é evidenciado, mostrando que o método aqui proposto pode ser aplicado para problemas mais complexos como o transporte difusivo de espécies dissolvidas para (ou da) superfície do nadador, conhecido como quimiorrecepção. Os resultados da aprendizagem obtidos no estudo mostram que, torna-se aparente a maior dificuldade de aprender a quimiotaxia em vez de aprender a locomoção.

## 1.1 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é simular a locomoção de micronadadores em baixo número de Reynolds ( $Re \ll 1$ ) através da resolução do problema de interação fluido-estrutura pelo método de elementos finitos acoplado a técnicas de aprendizado por reforço, utilizando um algoritmo de *Q-learning*, afim de identificar possíveis estratégias de locomoção de micronadadores, e melhor e entender como os erros de discretização do método numérico podem afetar ou interferir no processo de aprendizado. Para isto, serão estudados dois modelos de micronadador:

- **Nadador de Najafi-Golestanian:** constituído por corpos esféricos, este nadador está restrito a se deslocar numa direção. Neste caso, os corpos estão unidos por *links* ou hastes, que podem se comprimir ou expandir (ver Figura 8).
- **Nadador tipo Snake:** constituído por corpos elípticos unidos por *links* articulados, este nadador pode rotacionar e se deslocar no espaço bidimensional (ver Figura 31).

Em ambos os casos, será considerado que a de massa e tamanho das haste é desprezível.

### 1.1.1 *Objetivos Específicos*

Os objetivos mais detalhados desta dissertação são:

- Implementar numa plataforma de elementos finitos de código aberto a resolução do problema de interação fluido-nadador, que envolve as equações de conservação de momento em baixo  $Re$  (problema de Stokes) e equações que governam a cinemática do sistemas de sólidos rígidos articulado;
- Realizar um estudo detalhado dos erros de discretização espacial e temporal, incluindo uma análise sobre o efeito do remalhamento no erro de discretização espacial.
- Fazer um estudo exploratório de dos métodos de aprendizado por reforço via algoritmos de Q-learning para encontrar políticas de nado dos micronadadores.

## 1.2 **Organização deste trabalho**

No âmbito do estudo da locomoção de micronadadores sintéticos, empregamos duas ferramentas essenciais. A primeira delas é a simulação computacional também conhecida como etapa CFD (Dinâmica de Fluidos Computacional). Essa ferramenta proporciona a obtenção de dados significativos sobre a interação entre o micronadador e o ambiente fluido, possibilitando uma compreensão aprofundada do seu deslocamento, bem como de outros fatores como dissipação viscosa e velocidade de translação. Além disso, a etapa CFD permite a identificação dos campos de velocidade e pressão do fluido. Todos esses dados são relevantes na construção de estratégias de locomoção. Porém, neste trabalho, ficaremos restritos apenas as informações sobre o deslocamento. A segunda ferramenta, que denominamos de etapa AR (Aprendizado por Reforço), utiliza os dados obtidos na etapa CFD para construir políticas de aprendizado. Essas políticas capacitam o micronadador a desenvolver e aprender técnicas de nado por meio de aprendizado por reforço. Com base nisso, a estrutura deste trabalho está dividida da seguinte forma:

No capítulo 2 abordaremos os aspectos físicos e matemáticos do problema. Primeiramente apresentamos as equações que modelam o escoamento do fluido em regime com baixo  $Re$  e a cinemática do nadador. Com isso formulamos o problema de interação fluido-nadador, estabelecendo as relações entre a física do nadador e do fluido o qual está imerso, isto é, as equações que modelam este fenômeno. Em seguida, introduzimos a metodologia de elementos finitos, apresentando a formulação empregada em sua forma contínua e semidiscreta. Além disso, apresentamos as ferramentas empregadas no tratamento da malha computacional: movimentação da malha baseada na resolução de um problema de elasticidade linear e remalhamento total baseado na qualidade da malha. Por fim, detalhamos o método de discretização temporal adotado, e algumas estimativas de a priori dos erros de discretização provenientes do processo de solução com o método escolhido.

No capítulo 3 discutimos alguns aspectos da implementação do método utilizando a plataforma FEniCS. Inicialmente, para fins didáticos, mostramos como é feita a implementação de um problema mais simples de condução de calor. Em seguida, detalhamos os elementos essenciais da implementação do problema de interação fluido-nadador. Os aspectos geométricos dos modelos de micronadores considerados neste estudo também são detalhados neste capítulo. Exploramos estes modelos por meio de experimentos numéricos e por fim, realizamos análises dos erros de discretização e convergência das soluções encontradas. Com isso, concluímos a etapa de CFD.

No capítulo 4 abordamos a etapa de aprendizado por reforço, mostrando o potencial desta metodologia na locomoção de micronadores. Apresentamos o algoritmo Q-Learning e discutimos sua utilização em casos mais simples, em que o ambiente fluido é homogêneo, e também como ele pode ser empregado em tarefas mais complexas ou em casos em que o ambiente fluido não é homogêneo. Finalizamos apresentando os resultados obtidos ao empregar essa metodologia aos dois modelos de micronador estudados.

Encerramos este trabalho com algumas considerações finais sobre o estudo realizado e abordamos algumas possibilidades de trabalhos futuros que podem ser desenvolvidos a partir do apresentado.

## EQUAÇÕES DE GOVERNO

A microfluídica é a ciência de sistemas que processam ou manipulam pequenas quantidades de fluidos, usando canais com dimensões de dezenas a centenas de micrômetros, onde o comportamento do fluido difere da teoria de fluxo convencional principalmente devido à essa pequena escala do sistema (NGUYEN; WERELEY; SHAEGH, 2019). Nosso interesse nessa ciência é o estudo do movimento de pequenos corpos nadadores em um fluido incompressível em baixo número de Reynolds, o que vamos denotar por Interação Fluido-Nadador .

As equações de governo que modelam a dinâmica de um fluido são dadas pelas equações de Navier Stokes

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (2.1)$$

em que  $\mathbf{u}$  é o campo de velocidades,  $\rho$  é a densidade do fluido,  $D/Dt := \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$  é o operador de derivada material (SPAGNOLIE, 2015) e  $\boldsymbol{\sigma}$  é o tensor de tensões de Cauchy, que para fluidos newtonianos é dado por (AGUILLON *et al.*, 2013) (HU.; PATANKAR; ZHU, 2000)

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I}_d + 2\mu\nabla^s\mathbf{u} \quad (2.2)$$

onde  $p$  é a pressão,  $\mu$  é a viscosidade do fluido e  $\mathbf{I}_d$  matriz identidade de dimensão  $d \times d$ . O operador  $\nabla^s$  denota o gradiente simétrico de  $\mathbf{u}$  o qual é dado por

$$\nabla^s\mathbf{u} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla^T\mathbf{u}) \quad (2.3)$$

que é denominado tensor de deformações ou taxa de deformação. No caso dos chamados fluidos Newtonianos generalizados, o coeficiente de viscosidade  $\mu$  pode ser uma função da dissipação viscosa, i.e.,

$$\mu = \mu(\dot{\gamma}), \quad \dot{\gamma} = \sqrt{\nabla^s\mathbf{u} : \nabla^s\mathbf{u}} \quad (2.4)$$

tal como acontece no modelo de *Carreau-Yasuda* (ELFRING; LAUGA, 2015), o qual permite simular efeitos de *shear-thinning* e *shear-thickening*.

Como estamos interessados em problemas na microescala, portanto, em regime com baixo  $Re$ , onde há um domínio das forças viscosas sobre as inerciais, podemos simplesmente desconsiderar o termo inercial  $\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt}$  em (2.1) obtendo, assim o problema de Stokes incompressível, que é dado por: Encontrar  $\mathbf{u}$  e  $p$  no domínio  $\Omega_f \subset \mathbb{R}^2$  tais que

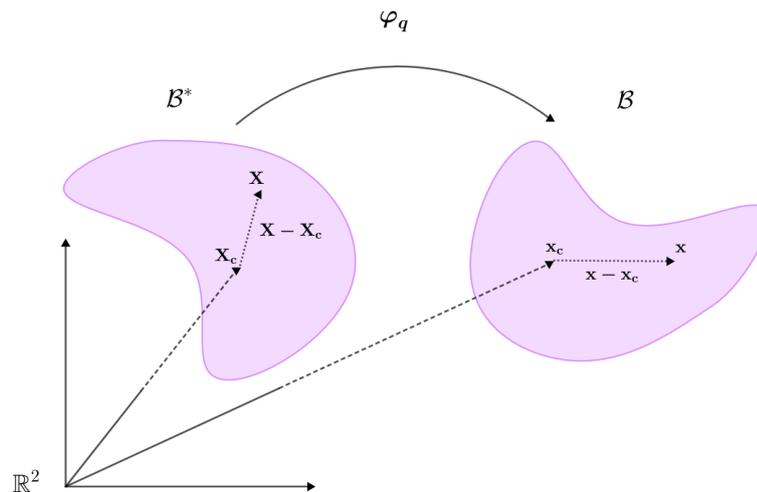
$$\begin{aligned} -\nabla \cdot \sigma(\mathbf{u}, p) &= \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \quad (2.5)$$

suplementado com condições de borda apropriadas, as quais serão detalhadas mais tarde.

## 2.1 Cinemática do nadador

Antes de introduzir o problema de interação-fluido nadador, vamos apresentar alguns conceitos necessários para descrever o movimento de sólidos rígidos, i.e., a cinemática. Estes conceitos são relevantes para a definição do problema e da formulação proposta neste trabalho. Neste ponto, por simplicidade vamos considerar apenas um corpo rígido. A cinemática de sistemas formados por vários corpos, unidos por articulações será considerado posteriormente quando introduzirmos os diferentes modelos de nadadores que serão estudados neste trabalho. Para tal fim, vamos denotar por  $\Omega_f = \Omega \setminus \mathcal{B}(\mathbf{q})$  o domínio que representa a área ou o volume preenchido pelo fluido incompressível, onde  $\Omega$  é o domínio total do sistema fluido-nadador e  $\mathcal{B}$  o domínio que representa o corpo do nadador. Note-se que a o domínio do nadador  $\mathcal{B}(\mathbf{q})$ , depende das suas coordenadas generalizadas  $\mathbf{q}$ .

Figura 3 – Mapa de deslocamento  $\varphi_{\mathbf{q}}$



Fonte: Elaborada pelo autor.

Dado um ponto  $\mathbf{X}_c$ , centro de rotação do corpo, em cada tempo  $t$ , existe um ponto  $\mathbf{x}_c(t)$  e uma matriz de rotação  $Q(t)$  tal que a posição  $\mathbf{x}(X, t) \in \mathcal{B}$  de um ponto material  $X \in \mathcal{B}^*$  é dada

por

$$\mathbf{x}(\mathbf{X}, t) = \varphi_{\mathbf{q}(t)}(\mathbf{X}) = \mathbf{x}_c(t) + \mathbf{Q}(t)(\mathbf{X} - \mathbf{X}_c) \quad (2.6)$$

em que  $\varphi_{\mathbf{q}}(\cdot)$  representa a transformação de deslocamento do corpo referencial  $\mathcal{B}^*$  dependendo das coordenadas generalizadas  $\mathbf{q}(t)$ , com  $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d \times \text{SO}(d)$  onde

$$\text{SO}(d) = \{\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{d \times d} : \mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T, \det[\mathbf{Q}] = 1\} \quad (2.7)$$

a qual no caso 2D é dada por

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \cos \theta(t) & -\sin \theta(t) \\ \sin \theta(t) & \cos \theta(t) \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Na prática, o que iremos precisar para resolver o problema, é a velocidade induzida no ponto  $\mathbf{x}$  do corpo, denotada por  $\mathbf{u}_B$ , que neste caso é dada por

$$\mathbf{u}_B(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_c(t) + \omega(t) \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_c(t)) \quad (2.9)$$

sendo  $\mathbf{v}_c(t) = \dot{\mathbf{x}}_c(t)$ ,  $\omega(t)$  a velocidade angular e

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

é a matriz *skew* simétrica. Finalmente, o vetor de velocidades generalizado é dado por  $\mathbf{s} = (\mathbf{v}_c, \omega)^T \in \mathbb{R}^{n_p}$  com  $n_p = 3$ , correspondendo a dois graus de liberdade de translação e um de rotação. Notar que no caso geral tridimensional, a complexidade do problema aumenta significativamente, pois para descrever a cinemática, teremos que  $n_p = d + \frac{d(d-1)}{2} = 6$ , correspondendo a três graus de liberdade de translação e outros três de rotação.

## 2.2 Interação Fluido-Nadador

A interação fluido-nadador se dá através das condições de não penetração e não deslizamento,

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_B(\mathbf{x}, t), \quad \text{para todo } \mathbf{x} \in \partial B(t) \quad (2.10)$$

conjuntamente com o balanço global de forças (2.11) e torques (2.12). Então, as lei do movimento de Newton, escritas aqui no regime de inercia desprezível, para todo  $t$ , são dadas por (AGUILLON *et al.*, 2013)

$$\int_{\partial B(t)} \sigma(\mathbf{u}) \mathbf{n} \, dS = \mathbf{f}^{\text{gen}} \quad (2.11)$$

$$\int_{\partial B} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_c)) \times \sigma(\mathbf{u}) \mathbf{n} \, dS = \mathbf{t}^{\text{gen}} \quad (2.12)$$

em que  $\mathbf{x}$  denota posições na superfície  $S$ ,  $\mathbf{n}$  é o vetor normal unitário exterior ao fluido que aponta para o interior de  $B$  e  $(\mathbf{f}^{\text{gen}}, \mathbf{t}^{\text{gen}})$  são forças externas generalizadas, que eventualmente

serão tomadas iguais a zero nos experimentos numéricos a serem apresentados a posteriori. A configuração do nadador é definida pelas coordenadas do corpo de referência  $\mathbf{x}_c$  e pela sua orientação angular  $\theta$ , que podem ser agrupadas num vetor de coordenadas generalizadas posicionais  $\mathbf{p}(t) = (\mathbf{x}_c(t), \theta(t))$ . A posição dos corpos restantes a qualquer tempo  $t$  pode ser obtida a partir de  $\mathbf{p}(t)$  e da configuração dos links que agrupamos num vetor  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_n)$ , sendo  $n$  o número de corpos que constituem o nadador. Logo, o estado completo é definido pelo vetor  $\mathbf{q} = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\xi})$ . Assim, o problema matemático a ser resolvido é :

Dado  $\mathbf{p}(0)$  e  $\boldsymbol{\xi}(t)$ ,  $t \geq 0$ , determinar  $\mathbf{p}(t) = (\mathbf{x}_c(t), \theta(t))$ ,  $\mathbf{s}(t) = (\mathbf{v}_c(t), \omega(t), \dot{\boldsymbol{\xi}}(t))$ ,  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  e  $\mathbf{p}(\mathbf{x}, t)$  para  $0 < t \leq T$  e  $\mathbf{x} \in \Omega_f(\mathbf{q}(t))$  satisfazendo

$$\frac{d\mathbf{x}_c}{dt} = \mathbf{v}_c, \quad (2.13)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega, \quad (2.14)$$

$$\mathbf{u} - \mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{s} = \mathbf{0}, \quad \text{em } \partial B(\mathbf{q}), \quad (2.15)$$

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad \text{em } \Omega_f(\mathbf{q}), \quad (2.16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{em } \Omega_f(\mathbf{q}), \quad (2.17)$$

$$\int_{\partial B(\mathbf{q})} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{f}^{\text{gen}}, \quad (2.18)$$

$$\int_{\partial B(\mathbf{q})} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{t}^{\text{gen}}. \quad (2.19)$$

em que  $\mathbf{v}_c(t) = \dot{\mathbf{x}}_c(t)$  corresponde à velocidade de translação e  $\omega(t)$  à velocidade angular no referencial espacial, cuja evolução temporal é ditada pelas equações de movimento (2.13) e (2.14). Note que sendo  $\boldsymbol{\xi}(t)$  dado, a velocidade das coordenadas configuracionais  $\dot{\boldsymbol{\xi}}(t)$  é automaticamente conhecida.

As equações (2.13) e (2.14) são as equações de movimento. A equação (2.15) é a condição de compatibilidade entre a velocidade do fluido e do nadador, e as equações (2.18) e (2.19), representam o balanço global de forças e torque, respectivamente. Em (2.15),  $\mathbf{H}$  é um operador que permite definir a velocidade na superfície molhada do corpo  $\partial B$ , a partir da velocidade generalizada do nadador  $\mathbf{s}$ , e será definido na seção seguinte. Observe que  $\mathbf{q}$  intervém em (2.15) - (2.19) através da geometria, ou seja na definição de  $\Omega_f$ . Assim, temos que a interação fluido-nadador pode ser vista como um problema de Interação Fluido-Estrutura (IFE). A solução deste problema se dá pela discretização espacial e temporal do problema na sua forma variacional utilizando o método dos elementos finitos, apresentado na sequência.

## 2.3 Formulação Variacional do problema

O processo de discretização das equações de governo, que modelam o problema a ser tratado, usando um método de elementos finitos parte de uma reformulação da equação diferencial dada como um problema variacional equivalente. A equação resultante deste processo

é chamada de formulação variacional ou formulação fraca, que detalhamos a seguir. A sua solução numérica será procurada em espaços de dimensão finita usando o Método de Galerkin (BRENNER; SCOTT, 2007).

### 2.3.1 Formulação Variacional Continua

Para considerar a interação fluido-nadador, primeiramente, precisamos introduzir o espaço de funções onde o problema variacional é formulado. Assim, seguindo o apresentado por (GLOWINSKI *et al.*, 2001),

$$W(\mathbf{q}) = \left\{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega_f(\mathbf{q}))^d : \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega, \mathbf{w} = \mathbf{H}(\mathbf{q}) \mathbf{d} \text{ on } \partial B, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_c} \right\},$$

que pode ser decomposto como

$$W(\mathbf{q}) = W_0(\mathbf{q}) \oplus V(\mathbf{q}),$$

onde  $V(\mathbf{q})$  é o espaço de dimensão finita (de dimensão  $n_c$ ) de extensões de movimentos compostos de corpo rígido, isto é,

$$V(\mathbf{q}) = \{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega_f(\mathbf{q}))^d : \mathbf{w} = \mathcal{E} \mathbf{H}(\mathbf{q}) \mathbf{d}, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_c} \}$$

e

$$W_0(\mathbf{q}) = \left\{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega_f(\mathbf{q}))^d : \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ on } \partial\Omega \right\}.$$

O operador  $\mathcal{E}$  é um operador linear de extensão (ou *lifting*) que, dada uma função suficientemente regular  $f$  definida em  $\partial B$ , atribui a ele  $\mathcal{E}f \in H^1(\Omega_f)$  que coincide com  $f$  em  $\partial B$  e é zero em  $\partial\Omega$ . Em campos de vetor ou matriz definidos em  $\partial B$ , este operador atua em componentes. Seguindo o apresentado no trabalho de (PAZ; BUSCAGLIA, 2020), a formulação fraca do problema interação fluido-nadador é dada por: *Determinar*  $(\mathbf{s}, \mathbf{u}, p) \in \mathbb{R}^{n_c} \times (W_0(\mathbf{q}) + \mathcal{E} \mathbf{H}(\mathbf{q}) \mathbf{s}) \times L_0^2(\Omega_f(\mathbf{q}))$ , tal que

$$\int_{\Omega_f(\mathbf{q})} \left[ \boldsymbol{\sigma} : \nabla^S \mathbf{w} - q \nabla \cdot \mathbf{u} \right] d\Omega = \int_{\Omega_f(\mathbf{q})} \mathbf{F}^{\text{gen}} \cdot \mathbf{d} d\Omega$$

para todo  $(\mathbf{d}, \mathbf{w}, q) \in \mathbb{R}^{n_c} \times (W_0(\mathbf{q}) + \mathcal{E} \mathbf{H}(\mathbf{q}) \mathbf{d}) \times L_0^2(\Omega_f(\mathbf{q}))$ , com  $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_p, 0, 0, 0)$ ,  $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$ , satisfazendo a condição inicial  $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$  e  $\mathbf{u}(\cdot, 0) = \mathbf{u}_0$ .

### 2.3.2 Formulação variacional semidiscreta

Para cada  $t \in [0, T]$ ,  $T > 0$ , seja  $\mathcal{T}_h(t)$  uma triangulação do domínio do fluido  $\Omega_f(t)$ , induzindo um domínio discreto  $\Omega_{fh}(t)$ , tal que  $\bar{\Omega}_{fh}(t) = \bigcup_e \Omega^e(t)$ , com  $h > 0$  o tamanho característico da malha formada por subdomínios compactos não vazios  $\Omega^e(t)$ . Para simplificar, assumimos que  $\Omega$  é poligonal e portanto  $\partial\Omega$  é exatamente aproximado, então  $\partial\Omega_{fh}(t) = \partial\Omega \cup \partial B_h(t)$ , sendo  $\partial B_h(t)$  a aproximação poligonal do corpo do nadador. As aproximações da velocidade do fluido  $\mathbf{u}$  e pressão  $p$  são escritas como

$$\mathbf{u}_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j \in \eta^u} n^j(\mathbf{x}) \mathbf{u}^j(t) \quad \text{e} \quad p_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{k \in \eta^p} m^k(\mathbf{x}) p^k(t),$$

em subespaços de dimensão finita  $\mathcal{U}_h(t) \subset H^1(\Omega_f(t))^d$  e  $\mathcal{M}_h(t) \subset L_0^2(\Omega_f(t))$ , respectivamente, em que  $n^j, m^k$  são as funções nodais de forma dos espaços  $\mathcal{U}_h$  e  $\mathcal{M}_h$ . Denotando por  $\mathbf{x}^i(t)$  a posição do nó  $i$  na malha, para  $i$  pertencente a um conjunto de índices globais de velocidade  $\eta^U$ , tal que,  $\mathbf{u}_h(\mathbf{x}^i(t), t) = \mathbf{u}^i(t)$ , para todo  $i \in \eta^U$ . Similarmente,  $p_h(\mathbf{x}^l(t), t) = p^l(t)$  para os nós de pressão  $\mathbf{x}^l(t)$  indexados pelo conjunto de índices  $\eta^P$ . O espaço de interpolação para a velocidade é

$$\mathcal{U}_h(\mathbf{q}) = \left\{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega_{fh}(\mathbf{q}))^d : \mathbf{w}|_{\Omega^e} \in P_m(\Omega^e)^d, \text{ para todo } e, \mathbf{w}|_{\partial\Omega} = \mathbf{0} \right\},$$

e para a pressão

$$\mathcal{M}_h(\mathbf{q}) = \left\{ q \in L_0^2(\Omega_{fh}(\mathbf{q})) : q|_{\Omega^e} \in P_m(\Omega^e), \text{ para todo } e \right\},$$

onde  $P_m(\Omega^e)$  é o espaço de polinômios em  $\Omega^e$  de grau menor ou igual a  $m$ .

Consideremos os espaços

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_h(\mathbf{q}) &= \left\{ \mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_h(\mathbf{q}) : \mathbf{w}_h = \mathbf{0} \text{ em } \partial\Omega, \mathbf{w}_h = \mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{d} \text{ em } \partial B_h, \mathbf{d} \in \mathbb{R}^{n_c} \right\} \\ \mathcal{W}_{0h}(\mathbf{q}) &= \left\{ \mathbf{w}_h \in \mathcal{U}_h(\mathbf{q}) : \mathbf{w}_h = \mathbf{0} \text{ em } \partial\Omega, \mathbf{w}_h = \mathbf{0} \text{ em } \partial B_h \right\} \end{aligned}$$

A menos de diferenças geométricas entre  $\partial B$  e  $\partial B_h$ , temos que as seguintes inclusões são válidas:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_h(\mathbf{q}) &\subset \mathcal{W}(\mathbf{q}), \\ \mathcal{W}_{0h}(\mathbf{q}) &\subset \mathcal{W}_0(\mathbf{q}), \\ \mathcal{W}_h(\mathbf{q}) &= \mathcal{W}_{0h}(\mathbf{q}) \oplus \mathcal{V}(\mathbf{q}). \end{aligned}$$

Para cada tempo  $t$ , seja  $\mathcal{E}$  o operador extensão definido por

$$\mathcal{E}f = \sum_{j \in \eta_\partial^U} f(\mathbf{x}^j) n^j,$$

sendo  $\eta_\partial^U \subset \eta^U$  contendo os índices de velocidade em  $\partial B_h$  e  $f$  uma função contínua (por partes  $P_m$ ) definida em  $\partial B_h$ , a qual é estendida para  $\Omega_{fh}$  interpolando de acordo ao espaço de elementos finitos adaptado nos nós pertencentes a  $\partial B_h$  e definindo como zero nos demais nós. A velocidade aproximada do fluido  $\mathbf{u}_h$  é procurada pertencendo a  $\mathcal{W}_h(\mathbf{q}_h)$ , assim

$$\mathbf{u}_h = \mathbf{u}_{0h} + \mathcal{E}\mathbf{H}\mathbf{s}_h.$$

Seja  $\mathbf{H}^i(\mathbf{q}) = \mathcal{E}\mathbf{H}(\mathbf{q}, \mathbf{x}^i)$ , isto é,

$$\mathbf{H}^i(\mathbf{q}) = \begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{q}, \mathbf{x}^i) & \text{se } i \in \eta_\partial^U \\ \mathbf{0} & \text{se } i \notin \eta_\partial^U \end{cases}$$

então, os valores nodais  $\mathbf{u}^i(t)$  de  $\mathbf{u}_h(\cdot, t)$  são incógnitas irrestritas se  $i \in \eta_\partial^U = \eta^U \setminus \eta_\partial^U$ , e para  $i \in \eta_\partial^U$ , tem-se que

$$\mathbf{u}^i(t) = \mathbf{H}^i(\mathbf{q}_h(t))\mathbf{s}_h(t).$$

A formulação semi-discreta do problema é dada por (PAZ; BUSCAGLIA, 2020): *Determinar*  $\mathbf{q}_h(t) \in \mathbb{R}^6$  e  $(\mathbf{s}_h(t), \mathbf{u}_h(\cdot, t), p_h(\cdot, t)) \in \mathbb{R}^6 \times (W_{0h}(\mathbf{q}_h(t)) + \varepsilon \mathbf{H}(\mathbf{q}_h(t)) \mathbf{s}_h(t)) \times M_h(\mathbf{q}_h(t))$ , tal que,

$$\frac{d\mathbf{x}_{ch}}{dt} - \mathbf{v}_{ch} = \mathbf{0}, \quad (2.20)$$

$$\frac{d\theta_h}{dt} - \omega = \mathbf{0}, \quad (2.21)$$

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} \left[ 2\mu \nabla^S \mathbf{u}_h : \nabla^S \mathbf{w}_h - p_h \nabla \cdot \mathbf{w}_h \right] d\Omega - \mathbf{F}^{\text{gen}} \cdot \mathbf{d} = 0, \quad (2.22)$$

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} q_h \nabla \cdot \mathbf{u}_h d\Omega + \int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} \tau_h \nabla p_h \cdot \nabla q_h d\Omega = 0, \quad (2.23)$$

para todo  $(\mathbf{d}, \mathbf{w}_h(\cdot, t), q_h(\cdot, t)) \in \mathbb{R}^6 \times (W_{0h}(\mathbf{q}_h(t)) + \varepsilon \mathbf{H}(\mathbf{q}_h(t)) \mathbf{d}) \times M_h(\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h(t)))$ , com  $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_p, 0, 0, 0)$ , satisfazendo a condição inicial  $\mathbf{q}_h(0) = \mathbf{q}_{0h}$ .

Para a interpolação espacial da velocidade e da pressão, adotam-se elementos finitos lineares  $P_1$ . Lembrando que interpolações de igual ordem não dão div-estáveis, para evitar os chamados modos espúrios de pressão, termos de estabilização são acrescentados na formulação variacional. Neste trabalho adotamos o clássico método *Galerkin Least Squares Method* (GLS) introduzido em (HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986). Com respeito a discretização temporal, foram utilizados métodos de primeira e segunda ordem, apresentados na seção 2.5. Aqui, vale salientar que toda a programação computacional foi realizada utilizando a plataforma FEniCS que permite uma implementação quase direta da formulação apresentada, como poderá ser visto na seção 3.1.

### 2.3.3 Formulação axisimétrica

Nos estudos numéricos será considerado um nadador formado por esferas, para o qual será formulado o problema anterior considerando simetria de revolução, que claramente é mais conveniente do ponto de vista computacional, que resolver o problema completo em 3D. Para tal fim, consideramos um campo vetorial tridimensional  $\mathbf{v}$  dado da seguinte forma

$$\mathbf{v} = (v_r, v_x, 0)^T$$

em que  $r$  denota a componente radial (i.e., a distância ao eixo de simetria), que nos problemas a serem estudados será o eixo horizontal e  $x$  denota a componente axial. Assume-se que ambas as componentes,  $v_r$  e  $v_x$  são funções apenas de  $(r, x)$  e independentes da coordenada angular  $\theta \in [0, 2\pi)$ . Daqui temos para o gradiente do campo vetorial  $\mathbf{v}$  que

$$\nabla \mathbf{v} = \left[ \begin{array}{cc|c} \nabla \mathbf{v}_{2D} & & 0 \\ & & 0 \\ \hline 0 & 0 & \frac{v_r}{r} \end{array} \right], \quad \nabla \mathbf{v}_{2D} = \begin{bmatrix} v_{r,r} & v_{r,x} \\ v_{x,r} & v_{x,x} \end{bmatrix}.$$

Denotando por  $\mathbf{v}_{2D} = (v_r, v_x)^T$ , podemos escrever a formulação variacional do problema de Stokes como se mostra na sequência

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{3D}} 2\mu \nabla^s \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \, dx_{3D} &= \\ &= 2\pi \int_{\Omega_{2D}} 2\mu \left( \nabla_{2D}^s \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v}_{2D} + \frac{u_r v_r}{r^2} \right) r \, dx_{2D}, \\ \int_{\Omega_{3D}} \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u})(\nabla \cdot \mathbf{v}) \, dx_{3D} &= \\ &= 2\pi \int_{\Omega_{2D}} \lambda \left( \nabla \cdot \mathbf{u}_{2D} + \frac{u_r}{r} \right) \left( \nabla \cdot \mathbf{v}_{2D} + \frac{v_r}{r} \right) r \, dx_{2D} \end{aligned}$$

onde temos usado que  $dx_{3D} = 2\pi r dx_{2D}$ .

## 2.4 Tratamento das malhas de elementos finitos

No Método de elementos Finitos, assim como em outros métodos para solução de Equações Diferenciais Parciais, como os métodos de Volumes Finitos, discretiza-se o domínio de solução, aproximando-o por um domínio discreto e particionado-o em células, mais precisamente, elementos finitos. Esses elementos podem apresentar formas geométricas diversas (triangular, quadrilaterais, cúbicas, tetraédricas, etc.), dependendo do caso. Em particular, neste trabalho ficaremos restritos a malhas compostas por triângulos, em domínio 2D, geradas pela conhecida biblioteca GMSH (Geuzaine, Christophe and Remacle, Jean-Francois, ).

Em simulações sobre domínios cuja a geometria varia com o tempo, como é o caso da iteração fluido nadador, em que ocorre o deslocamento da estrutura, o domínio onde a malha está definida é conseqüentemente alterado. Logo, faz-se necessário utilizar técnicas que permitam que a malha se conforme a nova descrição do domínio. Nesse sentido, este trabalho utiliza-se de malhas dinâmicas Lagrangianas para representar a geometria do nadador imerso no fluido. A diferença dos métodos chamados de fronteira imersa (*Immersed Boundary Method*, IBM (PESKIN, 2002)), em que a malha *background* do fluido está fixa e uma função indicadora é usada para separar os domínios sólidos e fluidos, é que nos métodos que envolvem malhas com fronteiras móveis, como o utilizado, uma questão central é controlar a qualidade geométrica e tamanho dos elementos ao longo da deformação, pois isto pode afetar significativamente a robustez e precisão dos resultados obtidos pelo MEF.

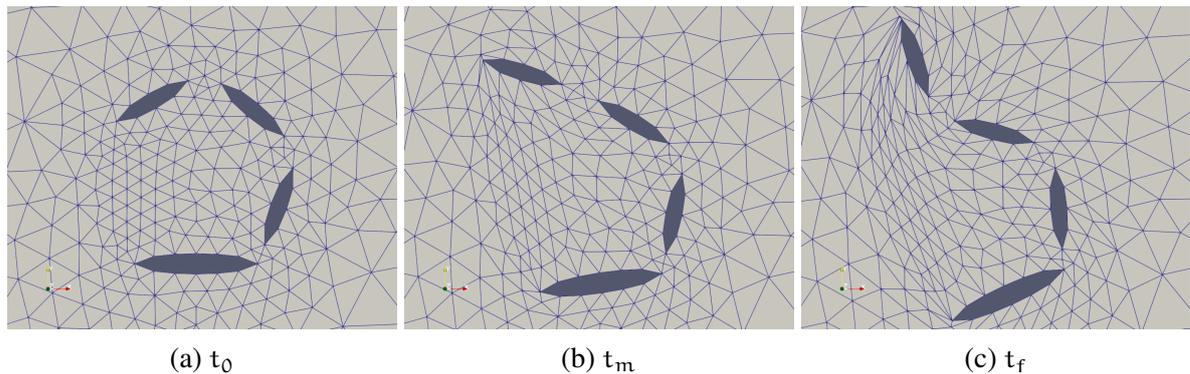
Como ilustração, na Figura 4 mostra-se uma sequência de malhas ao longo do tempo obtidas com o algoritmo de movimentação de malha que será detalhado na sequência. Estas figuras mostram as deformações experimentadas pelos triângulos da partição de elementos finitos. Para lidar com estes grandes deslocamentos dos corpos dos nadadores ao longo do tempo, mantendo a precisão numérica da formulação, são necessários dois ingredientes:

- Estratégias de movimentação de malhas: tipicamente, algoritmos de suavização baseados

na resolução de problemas elípticos, que permitam distribuir as grandes deformações sobre todos os triângulos da malha;

- Reconstrução total da malha com uma certa periodicidade temporal: quando os algoritmos de suavização não são suficientes é necessário refazer a malha. Note-se a distorção dos triângulos no último quadro da sequência de malhas na figura 4 após vários passos de tempo.

Figura 4 – Deformações experimentadas pelos triângulos da partição de elementos finitos próximo ao corpo de um nadador, no início ( $t_0$ ), metade ( $t_m$ ) e ao final ( $t_f$ ) de um movimento.



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 2.4.1 Movimentação da Malha Computacional

Os algoritmos de movimentação da malha estão baseados na suavização da malha para evitar concentrar as deformações dos elementos perto das superfícies móveis e distribuir estas em todos os triângulos da malha. Foram propostas ao longo de décadas, várias maneiras de melhorar a malha, dentre elas a de implementar propriedades elásticas de modo a governar a movimentação dos nós sem alterar o número destes, considerando a malha de elementos finitos como um grande sistema de molas lineares onde cada aresta de elemento se comporta como uma mola (BATINA, 1990), ou em que cada nó existe uma mola torsora (DEGAND; FARHAT, 2002), sendo ainda possível, uma combinação de ambos estes métodos. Outra forma seria baseando-se na diferença entre os volumes dos elementos existentes, bem como na variação de volume e forma do elemento ao longo do tempo (STEIN; TEZDUYAR; BENNEY, 2003). Uma das formas mais usuais, a qual é de fácil implementação na plataforma de elementos finitos e que está sendo utilizada neste trabalho, é baseada na resolução de EDPs elípticas de segunda ordem. Aqui adotamos um método clássico, que consiste na resolução de um problema de elasticidade linear, que descreve-se na sequência.

A ideia é modelizar a malha como um sólido elástico em que a relação entre as tensões  $\boldsymbol{\tau}$  e o campo de deslocamentos  $\boldsymbol{s}$  é dada pela lei constitutiva

$$\boldsymbol{\tau} = \lambda \text{tr}(\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{s}))\mathbf{I} + 2\mu\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{s}) \quad (2.24)$$

em que

$$\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{s}) = \frac{1}{2}(\nabla \boldsymbol{s} + \nabla \boldsymbol{s}^T) \quad (2.25)$$

é o tensor de deformação linearizado,  $\lambda$  e  $\mu$  são chamados coeficientes de Lamè, os quais podem ser definidos em termos de parâmetros  $E$ , conhecido como módulo de Young e  $\nu$  coeficiente de Poisson

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

e

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$$

Para o problema estar bem posto, é necessário que  $\mu(\boldsymbol{x}) > 0$ . A equação governante segue do equilíbrio estático, dada por:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\tau} = 0 \quad (2.26)$$

Assim, considerando o domínio computacional  $\Omega$ , o problema a ser resolvido é dado por:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} (\lambda \operatorname{div} \boldsymbol{s} \mathbf{I} + \mu(\nabla \boldsymbol{s} + \nabla \boldsymbol{s}^T)) &= 0 & \text{em } \Omega \\ \boldsymbol{s} &= 0 & \text{em } \partial\Omega \\ \boldsymbol{s} &= \mathbf{H}(\mathbf{q}) \boldsymbol{d} & \text{em } \partial\mathcal{B} \end{aligned} \quad (2.27)$$

em que o deslocamento do corpo é

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{s} \Delta t$$

Notar que não aparecem forças de corpo no lado direito da equação. Finalmente, os valores de  $E$  e  $\nu$  podem ser calibrados em cada problema. Neste trabalho adotamos os valores  $E = 10$  e  $\nu = 0.3$ , que têm funcionado satisfatoriamente na maioria dos experimentos numéricos apresentados. O resultado de resolver o problema 2.27 é o campo de deslocamentos  $\boldsymbol{s}$ , o qual é aplicado aos nós da malha para movimentar a geometria completa do problema do tempo  $t_n$  até o novo tempo  $t_{n+1}$ , i.e., se denotarmos por  $\mathbf{x}^i(t)$ ,  $i \in \eta_U$  à posição dos nós da malha de elementos finitos, teremos, num esquema de primeira ordem no tempo

$$\mathbf{x}^i(t_n + \Delta t) = \mathbf{x}^i(t_n) + \boldsymbol{s}_i \Delta t.$$

Outros esquemas de avanço temporal serão comentados mais tarde. Claramente, o movimento dos nós que estão sobre a superfície do nadador, i.e.,  $\mathbf{x}_i \in \partial\mathcal{B}$  respeitam a condição de borda imposta e portanto a cinemática do problema. A discretização do problema (2.27) também foi realizada utilizando o MEF, partindo da reformulação das equações em sua forma diferencial, em sua forma variacional. A discretização deste problema é clássica e é lembrada aqui por completude. Consideremos os seguintes espaços:

$$V_{Dg} = \{\mathbf{r} \in [H^1(\Omega)]^d; \mathbf{r} = 0 \text{ em } \partial\Omega\}. \quad (2.28)$$

Dada uma triangulação do domínio computacional  $\mathcal{T}_h$  o problema é formulado no espaço de funções lineares por partes

$$V_h = \left\{ \mathbf{r} \in H^1(\Omega)^d : \mathbf{r}|_{\Omega^e} \in P_1(\Omega^e)^d, \text{ para todo } e \in \mathcal{T}_h, \mathbf{r}|_{\partial\Omega} = \mathbf{g} \right\}. \quad (2.29)$$

A Formulação Variacional Contínua do problema é dada por: Encontrar  $\mathbf{s} \in V_{Dg}$  tal que

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{s}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}) d\Omega = \int_{\Omega} [\lambda(\nabla \cdot \mathbf{s})(\nabla \cdot \mathbf{r}) + 2\mu\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{s}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r})] d\Omega = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in V_{D0} \quad (2.30)$$

e a formulação variacional discreta segue de aplicar o método de Galerkin como é usual: Encontrar  $\mathbf{s}_h \in V_h$  tal que

$$\int_{\Omega_h} \boldsymbol{\tau}(\mathbf{s}_h) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}) d\Omega_h = \int_{\Omega_h} [\lambda(\nabla \cdot \mathbf{s}_h)(\nabla \cdot \mathbf{r}) + 2\mu\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{s}_h) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r})] d\Omega_h = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in V_{h0} \quad (2.31)$$

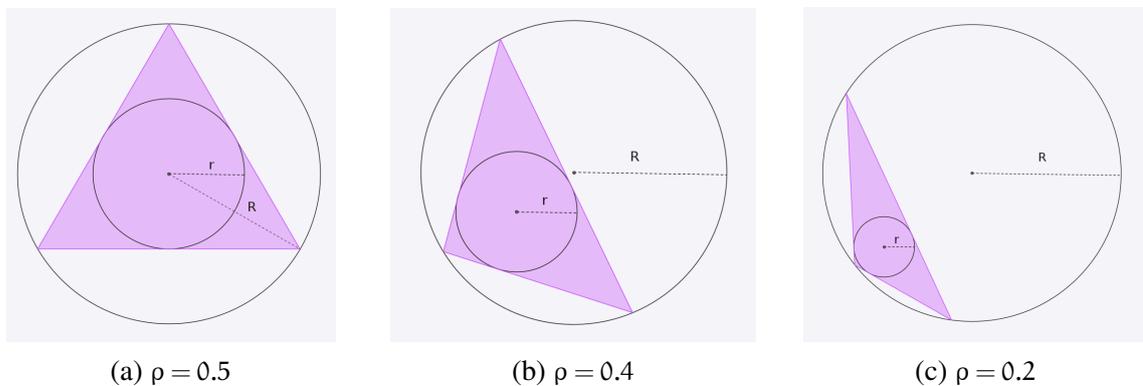
### 2.4.2 Estratégias de Remalhamento

Em uma simulação é essencial ter uma discretização apropriada do domínio para que se consiga uma solução numérica representativa do problema tratado, o que requer uma malha constituída por elementos adequados em termos de formato e tamanho. Como apresentado, a técnica de movimentação descrita anteriormente pode afetar significativamente a qualidade da malha de elementos finitos. Essa qualidade é avaliada com base na distorção das células ou elementos, ou seja, se possuem seus ângulos internos dentro de um limite imposto, idealmente, distantes de serem nulos ( $0^\circ$ ) ou rasos ( $180^\circ$ ) (KNUPP, 2007). Neste trabalho, o critério adotado para medir a qualidade da malha é baseado na razão

$$\rho = \frac{r}{R}$$

onde  $r$  e  $R$  são os raios dos círculos inscrito e circunscrito aos triângulos, respectivamente (Ver Figura 5). Para tal fim, foi utilizada a função `MeshQuality.radius_ratio_min_max`, disponível na plataforma FEniCS, que retorna  $\rho_{\min}$  e  $\rho_{\max}$  sobre todos os elementos da malha. Ressalta-se que FEnics reescala o valor  $\rho$  de tal forma que o valor 1 corresponde a melhor qualidade e valores próximos de zero indicam elementos degenerados.

Figura 5 – Exemplos de triangulação



Fonte: Elaborada pelo autor.

Conforme visto anteriormente, após um certo número de passos de tempo, a estratégia de movimentação de malha adotada, mostra-se insuficiente para controlar a qualidade dos

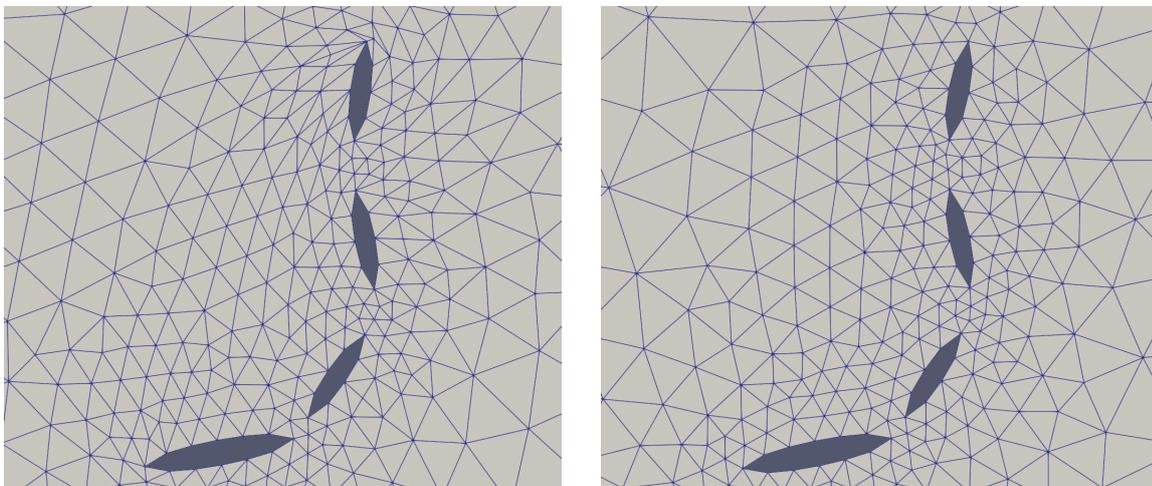
triângulos da partição de elementos finitos, como ilustrado na figura 4, em que os triângulos próximos ao corpo do nadador tem ângulos de medida consideravelmente pequena, alguns próximos de  $0^\circ$ , se fazendo necessário reconstruir parcial ou totalmente a malha de elementos finitos. No primeiro caso, podem ser realizadas operações locais de melhora da qualidade as quais envolverão, eventualmente, adição ou remoção de nós e elementos, com o qual a topologia da malha acaba mudando (LÖHNER, 1989). No segundo caso, a topologia é simplesmente refeita sem preservar a original. Este será o método adotado neste trabalho, principalmente por simplicidade de implementação e robustez. Isto significa que a geometria, a posição dos nós e conectividade da malha é substituída por uma nova partição de elementos finitos na qual as equações de governo são resolvidas. No entanto, é importante destacar que, sendo o nadador composto de corpos sólidos, a geometria dos corpos é respeitada no processo de remalhamento, isto é, a malha resultante possuirá nós e arestas sobre a borda exata dos corpos.

Na implementação do algoritmo de evolução temporal, descrito na seguinte seção, definimos um limite  $\mathcal{L}$  de tal forma que se

$$\rho_{\min} \leq \mathcal{L}$$

o remalhamento é realizado. Nos experimentos numéricos realizados utilizamos o valor  $\mathcal{L} = 0.4$  que tem funcionado bem em geral, porém, o impacto dos critérios de remalhamento na precisão dos resultados obtidos será analisado com cuidado no próximo capítulo. A figura 6 ilustra uma parte de uma malha de elementos finitos, antes e depois do remalhamento. Note que aplicado o remalhamento, os triângulos que foram degenerados são reconstruídos, obtendo-se assim elementos adequados em forma e tamanho. Também, note-se que as arestas e nós que se encontram sobre a borda dos corpos são preservados ao longo do processo de remalhamento.

Figura 6 – Malha computacional antes e depois do remalhamento, respectivamente, próximo ao corpo de um nadador.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Por fim, vale ressaltar que ao aplicar as técnicas descritas anteriormente, são atribuídos ao

problema de interação fluido-nadador erros inerentes da discretização do problema de elasticidade linear, que podem ser maiores ou menores dependendo da qualidade da malha. Logo, a frequência com que remalhamos pode afetar a qualidade da solução, o que, como mencionado, será analisado nas seções de análises de convergência 3.2.2 e 3.2.4.

## 2.5 Discretização Temporal

A escolha do esquema de discretização temporal pode ter um impacto significativo na precisão e robustez dos resultados neste tipo de problemas de interação Fluido-Nadador, especialmente no que diz respeito aos estudos de aprendizado que serão apresentados posteriormente. Isto é devido ao fato de que ao realizar movimentos de translação e rotação do nadador, a geometria do domínio computacional e a malha de elementos finitos na qual as equações governantes para o fluido estão sendo resolvidas, precisa ser atualizada. Isto, a sua vez, afeta o cálculo das forças que o fluido exerce sobre o nadador e por tanto a sua evolução. Neste trabalho temos experimentado com esquemas de primeiro e segundo ordem em  $\Delta t$ . Para começar, lembremos que o estado do nadador imerso no fluido é definido pelos seus graus de liberdade posicionais  $\mathbf{p}_h(t)$  e pelos seus graus de liberdade configuracionais  $\xi(t)$ , os quais são impostos. i.e., são funções conhecidas do tempo, tipicamente, o comprimento e/ou os ângulos dos links que conectam os diferentes corpos do nadador. Iremos denotar por  $\mathbf{q}_h^n = (\mathbf{p}_h^n, \xi(t_n))$  o estado do nadador no tempo  $t^n = n\Delta t$  com  $n \in \mathbb{N}_0$  e  $\Delta t > 0$ . O esquema de avanço temporal irá levar o sistema do tempo  $t_n$  até o tempo  $t_{n+1}$ , isto implica atualizar a configuração geométrica do sistema, i.e.,

$$[\mathcal{B}(\mathbf{q}_h^n), \Omega(\mathbf{q}_h^n)] \rightarrow [\mathcal{B}(\mathbf{q}_h^{n+1}), \Omega(\mathbf{q}_h^{n+1})]$$

Primeiramente, consideramos o esquema de ordem 1, o qual pode-se escrever a cada passo de tempo da seguinte forma:

- Dado  $\mathbf{q}_h^n = [\mathbf{p}_h^n, \xi(t_n)]$ , computar uma solução  $\mathbf{s}_p^*$  resolvendo (3.6)–(3.7) em  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^n, \xi(t_n))$
- Atualizar a posição:  $\mathbf{p}_h^{n+1} = \mathbf{p}_h^n + \Delta t \mathbf{s}_p^*$
- Movimentar a malha de elementos finitos resolvendo 2.27 para definir a configuração deformada  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^{n+1}, \xi(t_{n+1}))$
- Incrementar  $n$
- Repetir até chegar no tempo final

A vantagem clara do esquema que acabamos de apresentar, é a simplicidade de implementação e baixo custo computacional por cada passo de tempo, envolvendo apenas uma resolução do problema de movimentação da malha e do problema hidrodinâmico para determinar  $(\mathbf{u}_h, \mathbf{p}_h)$ , no entanto, o elevado erro de discretização torna o método inapropriado para capturar os

movimentos de translação e rotação do nadador com precisão aceitável, requerendo passos de tempo proibitivamente pequenos para atingir a precisão esperada, o qual tem sido confirmado por experimentação numérica. Isto motiva o uso de esquemas de mais precisos, em particular, esquemas de tipo preditor-corretor, que estarão baseados na regra do ponto médio. O método que temos adotado neste trabalho é dado por:

1. Dado  $\mathbf{q}_h^n = [\mathbf{p}_h^n, \boldsymbol{\xi}(t_n)]$  e  $\mathbf{s}_p^n$  em  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^n, \boldsymbol{\xi}(t_n))$
2. Atualizar a posição (preditor):  $\mathbf{p}_h^* = \mathbf{p}_h^n + \Delta t \mathbf{s}_p^n$
3. Computar a posição intermediária  $\mathbf{p}_h^{n+1/2} = \frac{1}{2} (\mathbf{p}_h^n + \mathbf{p}_h^*)$
4. Movimentar a malha de elementos finitos resolvendo 2.27 para definir a configuração deformada intermediária  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^{n+1/2}, \boldsymbol{\xi}(t_{n+\frac{1}{2}}))$
5. Dado  $\mathbf{q}_h^{n+1/2}$ , computar  $\mathbf{s}_p^{n+1/2}$  resolvendo (3.6)–(3.7) em  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^{n+1/2}, \boldsymbol{\xi}(t_{n+\frac{1}{2}}))$
6. Atualizar a posição (corretor):  $\mathbf{p}_h^{n+1} = \mathbf{p}_h^n + \Delta t \mathbf{s}_p^{n+1/2}$
7. Voltar a geometria na configuração  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^n, \boldsymbol{\xi}(t_n))$
8. Movimentar a malha de elementos finitos resolvendo 2.27 para definir a configuração deformada final  $\mathcal{B}(\mathbf{p}_h^{n+1}, \boldsymbol{\xi}(t_{n+1}))$
9. Incrementar  $n$
10. Repetir até chegar no tempo final

Claramente, o esquema anterior envolve mais sub-passos que o esquema de primeira ordem, a sua implementação sendo bastante mais complexa, inclui a aplicação do algoritmo de movimentação de malha assim como o problema hidrodinâmico no tempo intermediário  $t^{n+\frac{1}{2}}$ . A pesar disto, o ganho de precisão é significativo, e por isto o esquema será adotado para realizar os experimentos numéricos nesta dissertação. Para concluir a discussão sobre a discretização temporal do problema, note-se que os esquemas apresentados até aqui são esquemas explícitos no tempo. A formulação de esquemas implícitos é um desafio. Isto pode-se ver olhando para o cálculo das forças de interação, as quais são dadas por:

$$\int_{\partial \mathcal{B}(\mathbf{q}_h^{n+1})} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h^{n+1}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{f}^{\text{gen}},$$

$$\int_{\partial \mathcal{B}(\mathbf{q}_h^{n+1})} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h^{n+1}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{t}^{\text{gen}}.$$

e notando que o domínio de integração  $\mathcal{B}(\mathbf{q}_h^{n+1})$  depende justamente da incógnita  $\mathbf{p}_h^{n+1} = \mathbf{p}_h^n + \Delta t \mathbf{s}_p^{n+1/2}$ , que de fato está sendo procurada. Uma forma relativamente simples de tornar

estes esquemas implícitos é incorporar um processo iterativo no cálculo. Assim sendo, podemos escrever que

$$\mathbf{p}_h^{n+1} = \lim_{i \rightarrow \infty} \mathbf{p}_h^{n+1,i}$$

e calcular as forças atrasadas iterativamente, i.e., no estado  $\mathbf{p}_h^{n+1,i-1}$ . Quando convergido o processo iterativo, a solução corresponderá à de uma formulação implícita.

Como último detalhe, para resolver o problema de interação fluido-nadador (3.6)–(3.7) é necessário estimar a velocidade dos graus de liberdade configuracionais  $\dot{\boldsymbol{\xi}}(t_n)$ . Apesar de se ter a fórmula analítica para isto, pois as funções  $\boldsymbol{\xi}(t)$  são conhecidas, resulta conveniente para obter geometrias consistentes, usar a fórmula na sequência

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}(t_n) \approx \frac{\boldsymbol{\xi}(t_{n+1}) - \boldsymbol{\xi}(t_n)}{\Delta t}$$

## 2.6 Estimativas a priori do erro

Os esquemas de discretização espacial e temporal do problema completo de interação fluido-nadador apresentado acima será avaliado por experimentação numérica nos capítulos seguintes. No entanto, existem estimativas a priori do erro que podemos lembrar aqui (ver por exemplo (ERN; GUERMOND, 2013)). Dependendo da escolha do espaço para aproximação do campo de velocidades e da pressão no fluido e do esquema de avanço temporal, temos

$$\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_h\|_{H^1(\Omega)} + \|p - p_h\|_{L^2(\Omega)} \leq c_1 (h^k + \Delta t^r)$$

sendo  $k$  o grau do polinômio de interpolação utilizado. Em particular, neste trabalho usaremos polinômios lineares tanto para a velocidade como para a pressão (i.e.,  $k = 1$ ). Já que neste caso a conhecida condição LBB não é satisfeita, uma formulação estabilizada será usada para evitar os chamados modos espúrios de pressão (????). Para concluir, é interessante notar que os graus de liberdade de velocidade do nadador tem uma estimativa de convergência dada por

$$\|\mathbf{s} - \mathbf{s}_h\|_2 \leq c_2 (h^{2k} + \Delta t^r),$$

em que  $r$  é a ordem de convergência temporal.



---

# IMPLEMENTAÇÃO E EXPERIMENTAÇÃO NUMÉRICA

---

Neste capítulo serão apresentados aspectos do processo de implementação do problema e do método de solução propostos anteriormente, e alguns experimentos numéricos que permitem analisar a precisão com que as informações de interesse, como campos de velocidade, pressão e deslocamento dos modelos de micronadadores propostos, são obtidas. Como brevemente mencionado, conhecer essas informações de forma precisa é essencial para que se consiga fornecer ao algoritmo de aprendizado, dados consistentes que permitam ao micronadador desenvolver sua estratégia ótima de locomoção, o que será discutido com detalhes no próximo capítulo. Ressalta-se que o algoritmo utilizado neste trabalho foi desenvolvido pelo grupo de estudos em Microbiofluidica Numérica do Instituto de Ciências Matemáticas e Computação da Universidade de São Paulo. O processo de implementação do problema foi realizado utilizando a plataforma FEniCS descrita a seguir. Os experimentos numéricos foram realizados para dois modelos de nadadores, apresentados na sequência, utilizando a formulação apresentada anteriormente em [2.3](#).

## 3.1 Implementação em Fenics

A plataforma de computação científica FEniCS, de código aberto, foi iniciada em 2003 como uma colaboração de pesquisa entre a Universidade de Chicago e a Chalmers University of Technology ([ALNÆS et al., 2015a](#)), e possui várias componentes, que fornecem ferramentas de computação científica para trabalhar com malhas computacionais, formulações variacionais de elementos finitos e álgebra linear numérica para resolver equações diferenciais parciais. Os principais componentes da plataforma são:

1. **UFL**: Biblioteca Python para escrever problemas em sua forma variacional. Fornece a sintaxe para definir formas lineares e bilineares, espaços de elementos finitos, de forma que as EDP's possam ser escritas na sua forma fraca utilizando uma linguagem próxima à matemática;
2. **DOLFIN**: Biblioteca Orientada a Objetos Dinâmicos para Computação de Elementos Finitos. Ela fornece o ambiente computacional do FEniCS em C++ e Python e pode ser utilizada, entre outras coisas, para fazer interface com rotinas paralelas de álgebra linear, como `Petsc`;
3. **FFC**: Compilador de formas variacionais que gera um código C eficiente de baixo nível, a partir de uma descrição de alto nível *Unified Form Language* (UFL), podendo ser usado para montar os operadores discretos correspondentes. O tutorial *Just-in-time-compilation* revela informações interessantes acerca do assunto (Ver [JIT](#));
4. **Basics**: Biblioteca para tabulação e definição de elementos finitos. Permite aos usuários, por exemplo, avaliar funções de base de elementos finitos, acessar informações geométricas e topológicas sobre células de referência, interpolar em um espaço de elementos finitos, entre outras coisas;

Para maiores detalhes sobre os componentes recomenda-se consultar os repositórios correspondentes disponíveis nos links.

### 3.1.1 Um exemplo de implementação em FEniCS

Antes de mostrar a implementação do problema de interação Fluido-Nadador na plataforma de elementos finitos, vamos mostrar com uma finalidade principalmente didática, como resolver um problema escalar simplificado que já mostra vários dos ingredientes que serão utilizados posteriormente. O problema a considerar é a equação de condução de calor no caso estacionário, mas com algumas particularidades que são explicadas na sequência.

O objetivo é resolver o problema de Poisson (possivelmente não linear) em um domínio retangular com um número arbitrário  $n_b$  de furos circulares sem interseção. Dado o domínio computacional  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ,  $\partial\Omega = \Gamma_{\text{left}} \cup \Gamma_{\text{ad}} \cup \Gamma_{\text{right}} \cup \Gamma_{\text{holes}}$ , onde  $\Gamma_{\text{holes}} = \bigcup_{i=0}^{n_b-1} \Gamma_i$ , termo fonte

f e difusividade térmica  $\kappa$ , encontrar o campo de temperatura  $T$  satisfazendo

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla \cdot (\kappa(T) \nabla T) = f \quad \text{in } \Omega \\ T = T_\ell \quad \text{in } \Gamma_{\text{left}} \\ T = T_r \quad \text{in } \Gamma_{\text{right}} \\ T = T_i \quad \text{in } \Gamma_i, i = 0, \dots, n_b - 1 \\ -\kappa(T) \nabla T \cdot \mathbf{\hat{n}} = 0 \quad \text{in } \Gamma_{\text{ad}} \end{array} \right.$$

Dados os valores  $T_i, i = 0, \dots, n_b - 1$ , a solução do problema é encontrada de forma direta. Porém, neste exercício as  $T_i$ 's são incógnitas a serem determinadas de forma que a solução corresponda àquela em que o fluxo líquido de calor sobre a fronteira dos buracos é nulo, ou seja,

$$\int_{\Gamma_i} \kappa(T) \nabla T \cdot \mathbf{\hat{n}} ds = 0, \quad i = 0, \dots, n_b - 1 \quad (3.1)$$

Isso é análogo a resolver um problema no qual os buracos são substituídos por inclusões feitas de um material com condutividade térmica muito grande, de modo que a temperatura seja quase uniforme nas inclusões. No entanto, a priori, essas temperaturas também são desconhecidas e devem ser encontradas. Assim sendo, serão incorporadas incógnitas nas bordas dos buracos as quais serão encontradas de forma simultânea com as incógnitas internas.

Começamos definindo o espaço

$$V_D = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_i} = 0, v|_{\Gamma_{\text{left}}} = T_\ell, v|_{\Gamma_{\text{right}}} = T_r\}$$

e considerando uma decomposição aditiva para o campo de temperatura

$$T(\mathbf{x}) = \hat{T}(\mathbf{x}) + \sum_{i=0}^{n_b-1} T_i v_i(\mathbf{x}) \quad (3.2)$$

em que  $\hat{T} \in V_D$  e as funções auxiliares  $v_i$  pertencem ao espaço  $V_{\Gamma_i}$  definido por

$$V_{\Gamma_i} = \{v \in H^1(\Omega), v|_{\Gamma_i} = 1, v|_{\partial\Omega \setminus \Gamma_i} = 0\}$$

A formulação de elementos finitos para este problema é: Encontrar  $(\hat{T}, T_0, \dots, T_{n_b-1}) \in V_D \times \mathbb{R}^{n_b-1}$  tal que  $T = \hat{T} + \sum_{i=0}^{n_b-1} T_i v_i$  satisfazendo

$$\int_{\Omega} \kappa(T) \nabla T \cdot \nabla v dx = \ell(v) \quad \forall v \in V_0 \quad (3.3)$$

e

$$1 \int_{\Gamma_i} \kappa(T) \nabla T \cdot \mathbf{\hat{n}} ds = 0, \quad i = 0, \dots, n_b - 1 \quad (3.4)$$

onde  $V_0$  é o espaço  $V_D$  especializado para  $T_\ell = T_r = 0$ .

Observe que, aplicando uma fórmula de integração por partes, e supondo  $f = 0$  por simplicidade, a segunda equação pode ser escrita como

$$1 \int_{\Gamma_i} \kappa(T) \nabla T \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds = 1 \int_{\Omega} \kappa(T) \nabla T \cdot \nabla v_i \, dx$$

Notar que a função teste do resíduo associado à equação de equilíbrio térmico é simplesmente a função constante 1.

Embora no problema contínuo ambas coincidam, no caso discreto elas serão distintas, i.e.,

$$\int_{\Gamma_i} \kappa(T_h) \nabla T_h \cdot \mathbf{\hat{n}} \, ds \neq \int_{\Omega} \kappa(T_h) \nabla T_h \cdot \nabla v_{hi} \, dx$$

De fato, a segunda forma é mais precisa e convergente. Como ilustração, na sequência mostramos a implementação em FEniCS legacy do problema térmico descrito acima, o que é bastante instrutivo e similar a implementação do problema final que nos interessa:

```

1: ...
2:
3: # Space for bulk T
4: Eu = FiniteElement("Lagrange", 'triangle', degree=1)
5:
6: # Real (constant) space for T at holes
7: ER = []
8: for ib in range(nholes):
9:     ER.append(FiniteElement("Real", msh.ufl_cell(), 0))
10:
11: # Mixed space (so as we solve monolithically)
12: EM = MixedElement([Eu,ER])
13: W = FunctionSpace(msh, EM)
14:
15: # Bilinear form
16: a = (inner(kappa(T)*grad(T), grad(vaux))*dx)
17:
18: # Test functions
19: TstF = TestFunction(W)
20: (v, rs) = split(TstF)
21:
22: # Trial functions
23: TrlF = TrialFunction(W)
24: (u, Ts) = split(TrlF)
25:
26: # Additive decomposition (Eq. 3.2)
27: Ttot = u
28: for ib in range(nholes):
29:     Ttot += Ts[ib]*vFB[ib]
30:
31: # Residual
32: Res = a(Ttot, v) - f*v*dx
33: for ib in range(nholes):
34:     Res += a(Ttot, rs[ib]*vFB[ib])
35:
36: # Solve
37: ...

```

Neste código, primeiramente definimos o espaço de funções de Lagrange para o campo de temperaturas no domínio todo e na sequência definimos um espaço de funções constantes sobre todo o domínio. O valor dessas funções será o valor da temperaturas nas bordas de cada buraco. Com esses dois espaços é definido um espaço misto de funções, de forma que a solução do problema consistirá de um único vetor cujas primeira  $n_{\text{nod}}$  componentes corresponderão aos valores de temperatura no nós da malha e as seguintes  $n_{\text{holes}}$  corresponderão aos valores de temperatura nas bordas dos buracos. Algebricamente, isto corresponde-se com um vetor de incógnitas:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ T_{n_{\text{nodes}}} \\ \text{---} \\ T_{h_1} \\ \cdot \\ \cdot \\ T_{h_{n_{\text{hole}}}} \end{bmatrix}$$

Na sequência definimos a forma bilinear  $\alpha(\cdot, \cdot)$ , as funções de teste e de prova e a decomposição aditiva para o campo de temperaturas global 3.2. Finalmente temos a forma variacional do problema. completo, a qual é obtida somando os resíduos variacionais correspondentes a equação 3.3 e 3.4, que será usado para montar o sistema de equações definitivo. A funções teste  $rs[i]$  correspondem justamente com as funções constantes sobre o domínio, porém se faz necessário utilizar um símbolo próprio para esta, a fim de montar o resíduo do sistema e ao mesmo tempo implementar a sua diferenciação automática para montar a matriz Jacobiana do sistema, para posterior resolução pelo método de Newton. Se o problema for linear, o que ocorreria se o coeficiente de condutividade térmica não depender da solução, isto consumirá apenas uma iteração do método de Newton, caso contrário, várias iterações poderão ser necessárias. As funções  $vFB[i]$  correspondem as funções  $v_i \in V_{\Gamma_i}$  definido acima. Conceitualmente, este problema compartilha semelhanças com o problema de interação fluido-sólido. Para fixar ideias, por simplicidade, consideremos a translação rígida de corpos imersos no fluido. Neste caso, a velocidade dos corpos é um campo que assume valores constantes na superfícies dos corpos (os buracos no exemplo), porém, esta velocidade é desconhecida e deve ser obtida como parte da resolução do problema de interação fluido-sólido, sendo a equação de equilíbrio

$$\int_{\partial B(\mathbf{q}_h^{n+1})} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}_h^{n+1}) \cdot \mathbf{n} \, dS = 0$$

que é o análogo da Eq. 3.1. Claro, que a implementação neste caso torna-se mais complexa pois esta envolve a movimentação da geometria. Na próxima seção, apresentamos alguns detalhes da sua implementação.

### 3.1.2 Implementação do problema de Interação Fluido-Nadador em FEniCS

Resulta instrutivo também mostrar alguns detalhes da implementação das EDPs que governam o problema de interação fluido-nadador na plataforma FEniCS. Para tal fim, começamos com a resolução do problema de Stokes, que é o componente essencial para resolver os problema de interação Fluido-Nadador dado pelas Equações 2.16 e 2.17, lembradas aqui:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot (-p\mathbf{I}_d + 2\mu\nabla^S(\mathbf{u})) &= \mathbf{f} \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

que representam a conservação de massa e momento, respectivamente, as quais, reescritas na sua forma variacional discreta, são dadas pelas Equações 3.6 e 3.7, já acrescidas do termo de estabilização mencionado anteriormente:

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} \left[ 2\mu\nabla^S \mathbf{u}_h : \nabla^S \mathbf{w}_h - p_h \nabla \cdot \mathbf{w}_h \right] d\Omega - \mathbf{F}^{\text{gen}} \cdot \mathbf{d} = 0, \quad (3.6)$$

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} q_h \nabla \cdot \mathbf{u}_h d\Omega + \int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} \tau_h \nabla p_h \cdot \nabla q_h d\Omega = 0, \quad (3.7)$$

são facilmente programadas na biblioteca FEniCS Legacy devido a sua flexibilidade, que permite uma implementação quase direta das equações consideradas, como ilustrado no código na sequência, assim como os espaços de elementos finitos que são facilmente declarados (linhas 2 a 6), juntamente com os resíduos de massa e momento a serem usados no laço temporal que resolve o problema de Stokes e atualiza a configuração do nadador.

```

1: # Finite elements and spaces
2: EU = VectorElement("Lagrange", 'triangle', 1) # Velocity
3: EP = FiniteElement("Lagrange", 'triangle', 1) # Pressure
4: ES = VectorElement("Real", 'triangle', 0, np) # Rigid body motions
5: EM = MixedElement([EU, EP, ES])
6: W = FunctionSpace(mesh, EM)
7:
8: # Fluid problem
9: def MomentumResidual(u, p, v):
10:     mu = viscosity(u)
11:     return (inner(2*mu*sym(grad(u)), grad(v)) - div(v)*p)*dx - inner(b,
12:         v)*dx
13:
14: def MassResidual(u, p, r):
15:     mu = viscosity(u)
16:     hk = CellDiameter(mesh)
17:     tauk = hk*hk/(4*mu)
18:     return r*div(u)*dx + tauk*inner(grad(p)-b, grad(r))*dx

```

Por simplicidade, na sequência mostramos como seria a implementação da resolução propriamente dita do problema de interação, considerando um esquema de avanço temporal de primeira ordem, de fato mais simples que o esquema de segunda ordem adotado, explicado no capítulo anterior. O código é mostrado na sequência. Pode-se notar que este código guarda bastante

similaridade com a implementação do problema térmico explicada na seção anterior. Por exemplo, podemos ver a decomposição aditiva do campo de velocidades nas linhas 12 a 16, que corresponde a

$$\mathbf{u}_h = \hat{\mathbf{u}}_h + \sum_{i=0}^{n_p-1} s_i \mathbf{w}_h^p + \sum_{i=0}^{n_c-1} \ell_i \mathbf{w}_h^c \quad (3.8)$$

em que  $n_p$  denota o número de graus de liberdade posicionais que descrevem ao nadador (p.e., a posição e orientação do corpo de referencia) e  $s_i$  as velocidades correspondentes a estes graus de liberdade. Por outro lado,  $n_c$  denota o número de graus de liberdade configuracionais (p.e., o comprimento/abertura das hastes) e  $\ell_i$  as velocidades associadas, lembrando que estas são impostas no modelo, p.e., se a haste abrir e fechar com velocidade constante, será

$$\ell_i(t) = \ell_{\min} + (\ell_{\max} - \ell_{\min}) \frac{t}{T_{\text{ação}}}$$

em que  $T_{\text{ação}}$  é o tempo que demora uma ação. No código mostrado estas são denotadas por `ldot`. Como antes,  $\hat{\mathbf{u}}_h$  denota um campo de velocidades que satisfaz condições homogêneas de Dirichlet na superfície dos corpos. A variáveis correspondentes no código tem o mesmo nome, i.e., `np` e `nc`. Finalmente, o termo `GeneralizedForce` denota forças e torques aplicados sobre o nadador. Embora, alguns detalhes da implementação tenham sido omitidos por questões de brevidade, podemos apreciar que o código desenvolvido na plataforma FEniCS resulta relativamente simples.

```

1: # ...
2: for t in range(ntimes): # Loop over time steps
3:     if (need_remesh):
4:         mesh = Remesh( q , ... )
5:         W = FunctionSpace(mesh, EM)
6:
7:     whc, whp = ApplyLHq( W , q , ... )
8:
9:     (uhat, p, s) = TrialFunctions(W)
10:    (v, r, d) = TestFunctions(W)
11:
12:    uT = uhat
13:    for i in range(nc):
14:        uT += Constant(ldot(i,time))*whc[i] # Configurational dofs
15:    for i in range(np):
16:        uT += s[i]*whp[i] # Positional dofs
17:
18:    # Build total residual
19:    Res = MomentumResidual(uT, p, v)
20:    Res += MassResidual(uT, p, r)
21:    Fg = GeneralizedForce(time,nsd)
22:    for i in range(np):
23:        Res += MomentumResidual(uT, p, d[i]*whp[i])
24:        Res -= d[i]*Fg[i] * Constant(1.0 / assemble(1.0*dx)) * dx
25:
26:    # call nonlinear solver ...
27:
28:    # Integrate body equations
29:    qnew.assign(q + Constant(dt)*s)
30:
31:    # ...

```

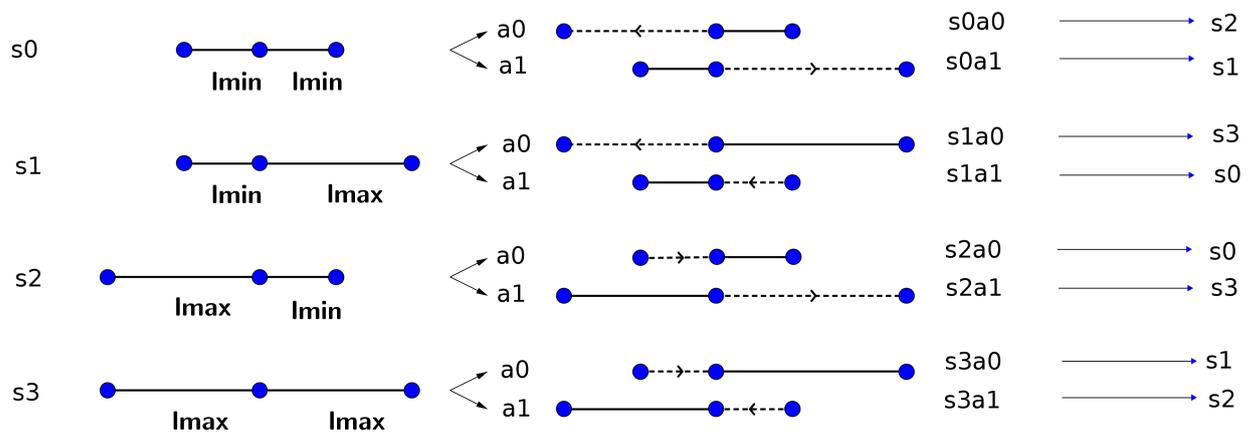
## 3.2 Modelagem Geométrica e Experimentação Numérica

Nesta seção apresentaremos aspectos geométricos e configuracionais dos modelos de nadadores propostos: um modelo unidimensional de geometria simples, formado por esferas ligadas por hastes flexíveis, apresentado por Ali Najafi e Ramin Golestanian passível de locomoção em baixo Reynolds como mostra os autores em (NAJAFI; GOLESTANIAN, 2004b) e um modelo de geometria mais geral, resultado direto de mudar os graus de liberdade dados pelos comprimentos dos braços do nadador de Najafi em ângulos de braços, sendo este uma variação do nadador de Purcell (BECKER; KOEHLER; STONE, 2003), com o qual procuramos simular, utilizando um modelo simplificado 2D, nadadores biológicos (SUZUKI; TSUJI; OH-TAKE, 2005) e/ou artificiais (HIROSE; YAMADA, 2009). Procuramos entender como se dá a locomoção ou deslocamento desses modelos no ambiente fluido e por fim, para determinar a precisão dos resultados obtidos, serão apresentadas algumas análises de convergência do método utilizado na discretização espacial e temporal do problema.

### 3.2.1 Nadador de Najafi-Golestanian

O nadador de Najafi-Golestanian é constituído por um sistema reconfigurável, composto por  $n$  esferas de raio  $R$  conectadas por  $n - 1$  hastes flexíveis, com espessura e massa desprezíveis, alinhados ao longo de uma direção. Esse sistema possui um total de  $2^{n-1}$  configurações (estado,  $s_n$ ) e cada configuração pode fazer a transição ( $s_n \alpha_n$ ) para  $n - 1$  configurações diferentes estendendo ou contraindo uma de suas hastes (ação,  $\alpha_n$ ). Para um nadador de três esferas, por exemplo, temos quatro configurações possíveis (estados  $s_0, s_1, s_2$  e  $s_3$ ) e cada uma destas pode transitar para dois novos estados, estendendo se contraído e vice-versa cada uma das suas duas hastes como mostra a Figura 7, em que  $\alpha_0$  representa a ação de acionar (abrir se fechado e

Figura 7 – Sistema configuracional para um nadador de três esferas.



Fonte: Elaborada pelo autor.

vice-versa) o braço da esquerda e  $\alpha_1$  a ação de acionar o braço da direita.

Como consequência do movimento de extensão e contração das hastes, o nadador tem um deslocamento na direção  $x$  e este simples grau de liberdade é o que chamamos no capítulo anterior de grau de liberdade posicional, e tal deslocamento será denotado por  $\Delta \mathbf{x}$ . Seguindo o apresentado em 2.1 esse deslocamento é obtido tomando como referência o centroide da esfera mais esquerda ( $x_{c0}$ ), ou seja, o quanto esse centroide se descolou na direção  $x$ , que é calculado simplesmente tomando a posição inicial e a posição final do centroide no final da ação, i.e.,

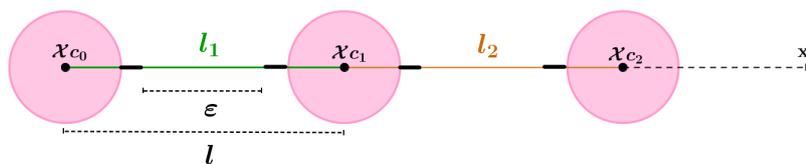
$$\Delta \mathbf{x} = \Delta \mathbf{x}(T_f) - \Delta \mathbf{x}(T_i)$$

Assim como o nadador do tipo *Snake*, que será apresentado posteriormente, o modelo de Najafi e Golestanian foi desenvolvido com base no nadador de Purcell e é amplamente abordado na literatura (YASUDA; HOSAKA; KOMURA, 2023) (GROSJEAN *et al.*, 2016) devido à sua simplicidade geométrica e cinemática. Essa simplicidade permite a obtenção de

resultados analíticos para a velocidade, deslocamento e eficiência da natação em um movimento unidimensional, possibilitando assim a validação de resultados numéricos. Como o objetivo deste trabalho se concentra em analisar somente a capacidade do nadador em se locomover e realizar tarefas em um ambiente fluido, os estudos aqui apresentados estão direcionados apenas ao deslocamento do nadador, sem considerar questões energéticas ou de eficiência de natação, que poderão ser exploradas em trabalhos futuros. Deste modo, pretende-se obter resultados consistentes com os encontrados na literatura, destacando aspectos interessantes do método proposto neste trabalho na simulação deste modelo de nadador.

Em um primeiro momento vamos considerar um nadador de 3 esferas conforme Figura 8, onde as longitudes dos links  $l_1$  e  $l_2$  (que vão desde o centroide  $x_c$  de uma esfera até o centroide da outra esfera consecutiva) variam no tempo satisfazendo  $2R < l - \varepsilon \leq l_1, l_2 \leq l$  com  $0 < \varepsilon < l$ . Dada uma determinada configuração (estado,  $s_n$ ), o nadador pode contrair, em um comprimento  $l_{\min} = 4R$ , ou se estender, em um comprimento  $l_{\max} = 10R$ , uma de suas hastes (ação,  $\alpha_n$ ) para se transformar do estado atual para um novo estado, realizando apenas uma única ação por vez.

Figura 8 – Modelo de micronadador de três esferas.



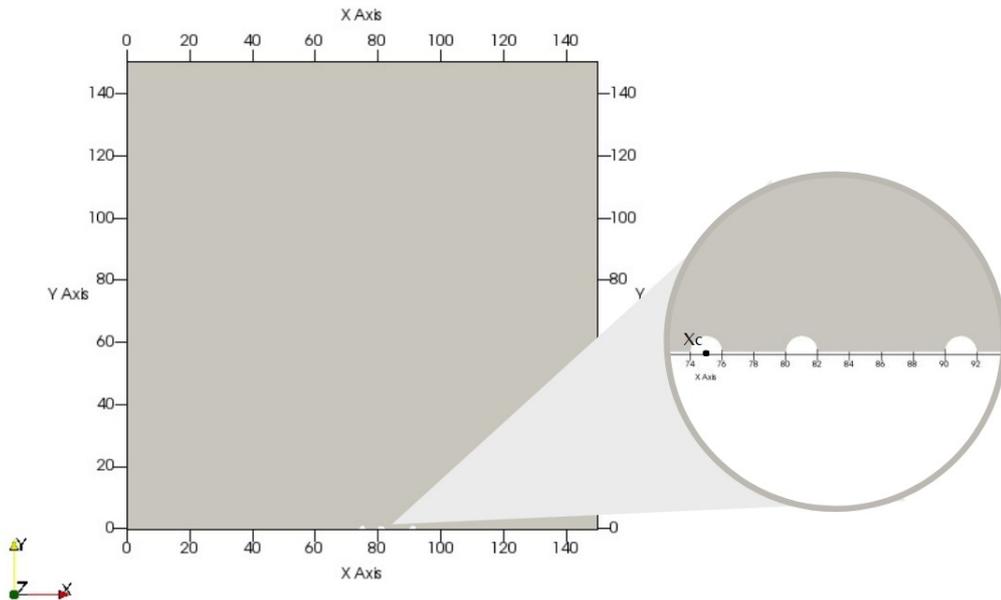
Fonte: Elaborada pelo autor.

A geometria do domínio de solução foi desenvolvida de forma a simular um meio infinito, em que não há interferência de paredes que possam influenciar no comportamento do fluxo de fluido, levando a efeitos como arrasto, separação de fluxo, perda de pressão, etc, como mostra a Figura 9. Assim, optamos por utilizar malhas não uniformes, com um refinamento maior próximo ao corpo do nadador onde os perfis de velocidade e pressão são mais significativos, o que reduz o custo computacional. A malha foi gerada, utilizando o software Gmsh como mencionado anteriormente, baseada em dois parâmetros de refinamento: o parâmetro  $h$  que define o tamanho dos elementos da malha próximo ao corpo do nadador, e o parâmetro  $lbod$  que define o tamanho dos elementos que estão mais distantes ao corpo do nadador.

Como ilustração, a Figura 10 mostra a malha (não estruturada), as linhas de corrente e contorno (próximos ao corpo do nadador) encontrados em uma simulação utilizando a formulação axissimétrica apresentada anteriormente em 2.3.3 para um nadador de três corpos esféricos. Os perfis de velocidade e pressão para um fluido newtoniano, podem ser vistos nas Figuras 11 e 12. A simulação foi realizada utilizando a malha da figura 10 e esquema de discretização temporal de segunda ordem apresentado em 2.5 com  $\Delta t = 0.01$ .

O modelo de Najafi-Golestanian foi proposto pelos autores como um mecanismo capaz

Figura 9 – Geometria do domínio de solução



Fonte: Elaborada pelo autor.

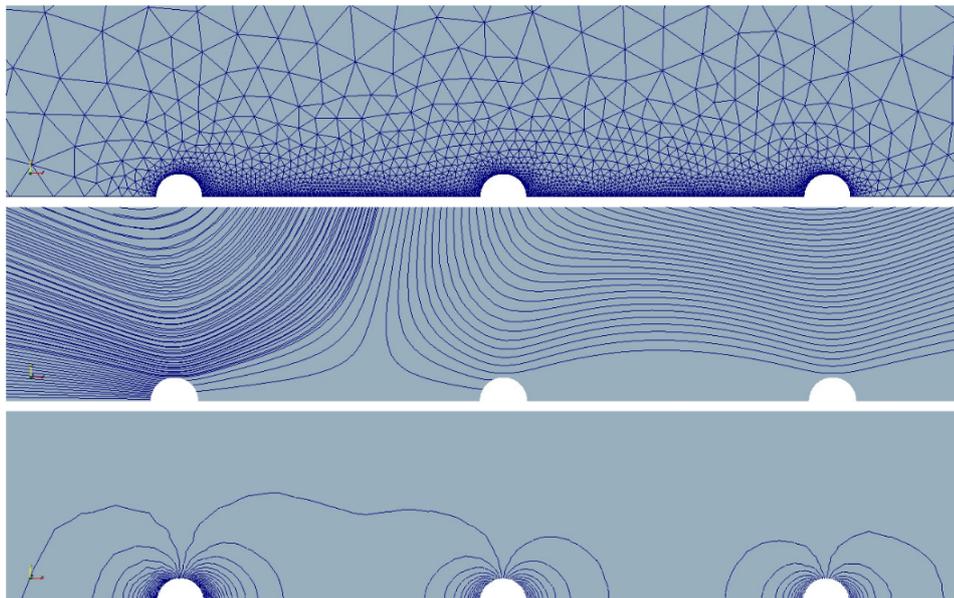
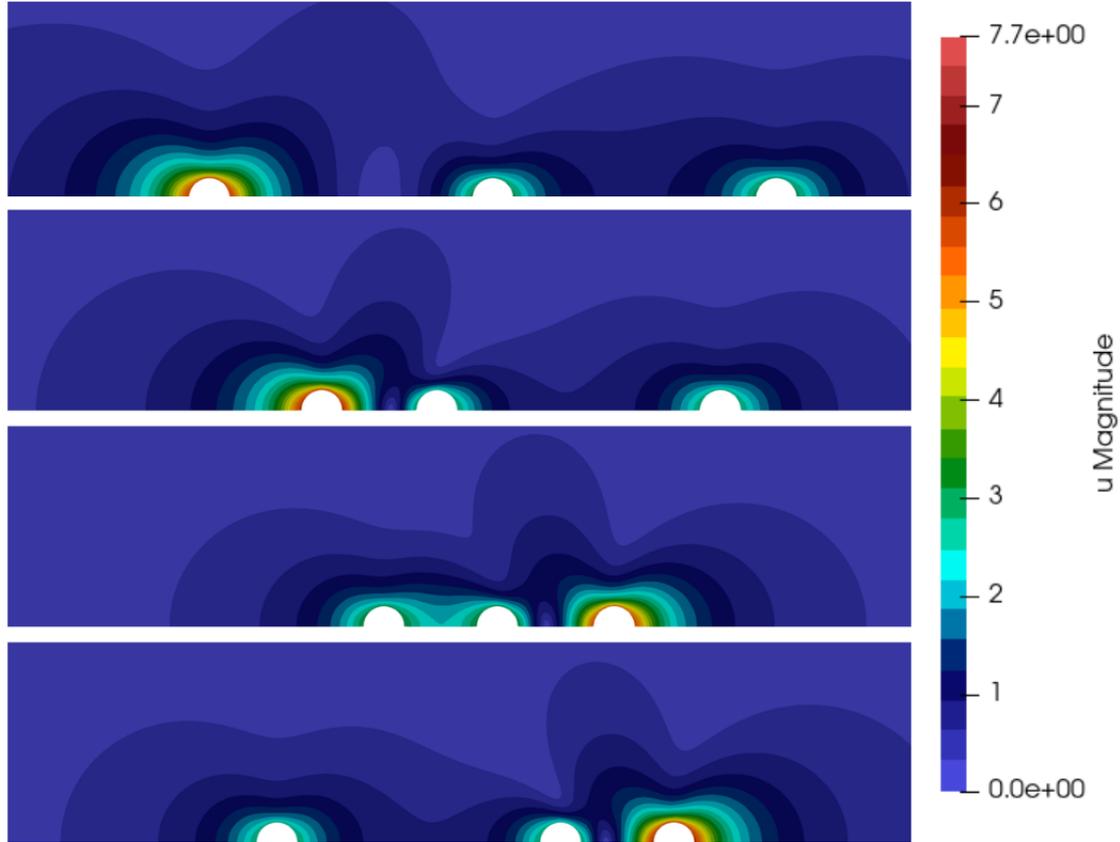


Figura 10 – Malha, Linhas de corrente e contorno encontrados em uma simulação de caso axissimétrico, para um nadador de 3 esferas.

nadar em baixos números de Reynolds, rompendo a simetria de reversão temporal através de um movimento periódico não recíproco. No caso do nadador de três esferas esse movimento é conhecido, sendo este caracterizado por um ciclo simples composto por quatro ações de extensão e contração de suas hastes. Ao executar este ciclo, o corpo do nadador têm um deslocamento na direção  $x$  que denotaremos por  $\Delta x_{\text{total}}$  calculado a partir do somatório dos pequenos

Figura 11 – Magnitude da velocidade para um fluido newtoniano de viscosidade  $\mu = 1$ , para os quatro estados possíveis de um nadador de três esferas.



Fonte: Elaborada pelo autor.

deslocamentos obtidos em cada uma das transições realizadas, isto é,

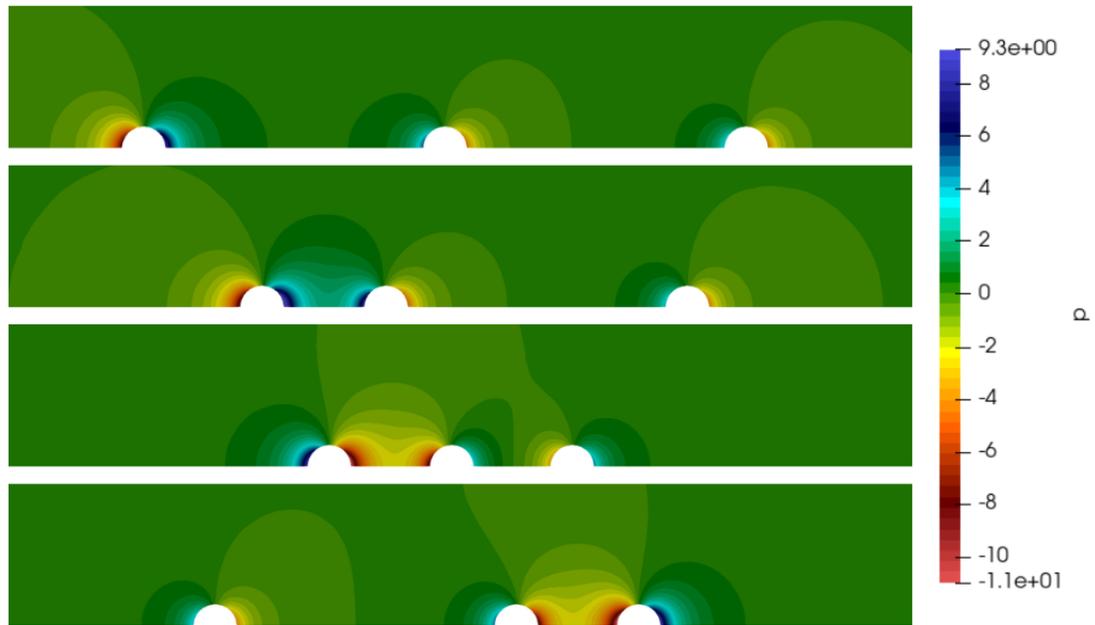
$$\Delta \mathbf{x}_{\text{total}} = \sum_{i=1}^m \Delta \mathbf{x}_i \quad (3.9)$$

em que  $m$  corresponde ao número de transições que compõe um ciclo. Alguns valores de deslocamentos encontrados em simulações para cada uma das quatro transições que compõem o ciclo ótimo de natação, são mostrados na Tabela 1, para um fluido newtoniano de viscosidade  $\mu = 1$  e também para um fluido não newtoniano (que será detalhado mais adiante).

A Figura 13 mostra como esse deslocamento,  $\Delta \mathbf{x}_{\text{total}}$ , varia em função da amplitude da braçada,  $\epsilon$ , para o ciclo de natação ótimo apresentado. Foram utilizadas duas soluções analíticas para validar os resultados numéricos obtidos com o método proposto neste trabalho. A primeira é dada por Najafi e Golestanian (NAJAFI; GOLESTANIAN, 2004a):

$$\Delta = 2.8R \left( \frac{\epsilon}{l_{\text{max}}} \right)^3 \quad (3.10)$$

Figura 12 – Pressão para um fluido newtoniano.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 1 – Deslocamento do corpo de referência para diferentes transições de um nadador de 3 esferas.

Transição	Fluido Newtoniano	Fluido Não Newtoniano
$S_3 a_0$	5.5728	5.7116
$S_1 a_1$	3.0448	2.8963
$S_0 a_0$	-5.3060	-5.4516
$S_2 a_1$	-2.7809	-2.6412
$\Delta \mathbf{x}_{Total}$	0.5306	0.5151

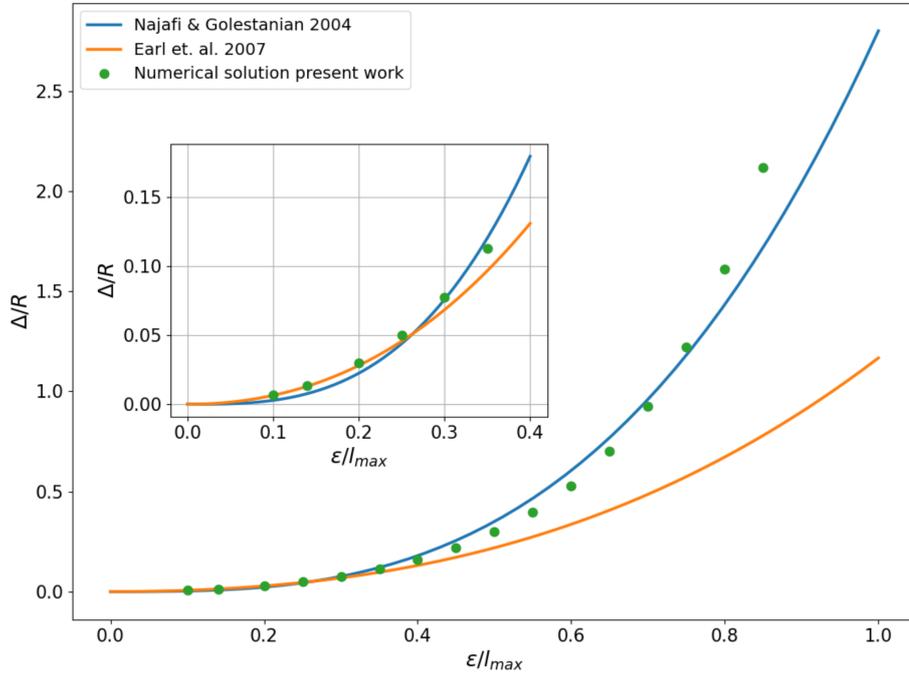
Fonte: Elaborada pelo autor.

em que o deslocamento  $\Delta$  é proporcional a  $\frac{\epsilon}{l_{max}}^3$ . E uma segunda dada por Earl et. al. (EARL *et al.*, 2007) :

$$\Delta = \frac{7}{12} R \left[ \left( \frac{\epsilon}{l_{max}} \right)^3 + \left( \frac{\epsilon}{l_{max}} \right)^2 \right] \quad (3.11)$$

Note que quanto maior é a amplitude de braçada, mais próximos das soluções analíticas os resultados numéricos se tornam, isto é, quanto mais afastadas as esferas estão uma das outras, menor se torna o erro numérico obtido nas simulações. Além disso, nota-se que a medida em que a amplitude de braçada diminui, as soluções analíticas vão se diferenciando, sendo a solução numérica mais próxima da solução dada por Najafi e Golestanian.

Figura 13 – Deslocamento do nadador após realizar um ciclo ótimo,  $\Delta$  em função da amplitude de braçada,  $\epsilon$ . A inserção mostra uma ampliação da região do gráfico para valores abaixo de  $\epsilon/l_{max} = 0.4$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Como mencionado anteriormente, a formulação proposta em 2.3 permite que reologias não newtonianas sejam simuladas, como é o caso dos fluidos Newtonianos generalizados citados no início do Capítulo 2. Esse tipo de fluido possui natureza não newtoniana, ou seja, não linear mas sua equação constitutiva é uma forma generalizada do fluido newtoniano, satisfazendo a seguinte equação reológica:

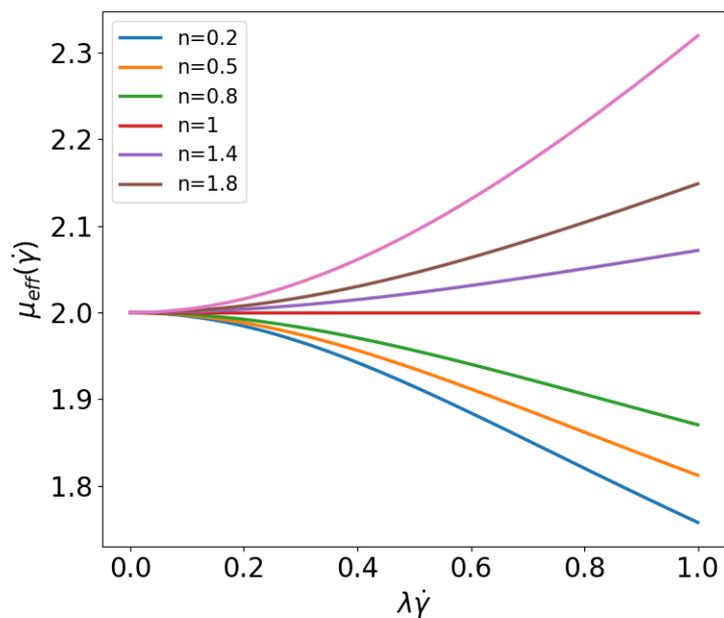
$$\tau = \mu_{\text{eff}}(\dot{\gamma})\dot{\gamma} \quad (3.12)$$

onde  $\tau$  representa a tensão de cisalhamento e  $\dot{\gamma}$  é a taxa de cisalhamento dada pela Equação 2.4. As figuras 16 e 15 ilustram a viscosidade, magnitude da velocidade e pressão, para um nadador de três esferas, no início e ao final de uma transição, respectivamente, para um fluido newtoniano generalizado conhecido como fluido de *Carreau*, onde a viscosidade,  $\mu_{\text{eff}}$ , é dada por

$$\mu_{\text{eff}}(\dot{\gamma}) = \mu_{\text{inf}} + (\mu_0 - \mu_{\text{inf}})(1 + (\lambda\dot{\gamma})^2)^{\frac{n-1}{2}} \quad (3.13)$$

em que  $\mu_{\text{inf}}$ ,  $\mu_0$ ,  $\lambda$  e  $n$  são coeficientes materiais. A simulação foi realizada utilizando as mesmas discretizações espacial e temporal mencionadas no caso newtoniano, utilizando como parâmetros:  $\mu_{\text{inf}} = 1$ ;  $\mu_0 = 2$ ;  $\lambda = 1$  e  $n = 0.5$ . Os valores para o deslocamento  $\Delta x$  encontrados, foram apresentados anteriormente na Tabela 1.

Figura 14 – Caption



Fonte: Elaborada pelo autor.

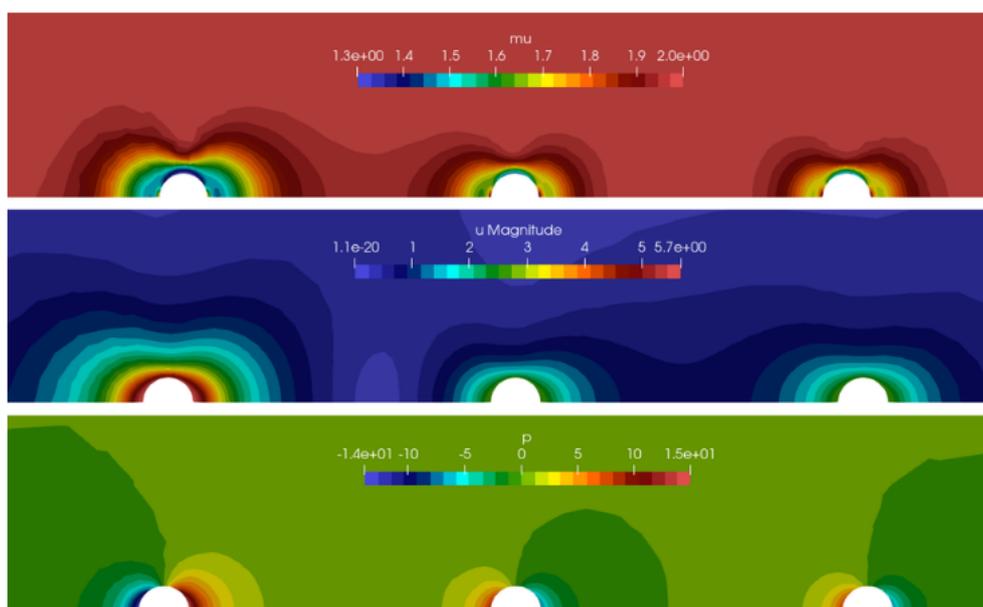


Figura 15 – Viscosidade, Magnitude de velocidade e pressão para um fluido não newtoniano em torno do nadador de 3 esferas, no início de uma transição.

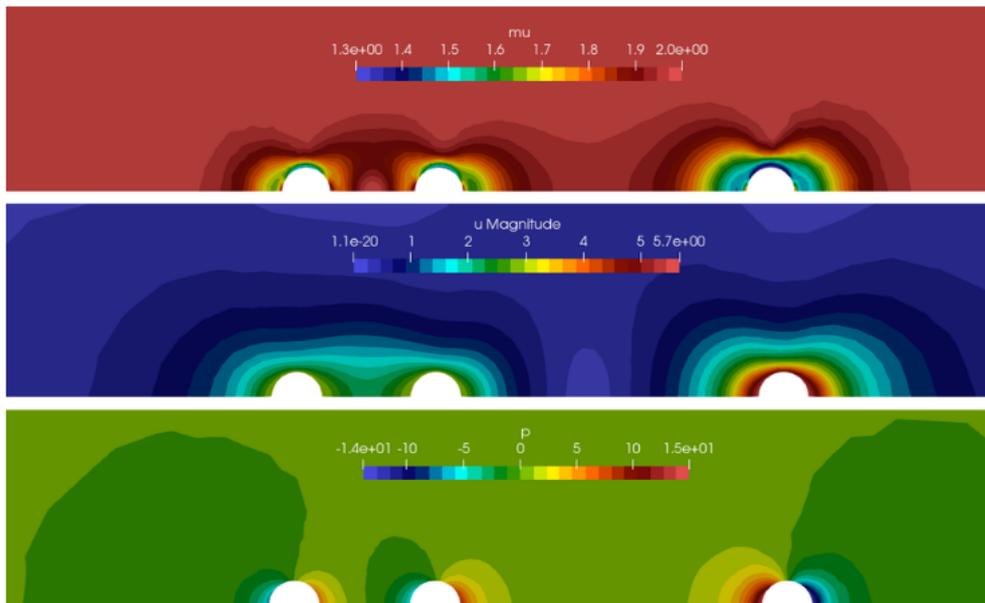


Figura 16 – Viscosidade, Magnitude de velocidade e pressão para um fluido não newtoniano em torno do nadador de 3 esferas, ao final de uma transição.

A seguir apresentaremos alguns resultados que permitem avaliar os efeitos da discretização espacial discutida em 2.4 e da discretização temporal apresentada em 2.5, na precisão com que as informações apresentadas são obtidas. Ficaremos restritos apenas a reologia newtoniana.

### 3.2.2 Estudos da precisão numérica

A obtenção de soluções numéricas precisas e confiáveis envolve desafios significativos, especialmente quando estamos lidando com a discretização do domínio espacial e temporal, como é o caso deste estudo. Conforme discutido na Seção 2.4, para resolver o problema de interação fluido-nadador foram introduzidas ao processo de solução algumas ferramentas de movimentação e reconstrução da malha computacional, o que incorpora à solução erros inerentes da discretização do problema de elasticidade linear, tornando ainda mais desafiador a obtenção de soluções confiáveis.

Neste contexto, a análise de convergência e a avaliação dos erros numéricos desempenham um papel crucial, permitindo avaliar o comportamento das soluções obtidas, à medida que reduzimos o tamanho dos intervalos discretos, e atestar se estas estão realmente convergindo para a solução desejada. Esta análise não apenas valida a abordagem numérica escolhida, mas também fornece informações cruciais sobre a eficácia do método e sua capacidade de reproduzir de maneira confiável o comportamento físico do sistema modelado. Além disso, compreender a natureza e a magnitude dos erros introduzidos pelos métodos numéricos nos permite adotar medidas para controlá-los e melhorar a precisão das soluções obtidas assegurando, assim, a sua confiabilidade.

Dado que estamos lidando com um problema de natureza complexa que não admite uma solução analítica, empregaremos uma abordagem que envolve uma discretização, em ambos os domínios espacial e temporal, com níveis de refinamento significativos, e esta será utilizada como nossa solução de referência, denominada  $S_{ref}$ . A partir dela, calcularemos os erros numéricos utilizando a seguinte fórmula para determinar o erro relativo:

$$|E_r| = \frac{|S_{ref} - S|}{|S_{ref}|} \quad (3.14)$$

em que  $S$  é a solução na malha a ser analisada. Ambas as soluções são tomadas ao final da realização de uma transição. Serão analisados as soluções obtidas para a velocidade de translação  $v$  e o deslocamento  $\Delta x$  do corpo de referência do nadador de Najafi-Golestanian.

As análises de convergência espacial foram realizadas utilizando cinco malhas formadas por elementos de tamanho  $h$  distintos conforme apresentado na Tabela 2, onde também pode-se observar alguns dados em relação ao custo computacional das simulações realizadas como o tempo de cálculo para um passo de tempo e também para um ciclo ótimo de nado, do método de segunda ordem escolhido, considerando a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha, que denominaremos *MeshQuality*, apresentada anteriormente em 2.4.2. Foram resolvidos 100 passos de tempo ( $\Delta t = 0.01$ ) do esquema de discretização temporal de segunda ordem apresentado em 2.5, para cada uma das quatro transições, de modo a amenizar a contribuição dos erros de discretização temporal na solução. Como solução de referência consideramos a solução obtida com uma malha computacional com parâmetro de refinamento  $h = 2 \times 10^{-3}$  (Ver Tabela 2). Esta mesma malha foi fixada para as análises de convergência do esquema de discretização temporal de segunda ordem discutido, também, com o intuito de amenizar a contribuição dos erros de discretização espacial na solução e utilizado como solução de referência a solução obtida para  $\Delta t = 0.001$  (1000 passos de tempo para cada transição).

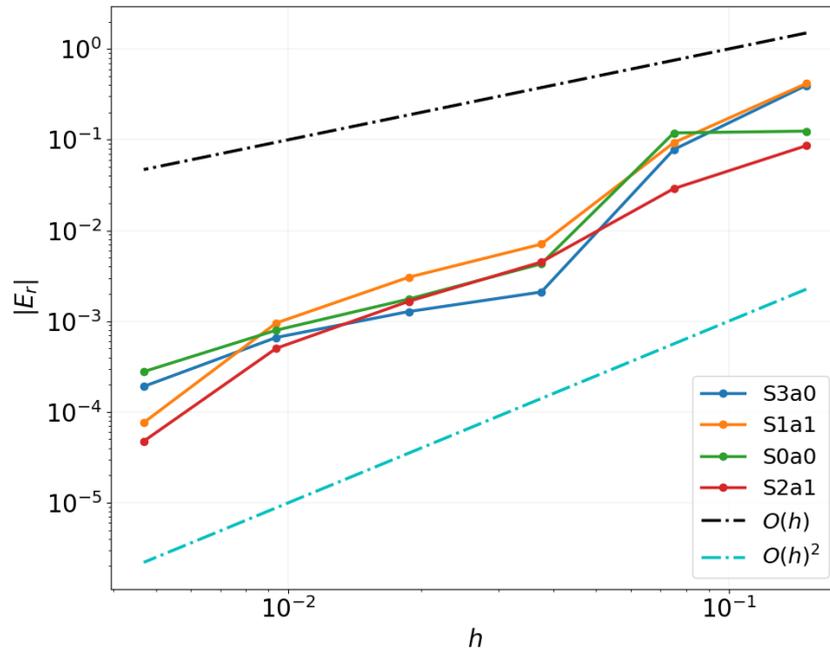
Tabela 2 – Caption

Malha	1	2	4	4	5	Referência
$h$	0.0750	0.0375	0.0188	0.0094	0.0047	0.0023
$l_{car}$	37.5	18.75	9.38	4.69	2.34	1.17
Número de elementos (inicial)	814	3527	6068	22398	77873	240491
Número de incógnitas do sistema	485	1910	3315	11755	40043	122454
Tempo de cálculo para um passo de tempo (s)	0.40	0.91	0.97	2.93	12.24	42.67
Tempo de cálculo para um ciclo ótimo (s)	162.41	365.46	389.56	1170.46	4895.75	17068.40

\*Simulações realizadas utilizando um processador Intel(R) Core(TM) i7-7700K CPU @ 4.20GHz.

Em relação à convergência espacial, considerando a estratégia *MeshQuality*, verificou-se que, para as quatro transições que compõe o ciclo ótimo de nado, tanto o deslocamento quanto a velocidade de translação apresentam erros de  $10^{-1}$  para a malha mais grosseira podendo chegar a  $10^{-4}$  para a malha mais refinada, consideradas, como mostram os gráficos das Figuras 17 e 20. Considerando que o remalhamento seja realizado em todos os passos de tempo (*AllTime*), temos que os resultados são similares aos encontrados com a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha, como mostram as Figuras 18 e 21.

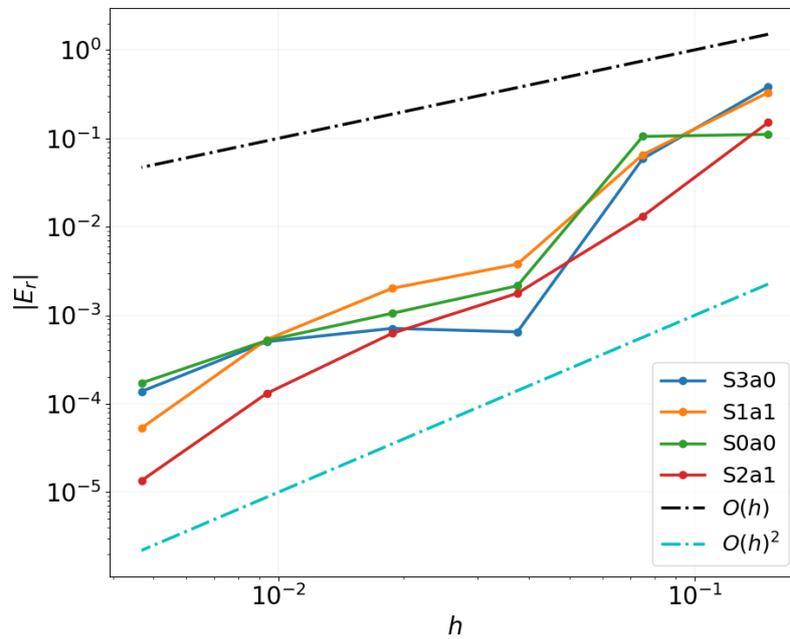
Figura 17 – Convergência em malha do deslocamento do corpo de referência  $\Delta x$  de um nadador de três esferas, considerando a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha (MeshQuality), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

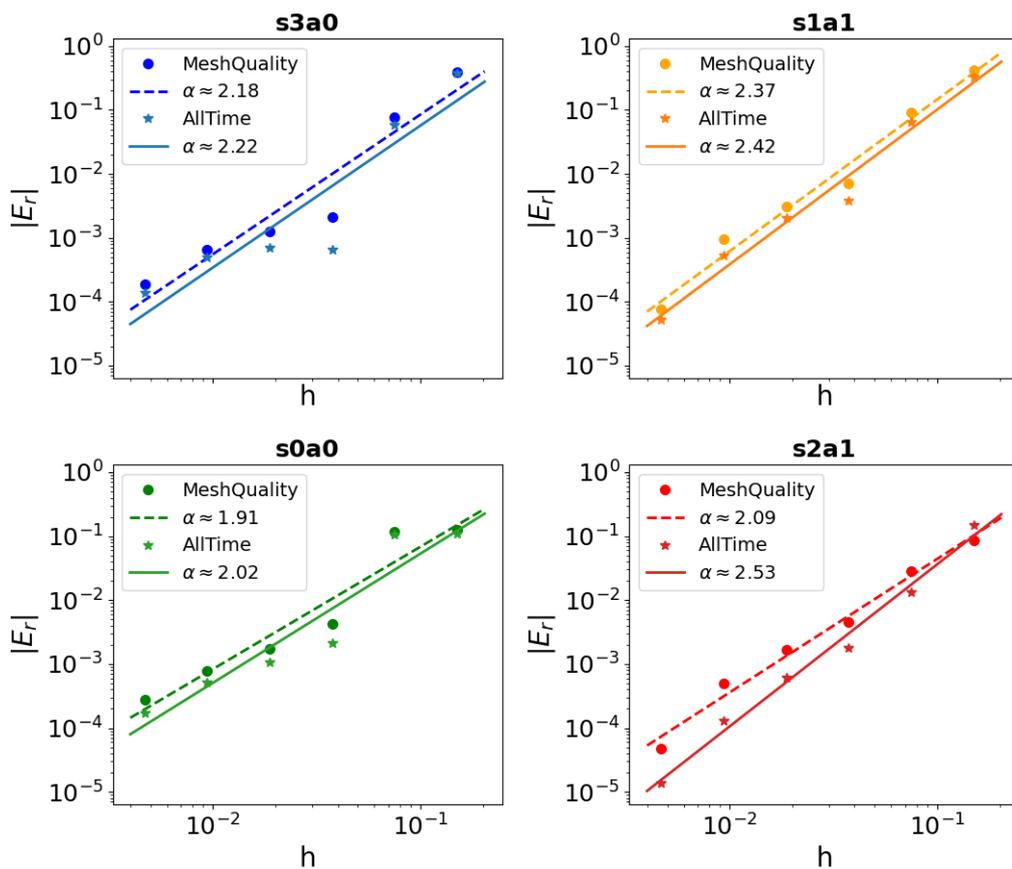
Para atestar a ordem de convergência dos resultados, foi realizado um ajuste não linear dos dados utilizando o Método dos Mínimos Quadrados (MMQ). A inclinação  $\alpha$  da reta obtida pelo MMQ fornece então uma aproximação para a ordem de convergência atingida. Os resultados obtidos mostram que, as quatro curvas de erros apresentam uma ordem de convergência próxima de  $O(h^2)$  (ordem 2) como mostram os gráficos das Figuras 19 e 22. Note que os valores de  $\alpha$  são próximos de dois.

Figura 18 – Convergência em malha do deslocamento do corpo de referência  $\Delta x$  de um nadador de três esferas, considerando o remalhamento em todos os passos de tempo (AllTime), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.



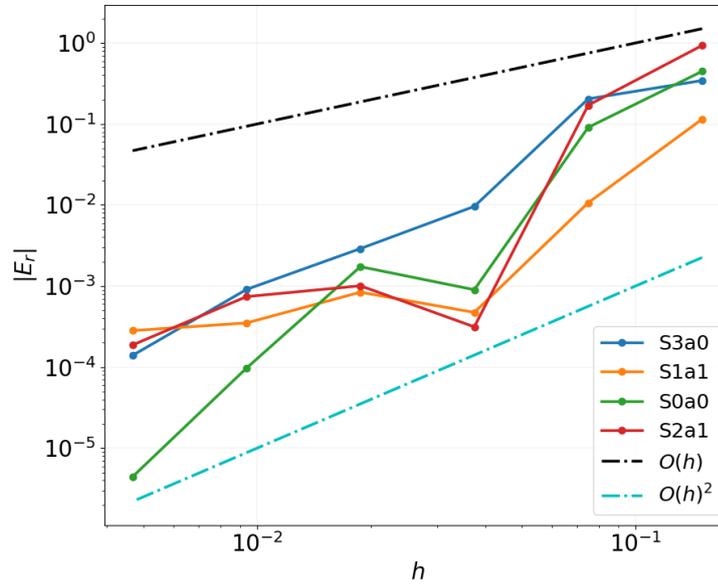
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 19 – Ajuste dos dados do deslocamento  $\Delta x$  do corpo de referência, de uma nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado, utilizando duas abordagens de remalhamento. As retas obtidas tem inclinação  $\alpha$ .



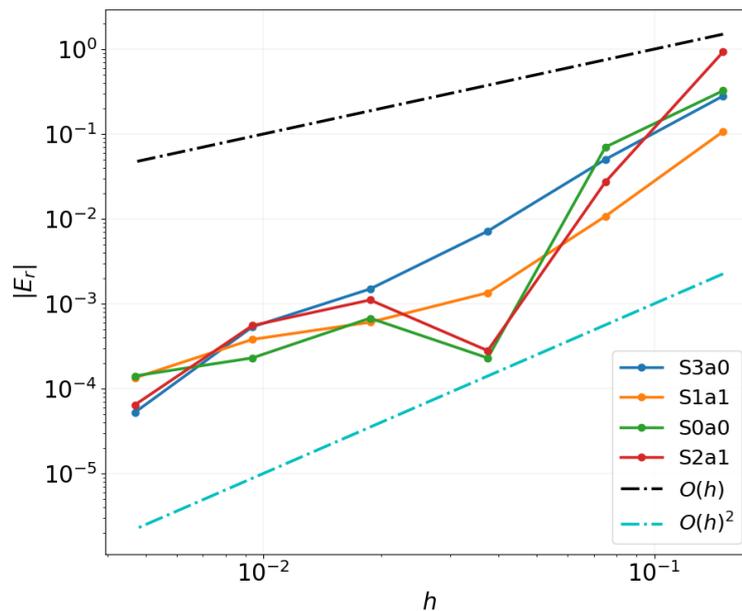
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 20 – Convergência em malha do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (MeshQuality) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.



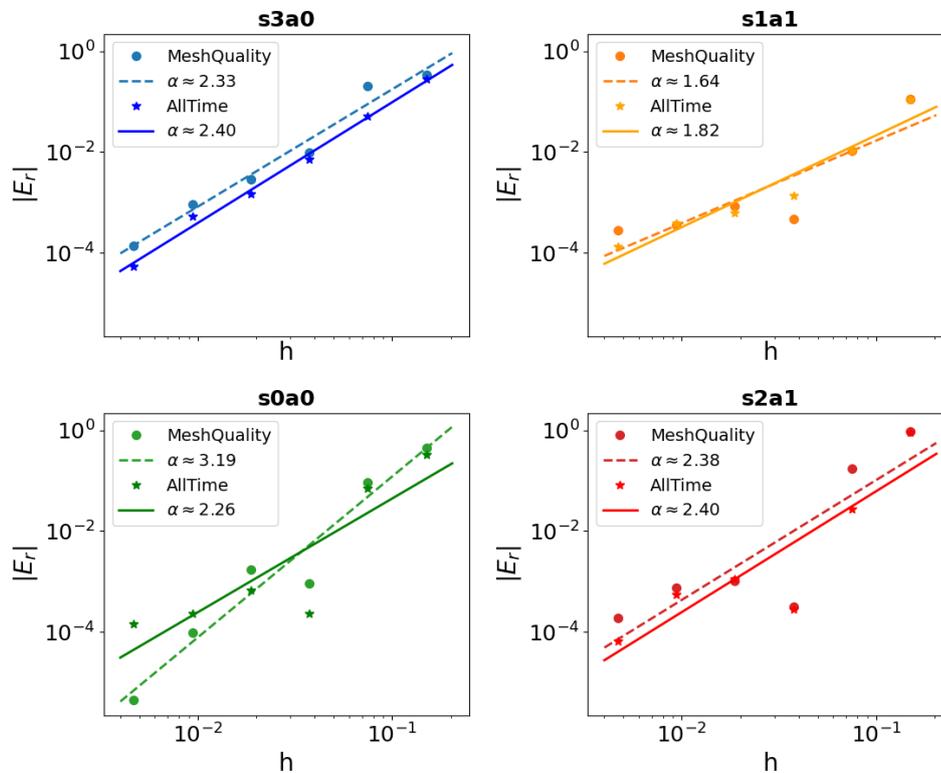
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 21 – Convergência em malha do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (AllTime) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 22 – Ajuste dos dados da velocidade de translação do corpo de referência, de um nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado. As retas obtidas tem inclinação  $\alpha$ .



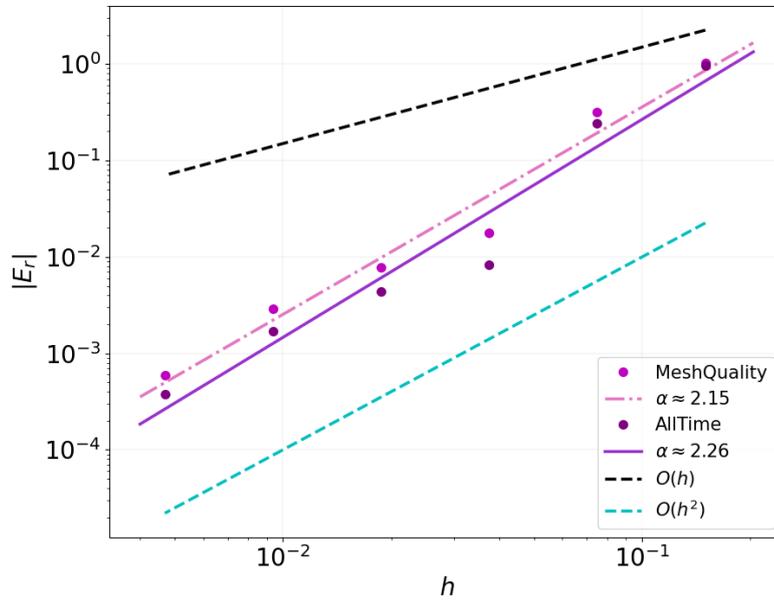
Fonte: Elaborada pelo autor.

Considerando que o nadador realize um ciclo ótimo de nado, o erro de discretização espacial para o deslocamento, do corpo de referência do nadador, pode chegar a  $10^{-3}$  para a malha mais refinada considerada, como mostra o gráfico da Figura 23. A reta obtida por MMQ possui uma inclinação de aproximadamente 1.82, o que sugere uma convergência de  $O(h^2)$  (ordem 2).

Em relação a convergência temporal, temos que os resultados para o erro em relação ao deslocamento, considerando as duas estratégias de remalhamento, são similares e os erros podem chegar a uma ordem de  $10^{-5}$  se considerarmos o menor passo de tempo ( $\Delta t = 0.025$ ) como pode ser visto nos gráficos das Figuras 24 e 25. Fazendo um ajuste de curvas pelo MMQ, os gráficos da Figura 26 sugerem uma convergência quadrática dos erros (ordem 2). Porém, considerando que o nadador realize um ciclo ótimo de nado, essa convergência decai para ordem 1 como mostra a Figura 27.

Se considerarmos, agora, os resultados para o erro em relação à velocidade de translação, temos que estes são maiores se comparados aos erros encontrados para o deslocamento, podendo chegar a uma ordem de  $10^{-3}$  se considerarmos o menor passo de tempo ( $\Delta t = 0.025$ ). Isso ocorre para as duas estratégias de remalhamento, como pode ser visto nos gráficos das Figuras

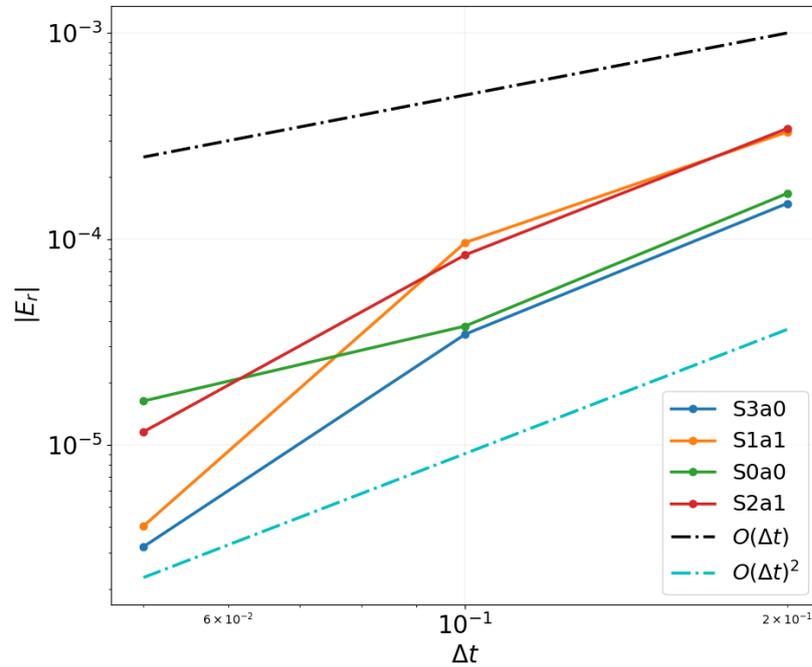
Figura 23 – Convergência em malha do erro relativo para o deslocamento total de um ciclo ótimo de nado. As retas obtidas pelo Método dos Mínimos Quadrados tem inclinação  $\alpha$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

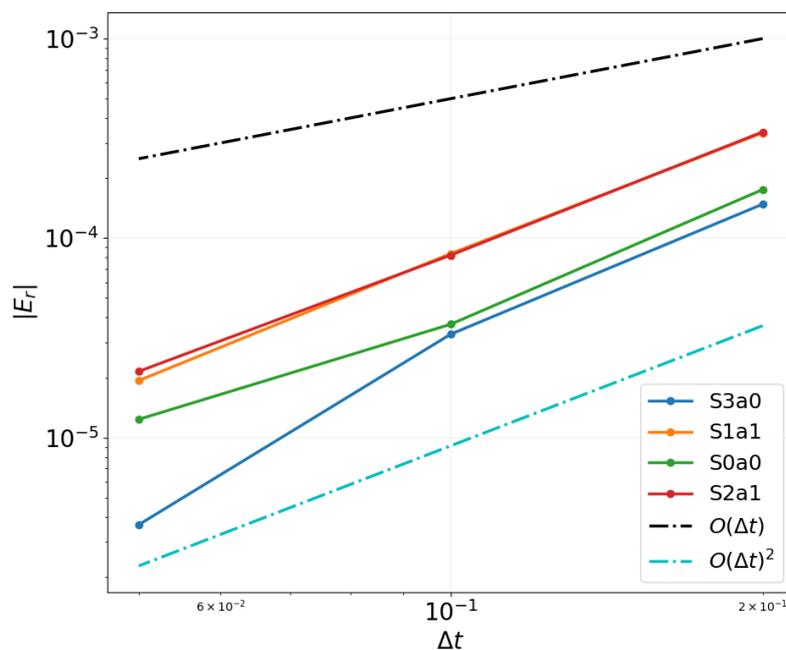
28 e 29. Além disso, as curvas obtidas pelo MMQ sugerem ordem 1 de convergência, como mostram os gráficos da Figura 30.

Figura 24 – Convergência em passo de tempo do deslocamento do corpo de referência  $\Delta x$  de um nadador de três esferas, considerando a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha (MeshQuality), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.



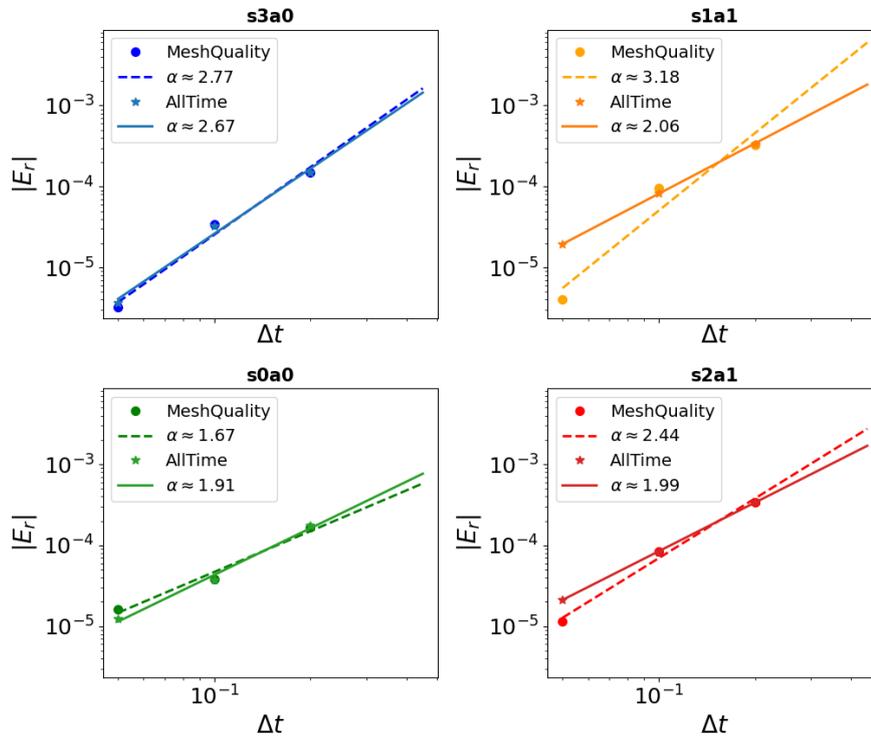
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 25 – Convergência em passo de tempo do deslocamento do corpo de referência  $\Delta x$  de um nadador de três esferas, considerando o remalhamento em todos os passos de tempo (AllTime), para as quatro transições que compõe ciclo ótimo de nado.



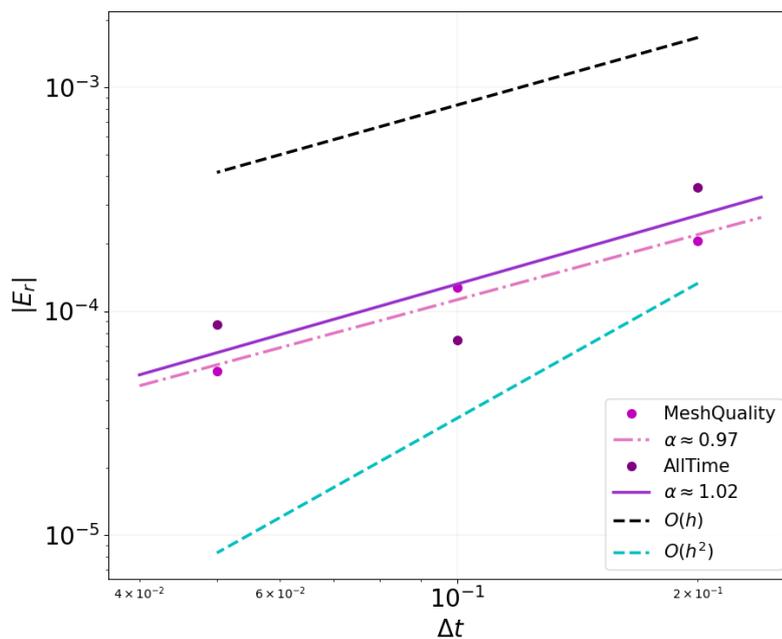
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 26 – Ajuste dos dados do deslocamento  $\Delta x$  do corpo de referência, de uma nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado, utilizando duas abordagens de remalhamento. As retas obtidas tem inclinação  $\alpha$ .



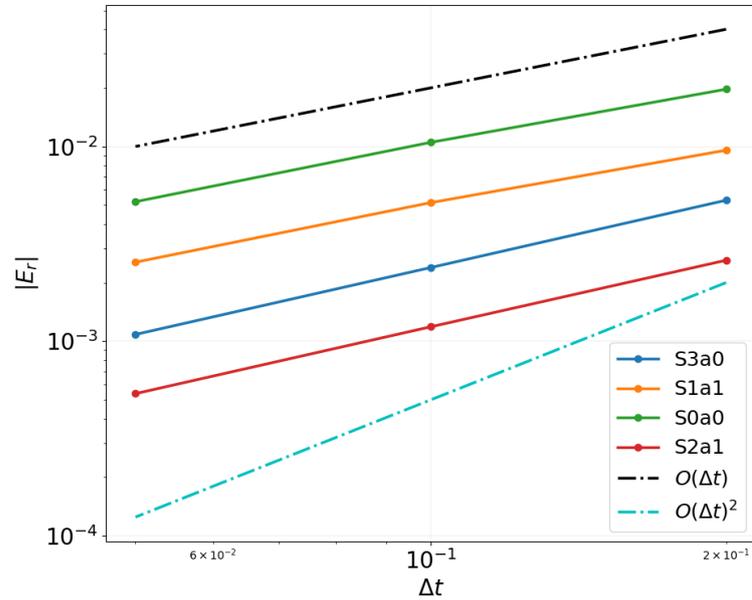
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 27 – Convergência em passo de tempo do erro relativo para o deslocamento total de um ciclo ótimo de nado. As retas obtidas pelo Método dos Mínimos Quadrados tem inclinação  $\alpha$ .



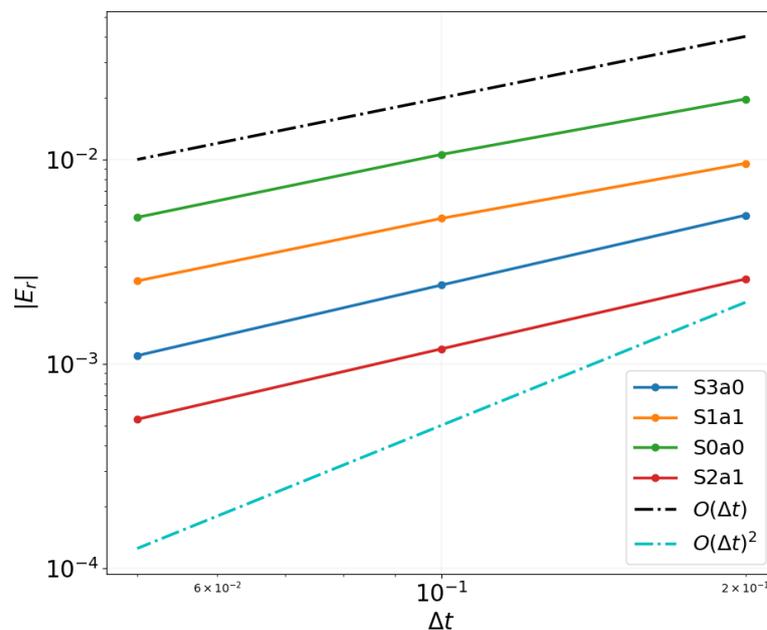
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 28 – Convergência em passo de tempo do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (MeshQuality) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.



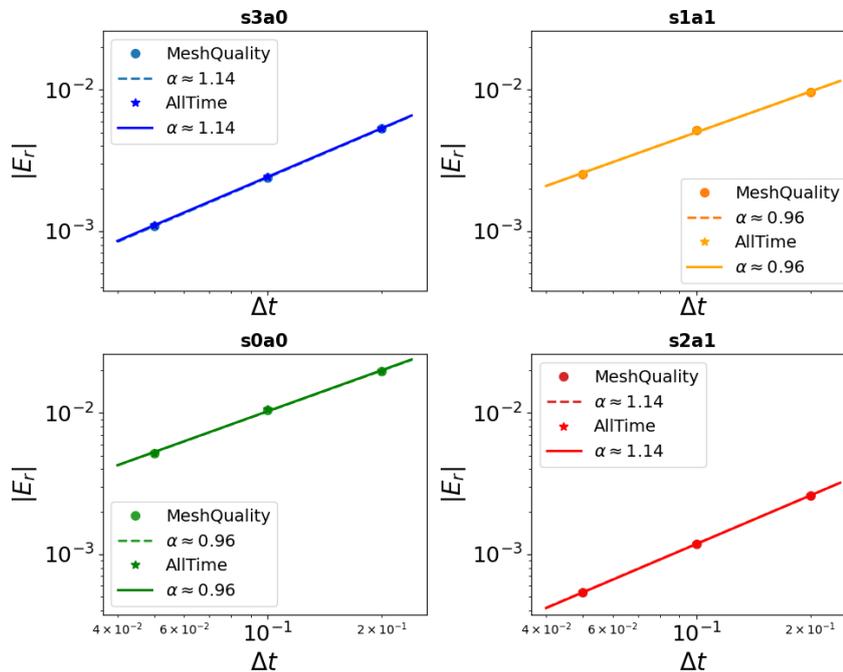
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 29 – Convergência em passo de tempo do erro relativo da velocidade de translação do corpo de referência, (AllTime) de um nadador de três esferas, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 30 – Ajuste dos dados da velocidade de translação do corpo de referência, de um nadador de três esferas, pelo Método dos Mínimos Quadrados, para as quatro transições que compõem o ciclo ótimo de nado. As retas obtidas tem inclinação  $\alpha$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 3.2.3 Nadador do tipo Snake

Além de nadadores formados por esferas unidas por braços ou *links* extensionais, como é o caso apresentado anteriormente do nadador de Najafi-Golestanian, onde se definia graus de liberdade configuracionais internos sobre os quais era possível atuar através de um conjunto discreto de ações (abertura ou fechamento dos braços), a formulação proposta permite considerar problemas mais complexos. Um exemplo de interesse neste trabalho, consiste de um nadador formado por corpos mais gerais (capsulas, elipses, etc.), unidos por *links* articulados, que, além de mudar o seu comprimento, possam também rotacionar com respeito a um ponto, o que denominaremos por *Snake* ( Figura 31).

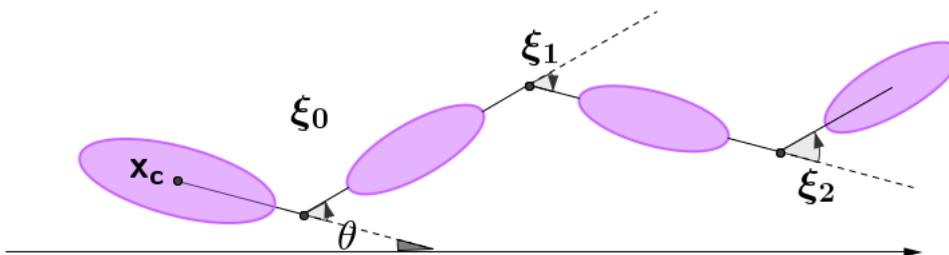


Figura 31 – Modelo de micronadador de quatro corpos mostrando as coordenadas posicionais e configuracionais. O corpo de referência possui um tamanho 0.5 (eixo maior) e 0.05 (eixo menor) maior em relação aos demais corpos.

O nadador do tipo Snake é constituído por  $n$  corpos elípticos de mesmo tamanho exceto pelo corpo de referência, o qual denominamos por cabeça do nadador, que possui um tamanho maior (ver Figura 31). Esses corpos estão unidos por  $n - 1$  *links* que se comportam como articulações, podendo variar seu ângulo interno entre um valor mínimo e máximo ( $\xi_m, \xi_M$ ), responsáveis por realizar o movimento do nadador. O movimento destes links é imposto e a critério de simplificação, vamos considerar *links* extensionais fixos, ou seja, suas hastes não realizam ações de se estender ou contrair. Neste caso, os graus de liberdade configuracionais estão relacionados apenas com os ângulos internos entre os links, os quais assumem valores discretos mas poderiam variar de maneira contínua entre um valor mínimo e um valor máximo.

Assim como o nadador de Najafi, o sistema do *Snake* possui  $2^{n-1}$  configurações possíveis (estados distintos) e pode realizar  $n - 1$  ações de ativação de *links*, podendo assim fazer  $2^{n-1}(n - 1)$  transições de ângulos, passando de  $\xi_{\min}$  para  $\xi_{\max}$  ou vice-versa, dado seu estado inicial. Note que, o número de transições possíveis aumenta significativamente com o aumento do número de corpos. Assim, para que seja possível um estudo detalhado desse modelo vamos considerar, a princípio, um micronadador de quatro corpos elípticos conforme ilustra a Figura 31, e posteriormente alguns resultados com mais corpos serão incorporados.

Para simplificar e facilitar a representação dos estados "s" e ações "a", vamos utilizar a notação  $s = \alpha = [l_0, l_1, l_2]$  em que  $l_0, l_1$  e  $l_2$  podem assumir os valores zero ou um. No caso dos estados, 0 significa que o link se encontra em  $\xi_{\min}$  e 1 que ele está em  $\xi_{\max}$ , e no caso das ações, 0 significa que o link continuará fixo e 1 que ele será ativado. Logo, os estados (ilustrados pela Figura 32) e ações possíveis são:

$$\begin{aligned} s_0 &= [0, 0, 0] & s_1 &= [0, 0, 1] & s_2 &= [0, 1, 0] & s_3 &= [0, 1, 1] \\ s_4 &= [1, 0, 0] & s_5 &= [1, 0, 1] & s_6 &= [1, 1, 0] & s_7 &= [1, 1, 1] \\ \alpha_0 &= [1, 0, 0] & \alpha_1 &= [0, 1, 0] & \alpha_2 &= [0, 0, 1] \end{aligned}$$

Cada par de ação estado define uma transição que representaremos por  $s_i \alpha_j$ , com  $i = 0, 1, \dots, 7$  e  $j = 0, 1, 2$ .

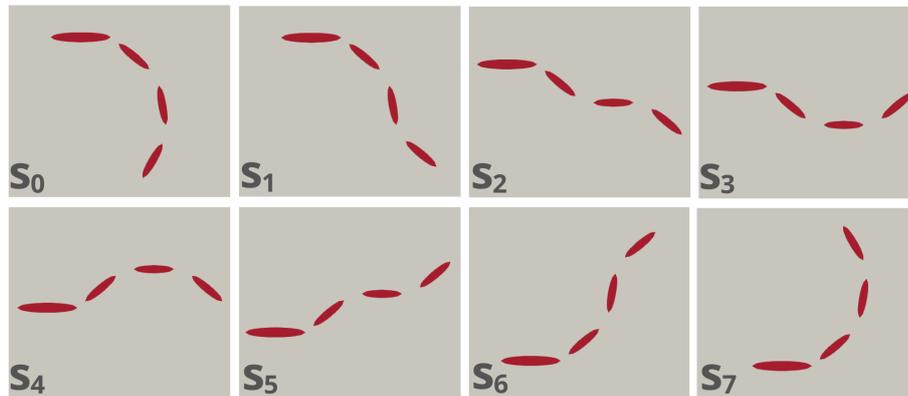


Figura 32

A Figura 33 ilustra o campo de velocidade para um nadador de quatro corpos no início meio e ao final de um movimento para diferentes valores de  $\xi$ , utilizando a malha computacional da figura 34 e passo de tempo  $\Delta t = 0.025$ . Neste caso em específico o nadador encontra-se no estado  $s_7$ , isto é, inicialmente com todos os links fixados em  $\xi_M$ , e executa a ação  $\alpha_2$ , ou seja, ele realiza a ativação do link  $l_2$  que se encontra na extremidade oposta a cabeça do nadador que passa de  $\xi_M$  para  $\xi_m$ . Com isso, a nova configuração do nadador é dada pelo estado  $s_6$ . Note que o valor máximo que  $\xi$  pode assumir é um ângulo de 90 graus pois para valores maiores a geometria da cabeça interceptaria a geometria do corpo que se encontra na outra extremidade.

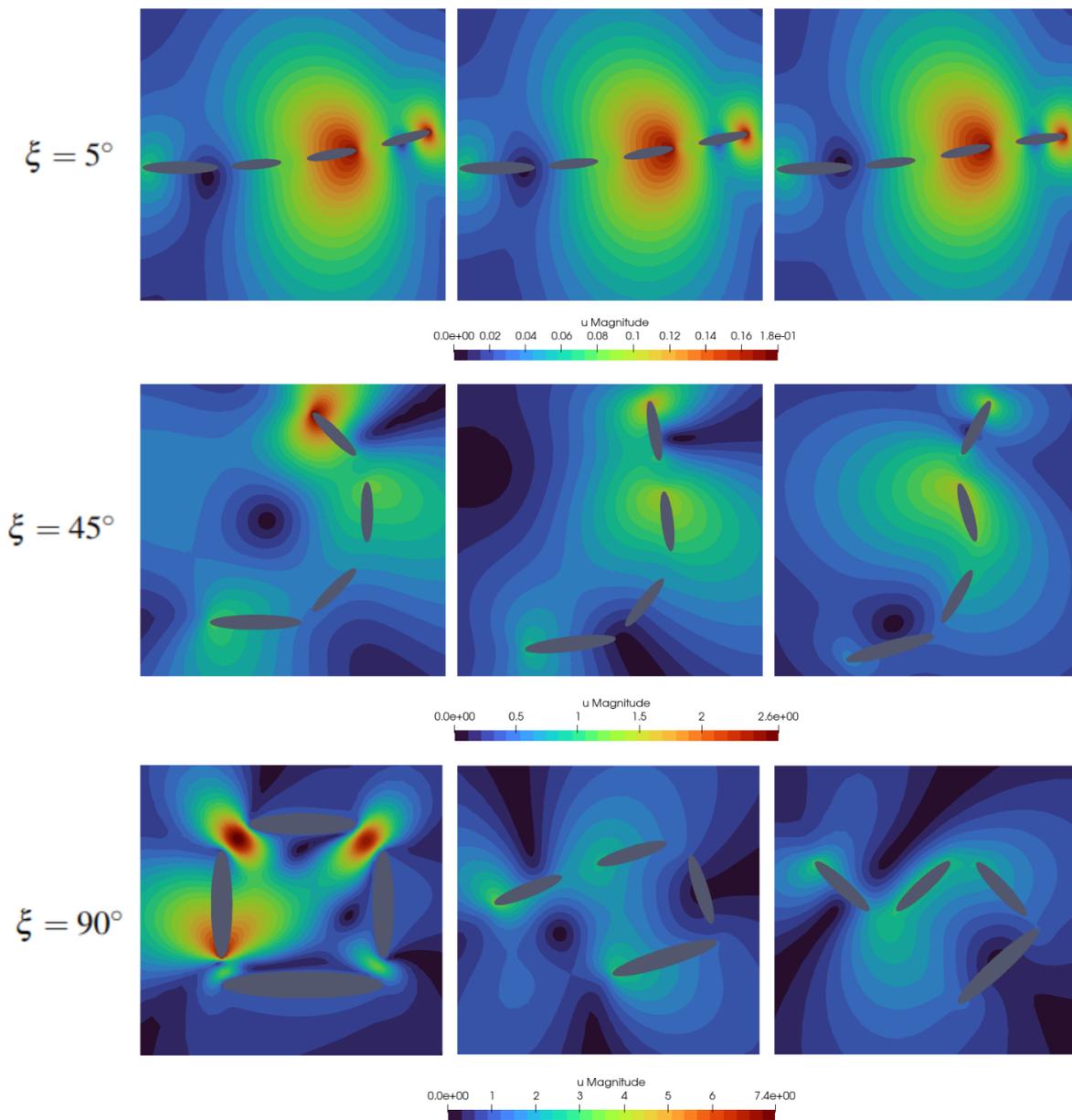


Figura 33 – Velocidade próximo ao corpo de um nadador de quatro corpos no início, meio e final de um movimento (transição  $s_7\alpha_2$ ), para três valores de  $\xi$ .

Dado um determinado estado, vamos considerar que o nadador pode ativar unicamente um dos *links* por vez para executar uma determinada ação, fazendo assim transições de um estado para outro. Por exemplo, se o nadador encontra-se no estado  $s_0$  e executa a ação  $a_0$  ele passa a estar, agora, no estado  $s_4$ , ou se ele está no estado  $s_3$  e executa a ação  $a_1$  ele passa a estar no estado  $s_1$ .

Cada ação que o nadador realiza gera um certo deslocamento líquido do nadador nas direções  $x$  e  $y$  e uma certa rotação em relação a um referencial de rotação. Estes são os denominados graus de liberdade posicionais, os quais serão denotados por

$$\mathbf{p}(t) = [x(t), y(t), \theta(t)]^T$$

Seguindo o apresentado em 2.1, o deslocamento é calculado tomando como referencia o centroide da cabeça do nadador, ou seja, o quanto o centroide se descolou nas direções  $x$  e  $y$  e em relação ao referencial de rotação e será denotado por  $[\Delta x(t), \Delta y(t), \Delta \theta(t)]^T$  que são calculados simplesmente tomando a posição inicial e a posição final no final da ação, i.e.,

$$\Delta \mathbf{p} = \mathbf{p}(T_f) - \mathbf{p}(T_i)$$

Considerando que o objetivo do nadador é aprender a se locomover em um determinado ambiente fluido, é necessário entender como se dá o seu deslocamento nesse ambiente, o que interfere diretamente nas escolhas das etapas de aprendizagem, isto é, se um nadador quer se deslocar para a direita ou esquerda, rotacionar em sentido horário ou anti-horário, etc. ele precisará escolher ações que o levem a atingir esse objetivo. De modo consequente, para entender o comportamento de  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  e  $\Delta \theta$  foram realizadas simulações, para cada uma das 24 transições possíveis, fixando o estado inicial e resolvendo as equações governantes ao longo de uma ação, para diferentes valores de  $\xi$ , entre 5 e 90 graus. Os parâmetros de discretização utilizados foram a malha da Figura 34 e passo de tempo  $\Delta t = 0.025$ . Os resultados obtidos estão apresentados a seguir nas Figuras 35, 36 e 39.

A critério de comparações entre os valores obtidos em cada uma das transições, estamos considerando o valor do deslocamento em módulo. Os valores positivos e negativos definem apenas a direção e sentido do movimento a ser realizado pelo nadador, contudo devem ser considerados nas etapas de aprendizado conforme o objetivo a ser alcançado.

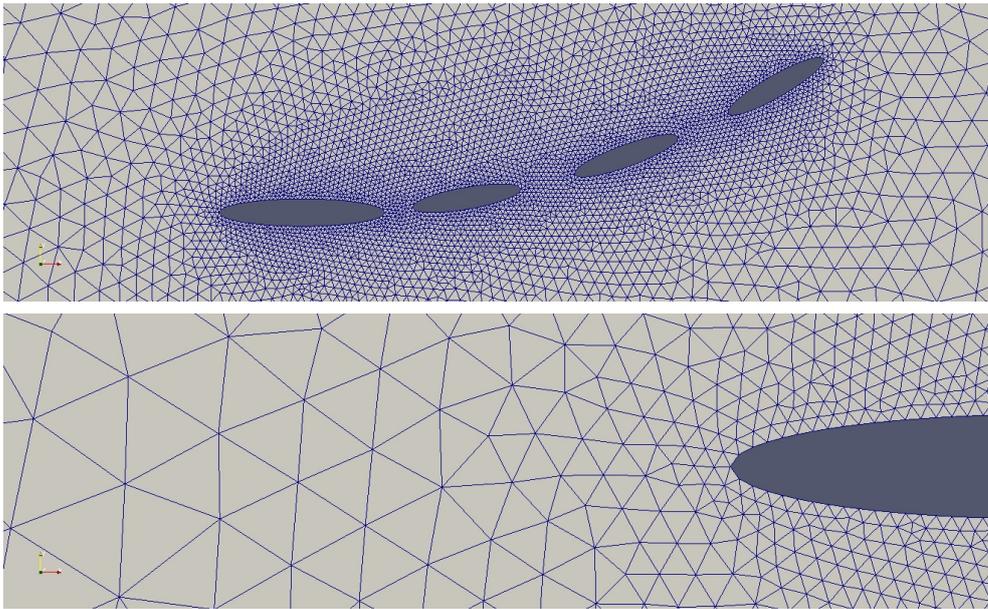


Figura 34 – Malha computacional não uniforme com 23244 elementos triangulares e 11841 pontos. O refinamento é realizado próximo ao corpo do nadador onde espera-se um maior gradiente das variáveis dependentes. As variáveis que controlam o espaçamento, ...

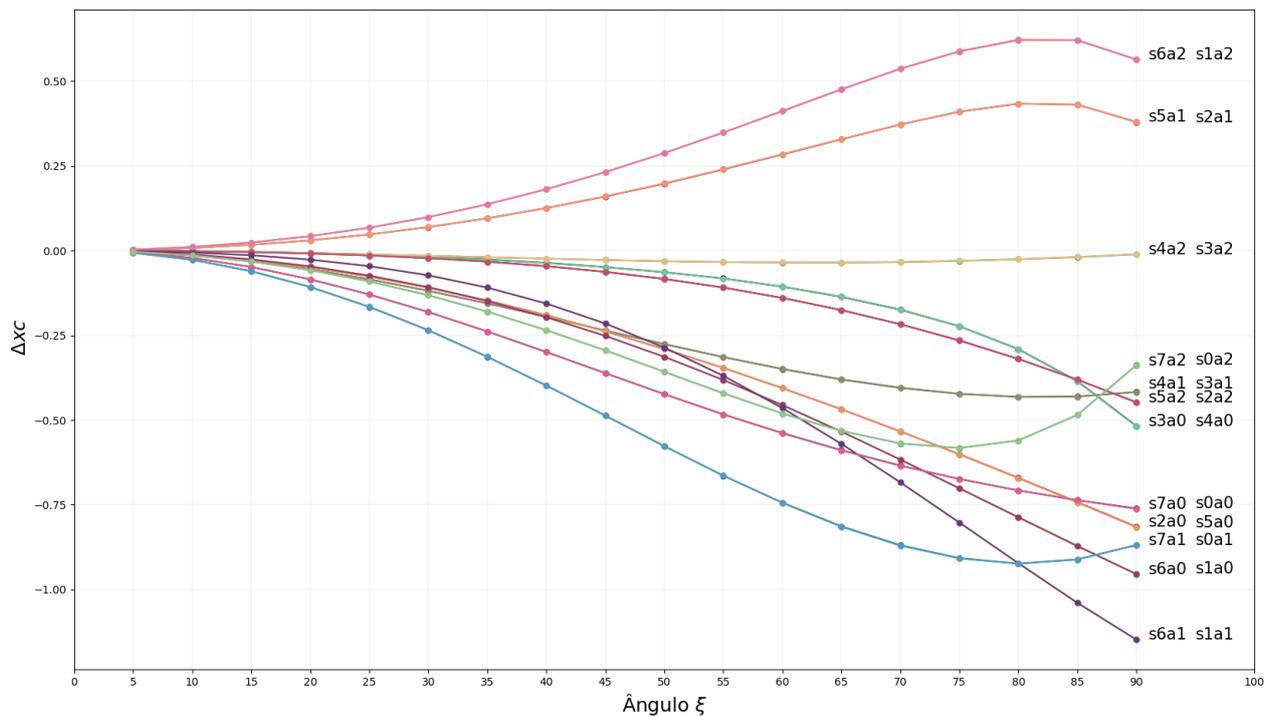


Figura 35 – Gráfico de  $\Delta xc$  em função do ângulo  $\xi$  para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos.

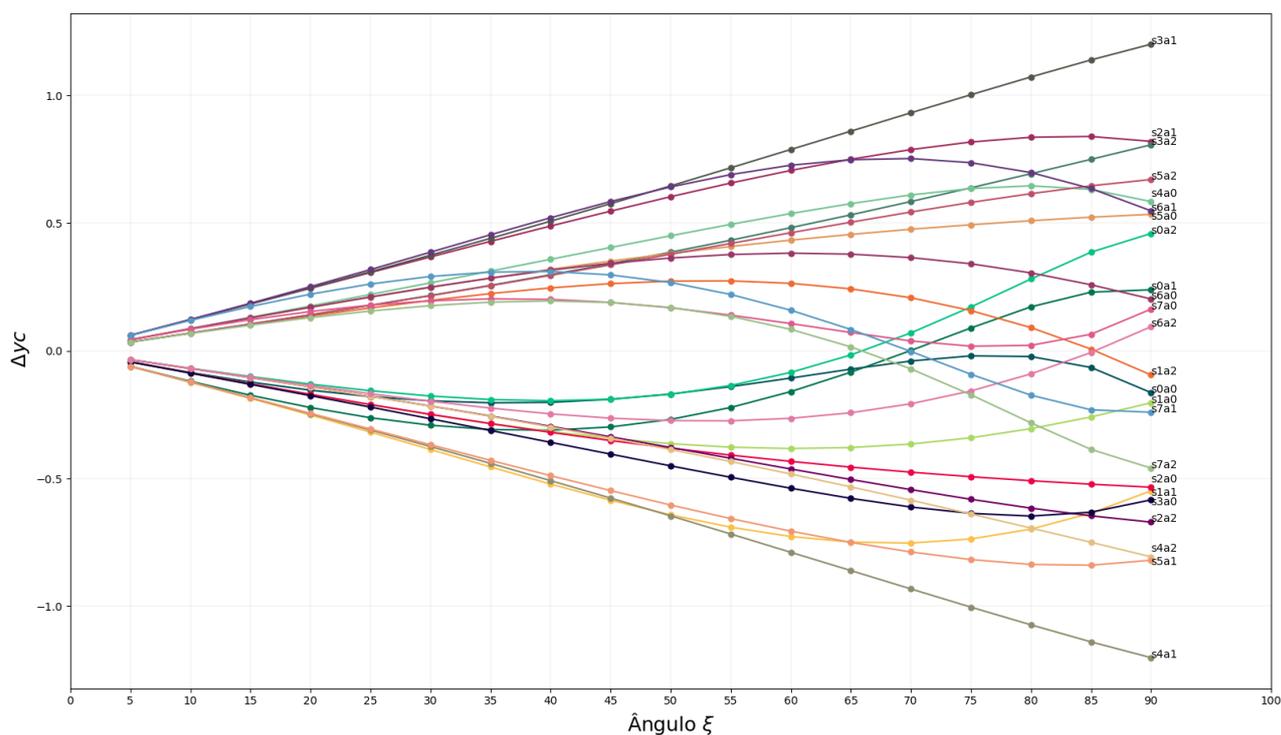


Figura 36 – Gráfico de  $\Delta y_c$  em função dos ângulos para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos.

No caso de  $\Delta x$  e  $\Delta y$  temos que o comportamento é dependente das ações e também do ângulo considerado. Note que o valor máximo de deslocamento para  $s_7a_2$  se dá para  $\xi=75$  graus, e para  $s_6a_1$  se dá para  $\xi=90$  graus. Entretanto, no somatório geral, considerando todas as transições, o comportamento se mostra bastante linear, onde a medida que os ângulos vão se tornando maiores, têm-se um maior ganho em termos de deslocamento (Figuras 37 e 38).

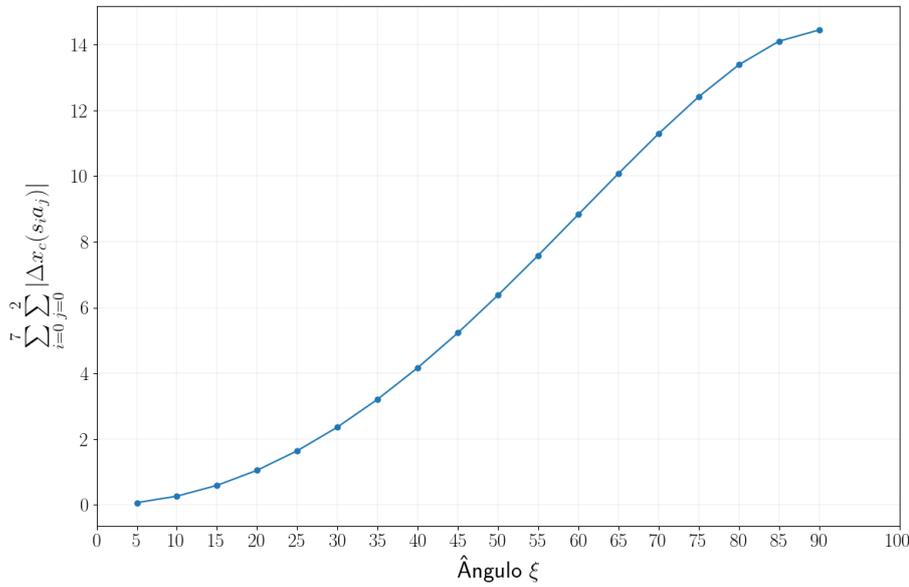


Figura 37

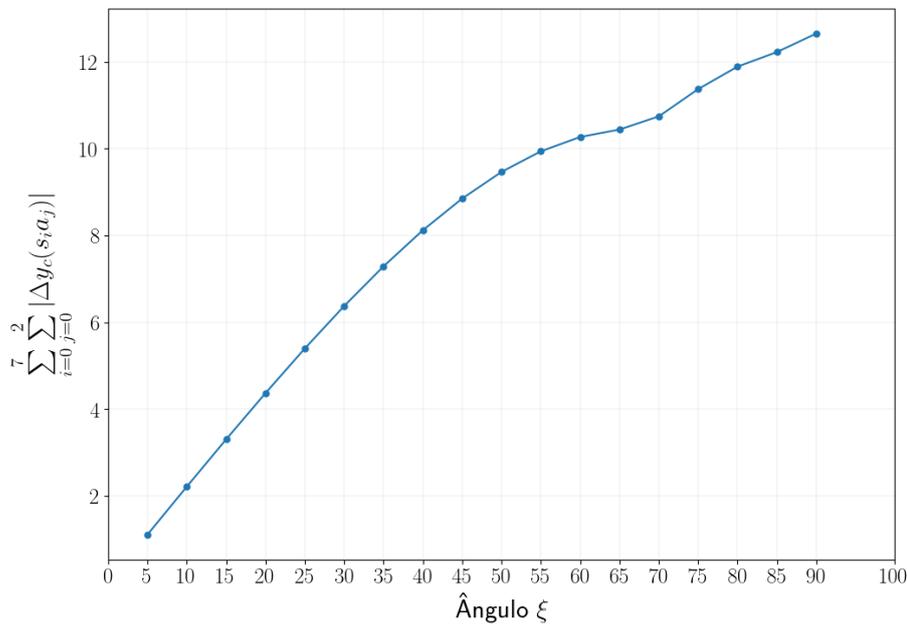


Figura 38

Ao contrário do que acontece com o deslocamentos nas direções  $x$  e  $y$ , o comportamento de  $\Delta\theta$  é linear no sentido de que, quanto maior o ângulo, maior é o valor do deslocamento, independentemente da transição considerada. Neste caso, dado qualquer estado inicial, a ação  $\alpha_0$  (de ativação do link entre a cabeça e o corpo consecutivo a ela) é a que resultou em maiores deslocamentos em relação ao referencial de rotação, seguida de  $\alpha_1$ , e por último  $\alpha_2$ .

Além disso, nota-se que ações distintas geram valores de deslocamentos distintos partindo de um mesmo estado inicial, independentemente do ângulo considerado. Por exemplo, considere que o nadador encontra-se no estado  $s_7$  e seu objetivo é realizar um movimento de rotação em sentido horário, é mais vantajoso que ele realize a ação  $\alpha_0$  do que a ação  $\alpha_2$ , já que  $s_7\alpha_0 > s_7\alpha_2$ .

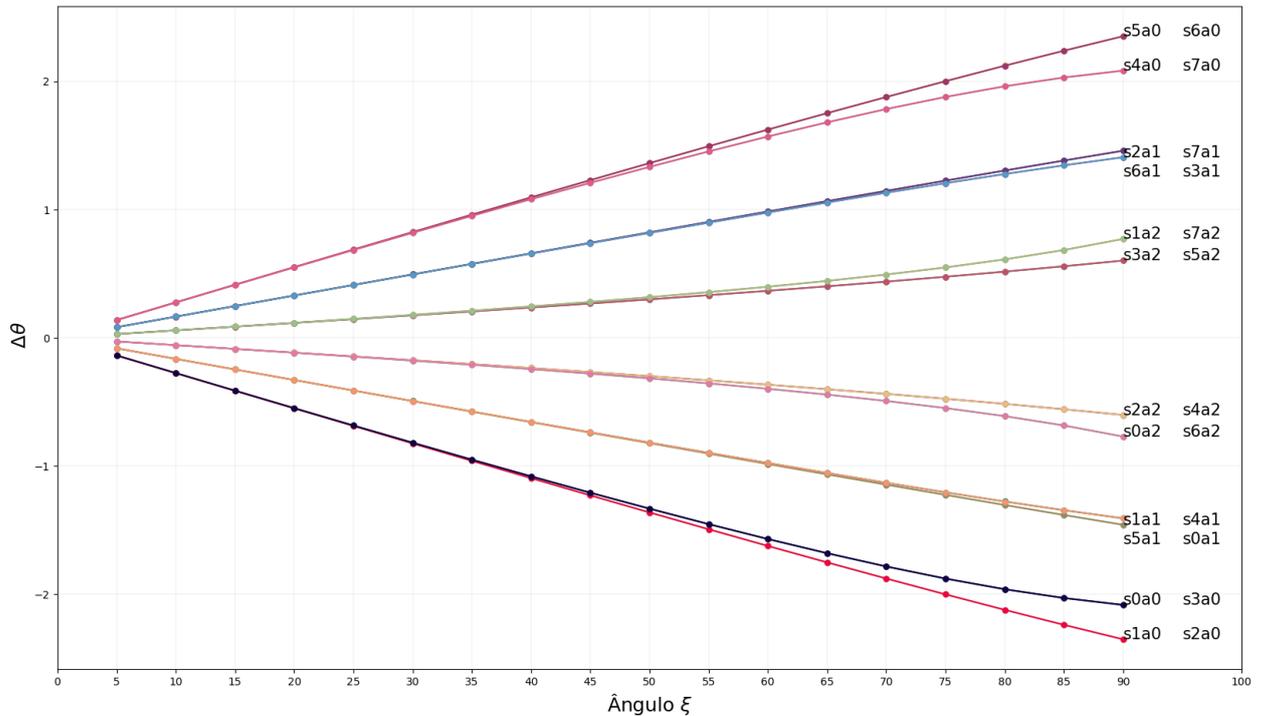


Figura 39 – Gráfico de  $\Delta\theta$  em função do ângulo  $\xi$ , para as 24 transições possíveis de um nadador de 4 corpos.

Uma outra quantidade que pode ser levada em consideração ao analisar o movimento de um nadador em um ambiente fluido é a dissipação viscosa, dada por

$$\mathcal{D} = 2\mu\nabla^S \mathbf{u} : \nabla^S \mathbf{u} \quad (3.15)$$

Ao se movimentar no fluido, o nadador consome uma certa quantidade de energia, que precisa compensar essa dissipação. Embora isto não será considerado neste trabalho, vale salientar que o processo de aprendizado poderia incorporar essa informação para descobrir mecanismos de nado mais eficientes em relações a questões energéticas. Isto poderá ser estudado em trabalhos futuros.

Como mostra a Figura 40, algumas ações podem ter um consumo de energia maior. Neste caso, as transições compostas para quatro estados específicos:  $s_0$ ,  $s_2$ ,  $s_5$  e  $s_7$ , e a ação  $\alpha_1$  (movimento do link entre os corpos que não estão nas extremidades), são as que vão exigir um maior gasto energético devido ao grande valor que a dissipação viscosa atinge, sendo um valor próximo ao dobro das demais transições. Entretanto, como o objetivo deste trabalho não está intimamente ligado a otimização energética da locomoção de nadadores, os efeitos da dissipação

viscosa serão desconsiderados nos estudos de aprendizado apresentados no Capítulo 4, mas poderão ser considerados em trabalhos futuros.

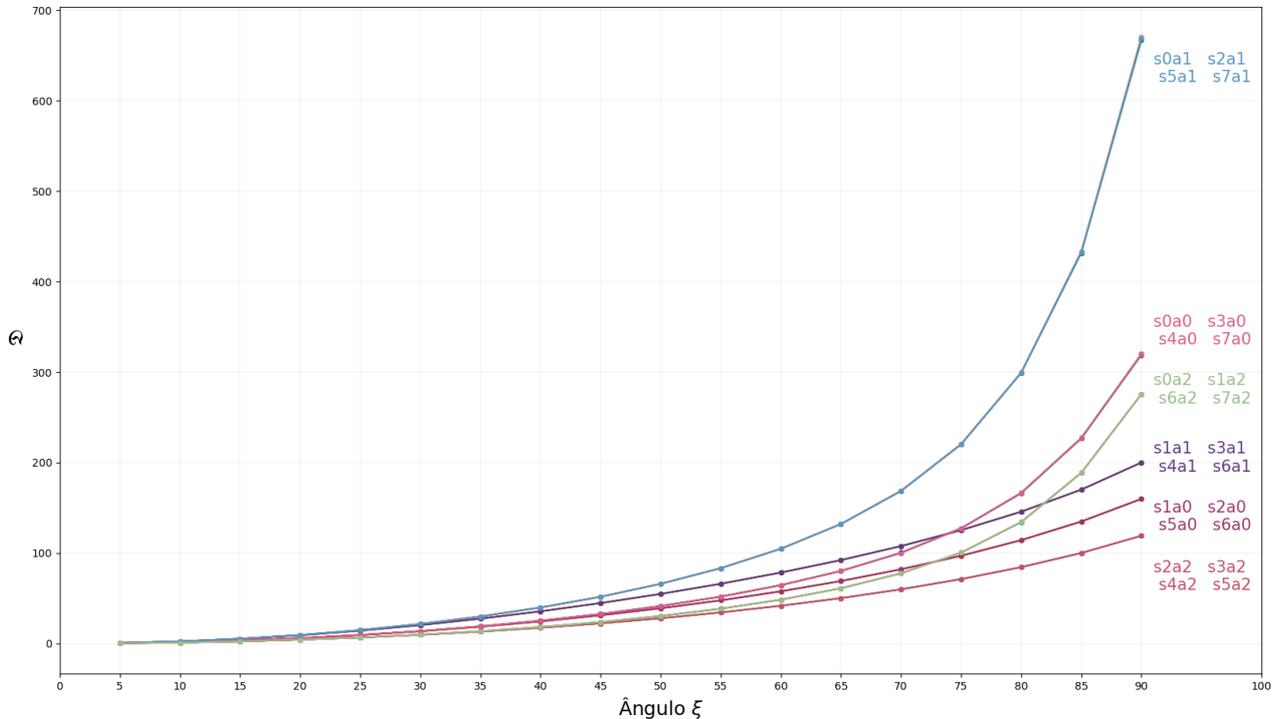


Figura 40 – Dissipação viscosa em função do ângulo  $\xi$ , para as 24 transições possíveis para um nadador *Snake* de 4 corpos.

Por fim, é importante salientar que, para gerar todos os resultados mencionados anteriormente, utilizou-se um parâmetro baseado na qualidade da malha para a execução do remalhamento através da função *MeshQuality* conforme abordado na seção 2.4, e como mencionado nesta, os efeitos do remalhamento podem ter interferido na qualidade dos resultados obtidos.

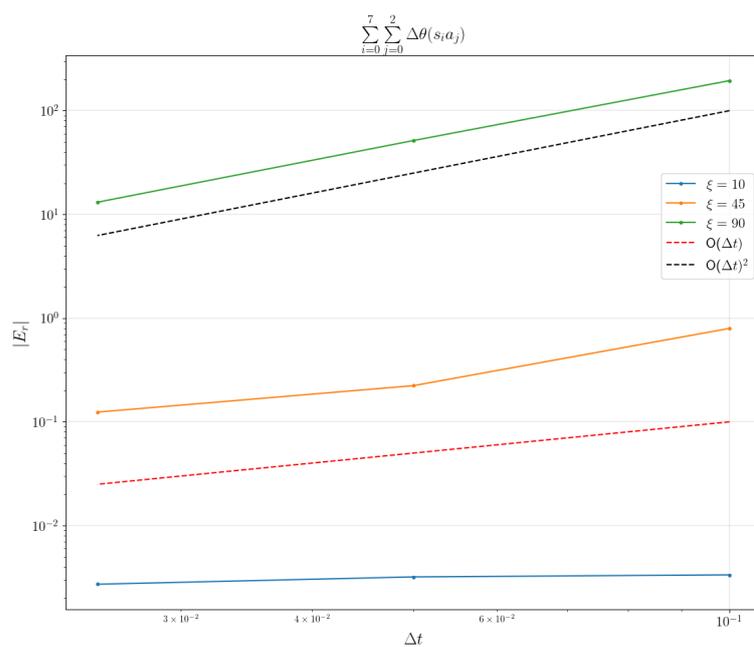
A seguir, como feito para o modelo de micronadador de Najafi, apresentaremos alguns resultados que permitem avaliar os efeitos da discretização espacial e temporal, na precisão com que as informações apresentadas anteriormente são obtidas. Uma análise de como o efeito do remalhamento interfere na solução encontrada foi incorporada a esses estudos.

### 3.2.4 Análises de convergência

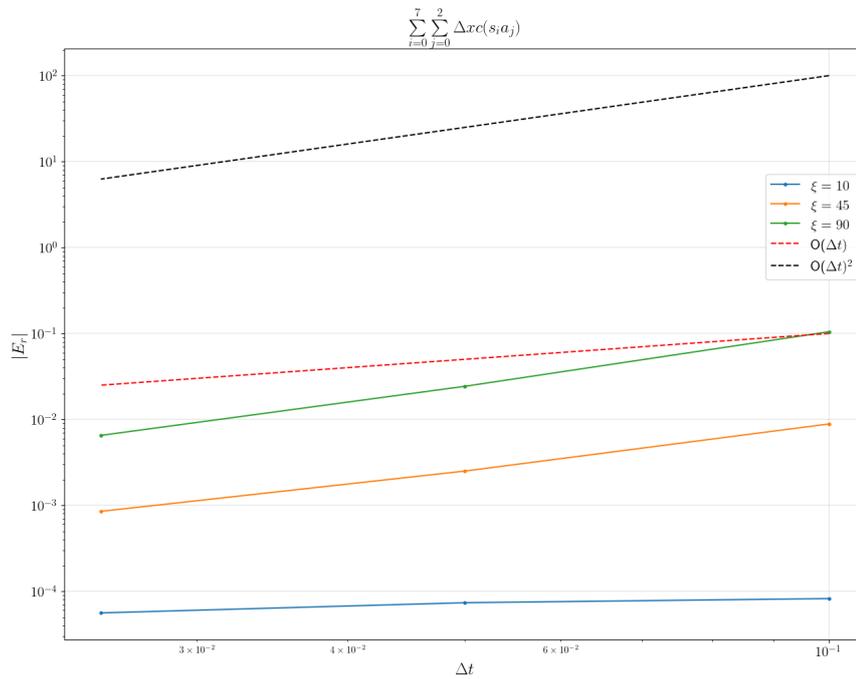
Conforme apresentado na seção 2.5, optou-se por utilizar um método de discretização temporal de segunda ordem no tempo. Porém, para ângulos pequenos, por exemplo  $\xi = 10$  e  $\xi = 45$  graus as curvas de erro não resgatam a ordem esperada, mas apresentam um valor pequeno em relação aos ângulos maiores como  $\xi = 90$ , que por sua vez apresentam uma convergência de ordem  $O(\Delta t)^2$ . Esse fato pode ser observado no gráfico da Figura 41, que mostra o erro relativo

para o somatório de  $\Delta\theta$ , considerando todas as transições possíveis para um nadador de quatro corpos, em função de  $\Delta t$ . O mesmo ocorre para  $\Delta x_c$  e  $\Delta y_c$  (Figuras 42 e 43).

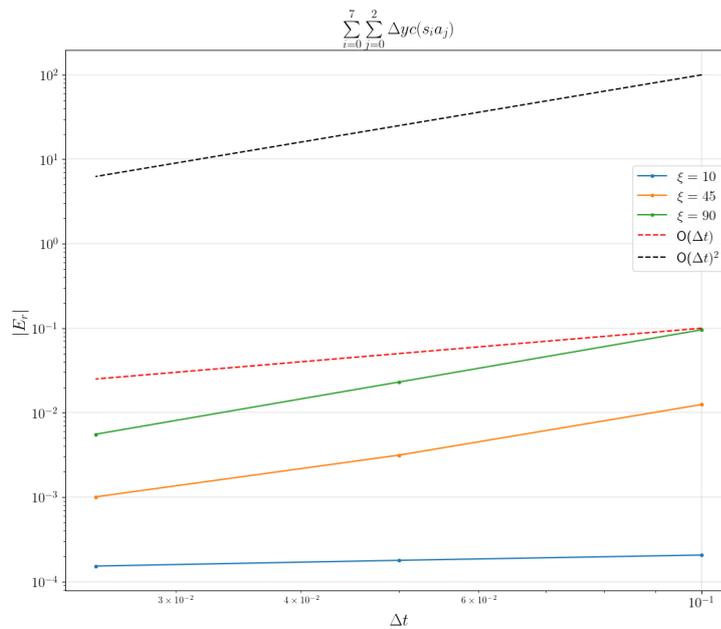
Figura 41 – Erro relativo para  $\Delta\theta$



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 42 – Erro relativo para  $\Delta x c$ 

Fonte: Elaborada pelo autor.

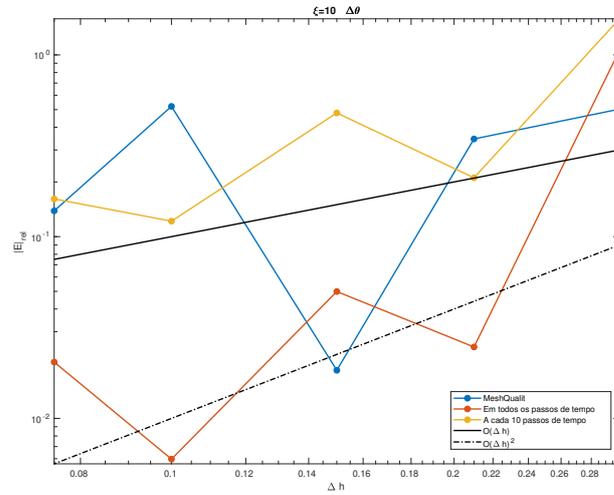
Figura 43 – Erro relativo para  $\Delta y c$ 

Fonte: Elaborada pelo autor.

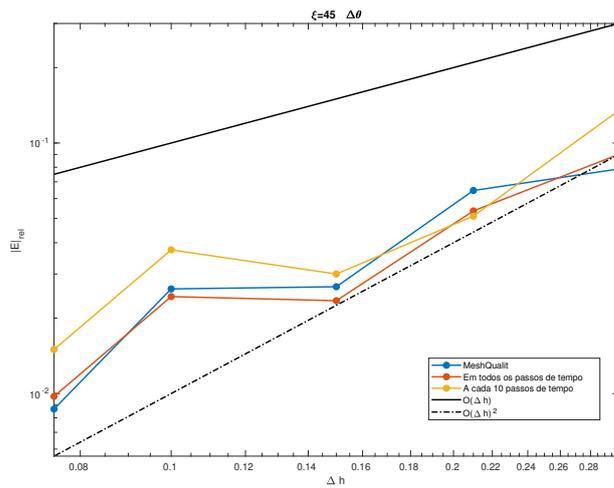
Em relação as estratégias de remalhamento temos que existe um custo computacional

considerável para cada remalhamento. Os gráficos das Figuras 44 e 45 mostram que para cada ciclo de ações considerado, o cenário é diferente e também depende do ângulo  $\xi$ . Porém, os erros para os três ciclos considerados, se mantêm na ordem de  $10^{-1}$  e  $10^{-2}$  independentemente da quantidade de remalhamento realizada. Assim, podemos considerar que a estratégia de remalhamento baseada na qualidade da malha apresentada na seção 2.4 é eficiente. Além de evitar um custo computacional realizando remalhamentos desnecessários, ela garante que a solução está sendo calculada em uma malha com elementos adequados em formato e tamanho.

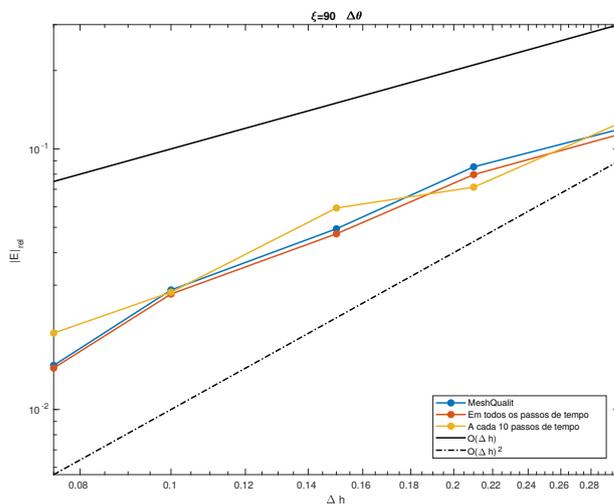
Figura 44 – Erro relativo em passo de tempo para um ciclo de ações. O ciclo é composto pela realização das ações: s1a0, s5a2, s4a0 e s0a2, nesta ordem.



(a)  $\xi = 10$  graus



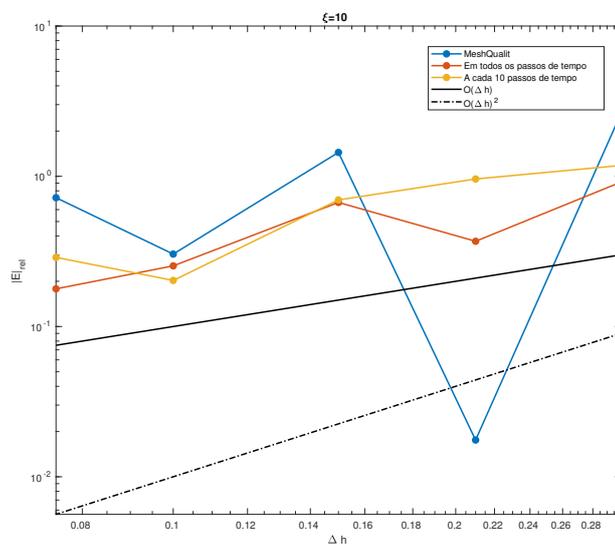
(b)  $\xi = 45$  graus



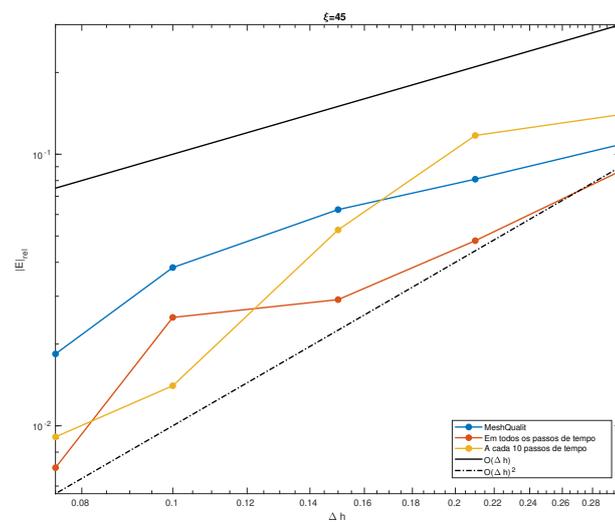
(c)  $\xi = 90$  graus

Fonte: Elaborada pelo autor.

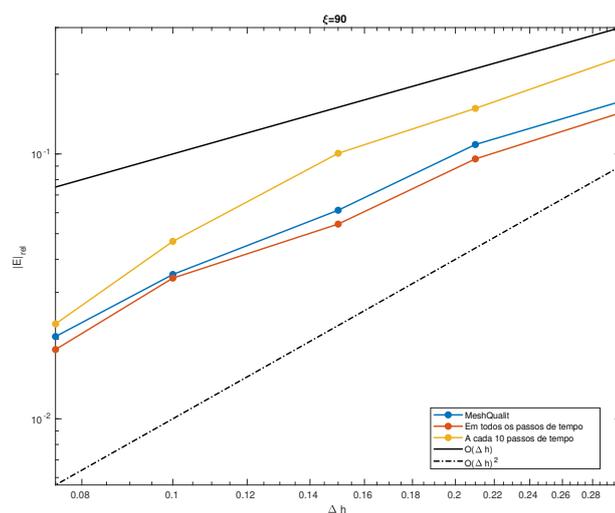
Figura 45 – Erro relativo em passo de tempo para um ciclo de ações. O ciclo é composto pela realização das ações: s0a2, s1a1, s3a2 e s2a1, nesta ordem.



(a)  $\xi = 10$  graus



(b)  $\xi = 45$  graus



(c)  $\xi = 90$  graus



---

## APRENDIZADO POR REFORÇO PARA LOCOMOÇÃO DE MICRONADADORES

---

Neste capítulo discutimos os conceitos de aprendizado por reforço (AR) que serão utilizados para encontrar as políticas de nado dos micronadadores imersos num fluido viscoso. O objetivo é realizar um estudo exploratório do método em alguns problemas de interesse para entender o potencial da metodologia no controle dos micronadadores. Lembrando dos capítulos anteriores, assume-se que os efeitos inerciais são totalmente desprezíveis, sendo isto determinante no tipo de políticas que serão aprendidas. Devido ao regime fluidodinâmico considerado, o deslocamento efetivo do nadador só ocorre sob uma política que é irreversível, de forma que a posição do corpo, após um ciclo de movimentos, seja diferente de sua posição inicial (teorema da vórtice de Purcell ([PURCELL, 1977](#))). Vale ressaltar que o problema de determinação da sequência de ações ótima (i.e., a política de nado procurada), a qual produz uma translação e/ou rotação efetiva do nadador, não é mais do que um problema de otimização, ou controle ótimo, o qual tem sido discutido amplamente na literatura, porém, é ainda de grande interesse pelas aplicações nas áreas de robótica e biomedicina, entre outras (ver p.e. (??????)). Em particular, o caso em que o ator está imerso num fluido, apresenta desafios adicionais relacionados com o custo e complexidade do simular a interação com o ambiente, e isto não tem sido discutido de forma abundante na literatura.

Concretamente, a política de deslocamento ou ativação dos links consiste em repetir um ciclo específico de ações, cada uma gerando um deslocamento na direção positiva, dependendo do caso, de rotação ou translação, uma vez que cada ciclo termina. Lembremos também que nesta dissertação ficamos restritos ao caso discreto, isto é, problemas em que existem um conjunto finito de possíveis estados e ações a serem executadas, em contraste com o caso contínuo. A política ou sequência de estados e ações pode ser aprendida pelo nadador através do conhecimento obtido a partir de sua interação com o fluido ambiente por meio de aprendizagem por reforço (AR) que será explicado na sequência. Claramente, a complexidade computacional

do processo de aprendizado dependerá do número de possíveis estados e ações. Ainda, neste trabalho consideramos o caso mais simples, no qual o nadador é capaz de ativar apenas uma das duas articulações, ou membros, por vez, como foi explicado em capítulos anteriores.

Antes de começar, é importante destacar que os métodos a serem utilizados neste capítulo são relativamente bem conhecidos, porém, existem alguns detalhes e particularidades advindos do problema de micronadadores que nos ocupa. Estes tem sido estudados e desenvolvidos ao longo dos últimos anos no grupo de pesquisa em microfluidica do ICMC-USP e tem sido publicados recentemente nos trabalhos (PAZ *et al.*, 2023), (SILVA *et al.*, 2022), (SOUZA *et al.*, 2023).

## 4.1 O algoritmo de Q-learning

O *Q-learning* é um algoritmo de aprendizado por reforço que busca encontrar a melhor ação a ser tomada a partir de um determinado estado, a fim de aprender uma política que maximize a recompensa total. O ‘Q’ no Q-learning significa qualidade. A qualidade, neste caso, representa a utilidade de uma determinada ação para obter alguma recompensa futura. A função de valor, de par ação e estado, estima quão boa será uma ação específica dado um determinado estado ou qual o retorno esperado para essa ação e é atualizada com base na Equação de Bellman (SUTTON; BARTO, 2018):

$$Q(s_n, a_n) \leftarrow Q(s_n, a_n) + \alpha [r_n + \gamma \max_{a_{n+1}} Q(s_{n+1}, a_{n+1}) - Q(s_n, a_n)] \quad (4.1)$$

onde  $s_n$  e  $a_n$  são o estado atual e a ação a ser realizada pelo nadador, respectivamente,  $r_n$  é a recompensa por executar a ação  $a_n$  a partir do estado  $s_n$ ,  $\alpha$  é taxa de aprendizado ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) que determina em que medida as informações recém-adquiridas substituem as informações antigas, e  $\gamma$  é denominado fator de desconto ( $0 \leq \gamma < 1$ ), e determina a importância das recompensas futuras.

A equação (4.1) associa um valor  $\bar{Q}$  ao par estado e ação  $(s, a)$ . Esse valor é atualizado ao longo das iterações buscando otimizar a recompensa obtida ao executar uma ação. Na matriz  $Q$ , o número de linhas coincide com o número de estados possíveis e o número de colunas corresponde ao número de ações possíveis em cada estado. Esta matriz armazena a experiência adquirida pelo ator (ou nadador no nosso contexto), sendo atualizada até convergir para a matriz que define a política ótima de movimentos, com base na recompensa de uma ação dado um estado. Estas recompensas são calculadas a partir da solução do problema de Stokes como foi explicado anteriormente. Para realizar o cálculo ou atualização efetiva dessa matriz, da qual será extraída a política de nado, neste trabalho seguiremos duas abordagens, uma determinística e uma outra estocástica, que explicamos na sequência.

### 4.1.1 AR determinístico - Algoritmo Off-policy

O caso mais simples que pode ser considerado é aquele no qual o fluido ambiente é homogêneo e permanece intacto ao longo do movimento do nadador, isto é, as recompensas obtidas como resultado das ações executadas não dependem da posição atual do nadador ou localização relativa dentro do domínio. Nestas condições, a matriz  $Q$  pode ser simplesmente atualizada de maneira iterativa até ela convergir num ponto fixo. O algoritmo para tal fim é mostrado em 1. Neste algoritmo, a ideia consiste simplesmente em percorrer todas as entradas da matriz  $Q(s_i, a_j)$ , i.e., todos os possíveis estados  $i = 1, \dots, N_s$  e ações  $j = 1, \dots, N_a$ , e atualizar as entradas usando a equação de Bellman (4.1). No algoritmo mostrado, denotamos por  $r_{ij}$  e  $s_k$  a recompensa e o estado resultante, respectivamente, de realizar a ação  $a_j$  no estado  $s_i$  e por  $Q^*$  a matriz resultante do processo que contem a política ótima aprendida. Notar que o passo de atualização, o qual envolve a resolução do problema fluido-dinâmico para determinar a recompensa, o qual é governado pelas equações de (Navier)-Stokes, pode ser feito numa fase *offline* quando o ambiente permanece intacto ao longo do tempo, i.e., as recompensas correspondentes a cada ação podem ser calculadas como pré-processo. Isto simplifica em grande medida os cálculos e reduz o custo computacional do algoritmo de aprendizado. Este algoritmo, que visa encontrar a política ótima, é denominado de *off-policy*. A partir de uma matriz  $Q$  convergida, pode ser extraída a política ótima  $\pi_{\text{opt}}$ .

---

**Algoritmo 1** – Algoritmo Q-learning - Atualização da Matriz.

---

**Data:**  $s_0$ ,  $Q_0$ -matrix

error =  $\infty$

**while** error >  $TOL$  **do**

**foreach**  $s_i \in (1, \dots, N_s)$  and  $a_j \in (1, \dots, N_a)$  **do**

        Update  $Q_{m+1}(s_i, a_j)$ -component as

$$Q_{m+1}(s_i, a_j) = (1 - \alpha)Q_m(s_i, a_j) + \alpha \left[ r_{ij} + \gamma \max_a Q_m(s_k, a) \right]$$

**end**

    error = norm( $Q_{m+1} - Q_m$ )/(max( $Q_{m+1}$ ) - min( $Q_{m+1}$ ))

$Q_m \leftarrow Q_{m+1}$

**end**

**Result:**  $Q^*$ -matrix

---

### 4.1.2 AR estocástico - Algoritmo on-policy

Para o aprendizado de tarefas mais complexas ou compostas, p.e., rotacionar até uma certa posição angular e a posteriori, nadar em linha reta, ou, em casos em que o ambiente com o qual o nadador interage muda ao longo da interação, tal como no problema de quimiotaxe ((?)), onde o nadador consome nutrientes presentes no fluido ambiente, portanto modificando a concentração ao redor dele, uma exploração aleatória da matriz de estados e ações precisa

ser utilizada. Isto será denominado também de **aprendizado ativo**. Em cada iteração de AR, a melhor ação é tomada a partir da matriz  $Q$  atualizada com probabilidade  $1 - \epsilon$ , ou uma ação é selecionada aleatoriamente com probabilidade  $\epsilon \in [0, 1]$ , o que permite ao nadador explorar todas as combinações possíveis de ações, evitando assim cair em políticas de avanço subótimo. Este parâmetro pode ser tomado constante ou variável ao longo das iterações, reduzindo ele à medida que as iterações de AR avançam. O algoritmo é apresentado em 2. Como no caso anterior, o passo de resolução pode ser evitado em certos casos, se o cálculo das recompensas foi feito numa fase *offline*. Neste caso, o interesse é obter a sequência de estados e ações que melhora o comportamento do ator, i.e., a política que vai sendo executada ao longo da atualização da matriz  $Q$  no algoritmo dado. Este tipo de algoritmo, se conhece como *on-policy*.

---

**Algoritmo 2** – Algoritmo Q-learning  $\epsilon$ -greedy
 

---

**Data:**  $s_0$ ,  $Q_0$ -matrix,  $m = 0$

error =  $\infty$

**while**  $m < N_{steps}$  **do**

    Compute action  $a_m$  as  $\arg \max_a Q_m(s_m, a)$  with probability  $1 - \epsilon_m$  or randomly with probability  $\epsilon_m$

    Add  $s_m, a_m$  to the policy

    Determine next state  $s_{m+1}$  based on  $s_m$  and  $a_m$

    Solve the necessary (Navier-)Stokes problem to go from state  $s_m$  until state  $s_{m+1}$  and compute reward  $r_m$

    Update the  $(s_m, a_m)$ -component as

$$Q_{m+1}(s_m, a_m) = (1 - \alpha)Q_m(s_m, a_m) + \alpha \left[ r_m + \gamma \max_a Q_m(s_{m+1}, a) \right]$$

$Q_m \leftarrow Q_{m+1}$

$m \leftarrow m + 1$

**end**

**Result:** Policy  $\pi$  (Sequence of states and actions)

---

## 4.2 Resultados para o nadador do tipo Najafi-Golestanian

Nos capítulos anteriores foi estudada a precisão da formulação numérica para resolver o problema de interação fluido-sólido no caso particular do nadador de tipo Najafi-Golestanian (ver ??), o qual é formado por  $n_c$  corpos esféricos, unidos por hastes que podem-se esticar até um valor máximo e comprimir até um valor mínimo, dando como resultado um movimento de translação na direção horizontal, i.e., o movimento é restrito ao eixo  $x$ , porém o problema fluido dinâmico é 3D (com simetria de revolução). Lembremos também, que o nadador pode apenas movimentar uma haste em cada ação, o que é uma simplificação que temos introduzido para facilitar a análise e a implementação.

Nesta seção mostraremos os resultados de aplicar o algoritmo de aprendizado por reforço determinístico apresentado na seção anterior, o qual basea-se na avaliação da função Ação-

Tabela 3 – Número total de possíveis estados e ações para os nadadores de Najafi-Golestanian de 3, 5, 7 e 9 corpos.

	3 corpos	5 corpos	7 corpos	9 corpos
$N_{\text{estados}}$	4	16	64	256
$N_{\text{ações}}$	2	4	6	8

Tabela 4 – PAULA: COLOCAR OS VALORES QUE TENHAM SIDO USADOS. Parâmetros geométricos usados para os nadadores de Najafi-Golestanian de 3, 5, 7 e 9 corpos.

Símbolo	Parâmetro	Valor
$\ell_{\min}$	Mínima extensão das hastes	0.1
$\ell_{\max}$	Máxima extensão das hastes	1.0
R	raio das esferas	1.0
$\mu$	viscosidade	0.1
n	índice na lei de Carreau-Yasuda	2
n	tempo de relaxação na lei de Carreau-Yasuda	0.1

Tabela 5 – Recompensas para o nadador de 3 esferas no caso de fluido Newtoniano.

Estado / Ação	$\alpha_0$	$\alpha_1$
$s_0$	2.4901479791e-01	-2.6616615929e-01
$s_1$	-1.2791184831e-02	2.6032070855e-01
$s_2$	-2.4904205637e-01	-7.1077970596e-04
$s_3$	1.0633121768e-02	-3.2295314051e-03

Valor (*Action-Value iteration*). Iremos estudar nadadores formados por  $N = 3, 5, 7$  e  $9$  esferas. Lembrando que o número de estados e ações depende do número de corpos, denotando este por  $n_c$ , eles vem dados por

$$N_{\text{estados}} = N_e = 2^{n_c - 1}, \quad N_{\text{ações}} = N_a = n_c - 1$$

Para os casos considerados, teremos por tanto os valores apresentados na tabela 3. Para este caso, vale lembrar que as recompensas correspondentes a cada possível ação e estado, podem ser pre-calculadas com antecedência, na fase *offline* ou de pré-processo. A sua vez, neste caso iremos apresentar resultados para o caso de um fluido Newtoniano e para o caso de um fluido Não-Newtoniano. O parâmetros geométricos e físicos considerados nos experimentos são dados na tabela 4.

Primeiramente, como ilustração do tipo de resultado obtidos, nas tabelas 5 e 6 apresentamos as recompensas calculadas com o algoritmo de interação fluido-estrutura para o nadador de 3 esferas, no caso de fluido Newtoniano e não Newtoniano, respectivamente. Estas tabelas mostram o deslocamento líquido da posição horizontal do centro de massas do conjunto de 3 corpos, correspondentes a cada possível estado e ação.

Tomando o caso Newtoniano, é fácil deduzir por inspeção qual deveria ser a política de

Tabela 6 – Recompensas para o nadador de 3 esferas no caso de fluido Não Newtoniano.

Estado / Ação	$\alpha_0$	$\alpha_1$
$s_0$	9.9966019457e-02	-1.1313357360e-01
$s_1$	-1.5700104191e-01	1.1309528809e-01
$s_2$	-9.3338516160e-02	1.4380670411e-01
$s_3$	1.5263807959e-01	-1.4651485174e-01

nado ótima, que será uma na qual, em cada estado, escolhemos a ação que maior deslocamento líquido produz. Por exemplo, se começarmos no estado 1 e executarmos a ação 1 (fechar a segunda haste), passaremos ao estado 0, no qual executamos a ação 0 (abrir a primeira haste), passando ao estado 2. Na sequência, executamos a ação 1 (abrir a segunda haste) para passar ao estado 3, e finalmente executamos a ação 0 (fechar a primeira haste) para voltar ao estado inicial 1. Como resultado disto, vemos que a política ótima achada consiste do ciclo  $[1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, \dots]$ .

Neste ponto aparece um fenômeno numérico interessante, que está relacionado com a acurácia da discretização espacial e temporal adotada. Devido a reciprocidade dos movimentos num fluido a baixo número de Reynolds (lembramos que neste caso a inercia é totalmente desprezível), notamos que o deslocamento líquido do nadador ao executar uma ação desde um estado inicial até um estado final, deveria ser igual em magnitude, mas de sinal contrário, se realizado no sentido inverso. Por exemplo, se para  $s_2 \rightarrow a_1$  o  $\Delta x_{21} = \alpha$ , então, para  $s_3 \rightarrow a_1$  deveria ser  $\Delta x_{31} = -\alpha$ . Isto não se verifica exatamente na prática devido aos erros de discretização, como surge de maneira clara observando a 5. Uma forma de melhorar a precisão dos cálculos seria obviamente refinar os parâmetros da simulação, i.e., o tamanho característico da malha e o passo de tempo, o que pode ser custoso computacionalmente, especialmente em sistemas formados por muitos corpos. Outra possibilidade, que temos adotado neste trabalho é realizar uma simetria da tabela de recompensas, tomando a cada passo

$$\Delta x_{21}^S \leftarrow (\Delta x_{21} - \Delta x_{31})/2,$$

e

$$\Delta x_{31}^S \leftarrow (\Delta x_{31} - \Delta x_{21})/2,$$

Aplicando estas correções, no exemplo considerado, as recompensas ao longo do ciclo virão dadas por:

- $s_1 \rightarrow a_1 \rightarrow \Delta x_{11} = 0.26324$
- $s_0 \rightarrow a_0 \rightarrow \Delta x_{00} = 0.24903$
- $s_2 \rightarrow a_1 \rightarrow \Delta x_{21} = 0.00126$
- $s_3 \rightarrow a_0 \rightarrow \Delta x_{30} = 0.01171$

Como confirmação, a matriz  $Q$  obtida pelo método com esta simetriação das recompensas foi:

$$Q = \begin{bmatrix} 128.5403 & 128.2722 \\ 128.4076 & 128.6721 \\ 128.1627 & 128.4197 \\ 128.5541 & 128.2881 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

A matriz foi obtida tomando  $\gamma = 0.999$  e  $\alpha = 1$  na equação de Bellman.

Agora, definimos a velocidade de translação como a soma das recompensas originadas de cada ação dividido pelo tempo total envolvido na realização do ciclo, o qual é igual ao número total de ações executadas  $n$  ao longo de um ciclo pelo tempo de cada ação, que nos experimentos foi considerado igual a 1 unidade de tempo, i.e.,

$$v_{tr} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Delta x_i$$

em que  $\Delta x_i$  é a recompensa devido a ação  $i$  no estado atual. Com os valores apresentados, resulta que  $v_{tr} = 0.13131$ . Para ter uma ideia, o valor da velocidade de translação sem efetuar a simetriação acaba sendo 0.12981, que de qualquer forma é bastante próxima.

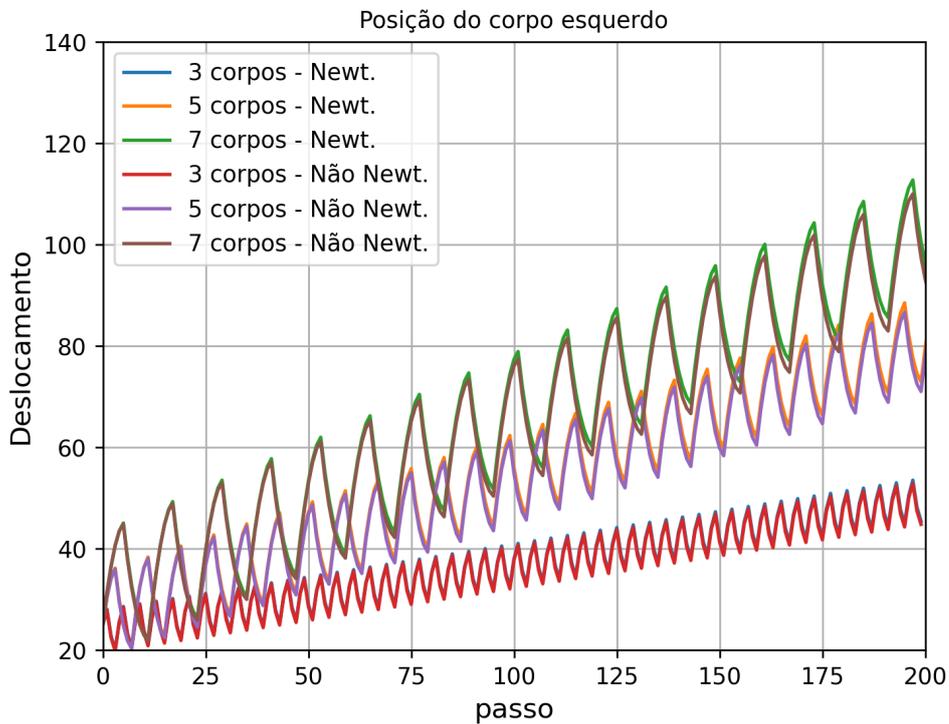
O mesmo raciocínio vale para o caso Não Newtoniano, porém os valores das recompensas e da velocidade final serão numericamente diferentes. Neste caso foi obtido:

- $s_1 - a_1 \rightarrow \Delta x = 0.11311$
- $s_0 - a_0 \rightarrow \Delta x = 0.09665$
- $s_2 - a_1 \rightarrow \Delta x = 0.14516$
- $s_3 - a_0 \rightarrow \Delta x = 0.15481$

dando como resultado que  $v_{tr} = 0.1274$ . Neste ponto, é interessante notar que os valores das recompensas obtidos são bastante diferentes aos do caso Newtoniano, porém a velocidade de translação final obtida não é muito distinta, pelo menos neste caso considerado, apenas com 3 corpos.

Para melhor comparar o comportamento do nadador nos dois tipos de fluidos, na figura 46 mostramos a posição do primeiro corpo, e na 48 mostramos a posição do centro de massas do conjunto, como resultado de repetir várias vezes o ciclo ótimo achado na fase de aprendizado, para os nadadores de 3, 5 e 7 corpos, considerando o caso Newtoniano e não Newtoniano, respectivamente. Nas figuras 47 e ?? mostramos detalhes das mesmas figuras. O primeiro que podemos observar é que o deslocamento líquido de translação aumenta na medida em que aumentamos o número de corpos. Também, podemos observar que o movimento do primeiro corpo de conjunto oscila significativamente quando comparado ao do centro de massas do sistema e a amplitude

Figura 46 – Recompensa para o nadador de Najafi-Golestanian de 3, 5 e 7 corpos. Posição horizontal do corpo da esquerda ao longo das iterações.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 7 – Ciclos ótimos para os nadadores de 3, 5 e 7 corpos.

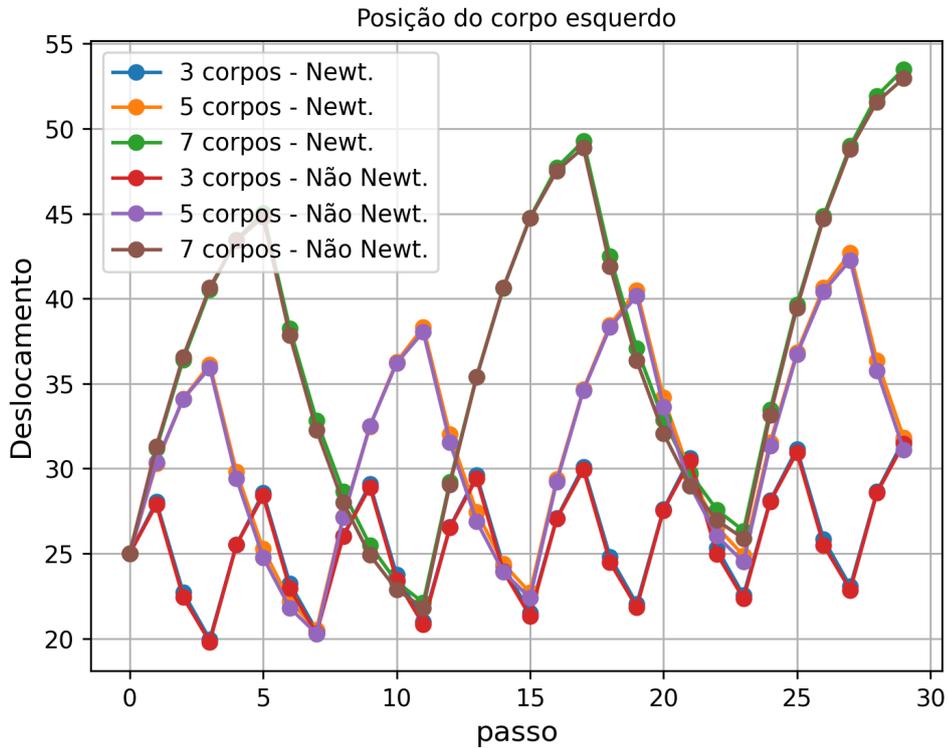
# corpos	Ciclo	$v_{tr}$ (Newt.)	$v_{tr}$ (Não Newt.)
3	[1, 0, 1, 0, ...]	0.13131	0.12743
5	[1, 2, 3, 0, 1, 2, 3, 0, ...]	0.27294	0.26381
7	[1, 2, 3, 4, 5, 0, 1, 2, 3, 4, 5, 0, ...]	0.35280	0.33978

dessas oscilações é maior quando maior é o número de corpos. Finalmente, é interessante observar as diferenças qualitativas entre o movimento do nadador no caso Newtoniano e Não Newtoniano. Como pode-se notar, no caso Newtoniano o centro de massas sempre experimenta um retrocesso em alguma etapa do ciclo aprendido, enquanto que o caso Não Newtoniano o deslocamento cresce monotonicamente. Isto pode ser observado claramente na figura ??.

Na tabela 7 apresentamos um resumo dos resultados para os nadadores de 3, 5 e 7 corpos, exibindo o ciclo aprendido, a velocidade real de translação (i.e., simetrizando a tabela de recompensas) para o caso Newtoniano e Não Newtoniano. Pode-se notar que a diferença entre a velocidade do caso Newtoniano e Não Newtoniano aumenta um pouco com o número de corpos. Isto claro, dependerá dos valores adotados no modelo de Carreau-Yasuda.

Finalmente, nas figuras 50, 51 e 52 mostramos a sequência de estados para os micronadadores de 3, 5 e 7 corpos, respectivamente. Pode-se notar em todos os casos que a política

Figura 47 – Detalhe da figura 46.



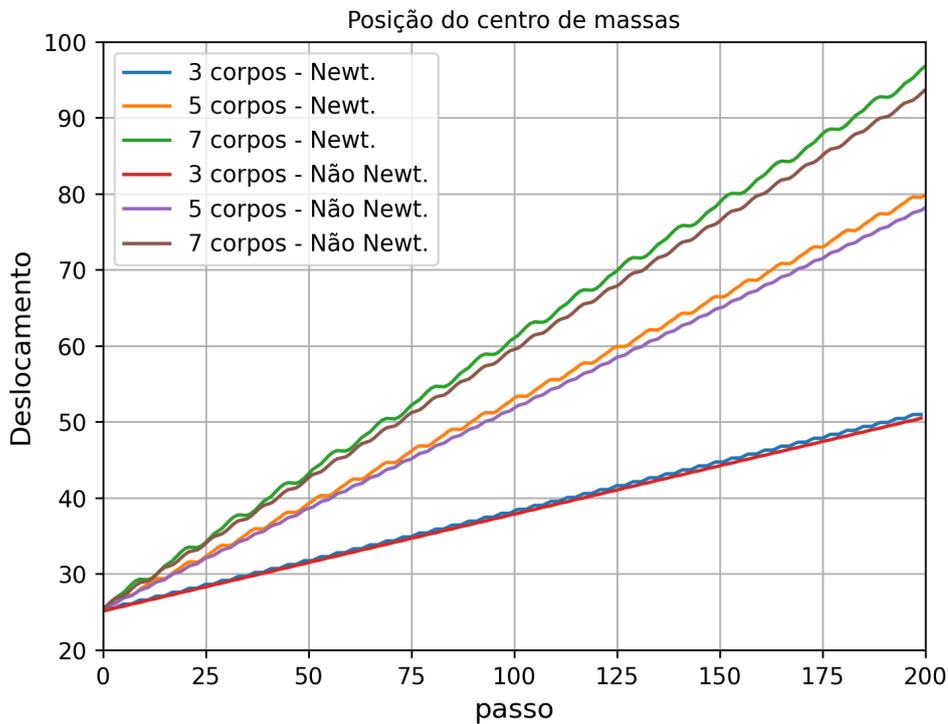
Fonte: Elaborada pelo autor.

ótima aprendida tem a forma de uma onda de abertura de hastes de direita para esquerda e de fechamento de haste de esquerda para direita.

### 4.3 Resultados para o nadador do tipo Snake

Lembrando dos capítulos anteriores, o nadador do tipo Snake é formado por uma certa quantidade de corpos de forma elíptica os quais estão conectados por articulações de espessura desprezível. Estas articulações podem ser ativadas, uma por vez, de forma a mudar o ângulo entre um valor máximo  $\xi_{\max}$  e um valor mínimo  $\xi_{\min}$  (ver figura 31). Claramente, isto é uma simplificação que foi adotada neste trabalho, pois em geral o nadador poderia ativar várias articulações ao mesmo tempo. O fato de cada ação levar uma articulação desde um ângulo mínimo ao um máximo também é uma simplificação, o caso mais geral permitindo estados intermediários, porém, isto aumentaria significativamente o espaço de procura para encontrar uma política de nado ótima. Na sequência mostramos resultados do processo de aprendizado por reforço aplicando as metodologias que acabam de ser descritas. Iremos mostrar primeiramente, resultados correspondentes ao aprendizado de uma tarefa simples de rotação e em segundo lugar, resultados sobre o aprendizado de tarefas compostas.

Figura 48 – Recompensa para o nadador de Najafi-Golestanian de 3, 5 e 7 corpos. Posição horizontal do centro de massas ao longo das iterações.



Fonte: Elaborada pelo autor.

#### 4.3.1 Movimento de rotação - Aplicação do Algoritmo (off-policy)

Nesta seção apresentamos os resultados de aprendizado por reforço para a tarefa simples de rotação. O objetivo de nadador é executar uma política de nado, i.e., uma sequência de ações que lhe permita rotacionar no sentido anti-horário ao redor de qualquer ponto, o qual não é especificado. Para tal fim, o cálculo da recompensa que resulta de cada ação, i.e., a ativação de uma determinada articulação, é dado simplesmente por:

$$r_n = \Delta\theta_n = \theta_{n+1} - \theta_n$$

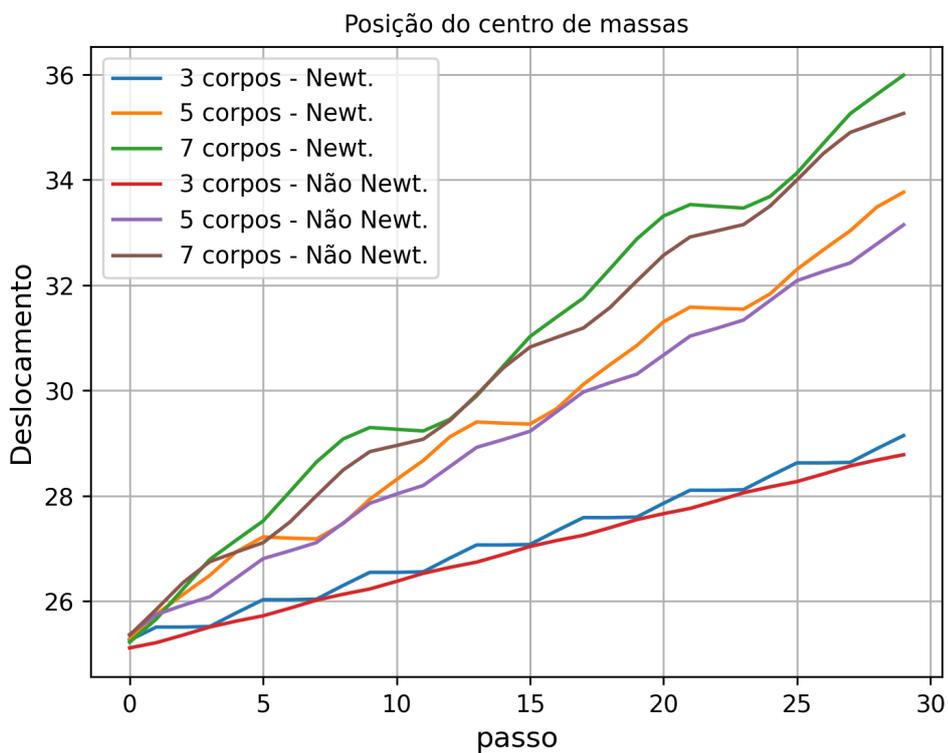
em que  $\theta_n$  é o ângulo do corpo de referência como respeito ao eixo  $x$  (como indicado na figura). Claramente, esta recompensa pode ser negativa ou positiva dependendo do estado do nadador e da ação executada.

Para ilustrar o comportamento do nadador como resultado do aprendizado usando o esquema de AR determinístico explicado anteriormente, mostramos as políticas aprendidas pelo nadador de tipo snake formado por 4, 6 e 10 corpos, respectivamente. Lembremos que o número de estados e ações depende do número de corpos, denotando este por  $n_c$ , eles vem dados por

$$N_{\text{estados}} = N_e = 2^{n_c - 1}, \quad N_{\text{ações}} = N_a = n_c - 1$$

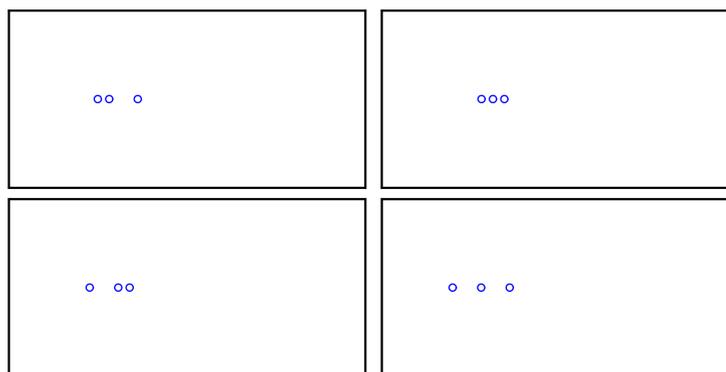
Para os três casos considerados, logo temos os valores apresentados na tabela 8. Nas figuras 53,

Figura 49 – Detalhe da figura 48.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 50 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 3 corpos.

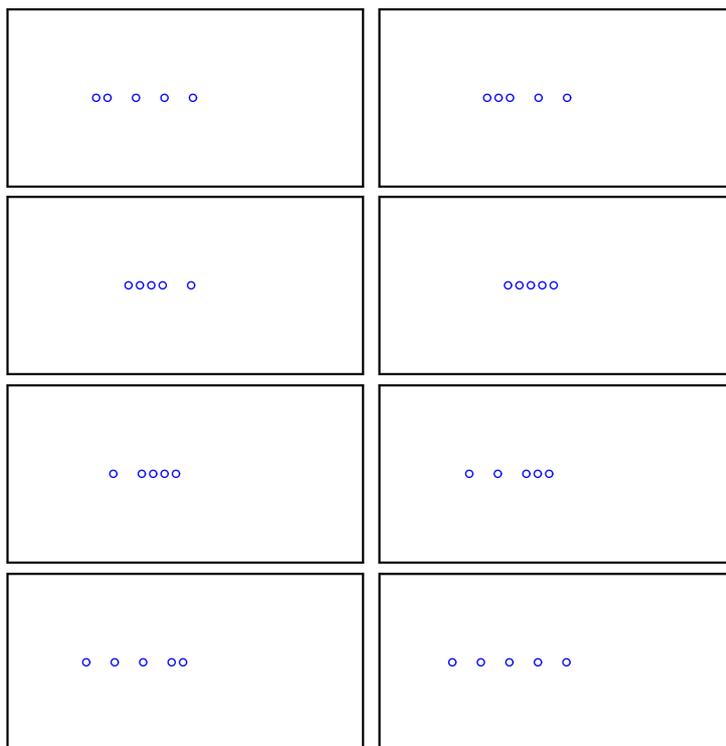


Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 8 – Número total de possíveis estados e ações para os nadadores de 4, 6 e 10 corpos.

	4 corpos	6 corpos	10 corpos
$N_{\text{estados}}$	8	32	512
$N_{\text{ações}}$	3	5	9

Figura 51 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 5 corpos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 52 – Sequência de estados para o nadador de Najafi-Golestanian de 7 corpos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

54, 55, 56, 57 e 58 mostramos o movimento resultante e a trajetória seguida pelo nadador como resultado de executar a política aprendida. Neste caso, mostramos resultados correspondentes a um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$  e  $30^\circ$ , respectivamente. Os movimentos são similares para outros ângulos de abertura, assim que omitiremos estes casos por brevidade. É importante mencionar que as trajetórias mostradas são apenas indicativas, já que as curvas estão promediadas ao longo de várias ações por questões de plotagem, de outra forma não se notaria a estrutura do movimento. Já, nas figuras que são mostradas mais para frente, é possível visualizar as trajetórias com mais detalhe. A política aprendida é logicamente independente do ângulo de abertura, porém, a velocidade de rotação resultante é diferente assim como a trajetória seguida, já que as recompensas relacionadas com o movimento de translação são diferentes em cada caso.

As figuras 59, 60 e 61 mostram os detalhes das trajetórias seguidas pelo nadador para o caso com ângulo de abertura de  $10^\circ$ . Como pode-se notar, as políticas para o nadador de 4 corpos e o nadador de 6 corpos, envolvem sequências nas quais apenas duas articulações são ativadas, que são a sequência  $[0, 2, 0, 2, \dots]$  e a sequência  $[1, 3, 1, 3, \dots]$ , enquanto que para o nadador de 10 corpos a sequência aprendida é mais complexa, envolvendo a ativação de 4 articulações, sendo estas  $[1, 3, 5, 7, 1, 3, 5, 7, \dots]$ . Partindo de um certo estado inicial, após executar estas sequências, o nadador retorna no estado original. Nos detalhes, pode-se notar claramente a diferenças entre os distintos nadadores, tanto no que diz respeito a forma da trajetória, quanto na amplitude do movimento. Notar que em cada caso, o tamanho da região sendo mostrada nas figuras é diferente, sendo para o nadador de 4 corpos uma região quadrada de lado 0.2, para o nadador de 6 corpos uma região quadrada de lado 1 e finalmente, para o nadador de 10 corpos, uma região quadrada de lado 4. Neste último caso, podemos observar os corpos que compõem o nadador, os quais são de tamanho comparável.

Para concluir esta parte, na tabela 9 reportamos as velocidades de rotação como função do ângulo de abertura das articulações para o nadador de 4, 6 e 10 corpos. A velocidade é calculada somando as recompensas originadas de cada ação e dividindo pelo tempo total envolvido na realização do ciclo, o qual é igual ao número total de ações executadas  $n$  ao longo de um ciclo pelo tempo de cada ação, que nos experimentos foi considerado igual a 1 unidade de tempo, i.e.,

$$\omega_{\text{num}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Delta\theta_i$$

em que  $\Delta\theta_i$  é a recompensa (i.e., a variação do ângulo do corpo de referência, indicado com cor azul nos gráficos) devido a ação  $i$ .

### 4.3.2 Movimentos compostos - Aplicação do algoritmo on-policy

Para o estudo de movimentos compostos será necessário utilizar o algoritmo que chamamos de aprendizado ativo. Neste caso iremos estudar o movimento de nado que consiste de duas etapas:

Figura 53 – Rotação do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações  $[0, 2, 0, 2]$ .

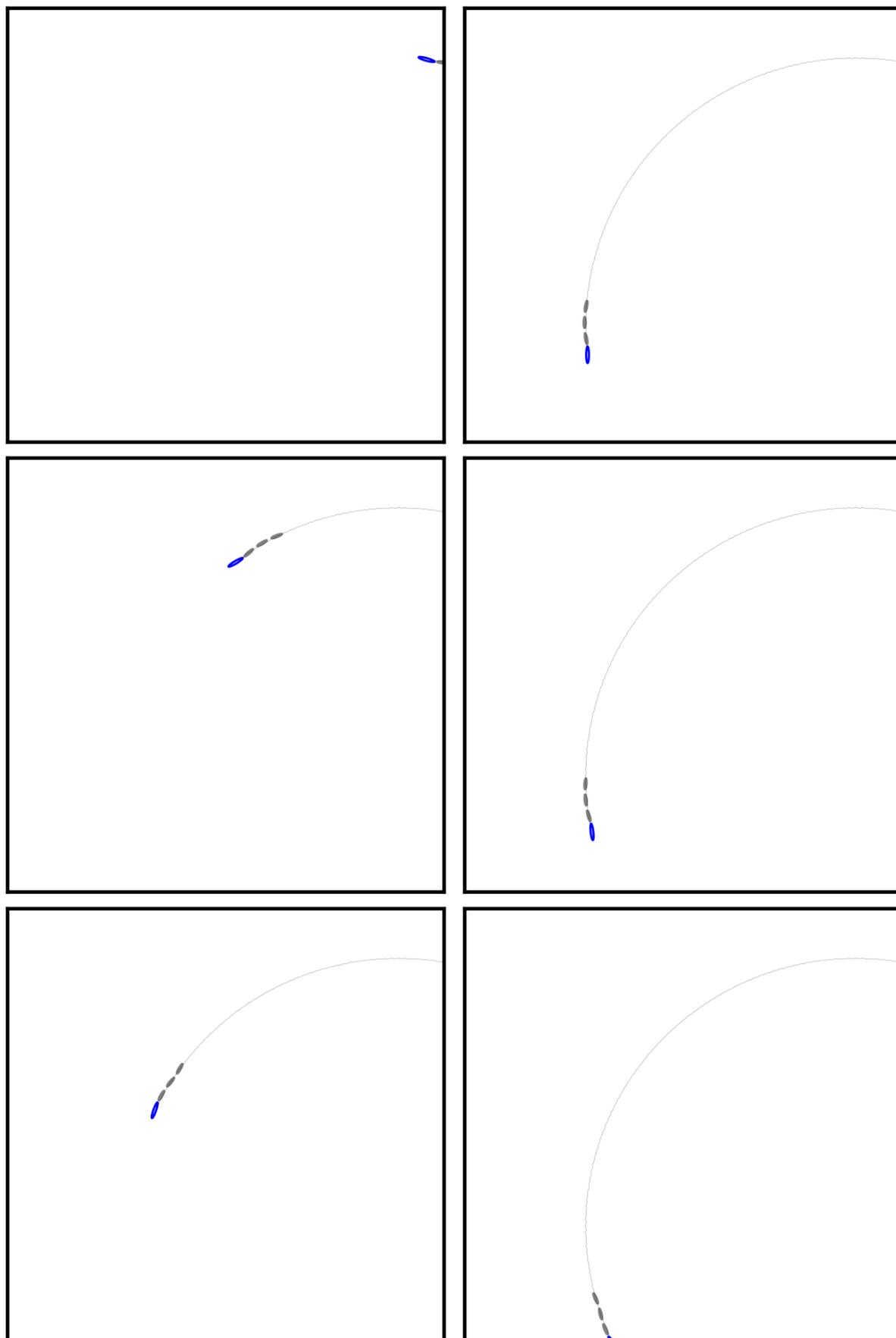


Figura 54 – Rotação do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações  $[0, 2, 0, 2]$ .

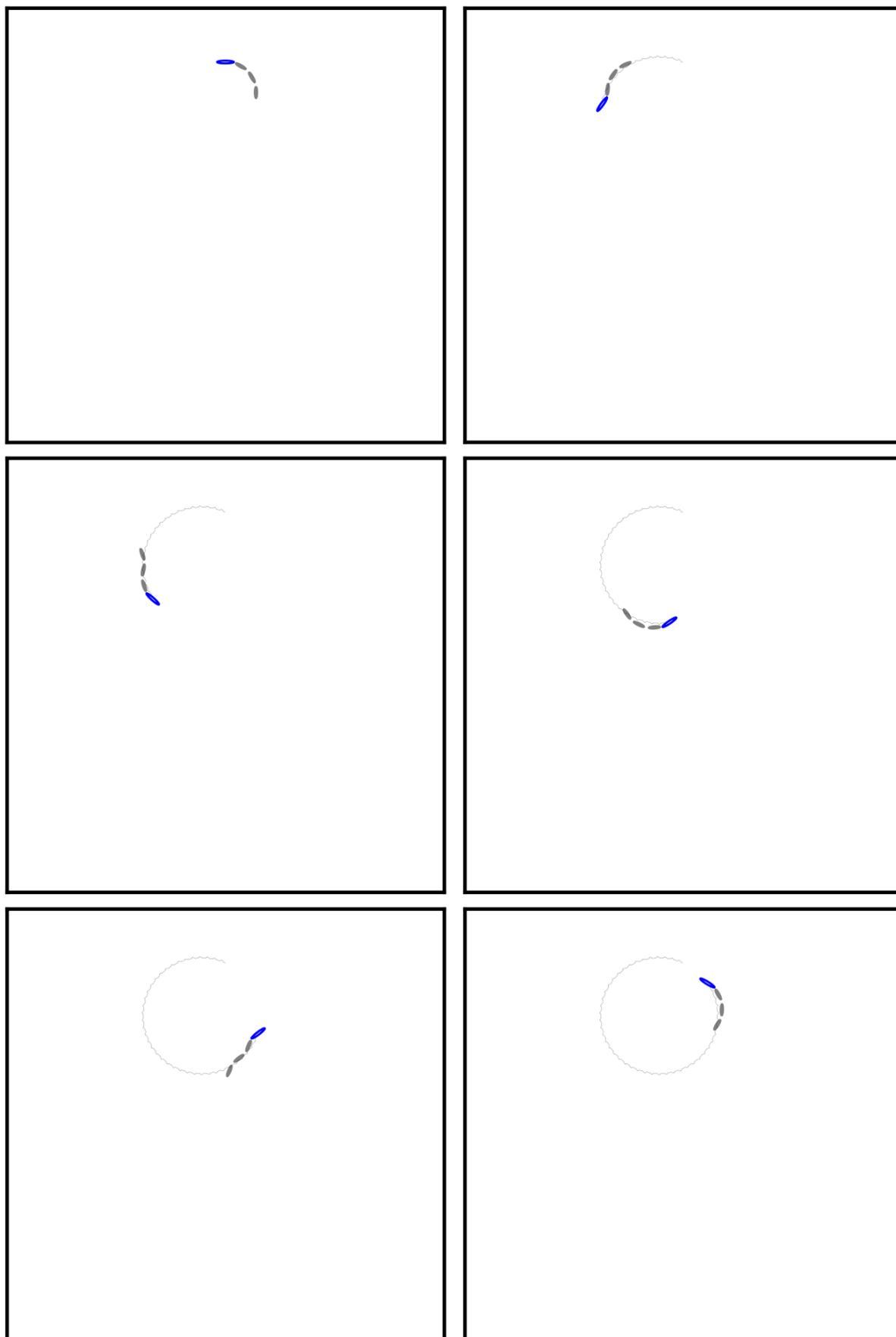


Figura 55 – Rotação do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,1,3].

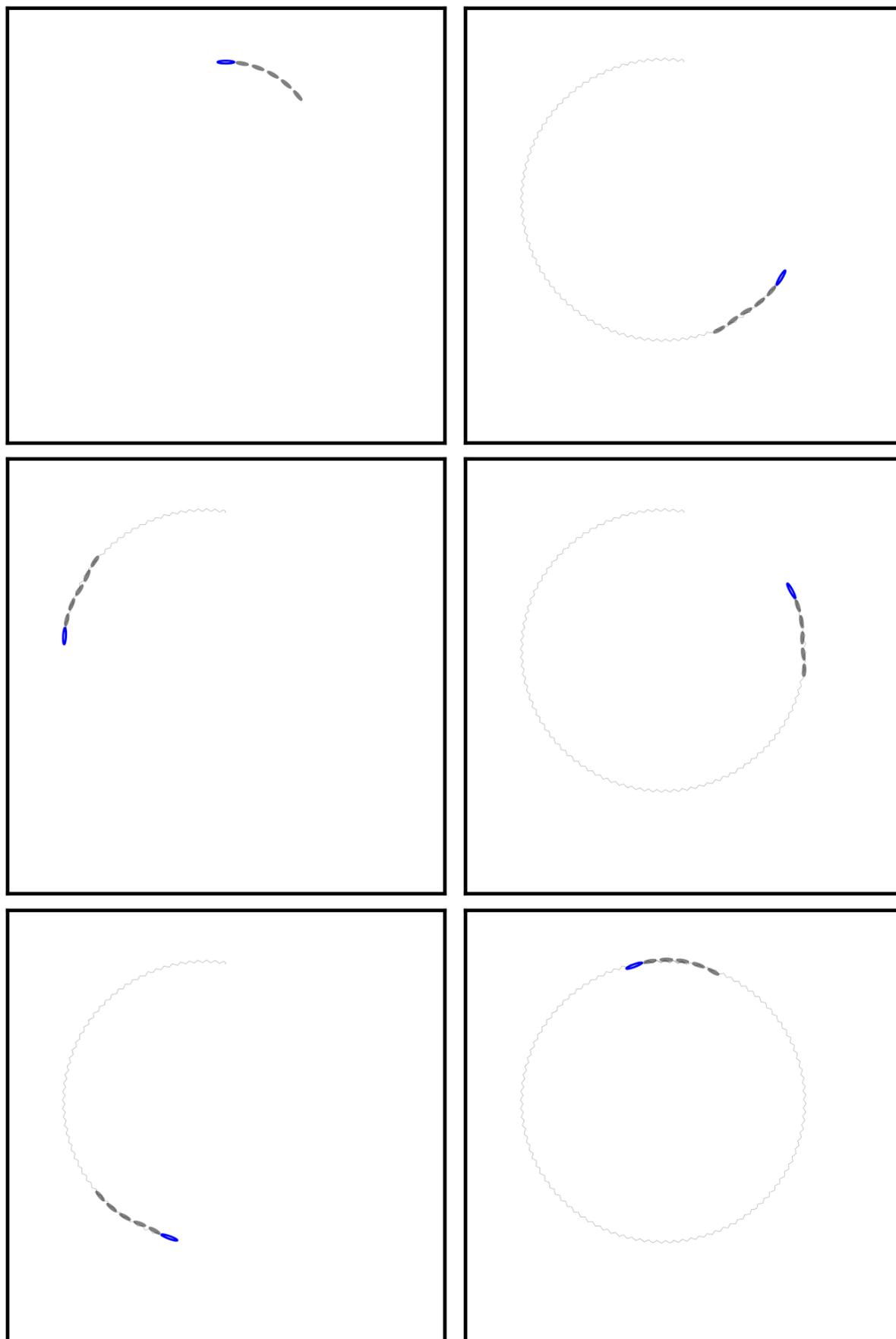


Figura 56 – Rotação do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,1,3].

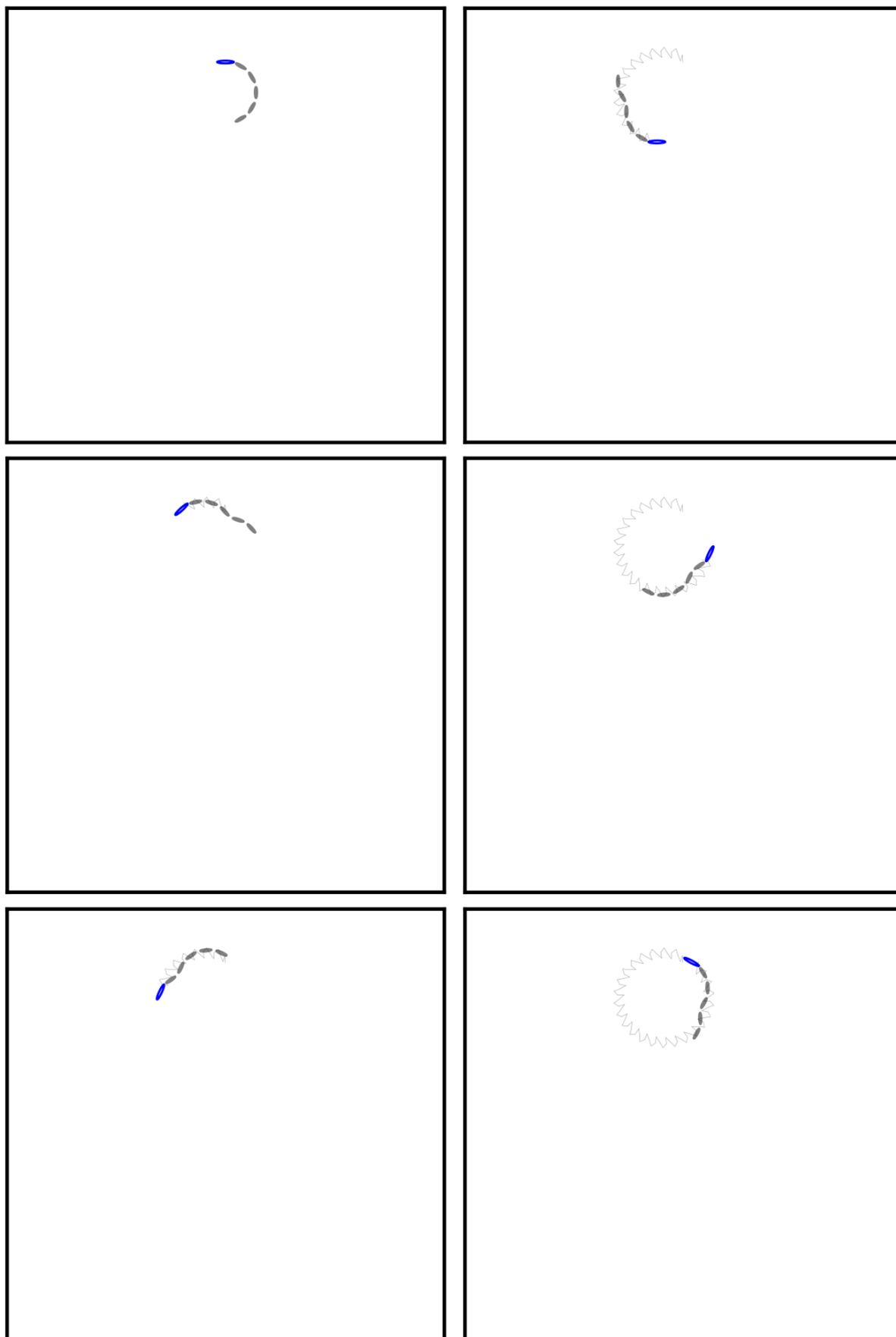


Figura 57 – Rotação do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,5,7,1,3,5,7].

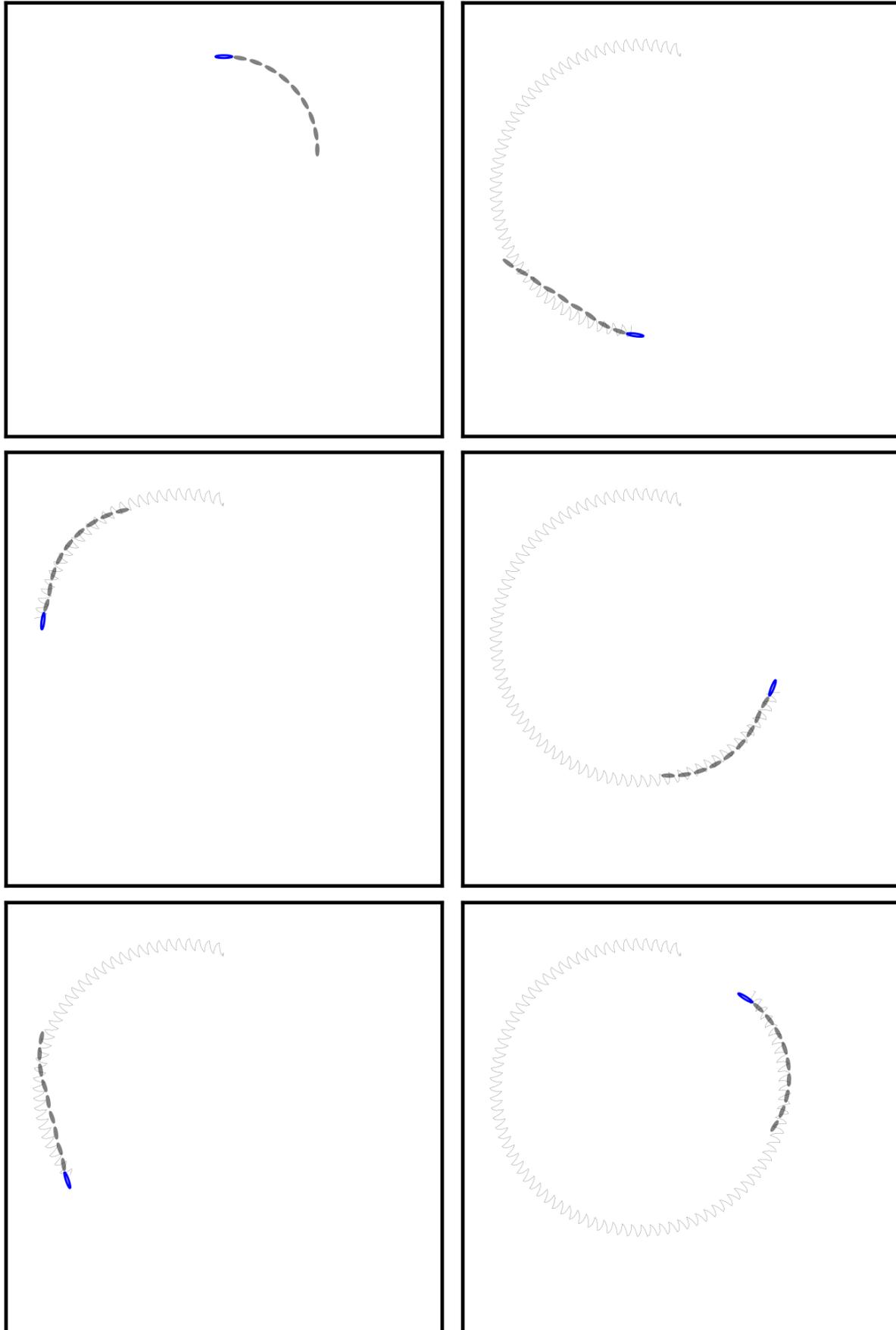


Figura 58 – Rotação do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico. Trajetória e posição do nadador em diferentes tempos para um ângulo de abertura das articulações de  $30^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,5,7,1,3,5,7].

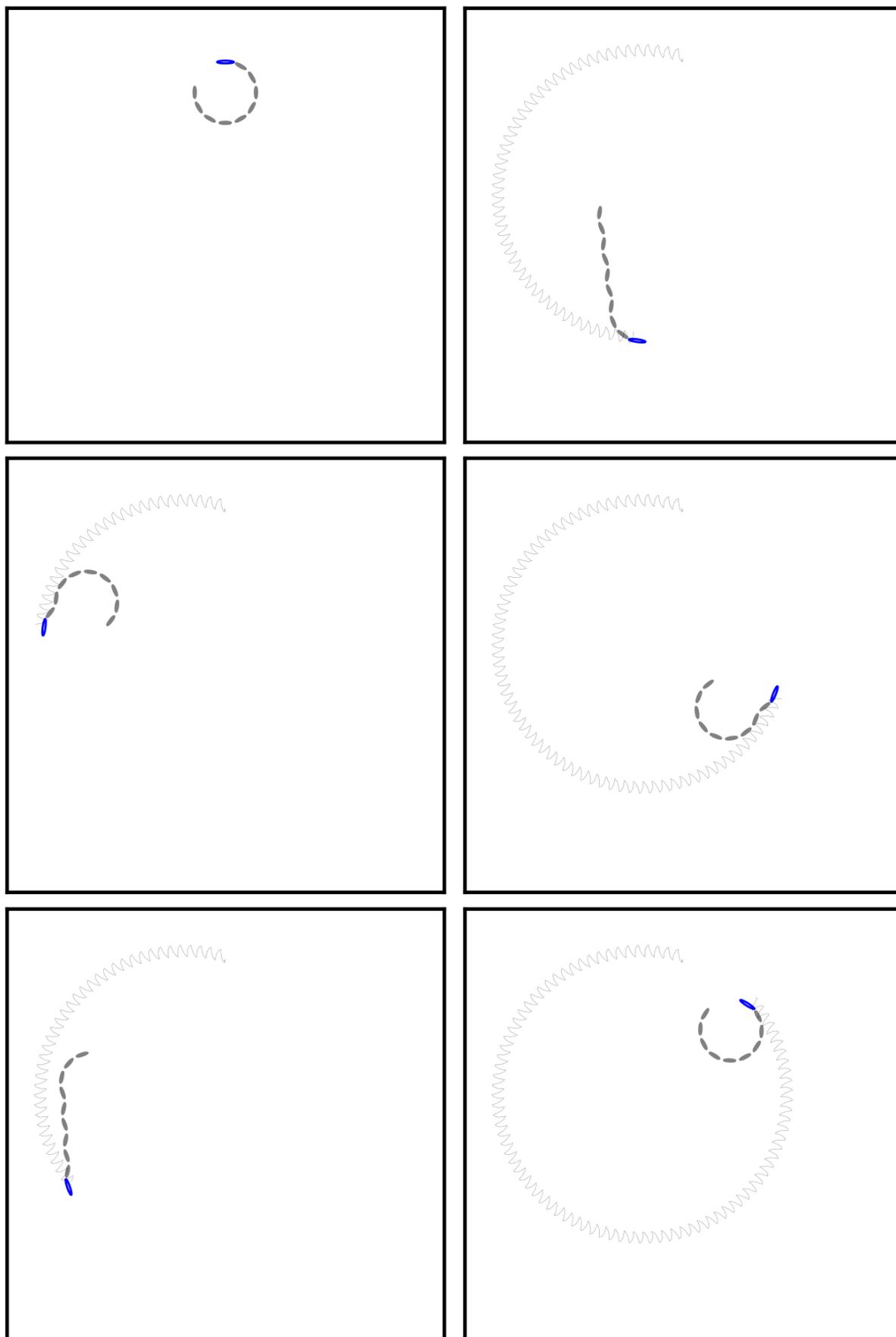
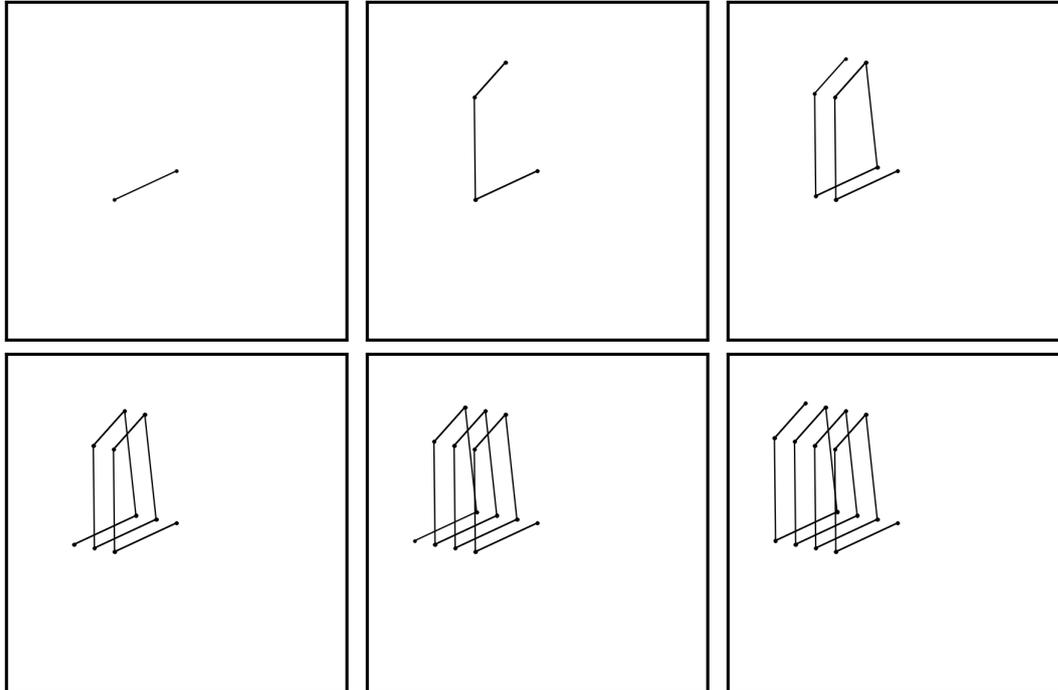


Figura 59 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 4 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações  $[0, 2, 0, 2]$ . A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 0.2.

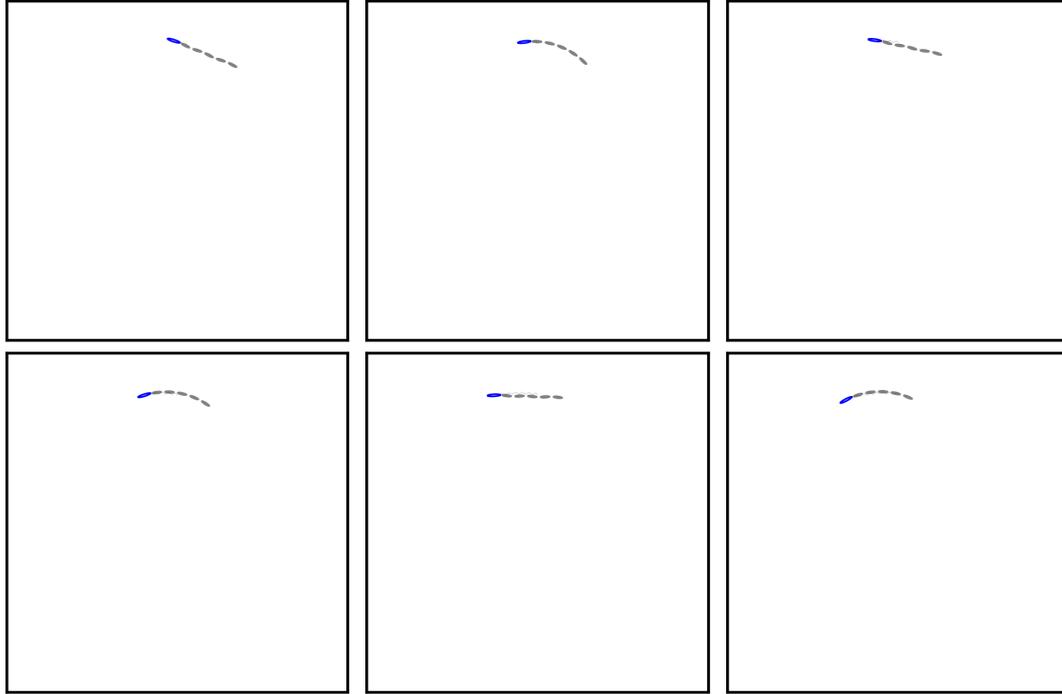


Fonte: Elaborada pelo autor.

Tabela 9 – Velocidade de rotação correspondentes às políticas aprendidas usando AR determinístico, para o nadador do tipo snake com 4, 6 e 10 corpos, considerando diferentes ângulos de abertura das articulações.

$\xi_{\min \max}$	4 corpos	6 corpos	10 corpos
10	0.00358	0.01632	0.06886
15	0.01561	0.05637	0.23239
20	0.04073	0.13904	0.60956
25	0.07738	0.27523	1.22919
30	0.13728	0.49207	2.50388
35	0.21738	-	-

Figura 60 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 6 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1, 3, 1, 3]. A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 1.



Fonte: Elaborada pelo autor.

- a. Rotacionar até um ângulo alvo  $\Theta_\alpha \pm \delta_\theta$ .
- b. Deslocar em linha reta nessa direção com o corpo de referência na frente.

sendo  $\delta_\theta$  uma tolerância dentro da qual o nadador é considerado que possui a orientação desejada. Nos experimentos numéricos será adotado para  $\delta_\theta$  um valor um 10% a mais do que a máxima variação de ângulo que o corpo de referencia pode experimentar, i.e.,

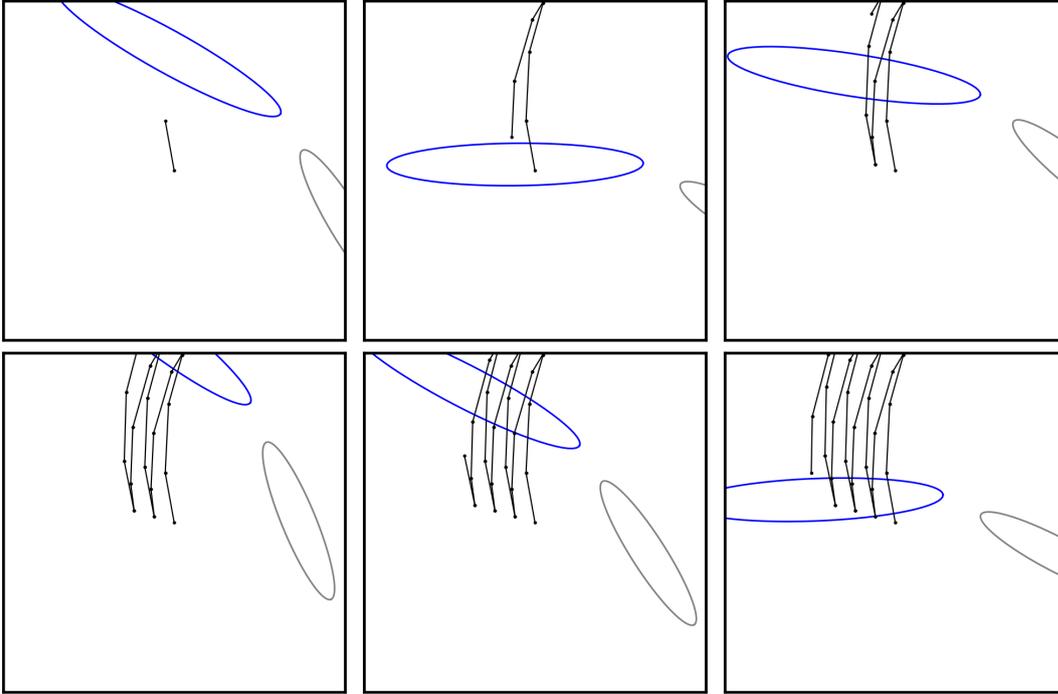
$$\delta_\theta = 1.1 \max_{s, \alpha} r_\theta(s, \alpha)$$

em que  $r_\theta(s, \alpha)$  denota a recompensa de realizar a ação  $\alpha$  no estado  $s$ . Neste ponto, precisamos lembrar que o movimento de translação é executado a partir da atualização da posição do centro de massas do nadador, i.e.,

$$\mathbf{x}_{\text{cm}}^{\text{m,new}} = \mathbf{x}_{\text{cm}}^{\text{m,old}} + \Delta \mathbf{x}_{\text{cm}}^{\text{m}} \quad (4.3)$$

em que  $\Delta \mathbf{x}_{\text{cm}}^{\text{m}}$  é o deslocamento do centro de massas devido a realizar uma ação determinada no estado corrente. Este deslocamento poder ser pre-calculado (numa fase *offline*), como dito anteriormente. Para isto, simplesmente é calculado o descolamento líquido produzido em cada possível estado do nadador e para cada possível ação a ser executada nesse estado. Porém, isto será realizado para um certo ângulo de orientação fixo do corpo de referência, sendo então

Figura 61 – Detalhe da trajetória do nadador de tipo snake com 10 corpos obtida via AR determinístico pra um ângulo de abertura das articulações de  $10^\circ$ . A política ótima corresponde a sequência de ações [1,3,5,7]. A região sendo mostrada corresponde a um quadrado de lado 4.



Fonte: Elaborada pelo autor.

necessário aplicar a transformação na sequência

$$\Delta \mathbf{x}_{cm}^m = \mathbb{R}_{\theta^m} \cdot \Delta \mathbf{x}_{cm}^{m,ref}$$

em que  $\mathbb{R}_{\theta^m}$  é a matriz de rotação correspondente ao ângulo atual  $\theta^m$ .

Para um nadador de  $n_c$  corpos, teremos que o número de estados possíveis será denotando este por  $n_e$ , eles vem dados por

$$N_{estados} = N_e = 2 \times 2^{n_c-1}, \quad N_{ações} = N_a = n_c - 1$$

i.e., a matriz  $Q$  terá o dobro de linhas que nos casos estudados anteriormente. Essencialmente, podemos pensar que a matriz  $Q$  estará formada por um bloco de linhas que codifica o política de rotação até o ângulo alvo e outro bloco que codifica a política de translação:

$$Q = \begin{bmatrix} Q_{rotação} \\ \text{-----} \\ Q_{translação} \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

Lembremos que o algoritmo de aprendizado ativo, além de depender dos metaparâmetros  $\alpha$  (taxa de aprendizado) e  $\gamma$  (taxa de desconto), também dependerá da probabilidade de escolha

de ações aleatórias  $\varepsilon$ . Eventualmente, o aprendizado também dependerá da taxa de decaimento deste probabilidade, a qual se calcula em geral segundo a regra

$$\varepsilon_m = \varepsilon_\infty + (\varepsilon_\infty - \varepsilon_0)e^{-\alpha m} \quad (4.5)$$

em que  $m$  é o índice que denota a iteração no algoritmo de Q-learning,  $\varepsilon_0$  o valor adotado para esta probabilidade no início do aprendizado e  $\varepsilon_\infty$  o valor assintótico. Claramente, se tomarmos  $\varepsilon_\infty = \varepsilon_0$  o valor será mantido constante ao longo das iterações, que é o que será feito nos experimentos a serem mostrados na sequência.

Neste problema iremos adotar a lei para o cálculo da recompensa dada por

$$r(\theta_m, \mathbf{x}_{cm}^m) = \begin{cases} r_{rot}^m & \text{if } \theta \notin [\Theta_a - \delta_\theta, \Theta_a + \delta_\theta] \\ r_{trans}^m & \text{if } \theta \in [\Theta_a - \delta_\theta, \Theta_a + \delta_\theta] \end{cases} \quad (4.6)$$

em que  $\theta_m$  é o ângulo atual e  $\mathbf{x}_{cm}^m$  é a posição do centro de massas do nadador no passo de aprendizado  $m$ . A sua vez as recompensas  $r_{rot}$  e  $r_{trans}$  são calculadas como

$$r_{rot}^m = \text{dist}(\theta^m, \Theta_a) - \text{dist}(\theta^{m-1}, \Theta_a) \quad (4.7)$$

onde  $\text{dist}(\theta^m, \Theta_a)$  denota a distância angular de  $\theta^m$  ao ângulo alvo  $\Theta_a$  e

$$r_{trans}^m = -\Delta \mathbf{x}_{cm}^m \cdot [\cos(\Theta_a), \sin(\Theta_a)]^T \quad (4.8)$$

Isto se materializa no código mostrado na sequência para ilustrar a funcionamento e simplicidade do algoritmo programado

```

1: def ComputeReward(theta, x, y):
2:     in_cone = IsinCone(theta)
3:     if(in_cone == True):
4:         return RewardRotation(theta, target)
5:     else:
6:         return RewardTranslation(theta, x, y)

```

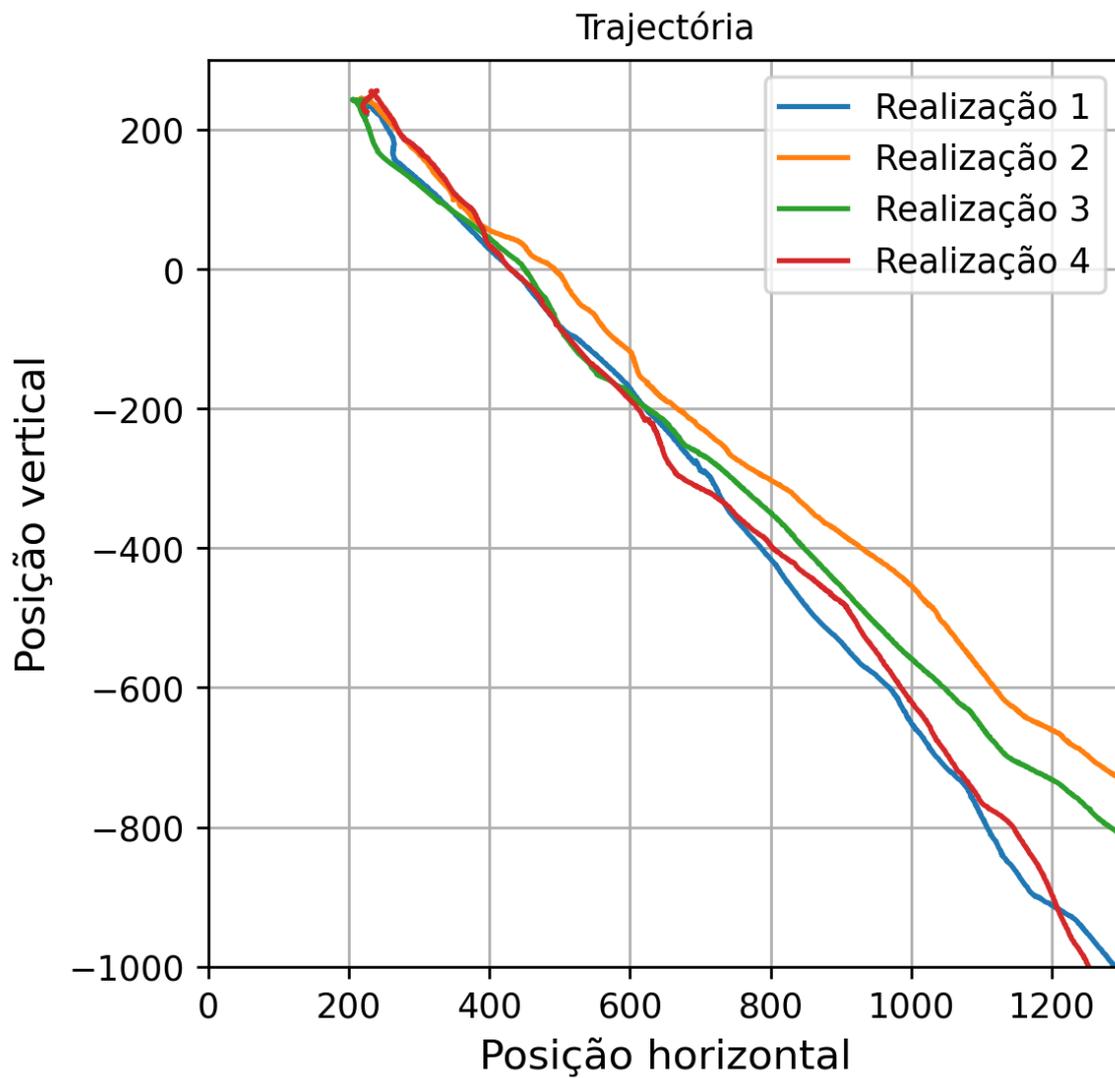
Como primeiro resultado mostramos na figura 62 várias trajetórias típicas resultantes do processo de aprendizado ativo para um caso com  $\Theta_a = -\frac{\pi}{4}$  para um nadador formado por 6 corpos. Os valores adotados para os metapâmetros foram

$$\gamma = 0.9999, \quad \varepsilon_\infty = \varepsilon_0 = 0.2, \quad \alpha = 1$$

A condição inicial corresponde a um ângulo  $\theta = 0$  com o corpo de referência a esquerda do resto dos corpos de nadador. O estado inicial corresponde a todas as articulações na sua posição de ângulo mínimo.

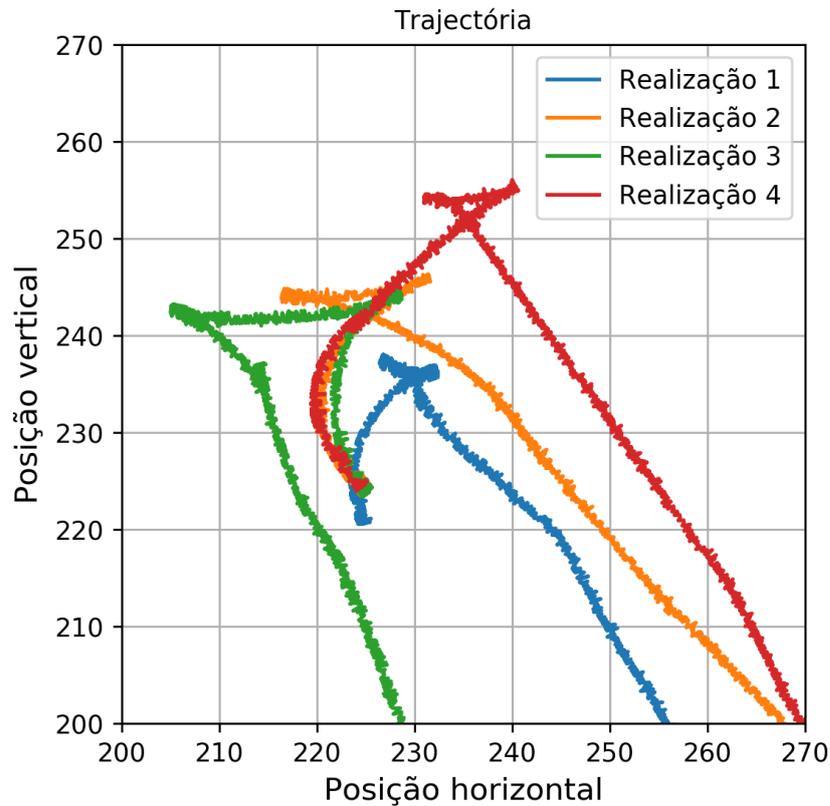
Neste caso o ângulo de abertura e fechamento das articulações foi de  $20^\circ$ . Pode ser observado em todos os casos que o nadador adota uma política de rotação em duas etapas até

Figura 62 – Trajetórias seguidas pelo nadador de 6 corpos em diferentes realizações do experimento de aprendizado de uma tarefa composta, a qual consiste de um movimento de rotação até um ângulo alvo e posterior translação.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 63 – Detalhe da figura 62.



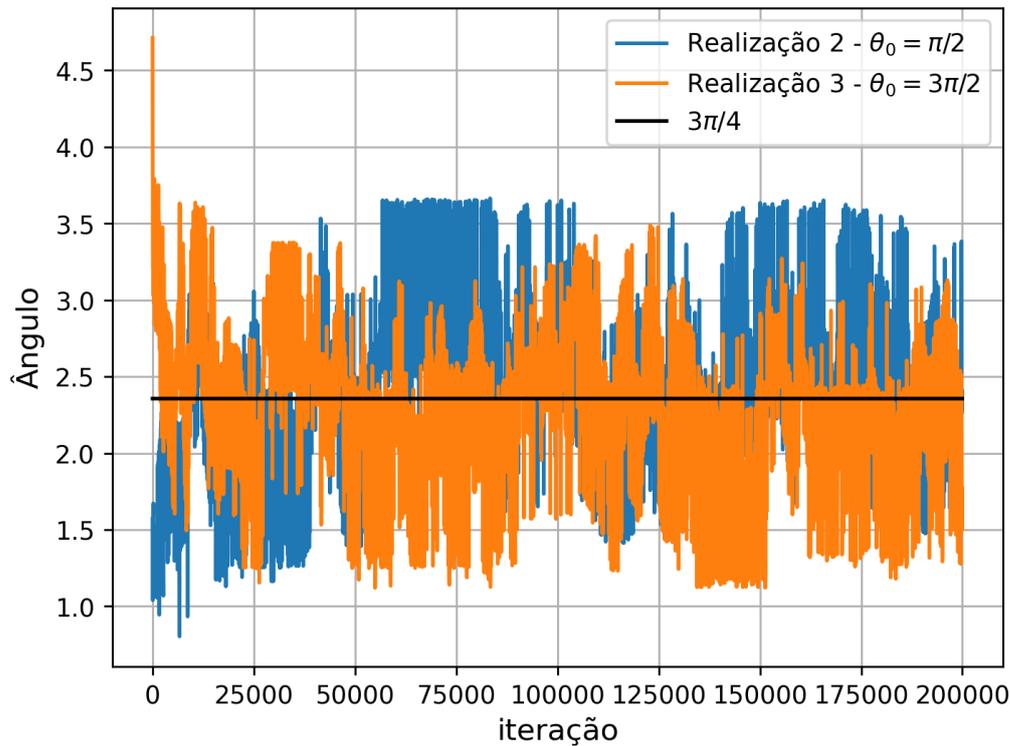
Fonte: Elaborada pelo autor.

ficar orientado na direção aproximada almejada, com o corpo principal apontando na direção sudeste, e posteriormente este começa a executar uma política de translação, a qual vai sendo ajustada a medida que avança, para finalmente estabelecer a política definitiva, sempre mantendo-se dentro da janela angular permitida. Isto significa que a matriz  $Q$  no algoritmo de aprendizado, está mudando ao longo do processo. Por isto, o que interessa neste caso não é a convergência a uma matriz  $Q$  fixa, mas, a sequência de estados e ações percorrida ao longo do processo, e a possibilidade de modificar de forma ativa a matriz para atingir o objetivo.

Outro ponto a mencionar, é que a política adotada depende do ângulo inicial do nadador, mas precisamente, da distância deste ao ângulo alvo  $\Theta_a$ . Como ilustração disto, na figura 64 mostramos o ângulo como função das iterações considerando ângulos iniciais  $\theta = \pi/2$  e  $\theta = 3\pi/2$ .

Podemos notar que neste caso o nadador adota trajetórias diferentes para atingir o ângulo alvo. No caso do nadador iniciando no ângulo  $\theta = \pi/2$  o nadador rotaciona em sentido antihorário, enquanto que para o nadador iniciando em  $\theta = 3\pi/2$  ele rotaciona no sentido horário, para atingir a orientação sudeste almejada. Isto pode ser melhor notado na figura 65 que mostra o processo inicial até atingir o ângulo alvo.

Figura 64 – Evolução do ângulo como função das iterações para diferentes condições iniciais.

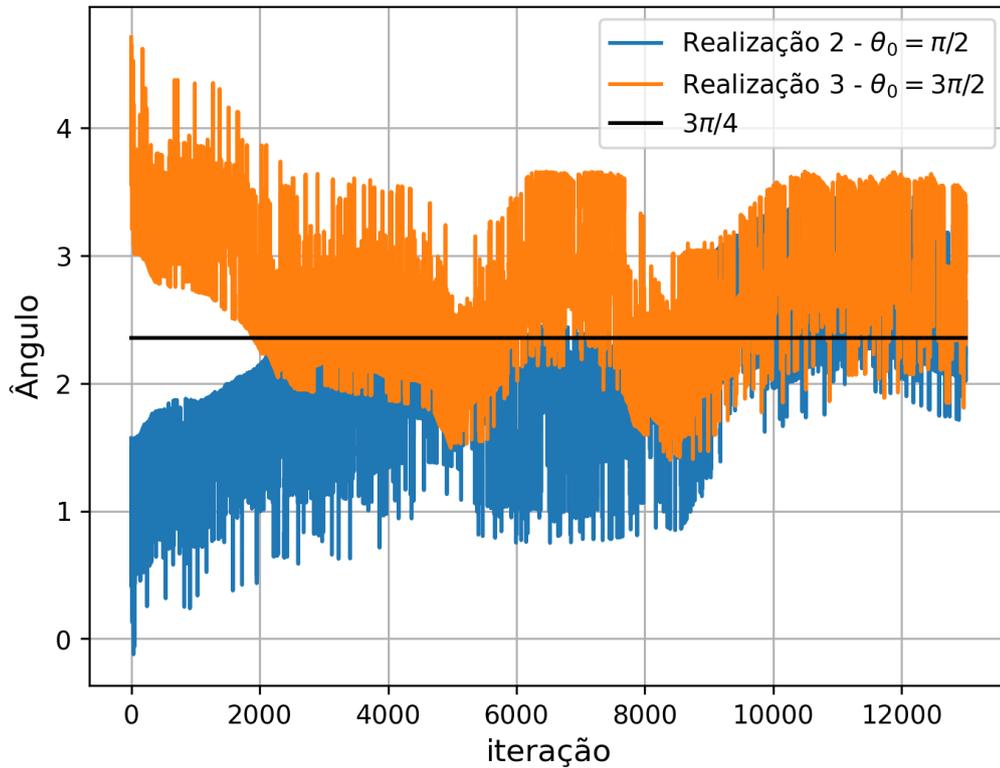


Fonte: Elaborada pelo autor.

Na sequência, estudamos o efeito dos metaparâmetros nos resultados obtidos. Primeiramente, consideramos o efeito da taxa de desconto  $\gamma$ . Para isto, na figura 66 mostra-se a recompensa acumulada ao longo dos passos de aprendizado para diferentes valores da  $\gamma$ , que foram, 0.99999, 0.9999, 0.999, 0.99, 0.9. O interessante de se notar é que para valores baixos de  $\gamma$  o algoritmo não consegue completar o aprendizado, isto é particularmente evidente para o menor valor  $\gamma = 0.9$ . Já para valores maiores de  $\gamma$ , particularmente a taxa de aprendizado é aproximadamente a mesma, isto pode-se notar comparando a inclinação da reta, a qual é muito similar para todos os casos com  $\gamma \geq 0.999$ .

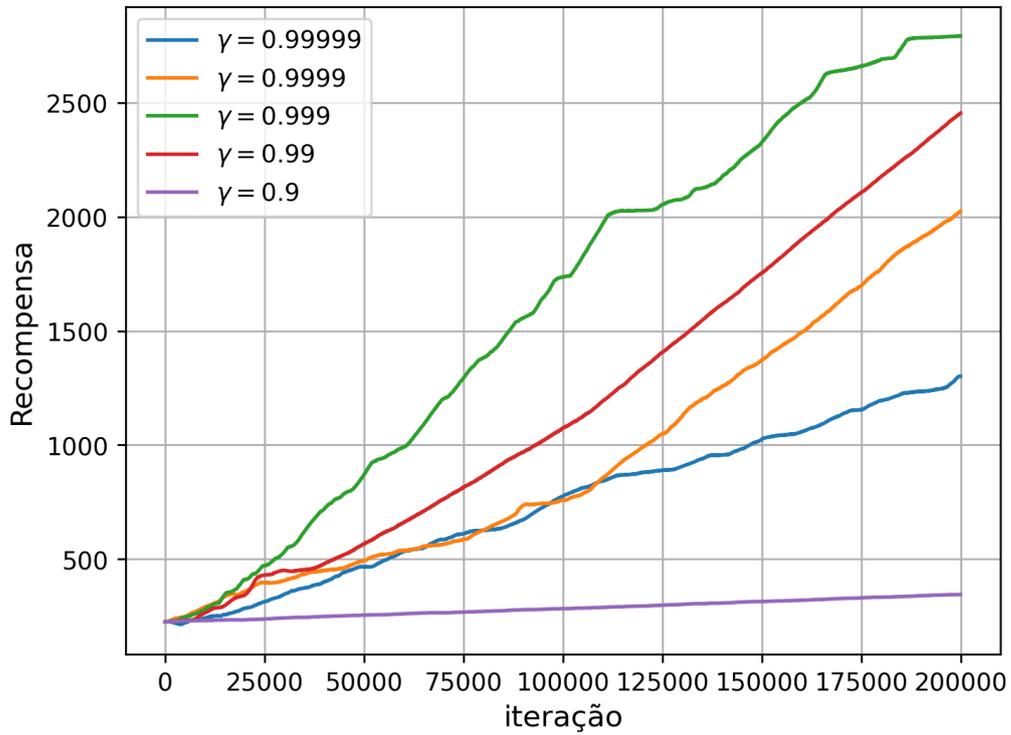
Outro parâmetro que tem um papel fundamental no taxa de aprendizado é a probabilidade de escolhas aleatórias de ações, que é definida pelo parâmetro  $\epsilon$ . Num primeiro estudo, consideramos um valor constante do parâmetro ao longo dos passos de aprendizado. Na figura 67 mostra-se a recompensa ao longo das iterações para diferentes valores da probabilidade. Neste experimento de aprendizado ativo, o interessante é notar que não é conveniente tomar uma taxa muito grande de escolhas aleatórias de ações, pois neste caso o algoritmo essencialmente não converge a uma matriz  $Q$  em que uma política da nado possa ser extraída. Por outro lado se a taxa de escolha de ações aleatórias for muito baixa, o algoritmo não consegue explorar o espaço de possíveis estados e ações o que se traduz numa taxa de aprendizado praticamente nula. No gráfico pode-se notar que a inclinação da curva é baixa para valores de  $\epsilon \sim 0.9$ , ela

Figura 65 – Detalhe da 64.

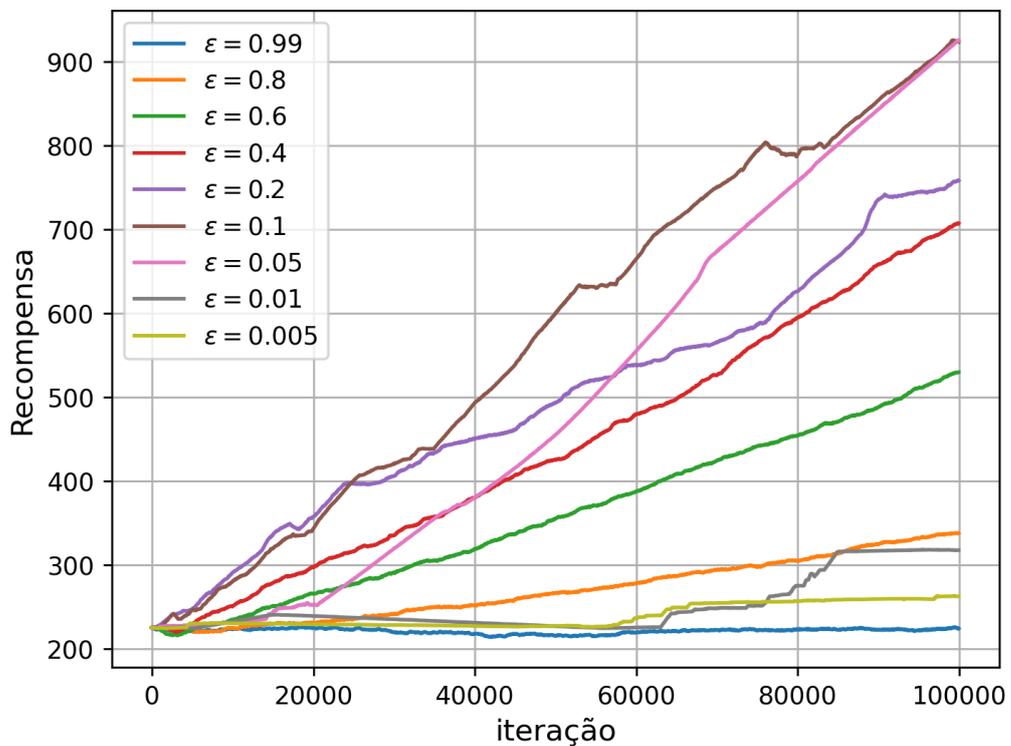


Fonte: Elaborada pelo autor.

começa aumentar para  $0.9 < \varepsilon < 0.05$  e volta para valores baixos para  $\varepsilon \sim 0.01$ . Finalmente, podemos ver que o valor de  $\varepsilon$  que produz as maiores taxas de aprendizado se encontra entre 0.05 e 0.2 aproximadamente. Resulta claro que um estudo exaustivo deste aspecto deveria incluir uma análise estatística, para o qual é necessário a efetuar alguns milhares de realizações do experimento. Para visualizar melhor a dispersão de resultados obtidos, na figura 68 mostramos o comportamento da recompensa ao longo das iterações para  $\varepsilon = 0.1$  considerando 10 realizações do mesmo experimento, destacando o envelope com a menor e a maior curva. Como pode-se ver existe uma certa dispersão de resultados ao redor de um valor médio. Comparando com os resultados da figura 67, notamos que a curva com o limite inferior encontra-se bastante acima dos resultados correspondentes para valores de  $\varepsilon > 0.2$ . Isto mostra que neste tipo de experimentos, valores próximos de  $\varepsilon$  ao redor de 0.1 – 0,2 fornecem resultados com taxas de aprendizado superiores.

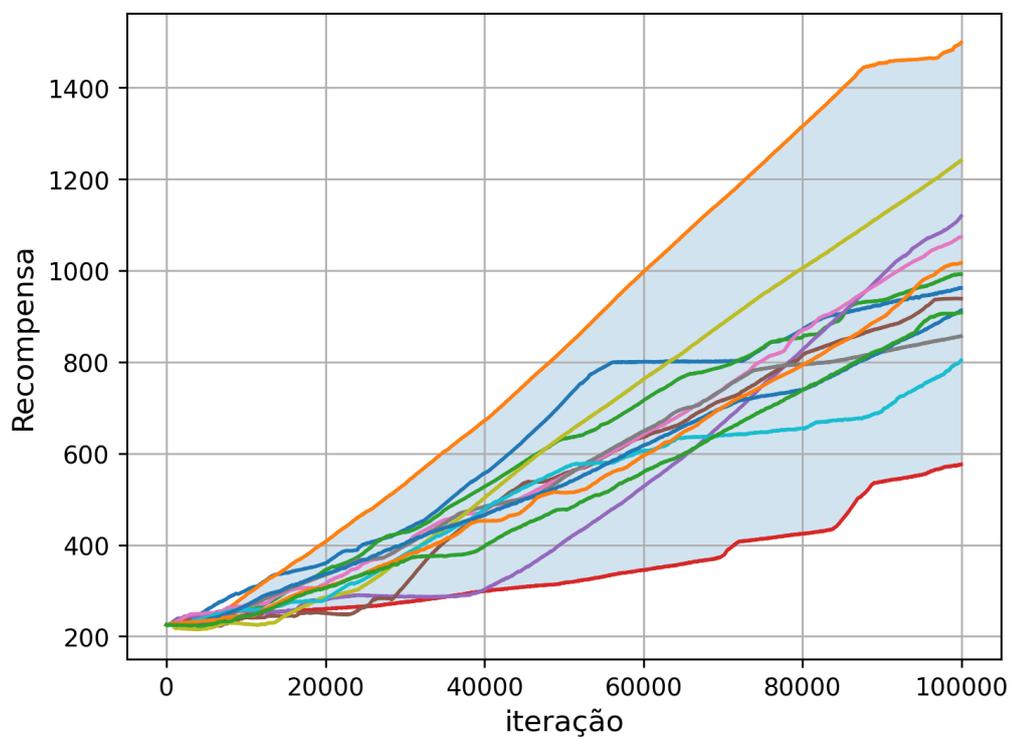
Figura 66 – Recompensa ao longo das iterações variando o parâmetro  $\gamma$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 67 – Recompensa ao longo das iterações variando o parâmetro  $\epsilon$ .

Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 68 – Recompensa ao longo das iterações para  $\epsilon = 0.1$  considerando diferentes realizações do experimento.



Fonte: Elaborada pelo autor.



---

## CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

---

Nos capítulos anteriores foram apresentadas as formulações matemáticas e numéricas para resolver o problema de interação Fluido-Sólido (*Fluid-Solid-Interaction*) governado pelas equações de conservação da quantidade de movimento no caso incompressível. Nos problemas de interesse para este trabalho, os efeitos inerciais puderam ser desprezados ( $Re \ll 1$ ), e então foi resolvida a equação de Stokes junto às equações de movimento dos sólidos rígidos. Para isto, foi proposta uma formulação monolítica, na qual a velocidade  $\mathbf{u}$  e a pressão  $p$  do fluido, eram determinadas em forma simultânea com as velocidades dos sólidos,  $\mathbf{s}$ , relacionadas com os chamados graus de liberdade posicionais dos micro nadadores, os quais são dados por um conjunto de coordenadas generalizadas, tipicamente, a posição do centro de massa e os ângulos de rotação. Para resolver numericamente o problema, foi adotada uma formulação de elementos finitos mistos estabilizados, com interpolação linear para velocidade e pressão (HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986), em malhas de triângulos não estruturadas, considerando o caso plano e o caso 2D axisimétrico. Já, para o avanço temporal foram implementados esquemas de primeira e segundo ordem teóricos, junto a algoritmos de movimentação de malha e remalhado frequente, com opção de ativação via controle de qualidade dos elementos. A formulação proposta está baseada no cálculo das forças de interação entre os corpos e o fluido via integrais volumétricas, em lugar da metodologia usual, em que estes termos são calculados via integrais de superfície sobre o contorno molhado dos corpos imersos no fluido. Mais detalhes sobre a formulação usada podem ser consultados em (PAZ; BUSCAGLIA, 2020). É importante mencionar que a implementação numérica da formulação proposta, foi realizada na plataforma de elementos finitos Fenics (ALNÆS *et al.*, 2015b), a qual tem mostrado ser uma ferramenta de grande utilidade que permite simplificar alguns aspectos computacionais do problema. Também foram apresentados vários resultados numéricos de estudos realizados com o intuito de verificar a implementação numérica e avaliar a sua precisão. Vale salientar que em alguns casos não

foi possível recuperar a ordem de convergência teórica dos esquemas de avanço temporal implementados. Em particular, para o esquema de segunda ordem, a sua excelente precisão em quanto ao nível de erro obtido pode-se destacar. De fato, com base na nossa experiência, o esquema de primeira ordem é na maioria dos casos inaplicável.

Entre os resultados apresentados, pode-se destacar o acoplamento deste resolutor com um algoritmo de aprendizado por reforço (ou *Reinforcement learning*), para encontrar estratégias de nado ótimas de micro nadadores formados por corpos esféricos e elípticos acoplados. O estudo considerou como recompensa a ser maximizada o avanço total do nadador em uma direção unidimensional e também em relação a um referencial de rotação. O método de aprendizado da política de nado ótima, foi implementado por meio de um algoritmo de *Q-learning* com uma estratégia  $\epsilon$ -greedy de otimização. Foi considerado tanto o caso de fluidos Newtonianos como de não Newtonianos, o qual foi relativamente simples de se fazer com a implementação de elementos finitos na plataforma adotada.

## REFERÊNCIAS

---

---

AGUILLON, N.; DECOENE, A.; FABRÈGES, B.; MAURY, B.; SEMIN, B. Modelling and simulation of 2d stokesian squirmers. **ESAIM Proceedings**, 2013. Citado nas páginas 27 e 29.

ALNÆS, M.; BLECHTA, J.; HAKE, J.; JOHANSSON, A.; KEHLET, B.; LOGG, A.; RICHARDSON, C.; RING, J.; ROGNES, M. E.; WELLS, G. N. The fenics project version 1.5. **Archive of Numerical Software**, v. 3, n. 100, 2015. Citado na página 43.

ALNÆS, M. S.; BLECHTA, J.; HAKE, J.; JOHANSSON, A.; KEHLET, B.; LOGG, A.; RICHARDSON, C.; RING, J.; ROGNES, M. E.; WELLS, G. N. The fenics project version 1.5. **Archive of Numerical Software**, v. 3, n. 100, 2015. Citado na página 113.

AUSAS, R. F.; GEBHARDT, C. G.; BUSCAGLIA, G. C. A finite element method for simulating soft active non-shearable rods immersed in generalized newtonian fluids. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, Elsevier, v. 108, p. 106213, 2022. Citado na página 23.

BECKER, L. E.; KOEHLER, S. A.; STONE, H. A. On self-propulsion of micro-machines at low reynolds number: Purcell's three-link swimmer. **Journal of fluid mechanics**, Cambridge University Press, v. 490, p. 15–35, 2003. Citado na página 50.

BRENNER, S. C.; SCOTT, L. R. **The Mathematical Theory of Finite Element Methods**. 3ed: Springer, 2007. Citado na página 31.

DEGAND, C.; FARHAT, C. A three-dimensional torsional spring analogy method for unstructured dynamic meshes. **Computers & structures**, Elsevier, v. 80, n. 3-4, p. 305–316, 2002. Citado na página 35.

EARL, D. J.; POOLEY, C.; RYDER, J.; BREDBERG, I.; YEOMANS, J. Modeling microscopic swimmers at low reynolds number. **The Journal of chemical physics**, AIP Publishing, v. 126, n. 6, 2007. Citado na página 55.

ELFRING, G. J.; LAUGA, E. Theory of locomotion through complex fluids. **Complex Fluids in Biological Systems: Experiment, Theory, and Computation**, Springer, p. 283–317, 2015. Citado na página 27.

ERN, A.; GUERMOND, J.-L. **Theory and practice of finite elements**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. v. 159. Citado na página 41.

GAO, W.; WANG, J. Synthetic micro/nanomotors in drug delivery. **Nanoscale**, Royal Society of Chemistry, v. 6, n. 18, p. 10486–10494, 2014. Citado na página 22.

Geuzaine, Christophe and Remacle, Jean-Francois. **Gmsh**. Disponível em: <<http://gmsh.info/>>. Citado na página 34.

- GLOWINSKI, R.; PAN, T.; HESLA, T.; JOSEPH, D.; PERIAUX, J. A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies: application to particulate flow. **Journal of Computational Physics**, n. 169(2), p. 363–426, 2001. Citado na página 31.
- GROSJEAN, G.; HUBERT, M.; LAGUBEAU, G.; VANDEWALLE, N. Realization of the najafigolestanian microswimmer. **Physical Review E**, APS, v. 94, n. 2, p. 021101, 2016. Citado na página 51.
- HARTL, B.; HÜBL, M.; KAHL, G.; ZÖTTL, A. Microswimmers learning chemotaxis with genetic algorithms. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, National Acad Sciences, v. 118, n. 19, p. e2019683118, 2021. Citado na página 23.
- HIROSE, S.; YAMADA, H. Snake-like robots machine design of biologically inspired robots [j]. **IEEE Robotics & Automation Magazine**, v. 3, 2009. Citado na página 50.
- HU., H. H.; PATANKAR, N. A.; ZHU, M. Y. Direct numerical simulations of fluid–solid systems using the arbitrary lagrangian–eulerian technique. **Journal of Computational Physics**, n. 169, p. 427–462, 2000. Citado na página 27.
- HUGHES, T. J.; FRANCA, L. P.; BALESTRA, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. circumventing the babuška-brezzi condition: a stable petrov-galerkin formulation of the stokes problem accommodating equal-order interpolations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 59, n. 1, p. 85–99, 1986. ISSN 0045-7825. Citado nas páginas 33 e 113.
- KAPRALOS, V.; KOUTROULIS, A.; ØRSTAVIK, D.; SUNDE, P. T.; RUKKE, H. V. Antibacterial activity of endodontic sealers against planktonic bacteria and bacteria in biofilms. **Journal of endodontics**, Elsevier, v. 44, n. 1, p. 149–154, 2018. Citado na página 21.
- KNUPP, P. **Remarks on Mesh Quality**. [S.l.], 2007. Citado na página 37.
- LAUGA, E. Bacterial hydrodynamics. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews, v. 48, p. 105–130, 2016. Citado na página 22.
- LI, J.; ÁVILA, B. E.-F. de; GAO, W.; ZHANG, L.; WANG, J. Micro/nanorobots for biomedicine: Delivery, surgery, sensing, and detoxification. **Science Robotics**, NIH Public Access, v. 2, n. 4, 2017. Citado na página 22.
- LÖHNER, R. Adaptive remeshing for transient problems. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, Elsevier, v. 75, n. 1-3, p. 195–214, 1989. Citado na página 38.
- MIRBAGHERI, S. A.; FU, H. C. Helicobacter pylori couples motility and diffusion to actively create a heterogeneous complex medium in gastric mucus. **Physical review letters**, APS, v. 116, n. 19, p. 198101, 2016. Citado na página 22.
- NAJAFI, A.; GOLESTANIAN, R. Simple swimmer at low reynolds number: Three linked spheres. **Physical Review E**, APS, v. 69, n. 6, p. 062901, 2004. Citado na página 54.
- \_\_\_\_\_. Simple swimmer at low reynolds number: three linked spheres. **Physical Review E**, 2004. Citado na página 50.

NASSIF, X.; BOURDOULOUS, S.; EUGÈNE, E.; COURAUD, P.-O. How do extracellular pathogens cross the blood–brain barrier? **Trends in microbiology**, Elsevier, v. 10, n. 5, p. 227–232, 2002. Citado na página 22.

NELSON, B. J.; KALIAKATSOS, I. K.; ABBOTT, J. J. Microrobots for minimally invasive medicine. **Annual review of biomedical engineering**, Annual Reviews, v. 12, p. 55–85, 2010. Citado na página 22.

NGUYEN, N.-T.; WERELEY, S.; SHAEGH, S. A. M. **Fundamentals and applications of microfluidics**. [S.l.]: Artech house, 2019. Citado na página 27.

PAZ, S.; AUSAS, R. F.; CARBAJAL, J. P.; BUSCAGLIA, G. C. Chemoreception and chemotaxis of a three-sphere swimmer. **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, Elsevier, v. 117, p. 106909, 2023. Citado nas páginas 24 e 84.

PAZ, S.; BUSCAGLIA, G. C. Simulating squirmes with volumetric solvers. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Science and Engineering**, 2020. Citado nas páginas 31, 33 e 113.

PESKIN, C. S. The immersed boundary method. **Acta numerica**, Cambridge University Press, v. 11, p. 479–517, 2002. Citado na página 34.

PURCELL, E. M. Life at low reynolds number. **American journal of physics**, American Association of Physics Teachers, v. 45, n. 1, p. 3–11, 1977. Citado nas páginas 22 e 83.

SAINTILLAN, D. Rheology of active fluids. **Annual Review of Fluid Mechanics**, Annual Reviews, v. 50, p. 563–592, 2018. Citado na página 22.

SANCHEZ, S.; SOLOVEV, A. A.; SCHULZE, S.; SCHMIDT, O. G. Controlled manipulation of multiple cells using catalytic microbots. **Chemical Communications**, Royal Society of Chemistry, v. 47, n. 2, p. 698–700, 2011. Citado na página 22.

SILVA, P. J. A. D.; DELLIER, L.; AUSAS, R. F.; BUSCAGLIA, G. C.; PAZ, S. Aprendizado de estratégias de propulsão de micronadadores a baixo número de reynolds. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 9, n. 1, 2022. Citado na página 84.

SOLER, L.; MAGDANZ, V.; FOMIN, V. M.; SANCHEZ, S.; SCHMIDT, O. G. Self-propelled micromotors for cleaning polluted water. **ACS nano**, ACS Publications, v. 7, n. 11, p. 9611–9620, 2013. Citado na página 22.

SOLOVEV, A. A.; XI, W.; GRACIAS, D. H.; HARAZIM, S. M.; DENEKE, C.; SANCHEZ, S.; SCHMIDT, O. G. Self-propelled nanotools. **Acs Nano**, ACS Publications, v. 6, n. 2, p. 1751–1756, 2012. Citado na página 22.

SOUZA, L. D. A. d.; BUSCAGLIA, G. C.; AUSAS, R. F.; SANCHEZ, S. P. Experimentos de aprendizado por reforço para micro nadadores articulados virtuais. **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**, v. 10, n. 1, p. 010052–1, 2023. Citado na página 84.

SPAGNOLIE, S. E. **Complex Fluids in Biological Systems**. [S.l.]: Springer, 2015. Citado na página 27.

- STEIN, K.; TEZDUYAR, T.; BENNEY, R. Mesh moving techniques for fluid-structure interactions with large displacements. **J. Appl. Mech.**, v. 70, n. 1, p. 58–63, 2003. Citado na página [35](#).
- STEWART, P. S. Mechanisms of antibiotic resistance in bacterial biofilms. **International journal of medical microbiology**, Elsevier, v. 292, n. 2, p. 107–113, 2002. Citado na página [21](#).
- SUTTON, R. S.; BARTO, A. G. **Reinforcement Learning: An Introduction**. 2ed: A Bradford Book, 2018. Citado na página [84](#).
- SUZUKI, M.; TSUJI, T.; OHTAKE, H. A model of motor control of the nematode *c. elegans* with neuronal circuits. **Artificial Intelligence in Medicine**, Elsevier, v. 35, n. 1-2, p. 75–86, 2005. Citado na página [50](#).
- VILELA, D.; PARMAR, J.; ZENG, Y.; ZHAO, Y.; SÁNCHEZ, S. Graphene-based microbots for toxic heavy metal removal and recovery from water. **Nano letters**, ACS Publications, v. 16, n. 4, p. 2860–2866, 2016. Citado na página [22](#).
- WIEZEL, O.; RAMASAMY, S.; JUSTUS, N.; OR, Y.; HATTON, R. L. Geometric analysis of gaits and optimal control for three-link kinematic swimmers. **Automatica**, Elsevier, v. 158, p. 111223, 2023. Citado na página [23](#).
- YASUDA, K.; HOSAKA, Y.; KOMURA, S. Generalized three-sphere microswimmers. **Journal of the Physical Society of Japan**, The Physical Society of Japan, v. 92, n. 12, p. 121008, 2023. Citado na página [51](#).
- YEOMANS, J. M.; PUSHKIN, D. O.; SHUM, H. An introduction to the hydrodynamics of swimming microorganisms. **The European Physical Journal Special Topics**, Springer, v. 223, n. 9, p. 1771–1785, 2014. Citado na página [22](#).
- ZOU, Z.; LIU, Y.; YOUNG, Y.-N.; PAK, O. S.; TSANG, A. C. Gait switching and targeted navigation of microswimmers via deep reinforcement learning. **Communications Physics**, Nature Publishing Group UK London, v. 5, n. 1, p. 158, 2022. Citado na página [23](#).

