

Aprendizado de estratégias de propulsão de micronadadores a baixo número de Reynolds

Paula Jaíne A. Da Silva¹, Luciano Dellier², Roberto F. Ausas³, Gustavo C. Buscaglia⁴
Instituto de Ciências Matemáticas e Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP
Stevens Paz⁵

Departamento de Matemáticas, Universidad del Valle, Calle 13 No. 100-00, Cali, Colombia

Resumo. O interesse em estudar micronadadores biológicos ou sintéticos tem crescido devido as suas habilidades de acessar pequenos espaços e de manipular e interagir com pequenas entidades nesse ambiente. No entanto, o nado nessas escalas implica em desafios para desenvolver estratégias de propulsão eficientes. Neste contexto, o objetivo deste trabalho é apresentar uma abordagem de aprendizado que permita ao micronadador encontrar estratégias de propulsão, com base em suas interações com o meio circundante, através do acoplamento entre técnicas de CFD e Aprendizado por Reforço. Será apresentada uma formulação de elementos finitos para o problema de interação sólido-fluido e resultados que ilustram como os erros de discretização podem influir no processo de aprendizado.

Palavras-chave. (Micronadador, Aprendizado por Reforço, Interação Fluido-Estrutura, FEM)

1 Introdução

Os micronadadores são organismos biológicos ou artificiais de tamanho micrométrico com capacidade de locomoção em fluidos, que adquirem sua habilidade de nadar como consequência de forças externas ou internas e da interação com o fluido em que se encontram submersos, girando apêndices helicoidais delgados ou propagando ondas de deformação ao longo de flagelas por meio de ações de motores moleculares, como é o exemplo das bactérias em *biofilm* [7] e os espermatozoides [3]. A capacidade que estes organismos têm de acessar pequenos espaços, e de manipular e interagir com pequenas entidades nesse ambiente possibilita amplas aplicações biomédicas, tais como microcirurgia, entrega direcionada de medicamentos, diagnósticos médicos localizados e também relacionadas à indústria: perfuração de matéria mole ; transporte de carga e células; biossensores e processos de descontaminação [2, 6, 9].

Entretanto, trabalhar em pequenas escalas implica em desafios para desenvolver técnicas de fabricação, controle, fornecimento de energia, e principalmente, estratégias de propulsão eficientes que permitam ao micro nadador atravessar 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 Na microescala há um domínio das forças viscosas sobre as inerciais em números de Reynolds baixos ($Re \ll 1$). Assim, estratégias comuns de propulsão macroscópica, empregadas por organismos maiores que operam em alto número de Reynolds, como

¹paulaasilva@usp.br

²lucianodellier@usp.br

³rfausas@icmc.usp.br

⁴gustavo.buscaglia@icmc.usp.br

⁵stevens.paz@correounivalle.edu.co

peixes 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. Nas últimas décadas, pesquisas têm procurado elucidar os princípios físicos que fundamentam a motilidade celular [4, 10], o que melhorou a compreensão geral da locomoção em baixo Re , que nos últimos anos gerou uma variedade de micronadadores sintéticos [1]. Porém, vários aspectos do problema ainda precisam ser estudados e para isto, a sua formulação numérica, de forma precisa e robusta é essencial.

Neste trabalho, apresentamos um estudo de aprendizagem de estratégias de propulsão para micronadadores. Para tal fim, as equações que descrevem o movimento dos corpos são acopladas com as equações de Stokes que governam o fluido circundante (Seção 2). A implementação do método é feita utilizando a plataforma de elementos finitos FEniCS (Seção 3). O processo de aprendizado por reforço é realizado utilizando o algoritmo de Q-learning, junto com uma estratégia *Epsilon Greedy*. Os resultados obtidos são analisados estatisticamente afim de identificar a probabilidade do nadador aprender estratégias ótimas, identificando como os erros de discretização das equações de governo podem contaminar o processo de aprendizado (Seção 4).

2 Equações de Governo

O modelo de micronadador utilizado neste trabalho é constituído de quatro corpos elípticos, de mesmo tamanho, exceto pelo corpo de referência, o qual denominamos por cabeça do nadador, que possui um tamanho maior (ver figura 1). Esses corpos estão unidos por *links* que se comportam como articulações, que variam entre um ângulo mínimo e máximo (ξ_m, ξ_M), responsáveis por realizar o movimento do nadador. O movimento destes links é imposto. A posição do nadador é definida pelas coordenadas do corpo de referência \mathbf{x}_c e pelo ângulo θ como ilustrado na figura, que agrupamos 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 $\boldsymbol{\xi} = (\xi_0, \xi_1, \xi_2)$. Logo, o estado completo é definido pelo vetor $\mathbf{q} = (\mathbf{p}, \boldsymbol{\xi})$. Neste trabalho estamos interessados na formulação do problema de interação destes

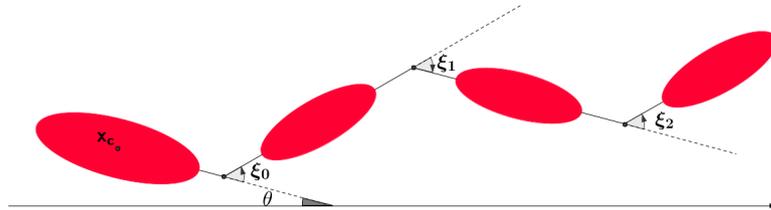


Figura 1: Modelo de micronadador mostrando as coordenadas posicionais e configuracionais.

nadadores microscópicos submersos em um meio aquoso, de forma que há um domínio das forças viscosas sobre as inerciais. Em tal caso, o problema é governado, pelas equações de Stokes no regime incompressível

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

em que \mathbf{u} é a velocidade e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões de Cauchy, que para fluidos Newtonianos é dado por

$$\boldsymbol{\sigma} = -pI + \mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (2)$$

onde p é a pressão, μ é a viscosidade do fluido e I a matriz identidade. Considerando um micronadador $\mathcal{B}(\mathbf{q})$, em um domínio $\Omega_f = \Omega \setminus \mathcal{B}(\mathbf{q})$ que representa a região preenchida pelo fluido incompressível, o problema 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 $p(\mathbf{x}, t)$ para $0 < t \leq T$ e $\mathbf{x} \in \Omega_f(\mathbf{q}(t))$ satisfazendo

$$\frac{d\mathbf{x}_c}{dt} = \mathbf{v}_c, \tag{3}$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega, \tag{4}$$

$$\mathbf{u} - \mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{s} = \mathbf{0}, \quad \text{em } \partial B(\mathbf{q}), \tag{5}$$

$$-\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, \quad \text{em } \Omega_f(\mathbf{q}), \tag{6}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{em } \Omega_f(\mathbf{q}), \tag{7}$$

$$\int_{\partial B(\mathbf{q})} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{f}^{\text{gen}}, \tag{8}$$

$$\int_{\partial B(\mathbf{q})} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c) \times \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} \, dS = \mathbf{t}^{\text{gen}}. \tag{9}$$

sendo \mathbf{f}^{gen} e \mathbf{t}^{gen} forças externas generalizadas, $\mathbf{v}_c(t) = \dot{\mathbf{x}}_c(t)$ a velocidade de translação e $\omega(t)$ a velocidade angular no referencial espacial, definidas pelas equações de movimento (3) e (4). Notar que sendo $\boldsymbol{\xi}(t)$ dado, a velocidade das coordenadas configuracionais $\dot{\boldsymbol{\xi}}(t)$ é automaticamente conhecida. A equação (5) é a condição de compatibilidade entre a velocidade do fluido e do nadador e as equações (8) e (9), representam o balanço global de forças e torque, respectivamente. Em (5), \mathbf{H} é um operador que permite definir a velocidade na superfície molhada do corpo ∂B , a partir da velocidade generalizada do nadador \mathbf{s} . Note-se que \mathbf{q} intervém em (5) - (9) através da geometria, ou seja na definição de Ω_f . Assim, temos que a interação fluido-nadador pode ser vista como um problema de interação fluido-estrutura. A solução deste problema se dá pela discretização espacial e temporal do problema na sua forma variacional utilizando o método dos elementos finitos, que apresentamos na sequência.

3 Formulação de Elementos Finitos

Para considerar a interação fluido-nadador, primeiramente, precisamos introduzir o seguinte espaço de funções:

$$W_0 = \{(\mathbf{d}, \mathbf{w}) \in \mathbb{R}^6 \times [H^1(\Omega_f(\mathbf{q}))]^2 : \mathbf{w} = \mathbf{0} \text{ em } \partial\Omega, \mathbf{w} = \mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{d} \text{ em } \partial B\}.$$

Seguindo o apresentado em [5], introduzindo um operador de extensão de funções \mathcal{E} de ∂B a Ω_f , a formulação variacional do problema é dada por: *Determinar* $(\mathbf{s}, \mathbf{u}, p) \in \mathbb{R}^6 \times (W_0(\mathbf{q}) + \mathcal{E}\mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{s}) \times L_0^2(\Omega_f(\mathbf{q}))$, tal que

$$\int_{\Omega_f(\mathbf{q})} [\boldsymbol{\sigma} : \nabla^S \mathbf{w} - q \nabla \cdot \mathbf{u}] = \int_{\Omega_f(\mathbf{q})} \mathbf{F}^{\text{gen}} \cdot \mathbf{d} \tag{10}$$

para todo $(\mathbf{d}, \mathbf{w}, q) \in \mathbb{R}^6 \times (W_0(\mathbf{q}) + \mathcal{E}\mathbf{H}(\mathbf{q})\mathbf{d}) \times L_0^2(\Omega_f(\mathbf{q}))$, com $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_p, 0, 0, 0)$, $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_0$. A formulação semidiscreta do problema completo (i.e., discreta no espaço e contínua no tempo) é: *Determinar* $\mathbf{q}_h(t) \in \mathbb{R}^6$ e $(\mathbf{s}_h(t), \mathbf{u}_h(\cdot, t), p_h(\cdot, t)) \in \mathbb{R}^6 \times (W_{0h}(\mathbf{q}_h(t)) + \mathcal{E}\mathbf{H}(\mathbf{q}_h(t))\mathbf{s}_h(t)) \times M_h(\mathbf{q}_h(t))$, tal que,

$$\frac{d\mathbf{x}_{ch}}{dt} - \mathbf{v}_{ch} = \mathbf{0}, \tag{11}$$

$$\frac{d\theta_h}{dt} - \omega = \mathbf{0}, \tag{12}$$

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} [2\mu \nabla^S \mathbf{u}_h : \nabla^S \mathbf{w}_h - p_h \nabla \cdot \mathbf{w}_h] - \mathbf{F}^{\text{gen}} \cdot \mathbf{d} = 0, \tag{13}$$

$$\int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} q_h \nabla \cdot \mathbf{u}_h + \int_{\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h)} \tau_h \nabla p_h \cdot \nabla q_h = 0, \tag{14}$$

para todo $(\mathbf{d}, \mathbf{w}_h(\cdot, t), q_h(\cdot, t)) \in \mathbb{R}^6 \times (W_{0h}(\mathbf{q}_h(t)) + \mathcal{E}\mathbf{H}(\mathbf{q}_h(t)) \mathbf{d}) \times M_h(\Omega_{fh}(\mathbf{q}_h(t)))$, com $\mathbf{d} = (\mathbf{d}_p, 0, 0, 0)$, satisfazendo a condição inicial $\mathbf{q}_h(0) = \mathbf{q}_{0h}$. Os termos de estabilização usados na formulação semidiscreta correspondem ao método GLS. Com respeito a discretização temporal, tem sido implementados métodos de primeira e segunda ordem, cujos detalhes omitimos aqui por brevidade. A implementação é realizada utilizando a plataforma de elementos finitos FEniCS.

4 Aprendizado por Reforço para locomoção de nadadores

O objetivo do processo de aprendizado é determinar uma estratégia (ou política) de nado otimizada que permita completar uma determinada tarefa, sem um conhecimento prévio da sequência de estados e ações que precisam ser executadas. Será utilizado o algoritmo de *Q-learning* para aprendizado por reforço baseado na Equação de Bellman [8], na qual se calcula uma matriz Q , cujo número de linhas coincide com o número de estados possíveis do nadador e seu número de colunas corresponde ao número de ações que podem ser executadas num determinado estado. A regra de atualização de Q é

$$Q(s_n, a_n) \leftarrow Q(s_n, a_n) + \alpha [r_n + \gamma \max_{\alpha_{n+1}} Q(s_{n+1}, a_{n+1}) - Q(s_n, a_n)] \quad (15)$$

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 , α é taxa de aprendizado ($0 \leq \alpha \leq 1$) que determina em que medida as informações recém-adquiridas substituem as informações antigas, e γ é denominado fator de desconto ($0 \leq \gamma < 1$) que determina a importância das recompensas futuras. Q armazena a experiência adquirida pelo nadador, sendo atualizada até convergir para a matriz que define a política ótima de movimentos. O cálculo das recompensas é feito a partir da resolução do problema de interação fluido-nadador usando a formulação apresentada na seção anterior. Como ilustração, na figura 2 mostram-se os campos de velocidade e pressão no início, metade e final do movimento ao ativar o primeiro link, para um ângulo de 45° . Como resultado da ação, o nadador se desloca e rotaciona com respeito ao estado inicial.

5 Experimentos numéricos

Considerando o nadador mostrado na figura 1, será apresentado um estudo de aprendizado em que a tarefa escolhida corresponde a um movimento de rotação do corpo do nadador. A recompensa é definida por $r_n = \theta - \theta_n$, em que θ é o ângulo atual do nadador como resultado de executar uma certa ação e θ_n é o ângulo anterior. Foram realizados experimentos utilizando dois níveis de discretização espacial e temporal, conforme figura 3, considerando valores de $\Delta t = 0.25$ (para a malha grossa) e $\Delta t = 0.025$ (para a malha fina).

Para que o micronadador consiga rotacionar deve-se mexer 2 links distintos alternadamente, um por vez, produzindo assim diversos ciclos de nado (eixo horizontal do gráfico da figura 3) que representam a sequência em que são executadas as ações de ativar as articulações (i.e., ir do ξ_m até o ξ_M ou viceversa). Cada caso no gráfico apresenta uma característica da forma: fixa-se um link no ângulo máximo ou mínimo e alterna-se o movimento dos outros dois links. Os ciclos com AH significam executar as ações no sentido da esquerda para direita sucessivamente, e H seria para a execução de ações no sentido oposto, gerando movimentos de rotação no sentido anti-horário e horário, respectivamente.

O gráfico de mudança média de ângulo (Figura 3), juntamente com o gráfico que mostra a evolução do ângulo $\theta(t)$ da cabeça (Figura 4), mostram que existem ciclos de nado que mudam o ângulo do nadador de maneira mais rápida. Por exemplo, considerando os resultados de malha fina, o ciclo C3AH possui uma velocidade de 0.008412, e para o C4AH a velocidade é 0.008382. Outras sequências também ilustradas na Figura, claramente exibem velocidades menores. Em geral

existirá um ciclo ótimo de ações, que faz com que o aprendizado ocorra de maneira mais rápida. Os ciclos que possuem velocidade negativa são ciclos que nadam no sentido oposto ao desejado.

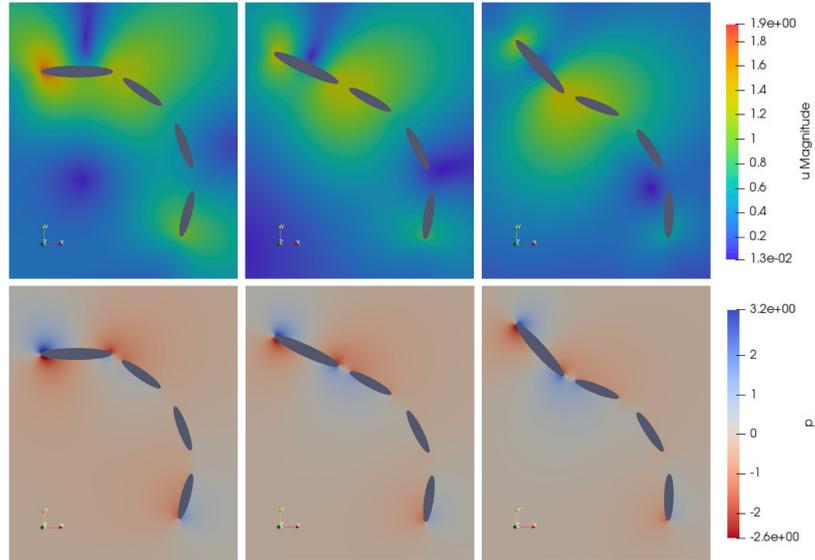


Figura 2: Magnitude da velocidade (parte superior) e pressão (parte inferior), no início, metade e final do movimento do primeiro link para um ângulo de articulação $(\xi_m, \xi_M) = (-45^\circ, +45^\circ)$.

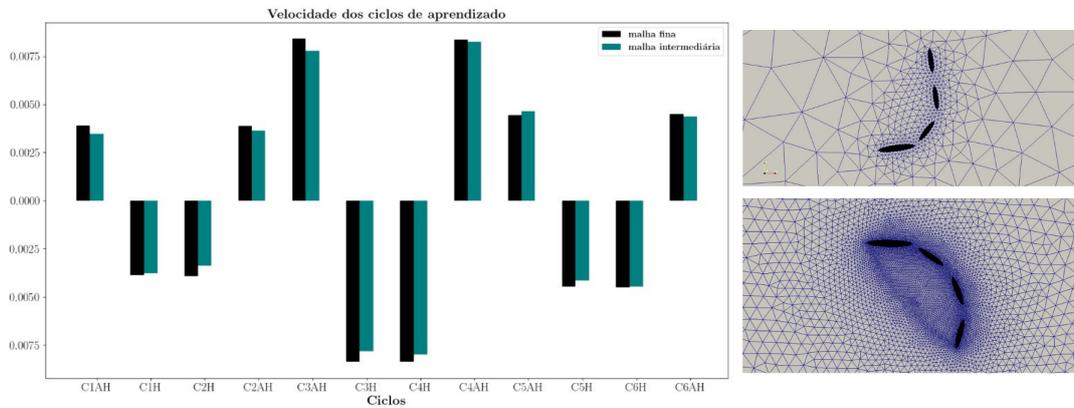


Figura 3: Gráfico de velocidades de mudança média de ângulo e malhas de elementos finitos num certo instante para ilustrar o refinamento espacial utilizado.

O processo de aprendizado tem uma componente estocástica, pois ela incorpora uma estratégia ϵ -greedy, que consiste em escolher a cada passo, com uma certa probabilidade, dentre as ações possíveis num estado, uma que seja aleatória, em lugar daquela que forneça máxima recompensa. Por isto, é necessário realizar um estudo com uma certa significância estatística. Nos experimentos numéricos, em cada caso foram produzidas 1000 de realizações dos ciclos de aprendizado e também

foi considerado o efeito do número máximo de passos. Os parâmetros considerados no algoritmo de Q-learning foram: $\gamma = 0.999$, $\alpha = 1$, $\epsilon_{greedy} = 0.4$ (probabilidade de escolha aleatória de uma ação) e $n_{QL} = 2K, 4K, 10K, 13K, 20K$ e $24K$. Sendo contabilizado cada ciclo de nado contido na matriz de aprendizado, para todos os estados que o nadador pode ter.

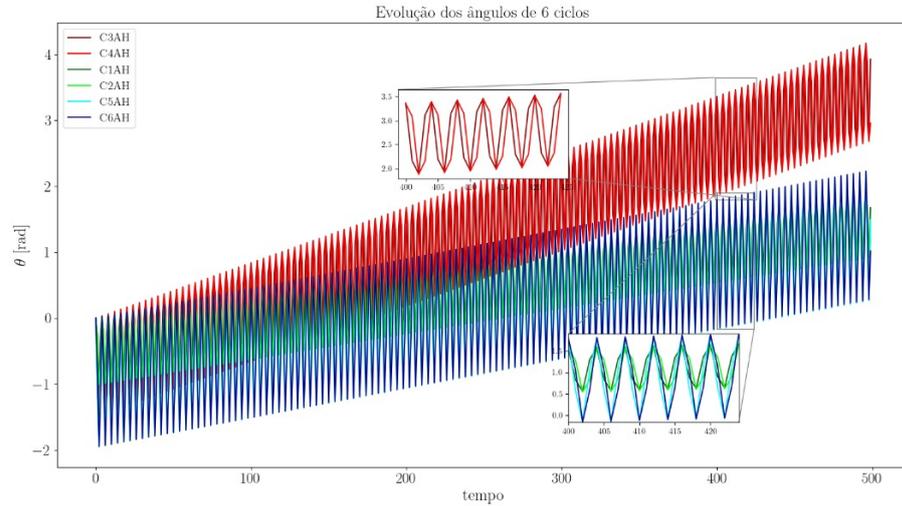


Figura 4: Evolução do ângulo da cabeça do micronadador em função do tempo para diferentes ciclos de nado.

Para concluir, a tabela 1 mostra que quanto mais passos de aprendizado o método executar, mais o micronadador tende a aprender o ciclo ótimo de mudança de ângulo. Isto pode ser considerado como uma medida de convergência do método à política ótima de nado. Note-se que no caso da malha fina, converge em 20000 passos para esse ciclo (100% dos casos caem no ciclo ótimo C3AH), enquanto que na malha mais grossa demora-se 24000, o que indica que os erros de discretização associados à resolução numérica do problema de interação fluido-estrutura, tem um papel importante na análise, pois afetam o processo de aprendizado. As informações da linha "n.a." na tabela, representam nados em que altera-se apenas um link, isto é, o nadador nunca sai do lugar e portanto nunca aprende a tarefa de rotacionar.

6 Considerações Finais

Apresentamos um estudo de aprendizado por reforço para micronadadores, representados por um conjunto de sólidos rígidos articulados, imersos em um meio aquoso e em baixo número de Reynolds. O objetivo do estudo foi encontrar políticas ótimas de avanço destes nadadores. O processo de aprendizado é baseado no cálculo de recompensas, nos exemplos numéricos mostrados, o ângulo de rotação do nadador, obtidos como resultado de alterar a sua configuração interna. Para tal fim, uma formulação de elementos finitos para o problema de interação fluido-sólido foi introduzida. O estudo permitiu ilustrar a viabilidade do esquema de aprendizado proposto e quantificar como os erros associados a discretização do problema fluido-dinâmico podem afetar as estatísticas (sobre milhares de realizações) do aprendizado das matrizes de *Q-learning*.

Tabela 1: Probabilidade de aprendizado (em %) para os diferentes possíveis ciclos de nado de um micronadador com 4 corpos, com ângulo máximo de articulação de 45°, considerando 1000 realizações e dois níveis de discretização. n.a., significa "não aprende".

Ciclos	Malha fina						Malha grossa					
	2000	4000	10000	13000	20000	24000	2000	4000	10000	13000	20000	24000
C1AH	4,35	2,3	0	0	0	0	4	2	0	0	0	0
C1H	0,05	0	0	0	0	0	0,05	0	0	0	0	0
C2H	0	0	0	0	0	0	0,02	0	0	0	0	0
C2AH	1,8	0,1	0	0	0	0	3	0,1	0	0	0	0
C3AH	49,64	57,5	83,3	93,6	100	100	44	52,8	65,75	75	98,65	100
C3H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C4H	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
C4AH	34,94	35,96	16,7	6,4	0	0	37,8	41	34,25	25	1,35	0
C5AH	4,25	2,0	0	0	0	0	5,5	2,3	0	0	0	0
C5H	0	0	0	0	0	0	0,01	0	0	0	0	0
C6H	0	0	0	0	0	0	0,02	0	0	0	0	0
C6AH	1,8	0,1	0	0	0	0	3	0,1	0	0	0	0
n.a.	2,45	1,5	0	0	0	0	2,6	1,6	0	0	0	0

Agradecimentos

Os autores agradecem à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, FAPESP, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CEPID-CeMEAI 2013/07375-0 e INCT-MACC) e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Referências

- [1] Stephen J Ebbens e Jonathan R Howse. "In pursuit of propulsion at the nanoscale". Em: **Soft Matter** 6.4 (2010), pp. 726–738.
- [2] Wei Gao e Joseph Wang. "Synthetic micro/nanomotors in drug delivery". Em: **Nanoscale** 6.18 (2014), pp. 10486–10494.
- [3] Vasileios Kapralos et al. "Antibacterial activity of endodontic sealers against planktonic bacteria and bacteria in biofilms". Em: **Journal of endodontics** 44.1 (2018), pp. 149–154.
- [4] Eric Lauga. "Bacterial hydrodynamics". Em: **Annual Review of Fluid Mechanics** 48 (2016), pp. 105–130.
- [5] Stevens Paz e Gustavo C. Buscaglia. "Simulating squirmes with volumetric solvers". Em: **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Science and Engineering** (2020).
- [6] Alexander A Solovev et al. "Self-propelled nanotools". Em: **Acs Nano** 6.2 (2012), pp. 1751–1756.
- [7] Philip S Stewart. "Mechanisms of antibiotic resistance in bacterial biofilms". Em: **International journal of medical microbiology** 292.2 (2002), pp. 107–113.
- [8] Richard S. Sutton e Andrew G. Barto. **Reinforcement Learning: An Introduction**. 2ed: A Bradford Book, 2018.
- [9] Diana Vilela et al. "Graphene-based microbots for toxic heavy metal removal and recovery from water". Em: **Nano letters** 16.4 (2016), pp. 2860–2866.
- [10] Julia M Yeomans, Dmitri O Pushkin e Henry Shum. "An introduction to the hydrodynamics of swimming microorganisms". Em: **The European Physical Journal Special Topics** 223.9 (2014), pp. 1771–1785.