

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

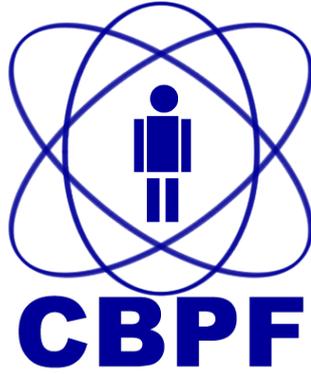
Dissertação de Mestrado

**PREVISÕES TEÓRICAS DO MODELO
DINÂMICO DE BACTÉRIAS
MAGNETOTÁTICAS COM DOIS FEIXES
FLAGELARES**

Jenny Concha Obando

Orientador: Prof. Dr. Daniel Acosta Avalos.

Rio de Janeiro
agosto de 2022



Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Dissertação

**PREVISÕES TEÓRICAS DO MODELO
DINÂMICO DE BACTÉRIAS
MAGNETOTÁTICAS COM DOIS FEIXES
FLAGELARES**

Dissertação apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), como pré-requisito para a obtenção do título de Mestre em Física sob a orientação do Prof. Dr. Daniel Avalos Acosta.

Jenny Concha Obando

Orientador: Prof. Dr. Daniel Acosta Avalos.

Rio de Janeiro
Agosto de 2022

“PREVISÕES TEÓRICAS DO MODELO DINÂMICO DE BACTÉRIAS
MAGNETOTÁTICAS COM DOIS FEIXES FLAGELARES”

JENNY PATRICIA CONCHA OBANDO

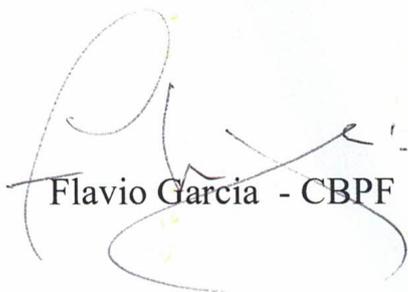
Dissertação de Mestrado em Física apresentada no
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do
Ministério da Ciência Tecnologia e Inovação.
Fazendo parte da banca examinadora os seguintes
professores:



Daniel Acosta Avalos – Orientador/CBPF



Fernanda de Ávila Abreu - UFRJ



Flavio Garcia - CBPF

Rio de Janeiro, 21 de setembro de 2022.

*Dedico este trabalho ao meu delirante professor e amigo Juan Bautista Florez
"Quero acreditar que a lua existe, e você também, mesmo que não possa vê-lo"
R.I.P.*

Agradecimentos

Gostaria de entregar os meus sinceros agradecimentos:

A minha mãe, Clara Elisa Obando, fonte inesgotável de luz e liberdade; ao meu pai, Duarte L. Concha, impulso dos meus passos; a minha amada Marcela, força inspiradora "vida perpétua" e a minha irmã Paola C, "abre caminho" suporte exemplar.

Á Stepnany Carolina Rosero "tribo de alma, alta amizade", que apesar da distância sua essência foi exaltada através de uma profunda companhia e apoio inabalável.

Aos amigos e colegas que fiz no Rio de Janeiro. Especialmente ao Matheus R. e á Nati S. que fortaleceram e deram mais cor ao meu jeito de amar.

Ao Prof. Dr. Daniel Acosta Avalos pela orientação, dedicação, por acreditar em mim e no meu trabalho, por me fornecer todo apoio e oportunidade.

Ao povo brasileiro que, através da bolsa de pesquisa concedida pela CNPq, financiou o meu estudo durante dois anos, finalmente Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF. por me dar a maravilhosa oportunidade de aprender e me formar baixo sua fraternidade e excelência acadêmica.

"Não sei quantas almas tenho. Cada momento mudei". Mas a gratidão também se multiplica e é uma por todos aqueles que tocaram meus caminhos.

Resumo

As bactérias magnetotáticas (MTB) pertencem a um grupo de bactérias que sintetizam nanopartículas de óxido ou sulfeto de ferro recobertas por uma membrana, chamadas de magnetossomos, as quais conferem à bactéria um momento magnético permanente que permite a elas alinhar-se passivamente com as linhas de campo magnético da Terra e nadar ao longo delas para encontrar as condições ideais de crescimento e sobrevivência, este comportamento é denominado magnetotaxia. O movimento dessas bactérias é totalmente definido pelos seus flagelos e feito num meio viscoso no regime de baixo número de Reynolds.

No presente trabalho, foi proposto um modelo dinâmico de seis graus de liberdade (6-DoF) para uma bactéria esférica com dois feixes de flagelos e uma cadeia de magnetossomos (momento magnético) posicionada no centro da esfera entre os dois flagelos, com o intuito de realizar simulações numéricas e analisar as trajetórias das MTB, sendo este o principal objetivo da presente pesquisa.

A solução numérica mostrou que a trajetória da bactéria é uma hélice cilíndrica orientada na direção do campo magnético, sujeita a condições específicas de inclinação (γ) e força dos flagelos, os quais são parâmetros fundamentais para a análise do padrão e/ou velocidade. Assim, foi revelado que o movimento é altamente sensível não apenas ao campo magnético, mas também à disposição dos flagelos. No referente aos comportamentos das coordenadas cartesianas que evidenciaram a formação de trajetórias helicoidais, dois tipos diferentes de oscilações foram notados na evolução individual da coordenada x em função do tempo, interpretadas como uma variação no diâmetro da hélice conforme os parâmetros são alterados e que influem notoriamente nas mudanças nos padrões das trajetórias.

Por outro lado, foi demonstrado que a frequência é sensível a variações nos valores de forças flagelares e inclinação (γ), permanecendo constante para variações de campo. Enquanto a análise da velocidade axial em função de γ , mostrou a inclinação ótima dos flagelos que permite à bactéria se movimentar com a máxima velocidade possível.

O modelo usado, e os resultados obtidos indicaram que a magnitude das forças e a posição dos flagelos no corpo da bactéria, têm influência nas mudanças das trajetórias e na velocidade da bactéria, aumentando a variabilidade de sua dinâmica de movimento. O que sugere a relevância do desenvolvimento de modelos cada vez mais específicos para a compreensão e análise do movimento das bactérias magnéticas, sendo estes primordiais nas pesquisas sobre potenciais aplicações em nanotecnologia e biomedicina.

Palavras chave: bactérias magnetotáticas, trajetória helicoidal, inclinação flagelar

Abstract

Magnetotactic bacteria (MTB) belong to a bacteria group that synthesizes nanoparticles of iron oxide or ferrous sulfate, covered by a membrane, called magnetosomes, which provide a permanent magnetic field to the bacteria that allows passively their orientation along the magnetic field lines of Earth's magnetic field and swim along them to reach regions of optimal conditions to grow and survive. This phenomenon is known as magnetotaxis. The MTB's motility is fully defined through their flagella and performed in a viscous medium in a regime of low Reynolds number.

In this work, it was proposed a dynamical model of six degrees of freedom (6 - DoF) for a spherical bacteria with two flagella and a magnetosomes' string (magnetic moment) placed on the sphere center between the two flagella, allowing numerical simulations and trajectory analysis of the MTB, being this the main aim of the present research.

The numerical solution shows a cylindrical helix trajectory oriented along the direction of the magnetic field under specific inclination conditions (γ) and the flagella forces. These parameters are fundamental to the analysis of the pattern and/or velocity. Therefore, it was found that the MTB movement is highly sensitive not only due to the magnetic field but also the flagella disposition. Relating to the cartesian coordinates that evidenced the helicoidal trajectories development, two different kinds of oscillations were detected on the individual x coordinate as a time function, interpreted as helix diameter variation so far as the parameters are modified and it have a notary influence on the trajectory patterns changes.

On the other hand, it was demonstrated that the frequency is sensitive to the changes in the values of the flagellum forces and inclination (γ), remaining constant to field variations. Related to the axial velocity analysis as a function of γ , it was shown that the optimal inclination of the flagella allows the bacteria to move with the maximum possible velocity.

The model that was used and the results obtained show that the magnitude of the flagellum forces and the flagella position on the bacteria body, influence the changes in the bacteria trajectory and velocity, increasing the variability of its movement dynamics. These results suggest the relevance of the development of more specific models in order to understand the movement of the magnetic bacteria, being essential in research related to potential applications in nanotechnology and biomedicine.

Key words: Magnetotactic bacteria, helicoidal trajectory, flagella inclination .

Sumário

Resumo	v
Abstract	vi
Introdução	16
1 Revisão Bibliográfica	19
1.1 Características gerais de bactérias magnetotáticas (MTB)	19
1.2 Magnetossomos e a magnetotaxia	21
1.3 Função dos Magnetossomos e Magneto-Aerotaxia	23
1.4 Flagelação	25
1.5 Movimento de bactérias magnetotáticas: Modelos biofísicos	26
2 Modelagem	37
2.1 Dois feixes flagelares presos ao corpo celular esférico e girando em torno de seus respectivos eixos	37
2.2 Forças e torques	37
2.3 Equações de translação	38
2.4 Equações rotacionais	43
2.4.1 τ_f^1 : Torque gerado pela Força 1	43
2.4.2 τ_f^2 : Torque gerado pela Força 2	43
2.4.3 Torque Hidrodinâmico	44
2.4.4 Torque magnético:	44
3 Métodos: Solução numérica e processamento de dados	47
3.1 Solução numérica	48
3.1.1 Parâmetros na simulação	54
3.1.2 Algoritmo das velocidades	54
3.2 Definição e variação de parâmetros	57
3.3 Execução do programa	58
3.4 Processamento de dados:	58
4 Resultados e Discussão	62
4.1 Comportamento de ângulos e coordenadas cartesianas	62
4.2 Trajetórias helicoidais	65
4.2.1 Frequências e velocidades para coordenadas cartesianas	71
4.3 Discussão	75
Conclusões	77

A Cinemática do Corpo Rígido	78
A.0.1 Coordenadas independentes de um corpo rígido	78
A.0.2 Atribuição dos graus de liberdade de um corpo rígido	79
A.0.3 Transformações ortogonais	80
A.0.4 Ângulos de Euler	81
Referências Bibliográficas	83

Lista de Figuras

1.1	Estrutura típica de uma bactéria magnetotática com forma de espirila, que contém magnetossomos (nanopartícula magnética + membrana lipídica) e flagelos. Fonte: figura adaptada da referência [15]	19
1.2	Morphologies of MTBs: , A: cocos(reproduzido de Lin et al. [16]) , B: ovoides (reproduzido de Zhang et al.[18]) , C: procariontes magnetotacticos multicelulares (reproduzido de Keim et al.[19]).	20
1.3	Diagrama Zona de Transição e Oxi- Anóxica (ZTOA) numa coluna de água. O campo geomagnético é representado pelas setas tracejadas. As bactérias magnetotáticas se alinham com o campo magnético e nadam perto da zona ZTOA. Fonte: figura adaptada da referência [20].	20
1.4	Morfologias cristalinas: A, B: dente ou bala, dispostos em várias cadeias. C, D: cubo-octaédrico, dispostos em uma cadeia. E, F: paralelepípedo ou prismático alongado, cadeia única. G: prismático dispostos em forma irregular. Fonte: [35].	22
1.5	Desenho esquemático magneto-aerotaxia: Nos hemisférios norte (NH) e sul (SH) ajuda as MTBs a encontrar eficientemente sua concentração ótima de oxigênio ([O ₂]) na zona de transição óxico-anóxica (ZTOA) em habitats naturais (colunas de água ou sedimentos) com gradientes verticais de concentração química. Em ambos os hemisférios, as células do lado óxico da ZTOA nadam ao longo das linhas de campo geomagnético girando seus flagelos no sentido anti-horário (CCW), enquanto as do lado anóxico nadam girando seus flagelos no sentido horário (CW). fonte:[27].	24
1.6	Arranjo de flagelos bacterianos. Monótrico: único flagelo em uma extremidade do corpo, nomeado flagelo polar; Anfítrico: um único flagelo ou um tufo de flagelos em ambas as extremidades;Lofotríquio vários flagelos em um tufo em posição polar; Peritríquio: flagelos distribuídos por todo o corpo bacteriano Fonte:[55].	26
1.7	Conjunto de eixos ortogonais usados no modelo de Nogueira e Lins de Barros[10]. O conjunto de vetores unitários (e_1, e_2, e_3) define o sistema de referencia BAC fixo no corpo da bactéria, no centro de massa 0. O sistema BAC gira em relação ao sistema de referencia LAB, definido pelo conjunto de vetores unitários (e_x, e_y, e_z) que esta fixo no laboratório. \mathbf{F} a força propulsora aplicada no ponto P, que corresponde ao ponto onde esta fixo o flagelo. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são, respectivamente, as componentes de \mathbf{F} longitudinal (ao longo do eixe e_3) e transversal (no plano formado por e_2 e e_1). A componente \mathbf{F}_T oscila com velocidade angular ω . A MTB possui um momento magnético \mathbf{m} localizado no centro de massa 0. O campo magnético externo se encontra orientado no sentido negativo do eixo Z do laboratório. Fonte: [10].	27

1.8	Representação esquemática dos sistema de referência usados no modelo teórico para o movimento do MTB na referencia [11]. e_1, e_2, e_3 são vetores ortonormais fixados ao corpo bacteriano. e_x, e_y, e_z são vetores ortonormais fixados ao laboratório. O campo magnético aplicado B esta na direção $-e_z$. O momento magnético \mathbf{m} esta fixo no centro de massa do corpo da bactéria e orientado paralelamente ao flagelo. O flagelo gira com velocidade angular ω . fonte:[11]	29
1.9	Conjunto de eixos ortogonais usados no modelo de Yang et al. [14]. O sistema fixo ao laboratório é representado com o subíndice g: $(X_g Y_g Z_g)$. O sistema coordenado (X, Y, Z) esta fixo ao corpo da bactéria, neste caso a bactéria magnetotactica MO-1. \mathbf{r}_{b1} é o vetor posição do ponto O1, que é o ponto de contato do flagelo 1 com a parede celular. Os dois flagelos se conectam rigidamente ao corpo celular nos pontos O1 e O2. O esferoide prolato tem semieixo maior a e semieixo menor b. Fonte [14].	32
2.1	Sistemas de coordenadas usados para o modelo de uma bactéria esférica com dois flagelos. $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ são os vetores unitários que definem o sistema de referencia BAC que esta fixo ao corpo da bactéria. $(\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z)$ são os vetores unitários que definem o sistema de referencia LAB fixo no laboratório. γ é o ângulo de inclinação de cada flagelo, os quais estão conectados rigidamente ao corpo da bactéria nos pontos P_1 e P_2 . Fonte: Jenny Concha	38
2.2	$\mathbf{F} = \mathbf{F}_f^1$ é a força propulsora gerada pelo flagelo 1. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são respectivamente a componente longitudinal, que esta dirigida ao longo do eixo do cilindro flagelar o qual corresponde com o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1'$, e a componente transversal, que surge das assimetrias do flagelo e gira com a mesma frequência angular do flagelo ω . \mathbf{m} é o vetor de momento magnético da bactéria, colinear a $\hat{\mathbf{e}}_1$. \mathbf{B} é o campo magnético externo, antiparalelo a $\hat{\mathbf{e}}_z$. Wt representa o ângulo girado pela componente \mathbf{F}_T no tempo t, e γ representa o ângulo entre o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1$ e o eixo do flagelo. Fonte: Jenny Concha.	39
2.3	$\mathbf{F} = \mathbf{F}_f^2$ é a força propulsora gerada pelo flagelo 2. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são respectivamente a componente longitudinal, que esta dirigida ao longo do eixo do cilindro flagelar o qual corresponde com o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1'$, e a componente transversal, que surge das assimetrias do flagelo e gira com a mesma frequência angular do flagelo ω . \mathbf{m} é o vetor de momento magnético da bactéria, colinear a $\hat{\mathbf{e}}_1$. \mathbf{B} é o campo magnético externo, antiparalelo a $\hat{\mathbf{e}}_z$. Wt representa o ângulo girado pela componente \mathbf{F}_T no tempo t, e γ representa o ângulo entre o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1$ e o eixo do flagelo. Fonte: Jenny Concha.	40
3.1	: Diagrama esquemático do procedimento usado para resolver numericamente as equações de movimento obtidas no capítulo 2. Fonte: Jenny Concha	47
4.1	Resultado numérico para as coordenadas do centro de massa e os ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 1 Oe (0,001T) e $\gamma=30^\circ$ (a) Coordenada x, (b) Coordenada y, (c) Coordenada z.	62
4.2	Resultado numérico para dos ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 1 Oe (0,0001 T) e $\gamma=30^\circ$ (a) Ângulo ψ , (b), Ângulo θ , (c)Ângulo ϕ	63

4.3	Resultado numérico para as coordenadas do centro de massa e os ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 100 Oe e $\gamma=20^\circ$ (a) Coordenada x, (b) Coordenada y, (c) Coordenada z, (d) Ângulo ψ , (e) Ângulo θ , (f) Ângulo ϕ	64
4.4	Trajетórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $\mathbf{F}_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1$ Oe (0,0001 T), (a)(b) $\gamma = 0^\circ$ (c)(d) $\gamma = 20^\circ$	65
4.5	Trajетórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $F_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1$ Oe (0,0001 T); (a)(b) $\gamma = 40^\circ$ (c)(d) $\gamma = 80^\circ$	66
4.6	Trajетórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12} \text{ N}$ e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1$ Oe (0,0001 T) ; (a) $\gamma = 0^\circ$ (b) $\gamma = 5^\circ$	67
4.7	Trajетórias simuladas 3D e projeções no plano XY em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12} \text{ N}$ e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1$ Oe (0,0001T) ; (a)(b) $\gamma = 35^\circ$	67
4.8	Trajетórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos para forças iguais; $F_{f1} = F_{f2}$; $F_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $\gamma = 20^\circ$ (a) $B=0$ (0T)Oe, (b) $B= 10$ Oe (0,001 T), (c) $B=800$ Oe (0,08T).	68
4.9	Trajетórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $F_{f1} = F_{f2}$; $F_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $\gamma = 60^\circ$. (b) $B=0$ (0T) Oe, (c) $B=100$ Oe (0,001 T)	69
4.10	: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12} \text{ N}$ e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $\gamma = 60^\circ$. P $B=0$ (a e b) $B=10$ Oe (0,001 T) (c e d) $B=1000$ Oe (0,1T) (e e f).	70
4.11	(a)Frequências, (b)Amplitude da coordenada y e (c) velocidade axial em função γ , para forças iguais; $F_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $B= 1$ Oe (0.0001T).	72
4.12	(a)Frequências, (b)Amplitude da coordenada y e (c)velocidade axial em função do campo magnético B, para forças iguais; $F_1= 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $\gamma = 20^\circ$ em vermelho, $\gamma = 60^\circ$ em azul.	74
A.1	Orientação relativa de um corpo rígido. O sistema S é inercial, S0 é um sistema cuja origem é fixado em algum ponto de referência do corpo e cujos eixos são paralelos aos de S. O sistema S' está fixo ao corpo e tem origem comum com S0 [76].	78
A.2	Conjunto de rotações para ir dos eixos $x_1x_2x_3$ aos eixos $x'_1x'_2x'_3$ [76].	81

Lista de Tabelas

1.1	Valor do momento magnético para MTB usando diferentes técnicas físicas. Fonte:[1]	23
1.2	Parâmetros das bactérias magnetotacticas MO-1 [14]	36
3.1	Parâmetros fixos usados na simulação	57
4.1	Medições das amplitudes frequências e inclinações com respeito a γ , para forças iguais (Caso 1); $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $B = 1$ Oe (0.0001T).	71
4.2	Amplitude da coordenada y, frequência de oscilação das coordenadas x e y e velocidade axial em função do campo magnético para o caso de forças iguais<; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$	73

Introdução

Bactérias magnetotáticas (MTB) são um grupo morfológicamente diverso de procariontes capazes de se alinhar passivamente com as linhas do campo magnético da terra e nadar ao longo delas, o que permite que as bactérias naveguem para ambientes com concentrações de oxigênio adequadas que fornecem as condições de vida mais favoráveis. Essa resposta comportamental (mecanismo de orientação) bacteriano é chamado magnetotaxis [1]. Ela se deve à principal característica das MTB de biomineralizar cristais magnéticos nanométricos envoltos por uma membrana em seu citoplasma, chamados de magnetossomos [2]. Essas nanopartículas podem ser de dois tipos de minerais: magnetita (Fe_3O_4) ou greigita (Fe_3S_4) e estão geralmente organizados em uma ou mais cadeias magnéticas dentro da bactéria conferindo a ela um dipolo magnético permanente [3]. Embora os magnetossomos sejam considerados as estruturas responsáveis pela orientação dessas bactérias, o movimento dinâmico das MTB é completamente definido pelos flagelos. Cada flagelo é uma máquina de motilidade supramolecular que consiste em um motor rotativo bidirecional, uma junta universal e uma hélice helicoidal. Um ou vários filamentos flagelares emergem nas laterais do corpo bacteriano e sua distribuição varia de acordo com a espécie de bactéria magnetotática [4]. Assim, podem ser classificadas em: monótricas quando possuem um único flagelo que se localiza em uma das extremidades da bactéria e é chamado de polar; lofótricas, que possuem dois ou mais flagelos (um tufo de flagelos) em posição polar; anfítricas têm um flagelo ou um tufo de flagelos em cada polo bacteriano; ou perítricas, quando possuem flagelos distribuídos por toda sua superfície [5].

As pesquisas sobre o movimento das MTB são diversas, e informações importantes sobre elas podem ser obtidas a partir do estudo de seu comportamento de natação em diferentes campos magnéticos. Por exemplo, as trajetórias em forma de U resultantes da mudança da direção do campo magnético têm sido usadas para medir as propriedades magnéticas das bactérias [6]. Kaspars et al. [7] propuseram um modelo para explicar que a dinâmica de uma MTB dependia da frequência do campo magnético rotativo. Esses tipos de campos podem ser usados para determinar a frequência de rotação limite abaixo da qual a trajetória em forma de O de uma bactéria magnética está sincronizada com o campo rotacional. O valor desta frequência limite permite a medição do momento magnético da bactéria e seu coeficiente de arrasto rotacional [8]. Aragão et al. [9] apresentaram uma análise estocástica sobre o movimento de uma bactéria magnetotática submetida a um campo magnético oscilante e a natureza do processo de inversão do campo magnético. Todos esses modelos consistentes com as observações experimentais presumem que as MTB nadam a uma velocidade de avanço constante e utilizam a condição de equilíbrio dos torques magnético e de resistência para obter os comportamentos e trajetórias de movimento, mas, quase todos não consideram a interação entre o fluido e o flagelo. De fato, para uma descrição do movimento mais das MTB mais detalhado deve também ser

considerado a interação da bactéria e o fluido viscoso no regime de baixo número de Reynolds, especificamente a interação dos flagelos com o fluido.

No primeiro modelo físico desenvolvido para explicar o movimento, as forças e torques aplicados na bactéria são anulados pela força e torque viscoso [10]. Isto produz um conjunto de 6 equações diferenciais acopladas (6-DOF) descrevendo a posição do centro de massa e os ângulos de rotação do corpo em função do tempo. Como as equações são acopladas as soluções propostas são numéricas. Recentemente foi mostrado que a solução deste modelo tem um regime estável, onde é possível encontrar também soluções analíticas para a posição do centro de massa em função do tempo [11]. Desta forma foi mostrado que as trajetórias teóricas de movimento de uma bactéria magnetotática na presença de um campo magnético são helicoidais com os eixos paralelos às linhas do campo magnético. Neste modelo é assumido que a bactéria é um coco com um único flagelo. Não obstante o que mais se observa na natureza é que os cocos magnetotáticos apresentam dois tufo de flagelos [12].

O presente trabalho propõe um modelo teórico do movimento de bactérias magnetotáticas incluindo dois flagelos (ou tufo de flagelos) e uma cadeia de magnetossomas. O modelo é desenvolvido levando em conta as considerações gerais dos trabalhos pioneiros [10,11]. Primeiro, a forma das bactérias não é deformável para que as leis de mecânica do corpo rígido possam ser aplicadas, em segundo lugar, a bactéria tem a geometria de uma esfera para a qual a solução de Stokes está disponível [13], em terceiro se utiliza a condição de equilíbrio dos torques magnéticos e de resistência para obter as coordenadas do movimento, em quarto lugar se considera que o movimento de uma bactéria magnetotática é impulsionado por uma força que atua em um ponto fixo em sua membrana. Estas considerações vão resultar num sistema de equações diferenciais ordinárias que governam o movimento. Porém, ao introduzir um termo extra para o segundo tufo de flagelos, a quarta consideração é modificada o que modifica também as equações, suas soluções numéricas, e os parâmetros da trajetória quando o campo magnético aplicado muda.

Isto pode ser evidenciado no modelo dinâmico de seis graus de liberdade proposto para uma bactéria com um corpo esferoide prolato com dois flagelos helicoidais e uma cadeia de magnetossomos colocada em qualquer ângulo em relação ao eixo de propulsão [14], onde a solução numérica das equações dinâmicas de Newton-Euler mostra trajetórias constituídas por hélices pequenas e grandes, estando a hélice pequena ao longo da hélice grande. Esse resultado assim como os resultados de outras pesquisas e seus respectivos contrastes experimentais mostram que o número de flagelos e a interação dos flagelos helicoidais rotativos com o fluido, que impulsiona o corpo da bactéria, é complexo e muito importante. Por este motivo, o presente trabalho não só faz ênfases na análise física detalhada da origem das equações que descrevem o movimento e o comportamento de uma MTB de dois flagelos submetida à ação de um campo magnético externo, também na análises de outros parâmetros que, embora não são diretamente observados, repercutem nas relações entre variáveis observáveis como a trajetória, e ajudam ao entendimento de uma variedade de comportamentos na locomoção bacteriana em diferentes condições.

Esta dissertação está organizada da seguinte forma: No capítulo 1 será feita uma revisão dos principais trabalhos que modelam teoricamente o movimento das MTB e seus resultados mais relevantes; no capítulo 2 são apresentadas as considerações principais para descrever o modelo, com o fim de obter o sistema de equações acopladas que governam

o movimento; no capítulo 3 é mostrada a solução numérica do modelo, para o qual foi usado linguagem -Python e o integrador numérico LSODA, neste capítulo também foram descritas as suposições e parâmetros necessários para as simulações; o capítulo 4 mostra a análise dos dados obtidos, que foram processados com o software Origin. E posteriormente são discutidas as formações das trajetórias, e alguns parâmetros necessários para compreendê-las como: a velocidade axial, e a frequência de oscilação da trajetória. Ao final dessa dissertação apresentamos as nossas conclusões sobre o trabalho e organizamos um apêndice necessário para a compreensão do texto.

Capítulo 1

Revisão Bibliográfica

1.1 Características gerais de bactérias magnetotáticas (MTB)

As bactérias magnetotáticas (MTB) pertencem a um grupo de bactérias que sintetizam nanopartículas magnéticas intracelulares, cuja formação tem sido encontrada em varias linhagens filogenéticas de bactérias Gram negativas. Estas nanopartículas se organizam em cadeias no citoplasma, conferindo um momento magnético ao corpo bacteriano, o que faz que elas interajam com o campo geomagnético para orientar passivamente sua navegação na direção deste campo, resposta conhecida como magnetotaxia. A locomoção destas bactérias está completamente definida pelos flagelos, que são diversos em relação à morfologia, fisiologia e filogenia [1].

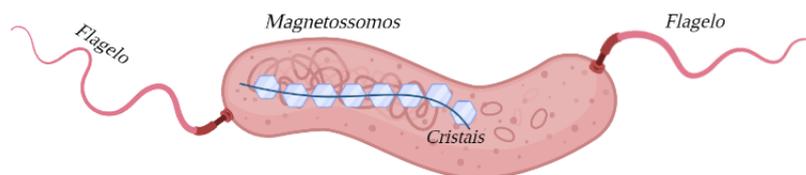


Figura 1.1: Estrutura típica de uma bactéria magnetotática com forma de espirila, que contém magnetossomos (nanopartícula magnética + membrana lipídica) e flagelos. Fonte: figura adaptada da referência [15]

A figura 1.1 representa uma célula de magnetospirillum que tem cerca de $3 \mu\text{m}$ de comprimento, com uma cadeia de aproximadamente 20 magnetossomos que se estendem ao longo do eixo da célula e dois flagelos, um em cada pólo da célula. O tamanho da cadeia do magnetossomo é cerca de $1 \mu\text{m}$ de comprimento e cada magnetossomo tem um tamanho de aproximadamente 50 nm de diâmetro [15]. Também têm sido relatadas outras morfologias comuns de MTB Fig.(1.2), como os cocos (esferas), ovoides, bacilos (bastões curtos ou longos), vibrios (bastões curvos), e até mesmo procariontes magnetotáticos multicelulares [16–19].

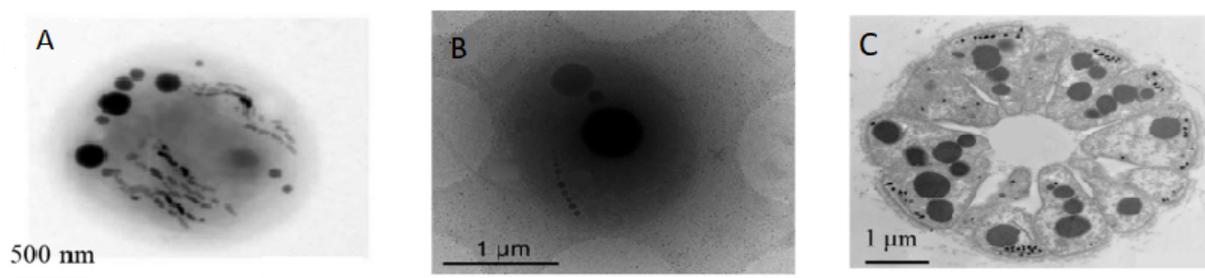


Figura 1.2: Morphologies of MTBs: , A: cocos(reproduzido de Lin et al. [16]) , B: ovoides (reproduzido de Zhang et al.[18]) , C: procariontes magnetotacticos multicelulares (reproduzido de Keim et al.[19]).

As MTB são consideradas onipresentes em habitats aquáticos que são neutros ou estão próximos de pH neutro, cosmopolitas na distribuição, mas, localmente são encontradas em alta densidade bem na zona de transição oxi-anóxica(ZTOA) (Fig 1.3). Todas as cepas em cultura pura têm uma forma de metabolismo respiratório (ou seja, nenhuma é conhecida por fermentar substratos) e exibem uma resposta tática negativa a concentrações altas de oxigênio. As MTB são obrigatoriamente organismos microaerofílicos ou anaeróbicos [3]. Assim sua migração para condições ideais depende tanto da aerotaxia e da magnetotaxia que atuam juntas como um tipo de comportamento sensorial chamado de magneto-aerotaxia, quanto da alteração na rotação flagelar [20]. A presença da cadeia de magnetossomos e flagelos, representa então uma vantagem adaptativa para o deslocamento através do gradiente químico, permitindo explorar recursos no ambiente para sobrevivência e reprodução.

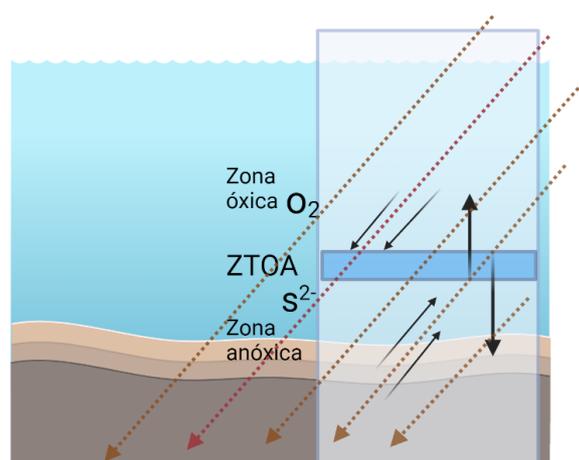


Figura 1.3: Diagrama Zona de Transição e Oxi- Anóxica (ZTOA) numa coluna de água. O campo geomagnético é representado pelas setas tracejadas. As bactérias magnetotáticas se alinham com o campo magnético e nadam perto da zona ZTOA. Fonte: figura adaptada da referência [20].

A existência das MTB foi relatada pela primeira vez em 1963 por Salvatore Bellini, um médico italiano de Pavia, Italia [21, 22]. Em seu estudo, ele concluiu que algumas bactérias anaeróbicas nadam persistentemente em direção ao polo norte magnético e pro-

põe a denominação “Bactérias Magnetossensíveis” junto com a hipótese de que existe uma bússola biomagnética em cada célula.

Em 1975 foi feita a primeira observação publicada oficialmente de MTB [2]. Nesse artigo o norte-americano Richard Blakemore, usando microscopia eletrônica de transmissão descreveu que bactérias coletadas de uma lagoa em Woods Hole, Massachusetts, continham cristais ricos em ferro, associando a eles o comportamento Magnetossensível o qual denotou como magnetotaxia e chamou as bactérias de magnetotáticas [21].

Desde então o conhecimento sobre MTB e magnetotaxia tem sido resumido em uma série de excelentes artigos de revisão [1, 23–27], e em muitos estudos multidisciplinares referentes à biomineralização, organização ultraestrutural de magnetossomos em bactérias, entendimento dos mecanismos moleculares e aplicações [28, 29].

1.2 Magnetossomos e a magnetotaxia

Os magnetossomos são estruturas nanométricas de ferro sintetizadas intracelularmente pelas MTB. Estas nanopartículas magnéticas estão envoltas por uma membrana de bicamada lipídica chamada membrana de magnetossomo (MM), que contém inúmeras proteínas, e se origina a partir da invaginação da membrana citoplasmática (CM) da célula [30].

As principais propriedades dos magnetossomas estão resumidas abaixo:

- (I) O mineral do magnetossomo é composto de magnetita (Fe_3O_4) ou greigita (Fe_3S_4) dependendo da espécie. Normalmente, uma espécie de MTB sintetiza cristais magnéticos de uma composição específica, magnetita ou greigita, embora algumas espécies sintetizem ambos os minerais [31].
- (II) A síntese da membrana do magnetossomo (orgânico) e do mineral de magnetita ou greigita (inorgânico) está sob estrito controle genético por um processo chamado mineralização biologicamente controlada (BCM) ou biomineralização, do qual o passo inicial é a invaginação da membrana citoplasmática para formar a vesícula da membrana do magnetossomo [1].
- (III) A morfologia, tamanho e disposição do cristal magnético é sujeito a controle químico, bioquímico e genético específico da espécie:

Tamanho: Possuem uma distribuição de tamanho estreita e morfologia uniforme quando as bactérias magnetotáticas são cultivadas em condições ótimas, ou seja, essencialmente usando uma baixa concentração de oxigênio (entre 0,25 e 10 mbar) [32]. Nestas condições a distribuição de tamanhos nos magnetossomos pode ser tão pequena quanto 10 nm em comparação com tamanhos de magnetossomos entre 45 e 55 nm para as espécies de bactérias magnetotáticas mais comumente estudadas (AMB-1 e MSR-1) [3, 33].

Em geral os cristais maduros de magnetita normalmente caem dentro de uma faixa de tamanho estreita de cerca de 35-120 nm (eixos principais), nesta faixa de tamanhos os cristais se comportam como monodomínios magnéticos estáveis (SD) à temperatura ambiente. . No caso dos cristais de magnetita forem menores de 35 nm eles serão superparamagnéticos (SP) à temperatura ambiente, o que significa que não possuem magnetizações remanescentes persistentes [24], e para cristais de magnetita muito grandes com comprimentos superiores de até 120 nm- 250 nm,

sua magnetização é não uniforme, e tenderão a formar múltiplos domínios magnéticos [33]. Assim, as cadeias de magnetossomos são formados por monodomínios magnéticos.

Morfologia: Três principais tipos de morfologias de cristais de magnetossomos tem sido identificadas: (1) cubo-octaédrico, (2) paralelepípedo ou prismático alongado [34], (3) em forma de dente ou bala [35] (Fig.3). Geralmente, a forma do cristal é estável dentro das células de uma única espécie ou cepa bacteriana, embora pequenas variações tenham sido encontradas em cristais de algumas espécies cultivadas sob diferentes condições [36].

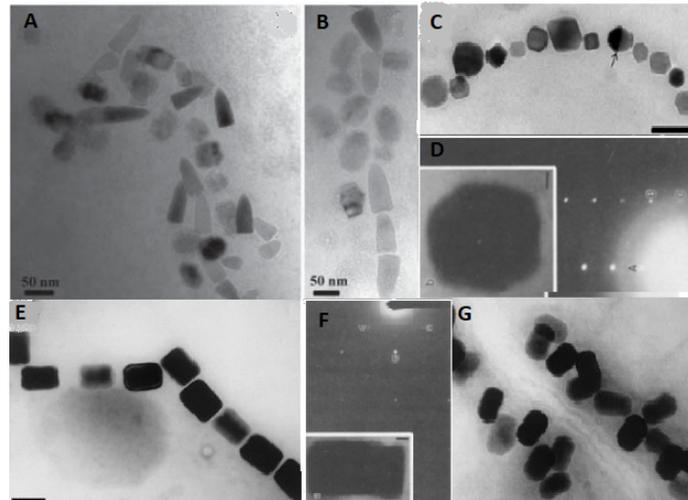


Figura 1.4: Morfologias cristalinas: A, B: dente ou bala, dispostos em várias cadeias. C, D: cubo-octaédrico, dispostos em uma cadeia. E, F: paralelepípedo ou prismático alongado, cadeia única. G: prismático dispostos em forma irregular. Fonte: [35].

- (IV) Os magnetossomos estão geralmente dispostos em cadeias na bactéria. Esse arranjo é estável o suficiente para ser preservado mesmo após romper as bactérias para isolar os magnetossomos e podem ser facilmente funcionalizados, devido à presença de vários grupos químicos em sua superfície. Quando são preparados em condições específicas, possuem alta biocompatibilidade e baixa toxicidade [37].
- (V) A cadeia de magnetossomos confere um momento magnético dipolar para as MTB, permitindo que elas se alinhem ao longo das linhas do campo magnético enquanto nadam, um comportamento denominado magnetotaxia.

A primeira estimativa teórica para o momento magnético foi feita contando a contribuição de várias nanopartículas dispostas em cadeia [38]. Outro método baseia-se na análise da volta em U: o momento magnético é determinado a partir da largura ou do tempo da volta de marcha executada por uma bactéria após uma inversão da polaridade do campo magnético aplicado [6, 39]. Um método diferente para estimar o momento magnético é a exposição a um campo magnético rotativo. Neste caso a MTB descreve trajetórias circulares seguindo a rotação do campo magnético até atingir uma frequência de escape, onde não consegue acompanhar mais a rotação do campo. A partir desta frequência é estimado o momento magnético [40, 41]. Os métodos anteriores dependem da motilidade das MTB e não podem ser usados para estimar o momento magnético de partículas inertes ou MTB mortas. Para este

ultimo caso, foi apresentado um método com base na aplicação de um campo magnético oscilante externo onde os microrganismos estão localizados [42]. A Tabela 1.1 resume o momento magnético medido com diferentes técnicas.

Tabela 1.1: Valor do momento magnético para MTB usando diferentes técnicas físicas. Fonte:[1]

Técnica	organismo	Momento magnético (A m ²)	Referência
Microscopia eletrônica	<i>Magnetotactic spirillum MS1</i>	1.3×10^{-15}	[38]
Volta em Us	Vários microorganismos de água doce a marinha	$0.3 \times 10^{-15} - 54 \times 10^{-15}$	[6]
Volta em U modificada	<i>Magnetospirillum magnetotacticum</i>	6.1×10^{-16}	[43]
SQUID	Bactérias não cultivadas de água doce	1.8×10^{-15}	[44]
Espalhamento de luz	<i>Aquaspirillum magnetotacticum</i>	2.2×10^{-16} 4.3×10^{-16} (morta)	[45]
Espalhamento de luz	<i>Magnetospirillum gryphiswaldense</i>	$2.53 \pm 1.6 \times 10^{-16}$	[46]
Birrefringência	<i>Aquaspirillum magnetotacticum</i>	1.21×10^{-16}	[47]
Campo magnético rotativo	Amostras naturais	4×10^{-15}	[48]
Campo magnético rotativo	Coco não cultivado MYC-1	1.8×10^{-15}	[44]
Pinças magnéticas	<i>Magnetospirillum gryphiswaldense</i>	$2.4 \pm 1.1 \times 10^{-16}$ (B menor) $7.7 \pm 3.4 \times 10^{-16}$ (B maior)	[49]

1.3 Função dos Magnetossomos e Magneto-Aerotaxia

Os magnetossomos dentro das MTBs estão organizados em um arranjo de cadeia e orientados com eixos de magnetização paralelos, dando a toda a cadeia o comportamento de um único dipolo magnético, permitindo que uma bactéria se oriente passivamente ao longo das linhas do campo geomagnético enquanto nada [50]. Essa resposta é conhecida como magnetotaxia sendo resultado do torque entre o campo geomagnético e o momento magnético da cadeia de magnetossomos, razão pela qual as MTB são descritos como “bússolas vivas”.

A magnetotaxia não representa uma verdadeira resposta de táxis como na fototaxia ou quimiotaxia. As bactérias magnetotáticas não são atraídas nem puxadas para perto ou para longe de uma fonte de campo magnético. Assim, a magnetotaxia é uma combinação da orientação passiva e motilidade ativa por flagelos ao longo das linhas de campo magnético [3].

A direção de nado das MTBs geralmente exibe uma polaridade relacionada com o hemisfério da Terra onde as bactérias estão localizadas. No hemisfério Norte, as MTBs normalmente nadam na direção que as linhas de campo magnético apontam, significando que elas se movem em direção ao polo sul de um ímã de barra (ou seja, para o norte no campo geomagnético); essas bactérias são conhecidas como North-Seeking (NS). No hemisfério sul, a MTB normalmente nada contra linhas de campo magnético, o que significa que elas se movem em direção ao polo norte de um ímã de barra (ou seja, para o sul no campo geomagnético) conhecidas como South-seeking (SS) (Fig.1.5) [27].

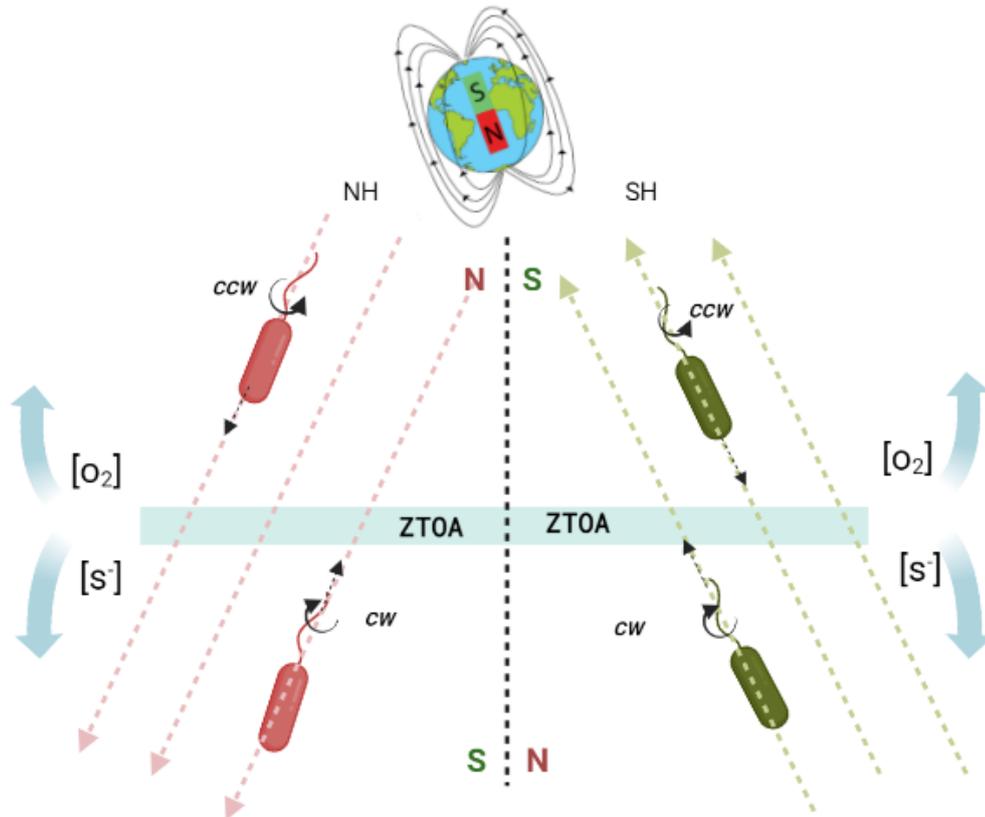


Figura 1.5: Desenho esquemático magneto-aerotaxia: Nos hemisférios norte (NH) e sul (SH) ajuda as MTBs a encontrar eficientemente sua concentração ótima de oxigênio ($[O_2]$) na zona de transição óxido-anóxica (ZTOA) em habitats naturais (colunas de água ou sedimentos) com gradientes verticais de concentração química. Em ambos os hemisférios, as células do lado óxido da ZTOA nadam ao longo das linhas de campo geomagnético girando seus flagelos no sentido anti-horário (CCW), enquanto as do lado anóxico nadam girando seus flagelos no sentido horário (CW). fonte:[27].

Se o modelo original de magnetotaxia proposto fosse verdadeiro, todas as bactérias magnetotáticas nadariam para o fundo dos tubos de cultura e para o sedimento em ambientes aquáticos naturais, mas a descoberta grandes populações de bactérias magnetotáticas na interface oxi-anóxica em colunas quimicamente estratificadas, faz que o modelo simples não explique satisfatoriamente como as bactérias na zona anóxica de uma coluna de água se beneficiam da magnetotaxia [3], nem explica como os cocos magnetotáticos formam bandas microaerófilas de células em meios de crescimento semi-sólidos com gradiente de oxigênio [51]. Isto mostra claramente que a magnetotaxia trabalha em conjunto

com a aerotaxia, que é a resposta pela qual as bactérias migram para uma concentração ideal de oxigênio em um gradiente de oxigênio (migrações para baixo e para cima da zona de transição oxi-anóxica) [52]. Essa migração seria um passeio aleatório tridimensional, mas a magnetotaxia a reduz a uma busca unidimensional, aumentando passivamente a eficiência da aerotaxia. Isso faz parte do “comportamento” conhecido como o modelo de magnetoaerotaxia, e se mostra como uma vantagem energética sobre os organismos não magnetotáticos.

No modelo de magnetoaerotaxia, as bactérias magnetotáticas podem estar em um estado oxidado ou reduzido: assim as bactérias magnetotáticas de natações unidirecionais podem reverter sua direção de natação (flagelos giram no sentido horário) e nadar para trás no estado reduzido (menor que a concentração ideal de oxigênio), no entanto, em condições óxicas ou estado oxidado (maior que a concentração ideal de oxigênio), as MTB nadam para baixo. Eles fazem isso girando seus flagelos no sentido anti-horário (Fig.1.5) [51].

Tem sido observados dois mecanismos magnetoaerotáticos diferentes, conhecidos como polar e axial: algumas MTB que nadam persistentemente em uma direção ao longo do campo magnético (NS ou SS) são magneto-aerotáticos polares, as linhas do campo magnético fornecem direção e eixo. Por outro lado, são magneto-aerotáticos axiais aqueles que nadam em qualquer sentido ao longo das linhas do campo magnético com inversões frequentes e espontâneas no sentido da natação sem se virar, ou seja, o campo magnético define o eixo mas não o sentido do nado, e a distinção entre NS e SS não se aplica a essas bactérias (não apresentam preferência polar) [27].

1.4 Flagelação

Todas as MTB atualmente conhecidas se movimentam impulsionadas por flagelos. Elas desenvolveram um aparelho flagelar refinado que fornece o meio mais eficiente de locomoção, onde o número de flagelos e disposição varia segundo a espécie.

Os flagelos são organelas helicoidais que compartilham uma estrutura básica de três partes: o corpo basal, o gancho e um filamento [4]. O corpo basal contém um motor rotativo reversível composto por um complexo de anéis de rotor e várias unidades de estator transmembrana, que converte o fluxo de íons através de um canal de íons de cada unidade de estator no trabalho mecânico necessário para a rotação do motor, que pode funcionar tanto no sentido horário quanto no anti-horário, gerando um torque que gira o filamento helicoidal preso a ele por um gancho. O gancho funciona como um acoplamento flexível ou junta universal para o filamento, transmitindo o torque gerado pelo motor ao filamento. [53]. O filamento flagelar é um polímero helicoidal construído a partir de uma única proteína (flagelina) e serve como hélice, convertendo o movimento de rotação do motor em impulso linear. Consegue adotar diferentes conformações polimórficas, exibindo extensas variações tanto no número quanto na localização entre as espécies [54].

As bactérias podem ter um único flagelo (monótrico) em uma extremidade do corpo, nomeado flagelo polar, ou podem ter um flagelo ou tufo de flagelos em cada extremidade (anfítrico), vários flagelos em um tufo na posição polar (lofotríquio) ou flagelos distribuídos por todo o corpo bacteriano (peritríquio) (Fig.1.6) [5, 55].

O número de flagelos por célula varia de 1 no vibrio marinho *Magnetovibrio blakemorei* cepa MV-1, ou um tufo ou feixes de flagelos típico no coco magnetotático *Magnetococcus marinus* cepa MC-1, até mais de mil nos procariontes magnetotáticos multicelulares

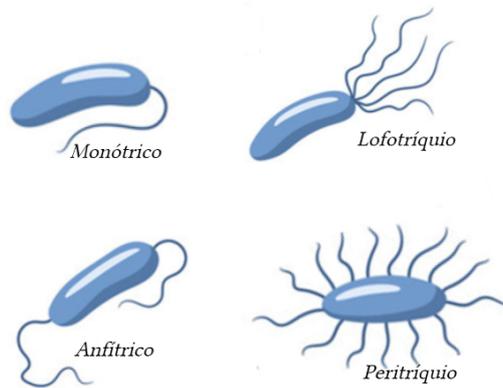


Figura 1.6: Arranjo de flagelos bacterianos. Monótrico: único flagelo em uma extremidade do corpo, nomeado flagelo polar; Anfítrico: um único flagelo ou um tufo de flagelos em ambas as extremidades; Lofotríquio vários flagelos em um tufo em posição polar; Peritríquio: flagelos distribuídos por todo o corpo bacteriano Fonte:[55].

(MMPs). A velocidade de natação também varia muito entre as espécies, de cerca de $40 \mu\text{m/s}$ em membros do gênero *Magnetospirillum* a mais de $1000 \mu\text{m/s}$ em alguns cocos magnetotáticos [56].

A propulsão flagelar envolve a interação de elasticidade e da hidrodinâmica. A estrutura do flagelo é dominada por forte comportamento elástico, ou seja, por termos de flexão e outros modos de deformação. Por outro lado, o meio circundante é governado por interações viscosas e pela relação constitutiva newtoniana. Assim, modelar o sistema composto flagelo/meio circundante é uma tarefa desafiadora. Muitos estudos teóricos da mecânica dos fluidos de nadadores helicoidais tem sido realizados para descrever a natureza da propulsão bacteriana e comportamento do fluxo em torno dela [57–61]

1.5 Movimento de bactérias magnetotáticas: Modelos biofísicos

Os estudos teóricos de mobilidade pretendem mostrar o comportamento de nado da bactéria a partir dos princípios da mecânica dos fluidos [62,63]. Bactérias magnetotáticas flageladas movem-se em um ambiente fluido e suas características de natação são influenciadas pela viscosidade, nadando no regime de baixo numero de Reynolds, onde a soma de todas as forças e de todos os torques é nula. Nesse regime, os microrganismos nadam seguindo uma trajetória helicoidal [64].

No modelo de Nogueira e Lins de Barros [10] é considerada uma MTB esférica com um único flagelo e uma cadeia de magnetossomos alinhados à linha do flagelo na presença de um campo magnético externo (Figura 1.7). São feitas as seguintes considerações:

- a . Bactéria magnetotática esférica com raio R
- b . Impulsionada por uma força \mathbf{F} (devido à ação flagelar)
- c . Bactéria possui um momento magnético permanente

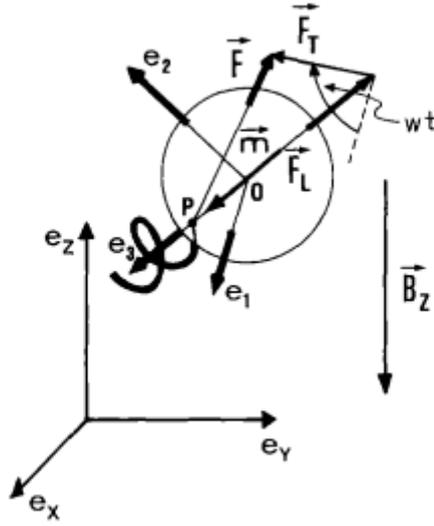


Figura 1.7: Conjunto de eixos ortogonais usados no modelo de Nogueira e Lins de Barros[10]. O conjunto de vetores unitários (e_1, e_2, e_3) define o sistema de referência BAC fixo no corpo da bactéria, no centro de massa 0. O sistema BAC gira em relação ao sistema de referência LAB, definido pelo conjunto de vetores unitários (e_x, e_y, e_z) que está fixo no laboratório. \mathbf{F} a força propulsora aplicada no ponto P, que corresponde ao ponto onde está fixo o flagelo. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são, respectivamente, as componentes de \mathbf{F} longitudinal (ao longo do eixo e_3) e transversal (no plano formado por e_2 e e_1). A componente \mathbf{F}_T oscila com velocidade angular ω . A MTB possui um momento magnético \mathbf{m} localizado no centro de massa 0. O campo magnético externo se encontra orientado no sentido negativo do eixo Z do laboratório. Fonte: [10].

d . Nada em um fluido com viscosidade η

e . Flagelo gira em torno de seu eixo com frequência angular ω em relação ao corpo celular.

Usando as equações de forças e torques:

$$\mathbf{F} + \mathbf{F}_H = \mathbf{0} \quad (1.1)$$

$$\mathbf{N}_C + \mathbf{N} + \mathbf{N}_H + \mathbf{N}_m = \mathbf{0} \quad (1.2)$$

Onde \mathbf{F} e \mathbf{N} , são a força e o torque gerado pelo flagelo, \mathbf{N}_C o torque de reação, \mathbf{N}_H e \mathbf{F}_H o torque e a força hidrodinâmicos e \mathbf{N}_m o torque magnético.

Nesse artigo os autores calcularam as equações diferenciais ordinárias que descrevem a evolução temporal das coordenadas do centro de massa (x, y, z) e dos ângulos de Euler para o corpo rígido (θ, ϕ, ψ) :

Equações que descrevem a translação do centro de massa da bactéria

$$\dot{x} = V_{12}[\cos \phi \cos(\omega t + \psi) - \sin \phi \cos \theta \sin(\omega t + \psi)] + V_3 \sin \theta \sin \phi \quad (1.3)$$

$$\dot{y} = V_{12}[\sin \phi \cos(\omega t + \psi) + \cos \phi \cos \theta \sin(\omega t + \psi)] - V_3 \sin \theta \cos \phi \quad (1.4)$$

$$\dot{z} = V_{12} \sin \theta \sin(\omega t + \psi) + V_3 \cos \theta \quad (1.5)$$

onde :

$$V_{12} = \frac{F_{12}}{6\pi\eta R} \quad (1.6)$$

$$V_3 = \frac{F_3}{6\pi\eta R} \quad (1.7)$$

F_{12} F_3 são, respectivamente, os componentes de \mathbf{F} ao longo de e_3 (componente \mathbf{F}_L) e no plano formado por e_1 e e_2 (componente \mathbf{F}_T).

Equações que descrevem a rotação do corpo celular em relação ao centro de massa da bactéria

$$\dot{\theta} = \beta \sin \theta - \alpha \sin(\omega t + \psi) \quad (1.8)$$

$$\dot{\phi} = \alpha \csc \theta \cos(\omega t + \psi) \quad (1.9)$$

$$\dot{\psi} = -\gamma - \alpha \cot \theta \cos(\omega t + \psi) \quad (1.10)$$

onde

$$\alpha = \frac{N_{12}}{8\pi\eta R^3} \quad (1.11)$$

$$\beta = \frac{mB}{8\pi\eta R^3} \quad (1.12)$$

$$\gamma = \frac{\mathbf{N}_C}{8\pi\eta R^3} \quad (1.13)$$

\mathbf{N}_C denota o par de reação devido ao par que gera a rotação flagelar com velocidade angular ω e $N_{12} = RF_{12}$.

As equações de movimento foram integradas numericamente em um computador usando o método Runge-Kutta de quarta ordem. Os valores experimentais estimados para os parâmetros usados na integração numérica foram:

$$R = 1,2 \pm 0,1 \mu\text{m}$$

$$m = (2,2 \pm 0,2) \times 10^{-12} \text{ emu. (1 emu} = 10^{-3} \text{ Am}^2)$$

$$B = 2,5 \pm 0,1 \text{ G (1 G} = 10^{-3} \text{ T)}$$

$$\alpha = 133 \pm 12 \text{ rad/s}$$

$$\omega - \gamma = 175 \pm 17 \text{ rad/s}$$

$$V_3 = 125 \pm 12 \mu\text{m/s}$$

O comportamento das soluções numéricas mostrou que os resultados são sensíveis à variação dos parâmetros e que trajetórias são semelhante a uma hélice cilíndrica, com uma evidente correspondência com as trajetórias experimentais analisadas no mesmo trabalho.

Na pesquisa recente [11] baseada no modelo anterior para uma bactéria esférica com um único flagelo (Figura 1.8), as equações de movimento (1.3), (1.4), (1.5), (1.8), (1.9) e (1.10) foram integradas usando o integrador numérico LSODA da biblioteca ODEPACK, disponível na linguagem Python, e usando os seguintes valores para os parâmetros:

$$\begin{aligned} \eta &= 1,2 \times 10^{-3} \text{ Pa s} \\ R &= 1 \mu\text{m} \\ m &= 1,5 \times 10^{-15} \text{ A m}^2 \\ F_3 &= F_{12} = 4 \times 10^{-12} \text{ N} \\ \omega &= 250 \text{ rad/s} \\ \mathbf{N}_c &= 2 \times 10^{-18} \text{ N m} \\ \alpha &= 159 \text{ rad/s} \\ \gamma &= 79 \text{ rad/s} \\ V_3 &= V_{12} = 212 \mu\text{m/s} \\ B &= (0,1, 0,6, 1, 2, 4, 8, 16, 20, 30, 40, 50, 60, 100, 200, 300, 400, 500) \text{ Oe.} \end{aligned}$$

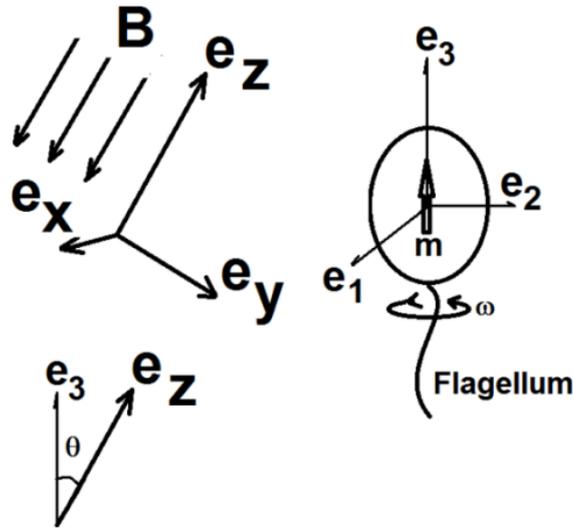


Figura 1.8: Representação esquemática dos sistemas de referência usados no modelo teórico para o movimento do MTB na referência [11]. e_1, e_2, e_3 são vetores ortonormais fixados ao corpo bacteriano. e_x, e_y, e_z são vetores ortonormais fixados ao laboratório. O campo magnético aplicado B está na direção $-e_z$. O momento magnético \mathbf{m} está fixo no centro de massa do corpo da bactéria e orientado paralelamente ao flagelo. O flagelo gira com velocidade angular ω . fonte:[11]

Nos gráficos obtidos nas simulações da referência [11] foi possível observar:

(1) Após um tempo, as coordenadas x e y oscilam como ondas senoidais e a coordenada z varia linearmente, características de uma trajetória helicoidal com coordenadas $x(t) = \mathcal{R} \cos(2\pi ft)$, $y(t) = \mathcal{R} \sin(2\pi ft)$ e $z(t) = V_z(t)$ onde V_z é a velocidade axial e \mathcal{R} é o raio da hélice.

(2) O Comportamento do ângulo de Euler θ adquire um valor constante θ_E após um tempo, e os ângulos ϕ e ψ após algum tempo variam linearmente. Esse comportamento é observado para todos os valores de campo magnético usados, afirmando que, após algum tempo, a trajetória adquire um estado estacionário, onde as coordenadas do centro de

massa variam como uma hélice cilíndrica com eixo paralelo ao campo magnético, e os ângulos podem ser escritos como:

$$\phi = \phi_0 - \omega_1 t \quad (1.14)$$

$$\psi = \psi_0 - \omega_2 t \quad (1.15)$$

$$\theta = \theta_E \quad (1.16)$$

(3) Velocidade angular do corpo $\Omega = [\omega_1^2 + \omega^2 + 2\omega\omega_1 \cos(\theta_E)]^{1/2}$ é um vetor que faz precessão em torno do eixo e_z que é a direção do campo magnético. Como o momento magnético esta fixo ao corpo, ele faz precessão em torno do campo magnético com velocidade angular ω_1 .

(4) Para o raio de trajetória \mathcal{R} e a velocidade axial V_z em função do campo magnético B , observou-se que a velocidade axial diminui inicialmente, atinge um valor mínimo e cresce para obter um valor estável. De acordo com a literatura [14] essa diminuição da velocidade quando o campo magnético aumenta está associado a uma inclinação intrínseca da cadeia do magnetossomos em relação ao feixe flagelar. Neste artigo [11] os resultados mostram que a velocidade diminui mesmo quando a cadeia do magnetossomo está alinhada com os flagelos.

Além da solução numérica é proposta uma solução analítica, como segue:

usando as Eqs. (1.14), (1.15), (1.16) nas Eqs.(1.8), (1.9), (1.10) as seguintes expressões são encontradas:

$$-\omega_1 = \alpha \csc(\theta_E) \cos(\psi_0) \quad (1.17)$$

$$0 = \beta \sin(\theta_E) - \alpha \sin(\psi_0) \quad (1.18)$$

$$-\omega_2 = \beta \sin(\theta_E) - \alpha \sin(\psi_0) \quad (1.19)$$

Usando as equações acima em (1.3), (1.4), (1.5) e após integração simples, a seguinte solução para as coordenadas do centro de massa é encontrada:

$$x = x_0 - [\mathcal{R}_{12} \sin(\psi_0) \cos(\theta_E) \cos(\phi_0 - \omega_1 t)] + [\mathcal{R}_3 \sin(\theta_E) \cos(\phi_0 - \omega_1 t) - \mathcal{R}_{12} \cos(\psi_0) \sin(\phi_0 - \omega_1 t)] \quad (1.20)$$

$$y = y_0 - [\mathcal{R}_{12} \sin(\psi_0) \cos(\theta_E) \sin(\phi_0 - \omega_1 t)] + [\mathcal{R}_3 \sin(\theta_E) \sin(\phi_0 - \omega_1 t) + \mathcal{R}_{12} \cos(\psi_0)] \cos(\phi_0 - \omega_1 t) \quad (1.21)$$

$$z = z_0 + [V_3 \cos(\theta_E) + V_{12} \sin(\theta_E) \sin(\psi_0)]t \quad (1.22)$$

Onde $\mathcal{R}_{12} = V_{12}/\omega_1$ e $\mathcal{R}_3 = V_3/\omega_1$. As equações representam uma hélice cilíndrica porque a projeção da trajetória no plano XY é um círculo de raio:

$$r = [(\mathcal{R}_3 \sin(\theta_E) - \mathcal{R}_{12} \sin(\psi_0) \cos(\theta_E))^2 + \mathcal{R}_{12}^2 \cos^2(\psi_0)]^{1/2} \quad (1.23)$$

Da Eq.(1.22) a velocidade axial é identificada como:

$$V_z = V_3 \cos(\theta_E) + V_{12} \sin(\theta_E) \sin(\psi_0) \quad (1.24)$$

θ_E e ψ_0 são funções de Beta β

No limite de campos magnéticos mais altos $\text{Beta}(\beta) \rightarrow \infty$, a trajetória se torna:

$$x = x_0 + \mathcal{R}'_{12} \cos(\omega_1 - \gamma)t \quad (1.25)$$

$$y = y_0 + \mathcal{R}'_{12} \sin(\omega_1 - \gamma)t \quad (1.26)$$

$$z = z_0 + V_3 t \quad (1.27)$$

$\mathcal{R}'_{12} = V_{12}/(\omega - \gamma)$ Neste caso, a trajetória corresponde à expressão clássica para uma hélice cilíndrica.

Para campos magnéticos nulos ($\beta = 0$) a trajetória é a seguinte:

$$x = x_0 + \mathcal{R}_3 \sin(\theta_E) \cos(\phi_0 - \omega_1 t) - \mathcal{R}_{12} \sin(\phi_0 - \omega_1 t) \quad (1.28)$$

$$y = y_0 + \mathcal{R}_3 \sin(\theta_E) \sin(\phi_0 - \omega_1 t) + \mathcal{R}_{12} \cos(\phi_0 - \omega_1 t) \quad (1.29)$$

$$z = z_0 + V_3 \cos(\theta_E)t \quad (1.30)$$

mostram que a trajetória para microrganismos não magnéticos, é uma hélice também.

Entre os resultados estão:

- (a) A solução analítica para trajetórias das MTB foi obtida com base nas soluções numéricas, mostrando pela primeira vez que as trajetórias são de fato hélices cilíndricas com eixo paralelo ao campo magnético.
- (b) O Momento magnético não se alinha ao campo magnético, mas faz precessão em torno dele, sendo totalmente orientado apenas para campos magnéticos muito altos.

Os resultados teóricos da referencia [11] foram comparados com medidas experimentais do movimento das MTB não cultivadas sob diferentes campos magnéticos, concluindo o seguinte:

- (c) As trajetórias mostraram ser uma mistura complexa de duas funções oscilantes, uma com frequência inferior e outra com frequência superior
- (d) Só a velocidade axial e a frequência da componente com frequência maior diminuem quando o campo magnético aumenta
- (e) O raio e a frequência para o componente de menor frequência não dependem do campo magnético

Por outro lado, no artigo [8] foi usada a análise do movimento das MTB, através do cálculo da trajetória de natação em campos magnéticos variáveis (dependente do tempo), com o fim de deduzir o momento magnético da bactéria. A geometria do corpo bacteriano foi aproximada a um elipsoide para determinar os coeficientes de arrasto e trajetórias para formas mais complicadas. Para isto, algoritmos computacionais foram desenvolvidos para calcular numericamente esses coeficientes que concordaram com os resultados experimentais obtidos no mesmo artigo.

Outro artigo que estuda o movimento dos MTBs não esféricos foi realizado por Zhen Cui et al. [65]. Através de métodos teóricos e experimentais, eles estudam o movimento de natação de bactérias magnetotáticas com forma de um esferoide alongado em um líquido viscoso sob a influência de um campo magnético externo.

Neste modelo foi usado um modelo fluidodinâmico incluindo o fluxo de Stokes tridimensional de um esferoide prolato de excentricidade arbitrária [66]. No modelo foram evidentes 12 graus de liberdade: a posição no laboratório $R = (X, Y, Z)$, as três componentes do vetor velocidade \mathbf{V}_L , e a velocidade angular de rotação $\mathbf{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$ e os três ângulos de Euler θ, ϕ, ψ , o que resulta em um sistema de 12 equações diferenciais ordinárias não lineares acopladas que descrevem o movimento da bactéria magnetotática. Assim, em comparação com a geometria esférica, a esferoidal alongada introduz não apenas uma matemática complicada, mas também uma nova dinâmica importante para uma melhor compreensão do movimento de natação de bactérias magnetotáticas não esféricas. Revelando, pela primeira vez, que o padrão e a velocidade do movimento de natação são sensíveis à forma da bactéria não esférica (marcada pelo tamanho de sua excentricidade).

Em 2012 um modelo dinâmico foi publicado por Yang et al. [14], que inclui não só uma variação na geometria do corpo, mas também o efeito de dois feixes flagelares (Figura 1.9). Entre as considerações importantes eles propuseram:

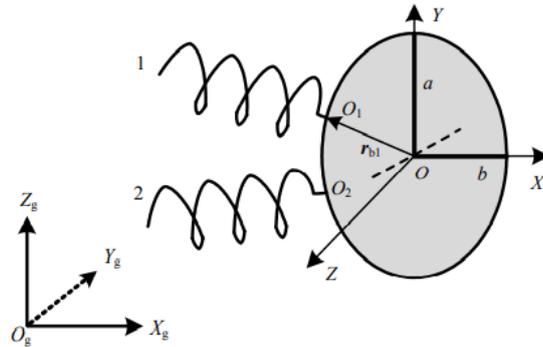


Figura 1.9: Conjunto de eixos ortogonais usados no modelo de Yang et al. [14]. O sistema fixo ao laboratório é representado com o subíndice g: $(X_g Y_g Z_g)$. O sistema coordenado (X, Y, Z) está fixo ao corpo da bactéria, neste caso a bactéria magnetotática MO-1. \mathbf{r}_{b1} é o vetor posição do ponto O_1 , que é o ponto de contato do flagelo 1 com a parede celular. Os dois flagelos se conectam rigidamente ao corpo celular nos pontos O_1 e O_2 . O esferoide prolato tem semieixo maior a e semieixo menor b . Fonte [14].

- (a) A célula MO-1 ovoide é modelada como um corpo esferóide prolato, com um semi-eixo maior, a , e dois semi-eixos menores, b . A apresenta dois flagelos helicoidais rígidos e uma cadeia de magnetossomos
- (b) Cada feixe flagelar helicoidal é representado como um único flagelo helicoidal espesso e sua forma não muda durante a natação. Os dois flagelos se conectam rigidamente ao corpo celular.
- (c) A cadeia de magnetossomos pode ser ajustada em qualquer ângulo β relativo ao eixo de propulsão.
- (d) É estabelecido um sistema de coordenadas $O_g X_g Y_g Z_g$, para descrever o movimento da célula MO-1 com respeito ao laboratório, e um sistema de coordenadas de corpo fixo ao corpo ($OXYZ$) que se move junto com a bactéria MO-1.
- (e) A força viscosa e o torque viscoso exercidos sobre o corpo da bactéria magnetotática, que nada na velocidade \mathbf{U} e gira na velocidade angular $\mathbf{\Omega}$, no sistema $OXYZ$, são escritas da seguinte forma de acordo com a equação de Stokes:

$$\mathbf{F}_b^0 = -\mathbf{C}_F \mathbf{U}^0 \quad (1.31)$$

$$\mathbf{T}_b^0 = -\mathbf{C}_M \mathbf{\Omega}^0 \quad (1.32)$$

onde o sobrescrito 0 denota as variáveis no sistema $OXYZ$, e \mathbf{C}_F e \mathbf{C}_M são matrizes diagonais 3×3

$$\mathbf{C}_F = 6\pi\mu a \begin{bmatrix} k_x & 0 & 0 \\ 0 & k_y & 0 \\ 0 & 0 & k_z \end{bmatrix} \quad (1.33)$$

$$\mathbf{C}_M = 8\pi\mu b^2 \begin{bmatrix} k'_x & 0 & 0 \\ 0 & k'_y & 0 \\ 0 & 0 & k'_z \end{bmatrix} \quad (1.34)$$

onde k_x, k_y, k_z e k'_x, k'_y, k'_z são coeficientes de correção.

- (f) Para o cálculo do impulso e torque produzidos pelos flagelos foi usada a teoria da força resistiva (RFT) [67]. O vetor de velocidade linear \mathbf{U}_{O1} e o vetor de velocidade angular $\mathbf{\Omega}_{O1}$ são dados como segue:

$$\mathbf{U}_{O1} = \mathbf{U} + \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}_{b1} \quad (1.35)$$

$$\mathbf{\Omega}_{O1} = \mathbf{\Omega} \quad (1.36)$$

onde \mathbf{r}_{b1} é o vetor de posição do ponto O1 com respeito à origem O (Fig. 1.9)

A velocidade \mathbf{U}_{f1} de um segmento do flagelo 1 na posição \mathbf{r}_{s1} pode ser expressa como

$$\mathbf{U}_{f1} = \mathbf{U}_{01} + (\boldsymbol{\Omega}_{01} + \omega_{\mathbf{m1}}) \times \mathbf{r}_{s1} \quad (1.37)$$

\mathbf{r}_{s1} é o vetor de posição do ponto 01 com respeito ao origem 0 e $\omega_{\mathbf{m1}}$ denota a velocidade angular do motor flagelar.

A força do fluido $d\mathbf{F}_{f1}$ agindo sobre um pequeno elemento ds da hélice flagelar avaliada com base no RFT pode ser escrita como

$$d\mathbf{F}_{f1} = d\mathbf{F}_{f1\parallel} + d\mathbf{F}_{f1\perp} = -C_{T1}\mathbf{U}_{f1\parallel}ds - C_{N1}\mathbf{U}_{f1\perp}ds \quad (1.38)$$

$d\mathbf{F}_{f1\parallel}$ e $d\mathbf{F}_{f1\perp}$ são as componentes tangencial e normal da força. $\mathbf{U}_{f1\parallel}$ e $\mathbf{U}_{f1\perp}$ são as velocidades tangencial e normal, respectivamente. C_{T1} e C_{N1} são os coeficientes de atrito (incluem viscosidade do fluido η e comprimento de onda λ ao longo da linha central do flagelo)

O Torque $d\mathbf{T}_{f1}$ produzido pela força $d\mathbf{F}_{f1}$ no ponto O1 é escrito como:

$$d\mathbf{T}_{f1} = \mathbf{r}_{s1} \times d\mathbf{F}_{f1} \quad (1.39)$$

Integrando as Eqs. (1.38) e (1.39) , a força que atua no flagelo é obtida:

$$\mathbf{F}_{f1}^{\xi} = \mathbf{A}_1\mathbf{U}_{01}^{\xi} + \mathbf{B}_1(\boldsymbol{\Omega}^{\xi} + \omega_{\mathbf{m1}}^{\xi}) \quad (1.40)$$

E o torque produzido pelo flagelo no ponto O1 é expresso como:

$$\mathbf{T}_{f1}^{\xi} = \mathbf{C}_1\mathbf{U}_{01}^{\xi} + \mathbf{D}_1(\boldsymbol{\Omega}^{\xi} + \omega_{\mathbf{m1}}^{\xi}) \quad (1.41)$$

$\mathbf{A1}, \mathbf{B1}, \mathbf{C1}, \mathbf{D1}$ são matrizes constantes 3×3 que dependem da forma e tamanho do feixe flagelar helicoidal. O sobrescrito ξ representa um sistema de referencia fixo no flagelo.

No sistema de coordenadas fixo ao corpo bacteriano ($OXYZ$), a força e o torque exercidos no flagelo “1” podem ser reescritos como:

$$\mathbf{F}_{f1}^0 = \mathbf{R}_{O\xi1}\mathbf{F}_{f1}^{\xi} \quad (1.42)$$

$$\mathbf{T}_{f1}^0 = \mathbf{R}_{O\xi1}\mathbf{T}_{f1}^{\xi} \quad (1.43)$$

Onde $\mathbf{R}_{O\xi1}$ é uma matriz de transformação entre sistemas de referencia. O sobrescrito ξ denota as variáveis no sistema de coordenadas fixas no flagelo $O_1\xi_1\xi_2\xi_3$

outro termo importante é o torque \mathbf{T}_{fb1}^0 produzido por \mathbf{F}_{f1}^0 no centro do corpo da célula calculado como:

$$\mathbf{T}_{fb1}^0 = \mathbf{r}_{b1}^0 \times \mathbf{F}_{f1}^0 \quad (1.44)$$

A bactéria magnetotactica MO-1 tem dois flagelos. Assim, a força e o torque exercidos no flagelo 2, é calculado pelo método acima com os parâmetros do flagelo 2.

- (g) O torque magnético na cadeia de magnetossomos gerado pelo campo magnético uniforme \mathbf{B} é dado por:

$$\mathbf{T}_m^0 = \mathbf{M}^0 \times \mathbf{B}^O \quad (1.45)$$

onde o momento magnético \mathbf{M} no sistema de coordenadas fixo ao corpo se escreve como:

$$\mathbf{M}^0 = |\mathbf{M}|[\cos \beta \sin \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \alpha]^T \quad (1.46)$$

Supondo que o ângulo entre o momento magnético \mathbf{M} e a direção OZ é α , e que o ângulo entre a projeção de \mathbf{M} no plano XOY e a direção OX é β .

O momento magnético $|\mathbf{M}|$ pode ser calculado a partir do tamanho e número de magnetossomos:

$$|\mathbf{M}| = NM_s V_m \quad (1.47)$$

onde N é o número de magnetossomos. V_m é o volume de um magnetossomo, $V_m = a_m b_m b_m$. a_m e b_m são o comprimentos e a largura do magnetossomo, respectivamente, e M_s é a magnetização de saturação da magnetita, 480 kA m^{-1}

- (h) Com base na análise anterior, um modelo dinâmico de seis graus de liberdade da bactéria magnetotactica MO-1, no sistema de coordenadas fixo ao corpo, é derivado a partir das equações:

$$m(\dot{\mathbf{U}}^0 + \boldsymbol{\Omega}^0 \times \mathbf{U}^0) = \mathbf{F}^0 \quad (1.48)$$

$$(\mathbf{I}_O \dot{\boldsymbol{\Omega}}^0 + \boldsymbol{\Omega}^0 \times \mathbf{I}_O \boldsymbol{\Omega}^0) = \mathbf{T}^0 \quad (1.49)$$

$$\mathbf{F}^0 = \mathbf{F}_b^0 + \mathbf{F}_{f1}^0 + \mathbf{F}_{f2}^0 + \mathbf{F}_m^0 \quad (1.50)$$

$$\mathbf{T}^0 = \mathbf{T}_b^0 + \mathbf{T}_{f1}^0 + \mathbf{T}_{fb1}^0 + \mathbf{T}_{f2}^0 + \mathbf{T}_{fb2}^0 + \mathbf{T}_m^0 \quad (1.51)$$

onde m é a massa da bactéria MO-1. A matriz de inércia \mathbf{I}_0 é igual a $\text{diag}\{I_x, I_y, I_z\}$. Atraves das Eqs. (1.48) e (1.49), a velocidade \mathbf{U}_O e a velocidade angular $\boldsymbol{\Omega}^0$ da bactéria MO-1 podem ser obtidas.

- (i) As equações dinâmicas da bactéria magnetotactica MO-1 são resolvidas pelo algoritmo Runge–Kutta. Considerando algumas suposições importantes e os parâmetros da tabela (1.2) para o corpo da bactéria, flagelos e da cadeia de magnetossomos [68], os seguintes resultados são obtidos:

- (I) Num campo magnético pequeno (0,05 mT) a trajetória de MO-1 é aparentemente composta por pequenas hélices com algumas pequenas flutuações. Num campo magnético maior (2,5 mT), a trajetória consiste em dois tipos de hélices: pequenas e grandes. O eixo da grande hélice é paralelo à linha do campo magnético, e a frequência da grande hélice é inferior ao da pequena hélice.

Tabela 1.2: Parâmetros das bactérias magnetotacticas MO-1 [14]

Símbolo	Parâmetros	Valor
μ	Viscosidade da água do mar	$1,08 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$
ρ	Densidade da água do mar	$1,025 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
$2a$	Comprimento da célula	$1,85 \mu\text{m}$
$2b$	Largura da célula	$1,33 \mu\text{m}$
N	Número de magnetossomos	17
a_m	Comprimento do magnetossomo	64 nm
b_m	Largura do magnetossomo	57 nm
α	Ângulo	9°
β	Ângulo	40°
L_1	Comprimento do feixe flagelar	$2,5 \mu\text{m}$
r_1	Raio do feixe flagelar	$0,05 \mu\text{m}$
ρ_1	Passo da hélice do flagelo	$0,75 \mu\text{m}$
R_1	Raio da hélice do flagelo	$0,28 \mu\text{m}$

- (II) A frequência da pequena hélice é igual à da rotação flagelar, e a frequência da grande hélice é igual à da rotação do corpo celular.
- (III) Foram apresentadas a análises para o movimento em forma de U e movimento em forma de O, que relacionam o diâmetro D da curva (em forma de U e em forma de O) com o campo magnético.
- (IV) Na simulação, as velocidades totais U_T e as velocidades ao longo do eixo Xg (U_{Xg}), que se encontra ao longo das linhas de campo magnético, mostram flutuações periódicas. Quando o campo magnético aumenta, as velocidades totais médias U_T aumentam enquanto as velocidade medias de U_{Xg} diminuem. As oscilações de longo período estão associadas à rotação do corpo da bactéria e as oscilações de curto período estão relacionadas com a rotação dos flagelos.

Os resultados da simulação do movimentos das bactérias magnetotacticas MO-1, em vários campos magnéticos, concordaram com os resultados experimentais mostrados no mesmo artigo, que indicam a validade do modelo dinâmico. Além disso, graças à quantidade e variabilidade dos parâmetros incluídos, é proposto como um modelo geral para estudar o movimento da bactéria.

Capítulo 2

Modelagem

2.1 Dois feixes flagelares presos ao corpo celular esférico e girando em torno de seus respectivos eixos

A fim de descrever o movimento de uma bactéria esférica de radio R , propulsionada por dois flagelos helicoidais, considera-se: (a) Os flagelos conectados rigidamente ao corpo celular agindo como duas forças \mathbf{F}_f^1 e \mathbf{F}_f^2 nos pontos fixos P_1 e P_2 . (b) A bactéria possui um momento magnético permanente \mathbf{m} (cadeia de magnetossomos) que interage com um campo magnético externo \mathbf{B} . (c) Nada em um meio (fluido) com viscosidade η caracterizado por uma condição de número de Reynolds muito baixo [69].

Por outro lado para expressar as equações de movimento convenientemente é necessário estabelecer dois sistemas de coordenadas: um sistema fixo $(\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z)$ que define o sistema de referencia do laboratório (LAB), e um sistema de coordenadas $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ com origem no centro de massa localizado no centro do corpo esférico, sistema de referencia BAC, movendo-se em relação ao sistema de referencia LAB (Fig.2.1).

2.2 Forças e torques

Para obter as equações de movimento translacionais e rotacionais são consideradas as equações (2.1) e (2.2), validas no regime de baixo número de Reynolds [10]. no qual as forças viscosas são muito mais importantes do que as forças inerciais e, como consequência, tanto a força total quanto o torque total atuando sobre a bactéria se anulam.

$$\sum \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{F}_f^1 + \mathbf{F}_f^2 + \mathbf{F}_H = \mathbf{0} \quad (2.1)$$

Esta equação implica que existe um equilíbrio instantaneo entre as forças flagelares \mathbf{F}_f^1 , \mathbf{F}_f^2 e a força hidrodinâmica \mathbf{F}_H , ou seja, a cada instante de tempo a lei de Stokes é valida

$$\sum \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0} \quad \longrightarrow \quad \boldsymbol{\tau}_f^1 + \boldsymbol{\tau}_f^2 + \boldsymbol{\tau}_{Rf}^1 + \boldsymbol{\tau}_{Rf}^2 + \boldsymbol{\tau}_H + \boldsymbol{\tau}_m = \mathbf{0} \quad (2.2)$$

Onde $\boldsymbol{\tau}_f^1$, $\boldsymbol{\tau}_f^2$, são os torques gerados pelos flagelos 1 e 2, $\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1$ e $\boldsymbol{\tau}_{Rf}^2$, são os torque de reação de cada flagelo, $\boldsymbol{\tau}_H$ é o torque hidrodinâmico e $\boldsymbol{\tau}_m$ o é o torque magnético.

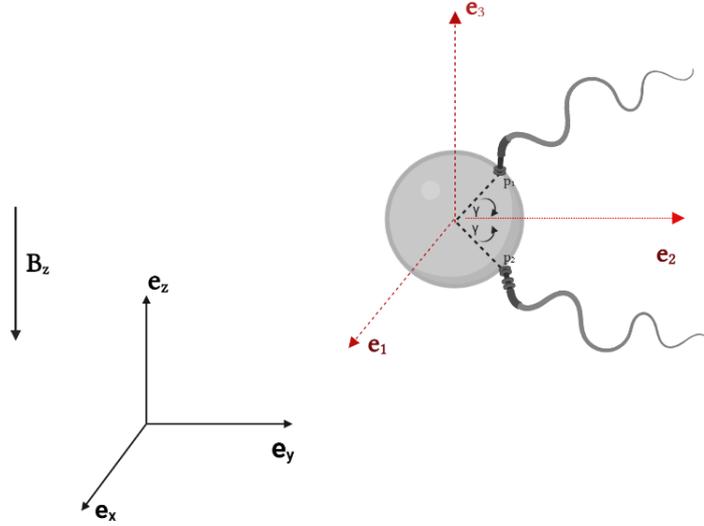


Figura 2.1: Sistemas de coordenadas usados para o modelo de uma bactéria esférica com dois flagelos. $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ são os vetores unitários que definem o sistema de referencia BAC que esta fixo ao corpo da bactéria. $(\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z)$ são os vetores unitários que definem o sistema de referencia LAB fixo no laboratório. γ é o ângulo de inclinação de cada flagelo, os quais estão conectados rigidamente ao corpo da bactéria nos pontos P_1 e P_2 . Fonte: Jenny Concha

2.3 Equações de translação

Assumindo que os flagelos cilíndricos giram com frequência angular ω , então no ponto de contato com a parede celular a força propulsora gerada pelo flagelo também oscila com frequência angular ω no sistema de referencia BAC e pode ser escrita como:

\mathbf{F}_f^1 : Força gerada pelo flagelo 1

$$\mathbf{F}_f^1 = F_{23} \cos(\omega t) \hat{e}_2' + F_{23} \sin(\omega t) \hat{e}_3' + F_1 \hat{e}_1' \quad (2.3)$$

onde F_1 e F_{23} são, respectivamente, as componentes de \mathbf{F}_f^1 ao longo de \hat{e}_1' e no plano $\hat{e}_2' \hat{e}_3'$. Para expressar a força gerada pelo flagelo 1 no referencial BAC é usada uma transformação ortogonal (rotação no plano $x_1 x_3, x_2 = x_2'$, ângulo de rotação γ) [Apêndice A]

$$\hat{e}_1' = \cos(\gamma) \hat{e}_1 + \sin(\gamma) \hat{e}_3 \quad (2.4)$$

$$\hat{e}_2' = \hat{e}_2 \quad (2.5)$$

$$\hat{e}_3' = -\sin(\gamma) \hat{e}_1 + \cos(\gamma) \hat{e}_3 \quad (2.6)$$

Então a força gerada pelo flagelo 1 no referencial $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ é:

$$\mathbf{F}_f^1 = [F_1 \cos(\gamma) - F_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma)] \hat{e}_1 + F_{23} \cos(\omega t) \hat{e}_2 + [F_{23} \sin(\omega t) \cos(\gamma) + F_1 \sin(\gamma)] \hat{e}_3 \quad (2.7)$$

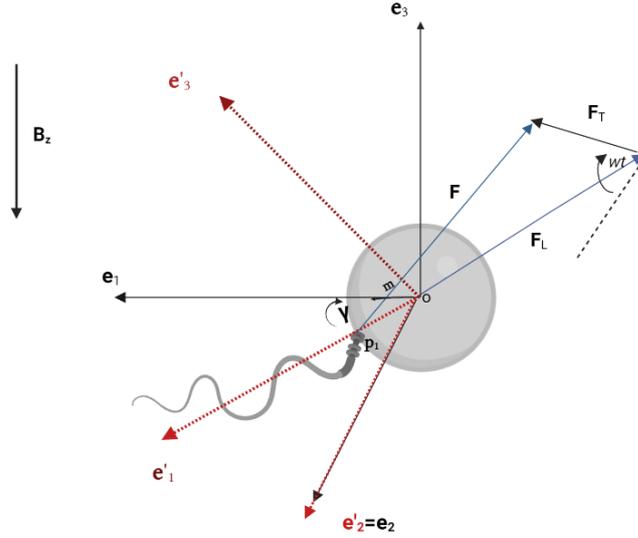


Figura 2.2: $\mathbf{F} = \mathbf{F}_f^1$ é a força propulsora gerada pelo flagelo 1. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são respectivamente a componente longitudinal, que esta dirigida ao longo do eixo do cilindro flagelar o qual corresponde com o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1'$, e a componente transversal, que surge das assimetrias do flagelo e gira com a mesma frequência angular do flagelo ω . \mathbf{m} é o vetor de momento magnético da bactéria, colinear a $\hat{\mathbf{e}}_1$. \mathbf{B} é o campo magnético externo, antiparalelo a $\hat{\mathbf{e}}_z$. Wt representa o ângulo girado pela componente \mathbf{F}_T no tempo t , e γ representa o ângulo entre o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1$ e o eixo do flagelo. Fonte: Jenny Concha.

\mathbf{F}_f^2 : Força gerada pelo flagelo 2

$$\mathbf{F}_f^2 = F_{23}^n \cos(\omega t) \hat{\mathbf{e}}_2' + F_{23}^n \sin(\omega t) \hat{\mathbf{e}}_3' + F_1^n \hat{\mathbf{e}}_1' \quad (2.8)$$

Onde F_1^n e F_{23}^n são, respectivamente, as componentes de \mathbf{F}_f^2 ao longo de $\hat{\mathbf{e}}_1'$ e no plano $\hat{\mathbf{e}}_2' \hat{\mathbf{e}}_3'$. Para expressar a força gerada pelo flagelo 2 no sistema de referencia BAC é usada uma transformação ortogonal (rotação num ângulo γ no plano $x_1 x_3, x_2 = x_2'$) [Apêndice A]:

$$\hat{\mathbf{e}}_1' = \cos(\gamma) \hat{\mathbf{e}}_1 - \sin(\gamma) \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.9)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_2' = \hat{\mathbf{e}}_2 \quad (2.10)$$

$$\hat{\mathbf{e}}_3' = \sin(\gamma) \hat{\mathbf{e}}_1 + \cos(\gamma) \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.11)$$

A força gerada pelo flagelo 2 no referencial $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$ é:

$$\mathbf{F}_f^2 = [F_{23}^n \sin(\omega t) \sin(\gamma) + F_1^n \cos(\gamma)] \hat{\mathbf{e}}_1 + F_{23}^n \cos(\omega t) \hat{\mathbf{e}}_2 + [F_{23}^n \sin(\omega t) \cos(\gamma) - F_1^n \sin(\gamma)] \hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.12)$$

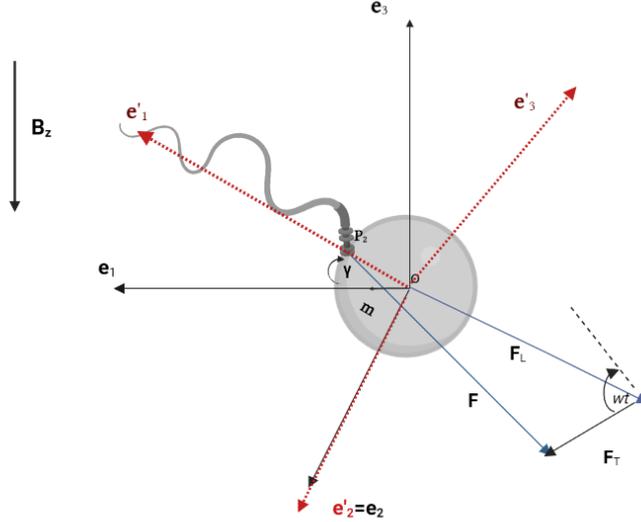


Figura 2.3: $\mathbf{F} = \mathbf{F}_f^2$ é a força propulsora gerada pelo flagelo 2. \mathbf{F}_L e \mathbf{F}_T são respectivamente a componente longitudinal, que está dirigida ao longo do eixo do cilindro flagelar o qual corresponde com o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1'$, e a componente transversal, que surge das assimetrias do flagelo e gira com a mesma frequência angular do flagelo ω . \mathbf{m} é o vetor de momento magnético da bactéria, colinear a $\hat{\mathbf{e}}_1$. \mathbf{B} é o campo magnético externo, antiparalelo a $\hat{\mathbf{e}}_z$. Wt representa o ângulo girado pela componente \mathbf{F}_T no tempo t , e γ representa o ângulo entre o eixo $\hat{\mathbf{e}}_1$ e o eixo do flagelo. Fonte: Jenny Concha.

Além das forças flagelares dadas por (2.7) e (2.12) a bactéria nada sob a ação de uma **Força hidrodinâmica** \mathbf{F}_H . Esta força refere-se à força de atrito experimentada por objetos, neste caso uma bactéria esférica, que se movem dentro de um fluido viscoso que requer a solução da equação de Navier-Stokes [70] Para simetria esférica esta força pode ser expressada como:

$$\mathbf{F}_H = -6\pi\eta R\mathbf{v}(t) \quad (2.13)$$

onde η é a viscosidade do fluido, R é o raio da bactéria e v é a velocidade relativa. Lembrando que o número de Reynolds R_e [71] é definido como o quociente entre os termos inerciais (forças necessárias para acelerar as massas = massa x aceleração = $l^3\rho_m v^2/R$), e os termos viscosos (forças necessárias para gerar cisalhamento (corte) = $\eta \frac{dv}{dx} \approx \eta l^3 v/R^3$) detectado por um certo elemento fluido de tamanho l que é arrastado pelo fluido com velocidade v , densidade do fluido ρ e viscosidade dinâmica η , até colidir com uma esfera de raio R .

$$R_e = \frac{\text{Termos inerciais}}{\text{termos de atrito}} = \frac{vR\rho_m}{\eta} \quad (2.14)$$

Se R_e for pequeno, o termo de atrito domina: a agitação produz a menor resposta possível, ou seja, um fluxo laminar onde as forças viscosas são claramente dominantes e as forças que agem sobre o corpo se encontram em equilíbrio estático instantâneo o tempo todo. Quando R_e é grande os efeitos inerciais predominam e o fluxo é turbulento, sendo válida a segunda Lei de Newton completa [72].

Portanto, de acordo com a Equação (2.1) e substituindo nela as Equações 2.7, 2.12 e 2.13 se obtém a seguinte relação:

$$\begin{aligned} \mathbf{O} = & -6\pi\eta R\mathbf{v}(t) + [F_1 \cos(\gamma) - F_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_1 + F_{23} \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 \\ & + [F_{23} \sin(\omega t) \cos(\gamma) + F_1 \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_3 + [F_{23}^n \sin(\omega t) \sin(\gamma) + F_1^n \cos(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_1 \\ & + F_{23}^n \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 + [F_{23}^n \sin(\omega t) \cos(\gamma) - F_1^n \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} 6\pi\eta R\mathbf{v}(t) = & [(F_1 + F_1^n) \cos(\gamma) - (F_{23} - F_{23}^n) \sin(\omega t) \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_1 \\ & + (F_{23} + F_{23}^n) \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 + [(F_{23} + F_{23}^n) \sin(\omega t) \cos(\gamma) \\ & + (F_1 - F_1^n) \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Resolvendo para \mathbf{v} :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t) = & [V_1 \cos(\gamma) + V_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_1 + V_{23}' \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 \\ & + [V_{23}' \sin(\omega t) \cos(\gamma) + V_1' \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_3 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Onde:

$$V_1 = \frac{(F_1 + F_1^n)}{6\pi\eta R} \quad (2.18)$$

$$V_1' = \frac{(F_1 - F_1^n)}{6\pi\eta R} \quad (2.19)$$

$$V_{23} = \frac{(F_{23}^n - F_{23})}{6\pi\eta R} \quad (2.20)$$

$$V_{23}' = \frac{(F_{23} + F_{23}^n)}{6\pi\eta R} \quad (2.21)$$

Finalmente para obter as equações de movimento para a translação do centro de massa em relação ao sistema de referencia fixo no laboratório LAB ($\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z$), é necessário uma adequada transformação entre os sistemas [Apêndice A]:

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_x \\ \mathbf{v}_y \\ \mathbf{v}_z \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Onde A^{-1}

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & -\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi & \sin \theta \sin \phi \\ \cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi & -\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & -\sin \theta \cos \phi \\ \sin \psi \sin \theta & \cos \psi \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

os ângulos θ, ϕ e ψ são os ângulos de Euler. Assim, as derivadas das coordenadas ficam da seguinte maneira:

$$\dot{x} = \mathbf{v}_x(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi) + \mathbf{v}_y(-\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi) + \mathbf{v}_z(\sin \theta \sin \phi) \quad (2.24)$$

$$\dot{y} = \mathbf{v}_x(\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi) + \mathbf{v}_y(-\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi) - \mathbf{v}_z(\sin \theta \cos \phi) \quad (2.25)$$

$$\dot{z} = \mathbf{v}_x(\sin \psi \sin \theta) + \mathbf{v}_y(\cos \psi \sin \theta) + \mathbf{v}_z(\cos \theta) \quad (2.26)$$

Por outro lado como

$$\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}_x \hat{e}_1 + \mathbf{v}_y \hat{e}_2 + \mathbf{v}_z \hat{e}_3 \quad (2.27)$$

Comparando com Eq. (2.17) se tem:

$$\mathbf{v}_x = V_1 \cos(\gamma) + V_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma) \quad (2.28)$$

$$\mathbf{v}_y = V'_{23} \cos(\omega t) \quad (2.29)$$

$$\mathbf{v}_z = V'_{23} \sin(\omega t) \cos(\gamma) + V'_1 \sin(\gamma) \quad (2.30)$$

Substituindo as expressões anteriores nas Equações 2.24, 2.25 e 2.26 então as equações de movimento de translação são finalmente obtidas:

$$\begin{aligned} \dot{x} = & V_1 \cos(\gamma)[\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi] + V_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma)[\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi] \\ & + V'_{23}[-\cos(\omega t) \sin \psi \cos \phi - \cos(\omega t) \cos \theta \sin \phi \cos \psi + \sin(\omega t) \cos(\gamma) \sin \theta \sin \psi] \\ & + V'_1 \sin(\gamma) \sin \theta \sin \phi \end{aligned} \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \dot{y} = & V_1 \cos(\gamma)[\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi] + V_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma)[\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi] \\ & + V'_{23}[-\cos(\omega t) \sin \psi \sin \phi + \cos(\omega t) \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin(\omega t) \cos(\gamma) \sin \theta \cos \psi] \\ & - V'_1 \sin(\gamma) \sin \theta \cos \phi \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \dot{z} = & V_1 \cos(\gamma) \sin \psi \sin \theta + V_{23} \sin(\omega t) \sin(\gamma) \sin \psi \sin \theta + V'_{23}[\cos(\omega t) \sin \theta \cos \psi + \\ & \sin(\omega t) \cos(\gamma) \cos \theta] + V'_1 \sin(\gamma) \cos \theta \end{aligned} \quad (2.33)$$

2.4 Equações rotacionais

- Para obter as equações de movimento rotacionais, precisamos definir cada torque da Equação 2.2:

2.4.1 τ_f^1 : Torque gerado pela Força 1

$$\boldsymbol{\tau}_f^1 = R\hat{\mathbf{e}}_1' \times \mathbf{F}_f^1 \quad (2.34)$$

No referencial $(\hat{\mathbf{e}}_1', \hat{\mathbf{e}}_2', \hat{\mathbf{e}}_3')$

$$\boldsymbol{\tau}_f^1 = R\hat{\mathbf{e}}_1' \times [F_{23} \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2' + F_{23} \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_3' + F_1\hat{\mathbf{e}}_1'] \quad (2.35)$$

$$\boldsymbol{\tau}_f^1 = \tau_{23} \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_3' - \tau_{23} \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2' \quad (2.36)$$

Usando Eq.(2.6) e Eq.(2.5) temos o torque gerado pelo flagelo 1 no referencial $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$:

$$\boldsymbol{\tau}_f^1 = -\tau_{23} \cos(\omega t) \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 - \tau_{23} \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 + \tau_{23} \cos(\omega t) \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.37)$$

$\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1$: **Torque de reação gerado pela Força 1** . Este torque surge porque o flagelo e o corpo bacteriano formam um sistema. Assim, ao girar o flagelo num sentido o corpo reage girando no sentido contrario. Assim como Nogueira e Lins de Barros [10] vamos assumir que este torque de reação é constante:

$$\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1 = -|\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1|\hat{\mathbf{e}}_1' \quad (2.38)$$

Onde

$$\hat{\mathbf{e}}_1' = \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 + \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.39)$$

Então o torque de reação para o flagelo 1 no sistema $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$ é:

$$\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1 = -|\boldsymbol{\tau}_{Rf}^1|[\cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 + \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3] \quad (2.40)$$

2.4.2 τ_f^2 : Torque gerado pela Força 2

No referencial $(\hat{\mathbf{e}}_1', \hat{\mathbf{e}}_2', \hat{\mathbf{e}}_3')$

$$\boldsymbol{\tau}_f^2 = R\hat{\mathbf{e}}_1' \times \mathbf{F}_f^2 \quad (2.41)$$

$$\boldsymbol{\tau}_f^2 = R\hat{\mathbf{e}}_1' \times [F_{23}^n \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2' + F_{23}^n \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_3' + F_1^n\hat{\mathbf{e}}_1'] \quad (2.42)$$

$$\boldsymbol{\tau}_f^2 = \tau_{23}^n \cos(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_3' - \tau_{23}^n \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2' \quad (2.43)$$

Usando Eq.(2.11) e Eq.(2.10) temos o torque gerado pelo flagelo 2 no referencial $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$:

$$\boldsymbol{\tau}_f^2 = \tau_{23}^n \cos(\omega t) \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 - \tau_{23}^n \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.44)$$

τ_{Rf}^2 : **Torque de reação gerado pelo flagelo 2.** Este torque surge porque o flagelo e o corpo bacteriano formam um sistema. Assim, ao girar o flagelo num sentido o corpo reage girando no sentido contrario. Assim como Nogueira e Lins de Barros [10] vamos assumir que este torque de reação é constante:

$$\tau_{Rf}^2 = -|\tau_{Rf}^2|\hat{\mathbf{e}}_1' \quad (2.45)$$

Onde

$$\hat{\mathbf{e}}_1' = \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 + \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.46)$$

Então o torque de reação para o flagelo 2 no sistema $(\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \hat{\mathbf{e}}_3)$ é:

$$\tau_{Rf}^2 = -|\tau_{Rf}^2|[\cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 - \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3] \quad (2.47)$$

2.4.3 Torque Hidrodinâmico

Como a bactéria esférica gira com uma velocidade angular Ω no mesmo fluido, se espera que o mesmo fluido atue com um torque sobre a bactéria, sendo este torque proporcional a Ω : $\tau_H = v\Omega$ A análise dimensional fornece $v \approx \eta R^3$, Assim, a expressão geral [73] para este torque (τ_H) é:

$$\tau_H = -8\pi\eta R^3\Omega(t) \quad (2.48)$$

$$\tau_H = -8\pi\eta R^3(\Omega_1\hat{\mathbf{e}}_1 + \Omega_2\hat{\mathbf{e}}_2 + \Omega_3\hat{\mathbf{e}}_3) \quad (2.49)$$

As componentes de $\Omega(t)$ podem ser escritas em termos dos ângulos de Euler no referencial BAC.

$$\Omega_1 = \dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi \quad (2.50)$$

$$\Omega_2 = \dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi \quad (2.51)$$

$$\Omega_3 = \dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi} \quad (2.52)$$

2.4.4 Torque magnético:

Para calcular este torque, o vetor de campo magnético \mathbf{B} é considerado constante, e para $t > 0$ o vetor \mathbf{B} é antiparalelo a $\hat{\mathbf{e}}_z$: $B = -B\hat{\mathbf{e}}_z$ [10]. No modelo assume-se que a cadeia de magnetossomas é colinear com $\hat{\mathbf{e}}_1$ produzindo um momento magnético $\mathbf{m} = m\hat{\mathbf{e}}_1$. Então

$$\tau_m = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = -mB(\hat{\mathbf{e}}_1 \times \hat{\mathbf{e}}_z) \quad (2.53)$$

Onde

$$\hat{\mathbf{e}}_z = \sin(\psi) \sin(\theta)\hat{\mathbf{e}}_1 + \cos(\psi) \sin(\theta)\hat{\mathbf{e}}_2 + \cos(\theta)\hat{\mathbf{e}}_3 \quad (2.54)$$

Agora

$$\hat{\mathbf{e}}_1 \times \hat{\mathbf{e}}_z = \hat{\mathbf{e}}_1 \times [\sin(\psi) \sin(\theta)\hat{\mathbf{e}}_1 + \cos(\psi) \sin(\theta)\hat{\mathbf{e}}_2 + \cos(\theta)\hat{\mathbf{e}}_3] \quad (2.55)$$

$$\tau_m = |\mathbf{m}||\mathbf{B}|[\cos(\theta)\hat{\mathbf{e}}_2 - \sin(\theta) \cos(\psi)\hat{\mathbf{e}}_3] \quad (2.56)$$

Substituindo as Equações 2.37, 2.40, 2.44, 2.47, 2.48, 2.56 na Equação 2.2 se tem:

$$\begin{aligned}
8\pi\eta R^3\Omega(t) = & -\tau_{23} \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 + \tau_{23} \cos(\omega t) \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 - \tau_{23} \cos(\omega t) \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 \\
& - \tau_{Rf}^1 \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 - \tau_{Rf}^1 \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 \\
& + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 - \tau_{23}^n \sin(\omega t)\hat{\mathbf{e}}_2 - \tau_{Rf}^2 \cos(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_1 \\
& + \tau_{Rf}^2 \sin(\gamma)\hat{\mathbf{e}}_3 + mB \cos(\theta)\hat{\mathbf{e}}_2 - mB \sin(\theta) \cos(\psi)\hat{\mathbf{e}}_3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
8\pi\eta R^3\Omega(t) = & [-\tau_{Rf}^1 \cos(\gamma) - \tau_{Rf}^2 \cos(\gamma) + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \sin(\gamma) - \tau_{23} \cos(\omega t) \sin(\gamma)]\hat{\mathbf{e}}_1 \\
& + [-\tau_{23} \sin(\omega t) - \tau_{23}^n \sin(\omega t) + mB \cos(\theta)]\hat{\mathbf{e}}_2 \\
& + [\tau_{23} \cos(\omega t) \cos(\gamma) + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \cos(\gamma) - \tau_{Rf}^1 \sin(\gamma) + \tau_{Rf}^2 \sin(\gamma) \\
& - mB \sin(\theta) \cos(\psi)]\hat{\mathbf{e}}_3
\end{aligned}$$

Como, $\Omega(t) = \Omega_1\hat{\mathbf{e}}_1 + \Omega_2\hat{\mathbf{e}}_2 + \Omega_3\hat{\mathbf{e}}_3$ se obtem:

Ω_1 :

$$8\pi\eta R^3\Omega_1 = -\tau_{Rf}^1 \cos(\gamma) - \tau_{Rf}^2 \cos(\gamma) + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \sin(\gamma) - \tau_{23} \cos(\omega t) \sin(\gamma) \quad (2.57)$$

$$8\pi\eta R^3\Omega_1 = \cos(\gamma)[- \tau_{Rf}^1 - \tau_{Rf}^2] + \cos(\omega t) \sin(\gamma)[\tau_{23}^n - \tau_{23}] \quad (2.58)$$

Então

$$\Omega_1 = -\alpha \cos(\gamma) + \xi \cos(\omega t) \sin(\gamma) \quad (2.59)$$

Onde

$$\alpha = \frac{\tau_{Rf}^1 + \tau_{Rf}^2}{8\pi\eta R^3} \quad (2.60)$$

$$\xi = \frac{\tau_{23}^n - \tau_{23}}{8\pi\eta R^3} \quad (2.61)$$

Ω_2 :

$$8\pi\eta R^3\Omega_2 = mB \cos(\theta) - \tau_{23} \sin(\omega t) - \tau_{23}^n \sin(\omega t) \quad (2.62)$$

$$8\pi\eta R^3\Omega_2 = mB \cos(\theta) - \sin(\omega t)[\tau_{23} - \tau_{23}^n] \quad (2.63)$$

$$\Omega_2 = \beta \cos(\theta) - \xi' \sin(\omega t) \quad (2.64)$$

Onde

$$\beta = \frac{mB}{8\pi\eta R^3} \quad (2.65)$$

$$\xi' = \frac{\tau_{23}^n + \tau_{23}}{8\pi\eta R^3} \quad (2.66)$$

Ω_3 :

$$8\pi\eta R^3\Omega_3 = \tau_{23} \cos(\omega t) \cos(\gamma) + \tau_{23}^n \cos(\omega t) \cos(\gamma) - \tau_{Rf}^1 \sin(\gamma) + \tau_{Rf}^2 \sin(\gamma) - mB \sin(\theta) \cos(\psi) \quad (2.67)$$

$$8\pi\eta R^3\Omega_3 = \cos(\omega t) \cos(\gamma)[\tau_{23} + \tau_{23}^n] + \sin(\gamma)[\tau_{Rf}^2 - \tau_{Rf}^1] - mB \sin(\theta) \cos(\psi) \quad (2.68)$$

$$\Omega_3 = \xi' \cos(\omega t) \cos(\gamma) + \alpha' \sin(\gamma) - \beta \sin(\theta) \cos(\psi) \quad (2.69)$$

Onde

$$\alpha' = \frac{\tau_{Rf}^2 - \tau_{Rf}^1}{8\pi\eta R^3} \quad (2.70)$$

Levando em conta as componentes da velocidade angular em termos dos ângulos de Euler (Equações 2.50,2.51,2.52 e comparando com as Equações 2.59, 2.64 e 2.69)obtemos as seguintes relações:

$$\dot{\phi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi = -\alpha \cos(\gamma) + \xi \cos(\omega t) \sin(\gamma) \quad (2.71)$$

$$\dot{\phi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi = \beta \cos(\theta) - \xi' \sin(\omega t) \quad (2.72)$$

$$\dot{\phi} \cos \theta + \dot{\psi} = \xi' \cos(\omega t) \cos(\gamma) + \alpha' \sin(\gamma) - \beta \sin(\theta) \sin(\psi) \quad (2.73)$$

Resolvendo o sistema de equações para as velocidades angulares $\dot{\phi}, \dot{\theta}, \dot{\psi}$, obtém-se

$$\dot{\theta} = [\xi \cos(\omega t) \sin(\gamma) - \alpha \cos(\gamma)] \cos(\psi) - [\beta \cos(\theta) - \xi' \sin(\omega t)] \sin(\psi) \quad (2.74)$$

$$\dot{\phi} = [\xi \cos(\omega t) \sin(\gamma) - \alpha \cos(\gamma)] \sin(\psi) \csc \theta + [\beta \cos(\theta) - \xi' \sin(\omega t)] \cos(\psi) \csc \theta \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} \dot{\psi} = & \xi' [\cos(\omega t) \cos(\gamma) + \cot \theta \sin(\omega t) \cos(\psi)] - \xi \cot \theta \cos(\omega t) \sin(\psi) \sin(\gamma) \\ & + \alpha' \sin(\gamma) + \alpha \cot(\theta) \cos(\gamma) \sin(\psi) - \beta [\sin(\theta) \cos(\psi) + \cos(\theta) \cos(\psi) \cot(\theta)] \end{aligned} \quad (2.76)$$

As Equações 2.74, 2.75 e 2.76 descrevem a rotação do corpo e junto com as Equações 2.31, 2.32 e 2.33 determinam completamente o movimento de uma bactéria magnetotactica esférica com uma cadeia de magnetossomas e dois flagelos.

Capítulo 3

Métodos: Solução numérica e processamento de dados

Este capítulo consiste na descrição das quatro etapas necessárias, resumidas no diagrama a seguir, para obter os dados e as trajetórias a serem analisadas

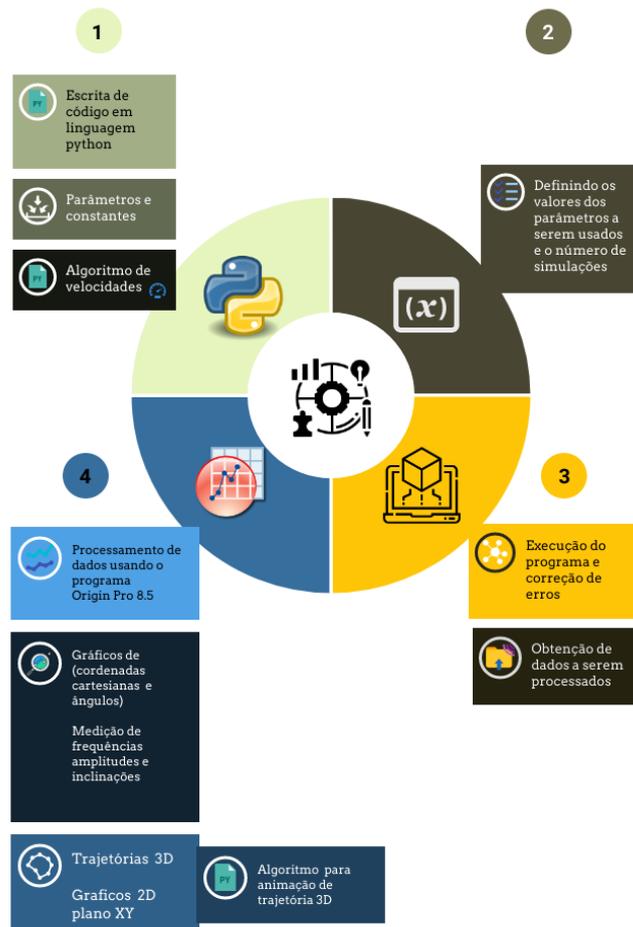


Figura 3.1: : Diagrama esquemático do procedimento usado para resolver numericamente as equações de movimento obtidas no capítulo 2. Fonte: Jenny Concha

3.1 Solução numérica

As equações diferenciais obtidas no capítulo 2 foram resolvidas numericamente usando um programa escrito na linguagem Python. Como as equações (2.31), (2.32), (2.33) e (2.74), (2.75), (2.76) são acopladas, para resolvê-las numericamente é utilizado o integrador numérico LSODA (Livermore Solver para Equações Diferenciais Ordinárias com o método automático de comutação para problemas rígidos e não-rígidos) da biblioteca ODEPACK [74].

O código (algoritmo) está esta escrito a seguir:

```
” # - * -coding : utf - 8 - * -
Created on Tue Apr 6 19:28:50 2021
@ author: ASUS
”
from typing import Tuple
from time import time
import numpy as np
import scipy.integrate as integrate
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

##### Parametros de Entrada #####
# Constantes

GAMMA = 0.34 # inclinação rad
OMEGA = 250#rad/s
ALPHA = 153.58#rad/s
ALPHA_TICK = -85.14#Rad/s
BETA = 11.93 #rad/s
EPSILON = -79.57 #rad/s
EPSILON_TICK = 318.30 #rad/s
V1 = 159.15 #μm/s
V1_tick = 53.05 #μm/s
V23 = -106.10 #μm/s
V23_tick = 424.41 #μm/s
# condições iniciais em t[0]
f0 = (

    0.001, # phi0
    0.001, # theta0
    0.001, # psi0
    0.001, # x0
    0.001, # y0
    0.001, # z0
)
# Valores de tempo a serem computados
```

```
t = np.linspace(0, 3 * np.pi , 500)
print("t -> ", t)
```

```
#####Fim dos Parâmetros de Entrada #####
```

```
def deriv(
    f : Tuple[float, float, float, float, float, float], t : float
) -> Tuple[float, float, float, float, float, float] :
    "
```

Definição das derivadas dos movimentos nos espaços cartesiano e angular
 "

```
def cot(x):
    # cotangente
    return 1 / np.tan(x)
def csc(x):
    # cossecante
    return 1 / np.sin(x)
phi, theta, psi, _, _, _ = f
```

```
phi_ = (
    np.sin(psi) * csc(theta)
    *(
        EPSILON * np.cos(OMEGA * t) * np.sin(GAMMA)
        - ALPHA * np.cos(GAMMA)
    )
    + np.cos(psi) * csc(theta)
    *(
        BETA * np.cos(theta)
        - EPSILON_TICK * np.sin(OMEGA * t)
    )
)
```

```
theta_ = (
    np.cos(psi)
    *(
        EPSILON * np.cos(OMEGA * t) * np.sin(GAMMA)
        - ALPHA * np.cos(GAMMA)
    )
    - np.sin(psi)
    *(
        BETA * np.cos(theta)
        - EPSILON_TICK * np.sin(OMEGA * t)
    )
)
```

$$\begin{aligned}
\text{psi_} = & (\\
& \text{EPSILON_TICK} \\
& * (\\
& \text{np.cos(OMEGA * t) * np.cos(GAMMA)} \\
& \quad + \text{np.sin(OMEGA * t) * np.cos(psi) * cot(theta)} \\
&) \\
& - \text{EPSILON} * (\text{np.cos(OMEGA * t) * np.sin(GAMMA) * np.sin(psi)} \\
& \quad * \text{cot(theta)}) \\
& - \text{BETA} * (\text{np.cos(psi) * np.sin(theta) + np.cos(theta) * np.cos(psi)} \\
& \quad * \text{cot(theta)}) \\
& + \text{ALPHA} * (\text{np.cos(GAMMA) * np.sin(psi) * cot(theta)}) \\
& + \text{ALPHA_TICK} * \text{np.sin(GAMMA)} \\
&)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{x_} = & (\\
& (\\
& \quad \text{V1} \\
& \quad * \text{np.cos(GAMMA)} \\
& \quad * (\text{np.cos(psi) * np.cos(phi) - np.cos(theta) * np.sin(phi) * np.sin(psi)}) \\
&) \\
& + \text{V23} \\
& * \text{np.sin(OMEGA * t)} \\
& * \text{np.sin(GAMMA)} \\
& * (\text{np.cos(psi) * np.cos(phi) - np.cos(theta) * np.sin(phi) * np.sin(psi)}) \\
& + \text{V23_tick} \\
& * (\\
& \quad - \text{np.cos(OMEGA * t) * np.sin(psi) * np.cos(phi)} \\
& \quad - \text{np.cos(OMEGA * t) * np.cos(theta) * np.sin(phi) * np.cos(psi)} \\
& \quad + \text{np.sin(OMEGA * t) * np.cos(GAMMA) * np.sin(theta) * np.sin(psi)} \\
&) \\
& + \text{V1_tick} * \text{np.sin(GAMMA) * np.sin(theta) * np.sin(phi)} \\
&)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{y_} = & (\\
& (\\
& \quad \text{V1} \\
& \quad * \text{np.cos(GAMMA)} \\
& \quad * (\text{np.cos(psi) * np.sin(phi) + np.cos(theta) * np.cos(phi) * np.sin(psi)}) \\
&) \\
& + \text{V23} \\
& * \text{np.sin(OMEGA * t)} \\
& * \text{np.sin(GAMMA)} \\
& * (\text{np.cos(psi) * np.sin(phi) + np.cos(theta) * np.cos(phi) * np.sin(psi)}) \\
& + \text{V23_tick} \\
& * (\\
& \quad - \text{np.cos(OMEGA * t) * np.sin(psi) * np.sin(phi)} \\
&)
\end{aligned}$$

```

    + np.cos(OMEGA * t) * np.cos(theta) * np.cos(phi) * np.cos(psi)
    - np.sin(OMEGA * t) * np.cos(GAMMA) * np.sin(theta) * np.cos(psi)
)
- V1_tick * np.sin(GAMMA) * np.sin(theta) * np.cos(phi)
)

z_ = (
    V1 * np.cos(GAMMA) * np.sin(psi) * np.sin(theta)
    + V23 * np.sin(OMEGA * t) * np.sin(GAMMA) * np.sin(psi) * np.sin(theta)
    + V23_tick
    * (
        np.cos(OMEGA * t) * np.sin(theta) * np.sin(psi)
        + np.sin(OMEGA * t) * np.cos(GAMMA) * np.cos(theta)
    )
    + V1_tick * np.sin(GAMMA) * np.cos(theta)
)
return (phi_, theta_, psi_, x_, y_, z_)
# Resolva a equação
print("starting integration...")
t0 = time()
f = integrate.odeint(deriv, f0, t, mxstep=5000000)
print(f"Finished integrating in time()-t0:.2f s")
# print(f)

# Calcule as derivadas
print("Calculating derivatives.")
derivadas = []
for variaveis, tempo in zip(f, t):

    phi, theta, psi, x, y, z = variaveis
    msg = [
        f"t={tempo}",
        f"x={x}",
        f"y={y}",
        f"z={z}",
        f"phi={phi}",
        f"theta={theta}",
        f"psi={psi}",
    ]
    print(" | ".join(msg))
    try:
        derivadas = np.array([deriv(variaveis, tempo) for variaveis, tempo
                               in zip(f, t)])
    except ZeroDivisionError:
        print('divisão por 0')
        derivadas.append([np.nan, np.nan, np.nan, np.nan, np.nan, np.nan])

```

```

        # valores ruins
derivadas = np.array(derivadas)

# Graficando as 6 funções em relação ao tempo

print("plotting...")

fig = plt.figure(figsize=[10, 10])

ax1 = fig.add_subplot(611)

ax1.plot(t, f[:, 0])
ax1.set_ylabel(r"$\phi(t)$")
ax1.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax1.set_xticklabels([ ])
ax1.grid()

ax2 = fig.add_subplot(612)

ax2.plot(t, f[:, 1])
ax2.set_ylabel(r"$\theta(t)$")
ax2.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax2.set_xticklabels([ ])
ax2.grid()

ax3 = fig.add_subplot(613)

ax3.plot(t, f[:, 2])
ax3.set_ylabel(r"$\psi(t)$")
ax3.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax3.set_xticklabels([ ])
ax3.grid()

ax4 = fig.add_subplot(614)

ax4.plot(t, f[:, 3])
ax4.set_ylabel("x")
ax4.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax4.set_xticklabels([ ])
ax4.grid()

ax5 = fig.add_subplot(615)

ax5.plot(t, f[:, 4])
ax5.set_ylabel("y")

```

```

ax5.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax5.set_xticklabels([ ])
ax5.grid()

ax6 = fig.add_subplot(616)

ax6.plot(t, f[:, 5])
ax6.set_xlabel("t")
ax6.set_ylabel("z")
ax6.set_xticks(np.arange(0, 3 * np.pi + 0.01, np.pi / 2))
ax6.set_xticklabels(
    ["0", r"\pi/2", r"\pi", r"3/2\pi", r"2\pi", r"5/2\pi", r"3\pi"]
)
ax6.grid()

```

```
plt.tight_layout(h_pad=0.1)
```

```
plt.savefig("solucao_031.pdf")
```

```
# Graficando a derivada de z em Função do tempo
```

```

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111)

ax.plot(t, derivadas[:, -1])

ax.set_xlabel("t")

ax.set_ylabel(r"$ \dot { z } $")

plt.savefig("solucao_z_pto_031.pdf")

```

```
# Graficando o movimento em 3D
```

```

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection="3d")

ax.plot(f[:, 3], f[:, 4], f[:, 5])

ax.set_xlabel("x")
ax.set_ylabel("y")
ax.set_zlabel("z")

```

```
plt.savefig("solucao_3d_31.pdf")
```

```

# Junte os vetores tempo (t) e a matriz com os valores da integração
# Observe que é necessário alterar o formato do vetor 't'.
matriz = np.hstack((t.reshape((-1, 1)), f))

```

```

# Adicione a matriz à derivada de z
matriz = np.column_stack((matriz, derivadas[:, -1]))

# salve o array final em um arquivo chamado 'data.csv'
np.savetxt("data_031.csv", matriz, delimiter=",", header="t,phi,theta,psi,x,y,z,z_pto")

# salva as derivados em um arquivo chamado derivadas_
derivadas = np.hstack((t.reshape((-1, 1)), derivadas))
np.savetxt(
    "data_derivadas_031.csv",
    derivadas,
    delimiter=",",
    header="t,phi_pto,theta_pto,psi_pto,x_pto,y_pto,z_pto",
)

```

3.1.1 Parâmetros na simulação

As seguintes premissas são consideradas:

- I. Os dois flagelos estão conectados simetricamente ao corpo celular. A inclinação dos eixos de rotação dos flagelos é igual e definida pelo ângulo γ que é um parâmetro variável no programa.
- II. A frequência de rotação f dos dois flagelos é a mesma. A velocidades angular $\omega = 2 * \pi * f$ é un parâmetros fixo (tabela 3.1).
- III. O parâmetro β varia com o campo magnético B de acordo com a equação (2.65) do capítulo 2
- IV. Os coeficientes $ALPHA$, $ALPHA_TICK$, $EPSILON$, $EPSILON_TICK$, $V1$, $V1_tick$, $V23$, $V23_tick$ são parâmetros de entrada variáveis, que dependem das expressões (2.18)... (2.21) e (2.60) (2.61), (2.66) e (2.70) do capítulo 2 e são calculadas usando o algoritmo apresentado abaixo e as constantes da tabela 3.1.

3.1.2 Algoritmo das velocidades

```

# - * -coding : utf - 8 - * -
”
Created on Tue Apr 20 14:35:25 2021
@ author: ASUS
”
import math
from math import pi

print("\033[1;36m "+ " Calculando V1 e V1_prime")
F1= float(input("Digite o valor de F1:"))
F1n= float(input("Digite o valor de F1n:"))
R=1/1000000 # raio da bac
η=0.001 #coef viscosidade Pa s
# forças magnitude -12 (artigo china)

```

```

F1= F1/1000000000000
F1n= F1n/1000000000000
V1=(F1 + F1n)/(6*pi*eta*R)
# velocidade em m/s converter para μm/s
V1= V1*1000000
print("\033[1;33m" + "o valor de V1 (μm/s)=" + '\033[0;m',V1)

V1_prime= (F1- F1n)/(6*pi*eta*R)
V1_prime= V1_prime*1000000
print("\033[1;33m" + "o valor de V1_prime ( μm/s)=" + '\033[0;m',V1_prime)

#####V23, V23_prime #####
print("\33[1;35m" + " *****")

print("\033[1;35m" + "Calculando V23 y V23_prime")
F23=float(input("Digite o valor de F23:"))
F23n= float(input("Digite o valor de F23n:"))
R=1/1000000 # raio da bac
eta=0.001 #coef viscosidade Pa s
# forças magnitude -12 (artigo china)
F23= F23/1000000000000
F23n= F23n/1000000000000
V23= (F23n- F23)/(6*pi*eta*R)
# velocidade em m/s converter para μm/s
V23 = V23*1000000
print("\33[1;33m" + "O valor de V23 (μm /s)= " + '\33[0;m',V23)

V23_prime= (F23n + F23)/(6*pi*eta*R)
V23_prime= V23_prime*1000000
print("\ 033[1;33m" + "El valor de V23_prime ( μm /s)=" + '\033[0;m',V23_prime)

##### α,α_prime, β #####
print("\33[1;36m" + " *****")

print("\33[1;36m" + " calculando α")
tauR1= float(input("Digite o valor de τR1:"))
tauR2= float(input("Digite o valor de τR2:"))
R=1/1000000
eta=0.001# Pa s
tauR1 = tauR1/10000000000000000000
tauR2= tauR2/10000000000000000000
alpha=(tauR1 + tauR2)/(8*pi*eta*(R**3))
# Torques magnitud -19 (artigo china)
print("\033[1;33m" + "o valor α em rad/s = " + '\033[0;m',alpha)

print("\033[1;36m" + " *****")
print("\033[1;36m" + "calculando α_prime")

```

```

τR1= float(input("Digite o valor de τR1:"))
τR2= float(input("Digite o valor de τR2:"))
R=1/1000000
η=0.001# Pa s
τR1 = τR1/10000000000000000000
τR2= τR2/10000000000000000000
α_prime=(τR2 - τR1)/(8*pi*η*(R**3))
#Torques magnitud -19 (artigo ?? )
print("\033[1;33m"+"o valor α_prime em rad/s ="+' \033[0;m', α_prime)

print("\033[1;32m"+"*****")
print("\33[1;32m"+" β ")
B= float(input("Digite o valor de B:"))
m= float(input("Digite o valor de m:"))
R=1/1000000
η=0.001# Pa s
B= B/10000
m=m/10000000000000000000

β =(m*B)/(8*pi*η*(R**3))
print("\033[1;33m"+"O valor β em rad/s="+' \033[0;m', β )

```

```

##### ξ, ξ_prime #####
F23 = float(input("Digite o valor de F23:"))
F23n = float(input("Digite o valor de F23n:"))
R=1/1000000
η=0.001# Pa s

F23= F23/10000000000000000000
F23n= F23n/10000000000000000000

```

```

τ23= R*F23
τ23n=R*F23n

```

```

ξ= (τ23n - τ23)/(8*pi*η*(R**3))
#Torques magnitud -19 (artigo china)
print("\033[1;33m"+"O valor ξ em rad/s="+' \033[0;m', ξ)

```

```

ξ_prime=(τ23n + τ23)/(8*pi*η*(R**3)) print("\33[1;33m"+"El valor ξ_prime em rad/s="+' \033[0;m',
ξ_prime)

```

Deve-se notar que esses coeficientes estão relacionados com as velocidades e dependem das forças e do torques, e portanto, elas serão as variáveis fundamentais. Por outro lado, os parâmetros fixos (constantes) são escolhidos de acordo com [11] e listados na Tabela(3.1).

Tabela 3.1: Parâmetros fixos usados na simulação

Símbolo	Parâmetros	Valor
R	Raio do corpo celular	$1 \mu\text{m}$
η	viscosidade	$1 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$
m	momento magnético	$1.5 \times 10^{-15} \text{ A}\cdot\text{m}^2$
ω	velocidade angular flagelar	250 rad/s

3.2 Definição e variação de parâmetros

O número de simulações a realizar é definido pela variação nos parâmetros: ângulo de inclinação dos flagelos (γ), e intensidade do campo magnético (B), e a relação entre as forças e os torques flagelares, a qual desempenha um papel importante. Dois grupos foram formados:

- **Grupo A.** Variação do ângulo (γ): A variação será de 5 em 5 graus até chegar a 90 graus (transformados em radianos). O campo magnético constante e igual a 1 Oe (0.0001 T).

Dentro deste grupo existem dois casos: forças com módulos iguais e forças com módulos diferentes onde $F1 > F2$ com $F2 = 0.8F1$. Os valores a serem utilizados nas simulações são estabelecidos da seguinte forma:

F_f^1 (força do flagelo 1) depende de $F1$ e $F23$

F_f^2 (força do flagelo 2) depende de $F1n$ e $F23n$

Então para que $F_f^1 = F_f^2 = 5 \times 10^{-12} \text{ N}$ (caso 1) as forças a serem usadas no programa são:

$$F1 = 4.59 \times 10^{-12} \text{ N} = F1n$$

$$F23 = 2 \times 10^{-12} \text{ N} = F23n$$

Os torques de reação para este caso são os mesmos e têm os valores

$$\tau R1 = \tau R2 = 2 \times 10^{-18} \text{ N}\cdot\text{m}$$

Para o caso 2: $F_f^1 > F_f^2 \mapsto 4 \times 10^{-12} \text{ N} > 3.2 \times 10^{-12} \text{ N}$ as forças a serem usadas no programa são:

$$F1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N} \text{ e } F23 = 2.646 \times 10^{-12} \text{ N}$$

$$F1n = 2 \times 10^{-12} \text{ N} \text{ e } F23n = 2.497 \times 10^{-12} \text{ N}$$

Os torques de reação para este caso são : $\tau R1 > \tau R2 = 2 \times 10^{-18} \text{ N}\cdot\text{m} > 1.2 \times 10^{-18} \text{ N}\cdot\text{m}$

- **Grupo B.** Variação de campo magnético (B): A variação será de 1 Oe até 1000 Oe (0.1 T), e o valor de gama assume valores de $\gamma = 20^\circ(0, 349 \text{ rads})$, $\gamma = 60^\circ(1, 047 \text{ rads})$, e $\gamma = 90^\circ(0, 349 \text{ rads})$ para os dois casos de forças descritas no grupo A

Assim o número de simulações a realizar é 100, e os valores de tempo a serem computados em cada simulação são de 5000.

3.3 Execução do programa

Cada simulação mostra e ordena os dados num arquivo data.csv. Os arquivos mostram 5000 tempos e suas correspondentes coordenadas cartesianas x , y , z e ângulos ψ , θ , ϕ .

3.4 Processamento de dados:

Os dados obtidos foram organizados e analisados no programa OriginPro 8.5 da seguinte maneira:

1. Obtenção dos gráficos para ângulos ψ , θ , ϕ . Posteriormente, medir frequências de oscilação para ψ e θ . Para ϕ medir a inclinação em função do tempo e a frequência de oscilação.
2. Representação gráfica das coordenadas x , y e z em função do tempo. Determinar as frequências de oscilação usando a transformada de Fourier da autocorrelação. Obter a amplitude para as coordenadas x e y , e para a coordenada z medir a inclinação em função do tempo e a respectiva frequência de oscilação.
3. Representação gráfica das trajetórias 3D e projeções 2D (plano xy) para cada simulação.

Finalmente foi feito um programa para obter animações das trajetórias 3D das tabelas obtidas no programa inicial. Seu algoritmo é apresentado a seguir:

```
# Importação de biblioteca

import numpy as np import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib import animation
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D from IPython import display

# Definição de Funções

def animate_func(num):
    "Inputs: - num: Índice para a etapa atual da animação, itera sobre o conjunto de
    dados.
    Outputs: N/A "

    ax.clear()

    ax.plot3D(dataSet[0, :num+1], # Eixo X

              dataSet[1, :num+1], # Eixo y

              dataSet[2, :num+1], # Eixo z
```

```

        c='blue') # Cor da linha do caminho em movimento

# Adicione a localização do ponto na etapa num. É atualizado a cada iteração
ax.scatter(dataSet[0, num],# Eixo X

           dataSet[1, num],# Eixo y

           dataSet[2, num],# Eixo z

           c='blue', # cor do ponto em movimento

           marker='o')

# Adiciona origem da figura. Permanece constante na animação.

ax.plot3D(dataSet[0, 0], # Eixo X

          dataSet[1, 0], # Eixo y

          dataSet[2, 0], # Eixo z

          c='red', # Cor do ponto de origem

          marker='o')

# Definição dos limites dos eixos
ax.set_xlim3d([x_min, x_max])

ax.set_ylim3d([y_min, y_max])

ax.set_zlim3d([z_min, z_max])

# Adiciona rótulos à figura
# ax.set_title('Route Time = ' + str(np.round(time[num], decimals=2)) + 'sec') # Estes
# não são segundos em tempo real.

ax.set_xlabel('Eixo x')

ax.set_ylabel('Eixo y')

ax.set_zlabel('Eixo z')

# Insira o arquivo CSV

df = pd.read_csv('../input/data-eq/data_004i.csv')

n_points = 500

```

```

# df = df[ : n_points]
# Seleção dos primeiros N pontos

df = df[-n_points : ]# Seleção dos ultimos N pontos

#Ver dataframe
df

# Combinação de coordenadas de posição

dataSet = np.array([df['x'], df['y'], df['z']])

#Cálculo do número de pontos

numDataPoints = df.shape[0]

#Cálculo de máximos e mínimos

x_min, x_max = dataSet[0].min(), dataSet[0].max()

y_min, y_max = dataSet[1].min(), dataSet[1].max()

z_min, z_max = dataSet[2].min(), dataSet[2].max()

#Gráfico estático

fig = plt.figure(figsize=(7, 7))

ax = plt.axes(projection='3d')

ax.plot3D(dataSet[0], dataSet[1], dataSet[2], 'gray')

ax.set_xlim3d([x_min, x_max])

ax.set_ylim3d([y_min, y_max])

ax.set_zlim3d([z_min, z_max])

ax.set_xlabel('Eixo x')

ax.set_ylabel('Eixo y')

ax.set_zlabel('Eixo z')

fig.tight_layout()

```

```

#Animação

fig = plt.figure(figsize=(7, 7))
ax = plt.axes(projection='3d')
anim = animation.FuncAnimation(fig, #Figura onde a animação é plotada.

                                animate_func, # Função de atualização de animação,
itera sobre num.

                                interval=100, # Atraso entre frames [milisegundos].

                                frames=numDataPoints # Número de quadros a serem
exibidos.

                                )

plt.tight_layout()

# Almacenamiento de video

path_mp4 = r'./video.mp4'
duration_mp4 = 6 # duração da animação [s].
writervideo = animation.FFMpegWriter(fps=numDataPoints/duration_mp4)

anim.save(path_mp4, writer=writervideo)

# Video HTML5

video = anim.to_html5_video() html = display.HTML(video)

display.display(html)

# guardar gif

# path_gif = r'./animacion.gif' # Ruta donde se guarda el gif.

# duration_gif = 6 # [s].

# writergif = animation.PillowWriter(fps=numDataPoints/duration_gif)

# anim.save(path_gif, writer=writergif)

```

Capítulo 4

Resultados e Discussão

4.1 Comportamento de ângulos e coordenadas cartesianas

Os resultados das coordenadas x , y , z , ϕ , ψ e θ , em função do tempo, para duas simulações representando cada grupo (A-B) com valores diferentes de campo magnético e γ são mostrados nas Figuras (4.1), (4.2), (4.3).

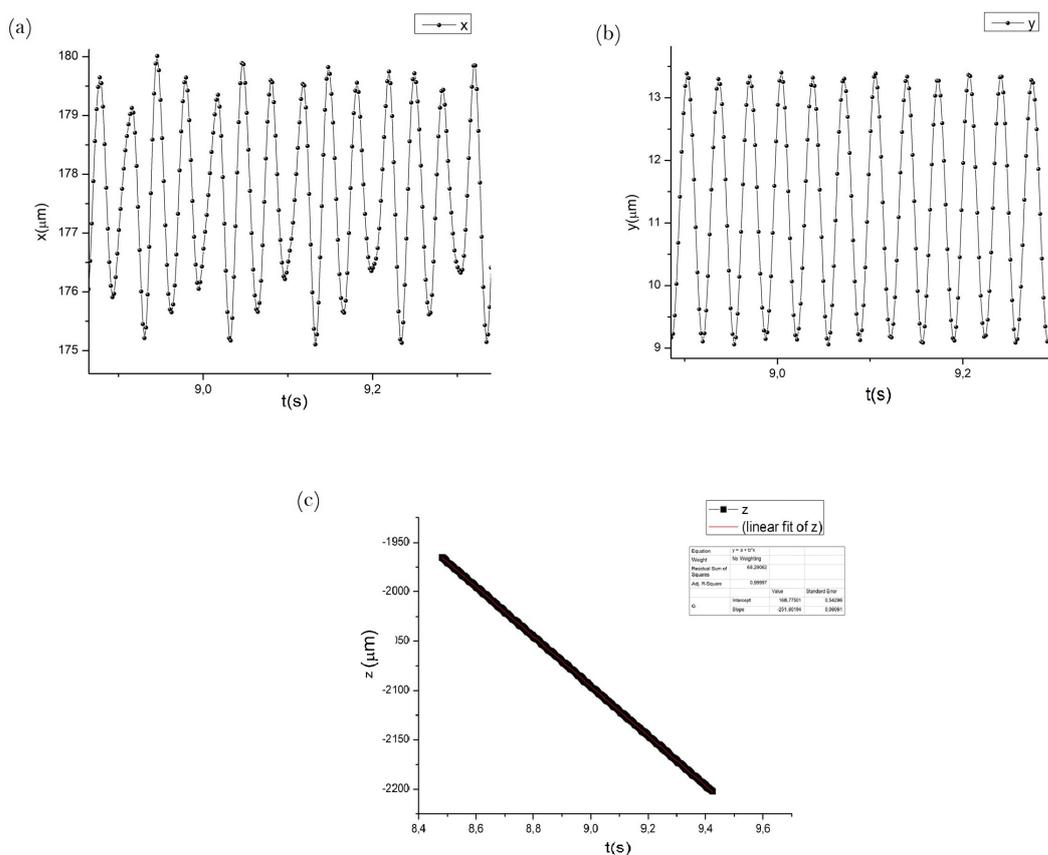


Figura 4.1: Resultado numérico para as coordenadas do centro de massa e os ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 1 Oe (0,001T) e $\gamma=30^\circ$ (a) Coordenada x , (b) Coordenada y , (c) Coordenada z .

Observa-se que a coordenada y oscila sinusoidalmente, que a coordenada x oscila numa forma mais complexa (Figura 4.1.a), com amplitude variável, e que a coordenada z varia linearmente (Figura 4.1.c). Numa primeira aproximação, ignorando a variação de amplitude em x , podemos assumir que a trajetória se assemelha a uma hélice cilíndrica com coordenadas $x(t) = \mathcal{R}\cos(2\pi ft)$, $y(t) = \mathcal{R}\sin(2\pi ft)$ e $z(t) = V_z t$, onde V_z é a velocidade axial e \mathcal{R} é o raio da hélice. Na Figura (4.2) podemos observar também os ângulos de Euler em função do tempo. Os ângulos ψ e θ oscilam em volta de um valor fixo ($\psi_0 = 11$ rad e $\theta_0 = 1,6$ rad) enquanto ϕ esta variando continuamente com velocidade angular $\omega_\phi = 64.08$ rad/s. Isto significa que o corpo da bactéria esta girando em volta do campo magnético externo de acordo com a definição do ângulo ϕ (Figura. A.2) porém a cadeia de magnetossomas está inclinada e vibrando enquanto gira. O mesmo pode ser comentado sobre a Figura (4.3), onde se observa que em primeira aproximação as coordenadas x, y e z se comportam como aquelas de uma hélice cilíndrica e os ângulos de Euler mostram que o corpo da bactéria esta precessando em volta do campo magnético.

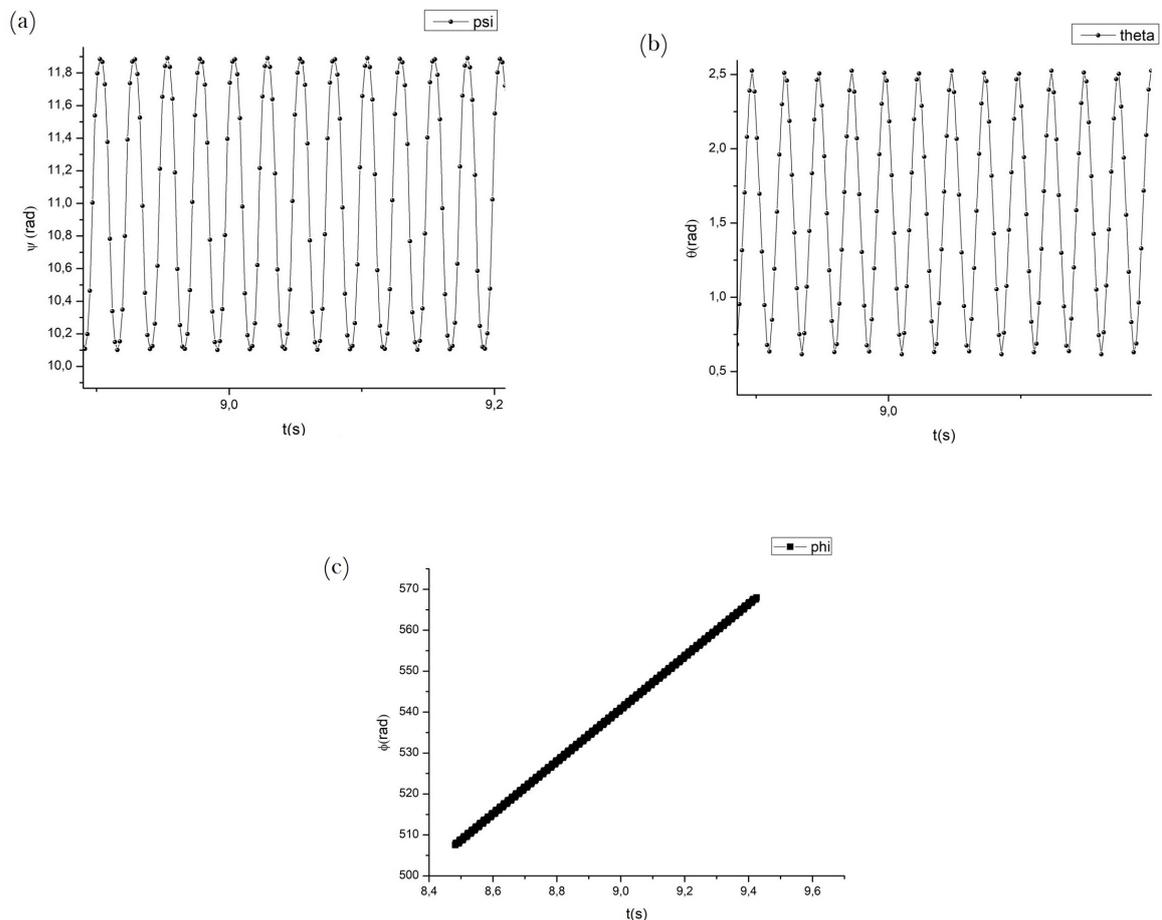


Figura 4.2: Resultado numérico para dos ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 1 Oe (0,0001 T) e $\gamma=30^\circ$ (a) Ângulo ψ , (b), Ângulo θ , (c)Ângulo ϕ .

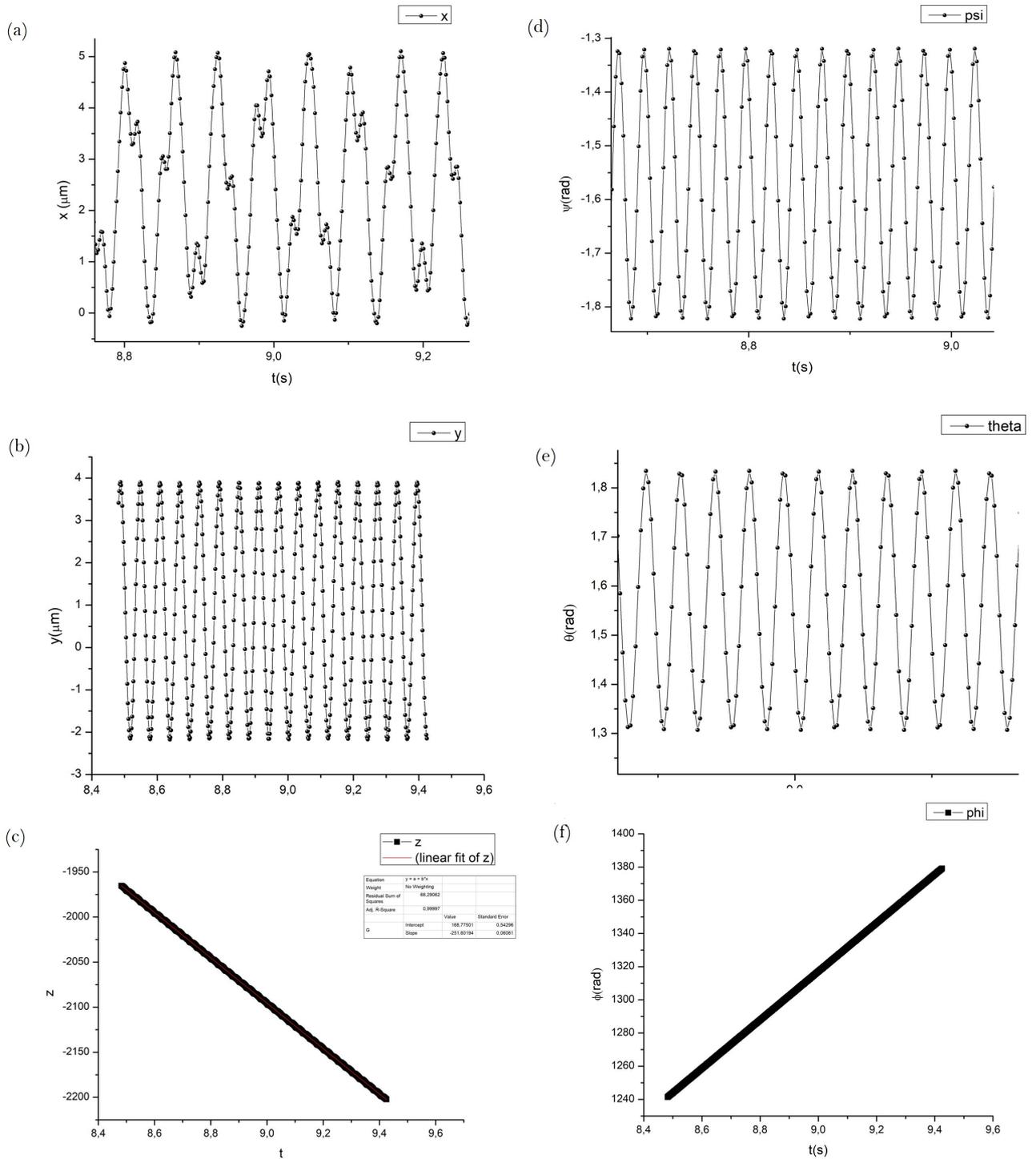


Figura 4.3: Resultado numérico para as coordenadas do centro de massa e os ângulos de Euler em função do tempo para um campo magnético de 100 Oe e $\gamma=20^\circ$ (a) Coordenada x , (b) Coordenada y , (c) Coordenada z , (d) Ângulo ψ , (e) Ângulo θ , (f) Ângulo ϕ .

4.2 Trajetórias helicoidais

As trajetórias de movimento do modelo proposto (bactéria magnetotática esférica com dois flagelos) são simuladas em campos magnéticos uniformes com intensidades variáveis (Grupo B) e para ângulos γ variáveis e campo magnético constante de 1 Oe (Grupo A).

Grupo A. Variação angular(γ) *Caso 1* : Forças dos flagelos iguais $F_f^1 = F_f^2$

Para ângulos de γ pequenos as trajetórias mostradas na Figura (4.4) são parecidas com hélices cilíndricas de amplitude variável e com eixo paralelo ao campo magnético. Se observa na projeção da trajetória no plano XY que as hélices não estão perfeitamente definidas o que será discutido posteriormente de forma geral.

Para ângulos $\gamma > 25^\circ$ as trajetórias são menos uniformes, enquanto o ângulo aumenta a forma de hélice é menos evidente (Figura 4.5)

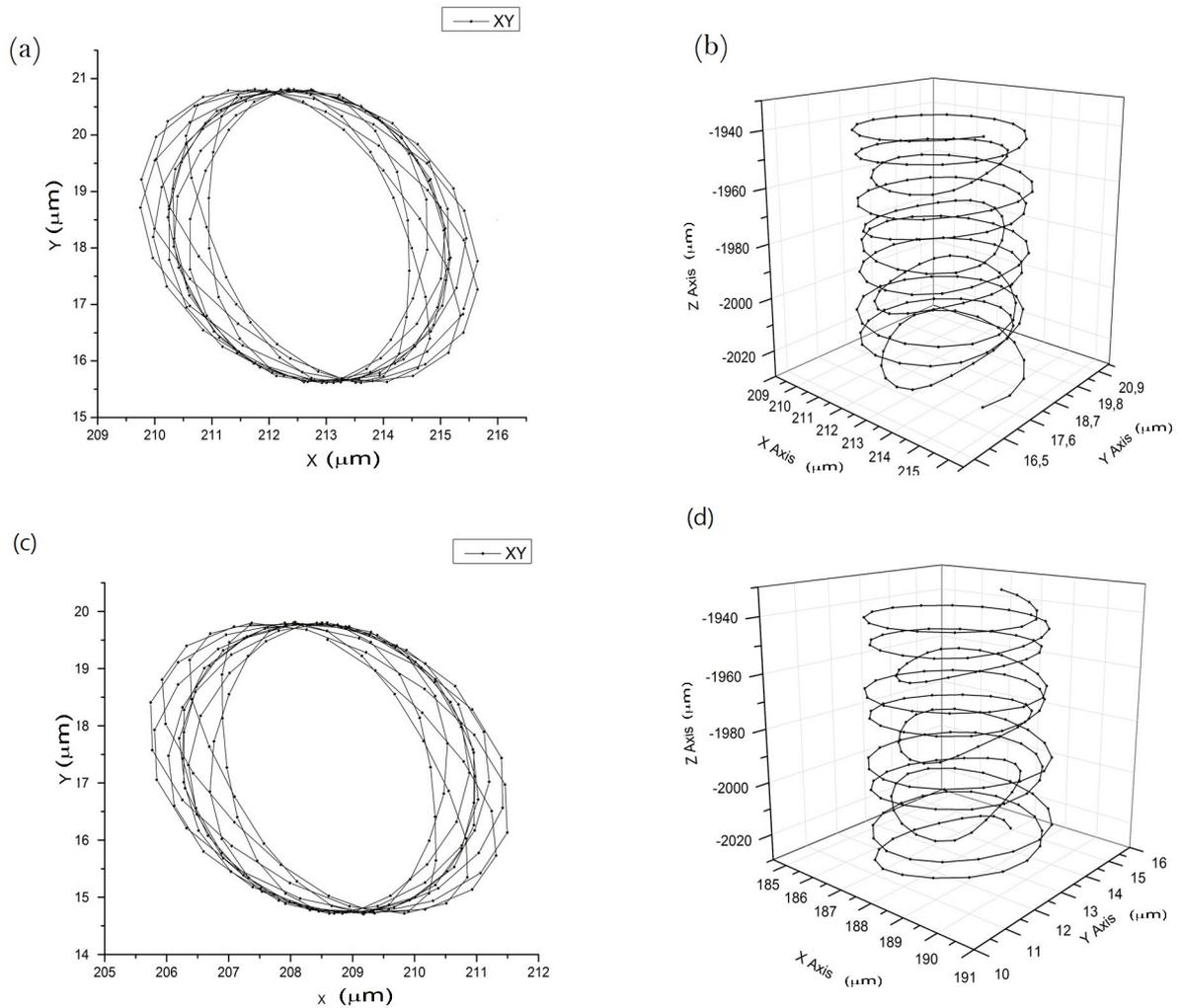


Figura 4.4: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $\mathbf{F}_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250 \text{ rad/s}$, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1 \text{ Oe}$ (0,0001 T), (a)(b) $\gamma = 0^\circ$ (c)(d) $\gamma = 20^\circ$.

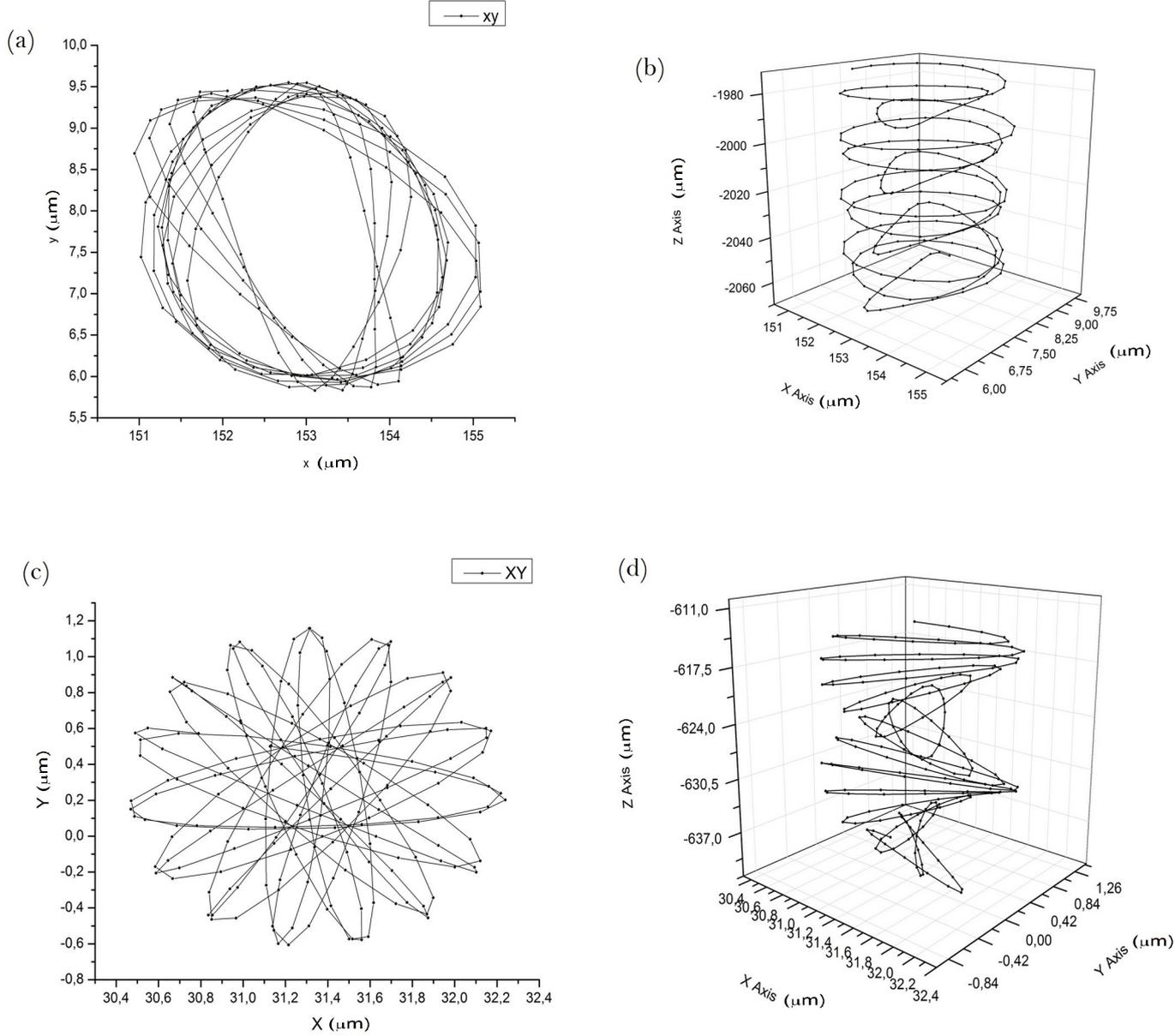


Figura 4.5: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250 \text{ rad/s}$, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1 \text{ Oe}$ (0,0001 T); (a)(b) $\gamma = 40^\circ$ (c)(d) $\gamma = 80^\circ$.

Caso 2 : Forças dos flagelos diferentes $F_f^1 > F_f^2$

Para valores pequenos do ângulo γ , as trajetórias são hélices com diâmetros variáveis e com eixo não alinhado com as linhas do campo magnético, mudando de direção constantemente em alguns casos (figura 4.6). Pode se observar na projeção no plano XY como o padrão vai mudando com o aumento de γ . Para ângulos $\gamma > 30^\circ$ as trajetórias são menos uniformes, enquanto o ângulo aumenta, os gráficos no plano XY apresentam padrões mais espalhados no plano (figura 4.7). Como as trajetórias observadas não refletem o que se observa no movimento real de uma bactéria, os resultados com $F_f^1 > F_f^2$ não serão discutidos.

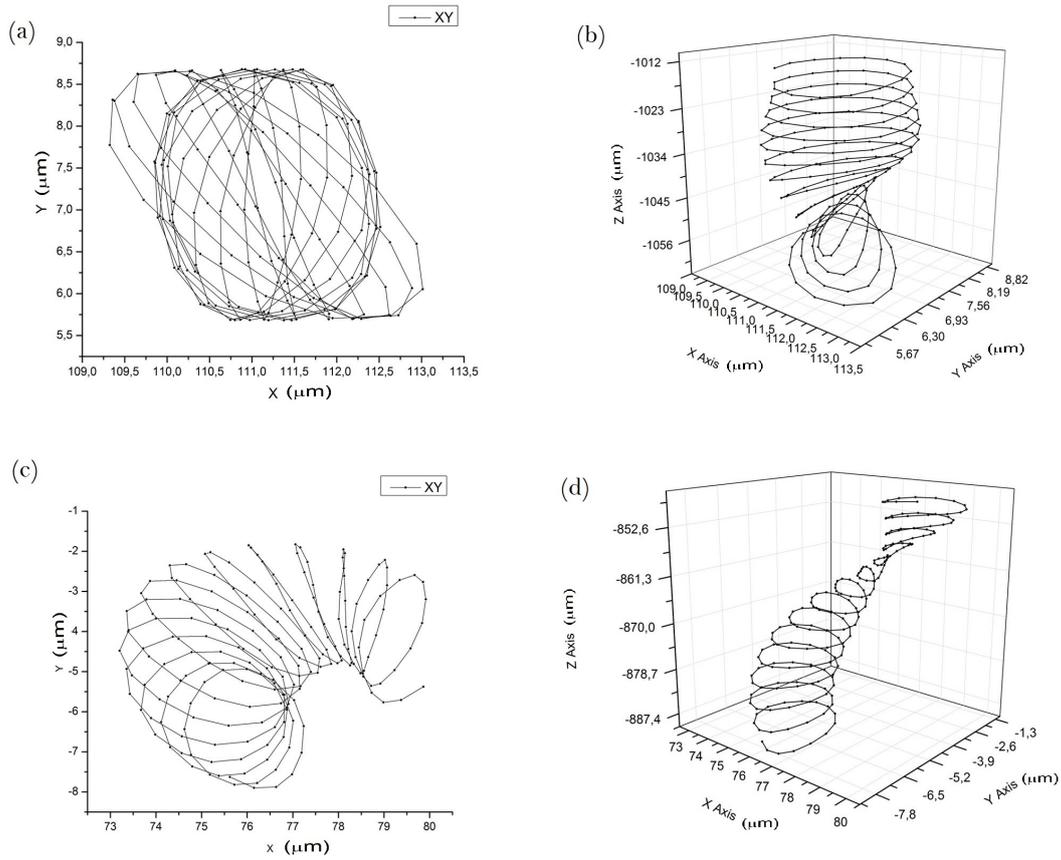


Figura 4.6: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12} \text{ N}$ e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\omega = 250 \text{ rad/s}$, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1 \text{ Oe}$ ($0,0001 \text{ T}$); (a) $\gamma = 0^\circ$ (b) $\gamma = 5^\circ$.

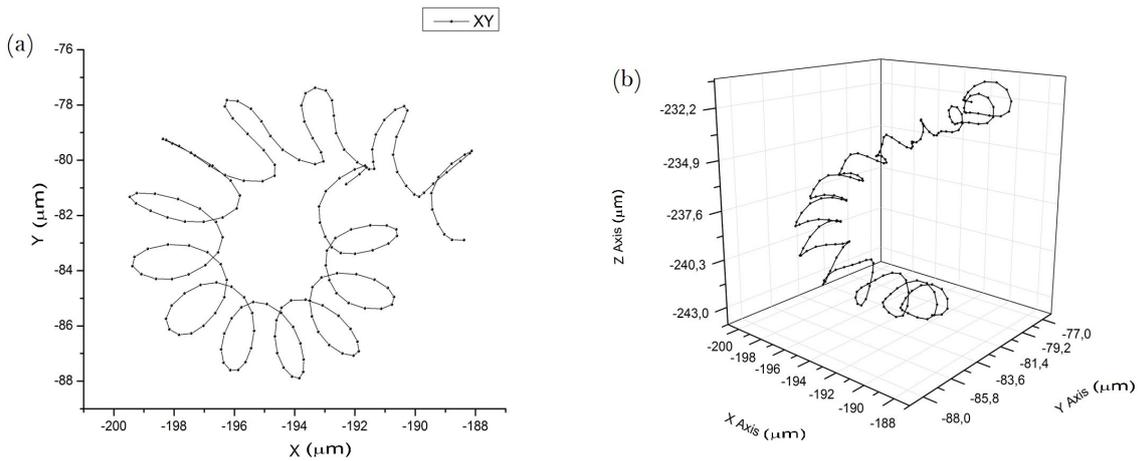


Figura 4.7: Trajetórias simuladas 3D e projeções no plano XY em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12} \text{ N}$ e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12} \text{ N}$, $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12} \text{ N}$, $\omega = 250 \text{ rad/s}$, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$ para $B = 1 \text{ Oe}$ ($0,0001 \text{ T}$); (a)(b) $\gamma = 35^\circ$.

Grupo B: Variação do campo magnético B .

Caso 1 : Forças dos flagelos iguais $F_f^1 = F_f^2$ e $\gamma = 20^\circ$

Para $B = 0$ a trajetória simulada é observada na Figura 4.8a e b. Esta trajetória deveria corresponder com a trajetória de uma bactéria normal, não magnetotática. Estas trajetórias, para microorganismos em movimento no regime de baixo número de Reynolds, correspondem com hélices [64]. A Figura (4.8b) mostra que a trajetória calculada com o presente modelo é uma hélice com seção transversal elipsoidal. Até onde sabemos, este tipo de trajetória não é observada no nado de microorganismos, o que pode estar relacionado com a escolha do posicionamento dos flagelos e com o valor das forças usadas.

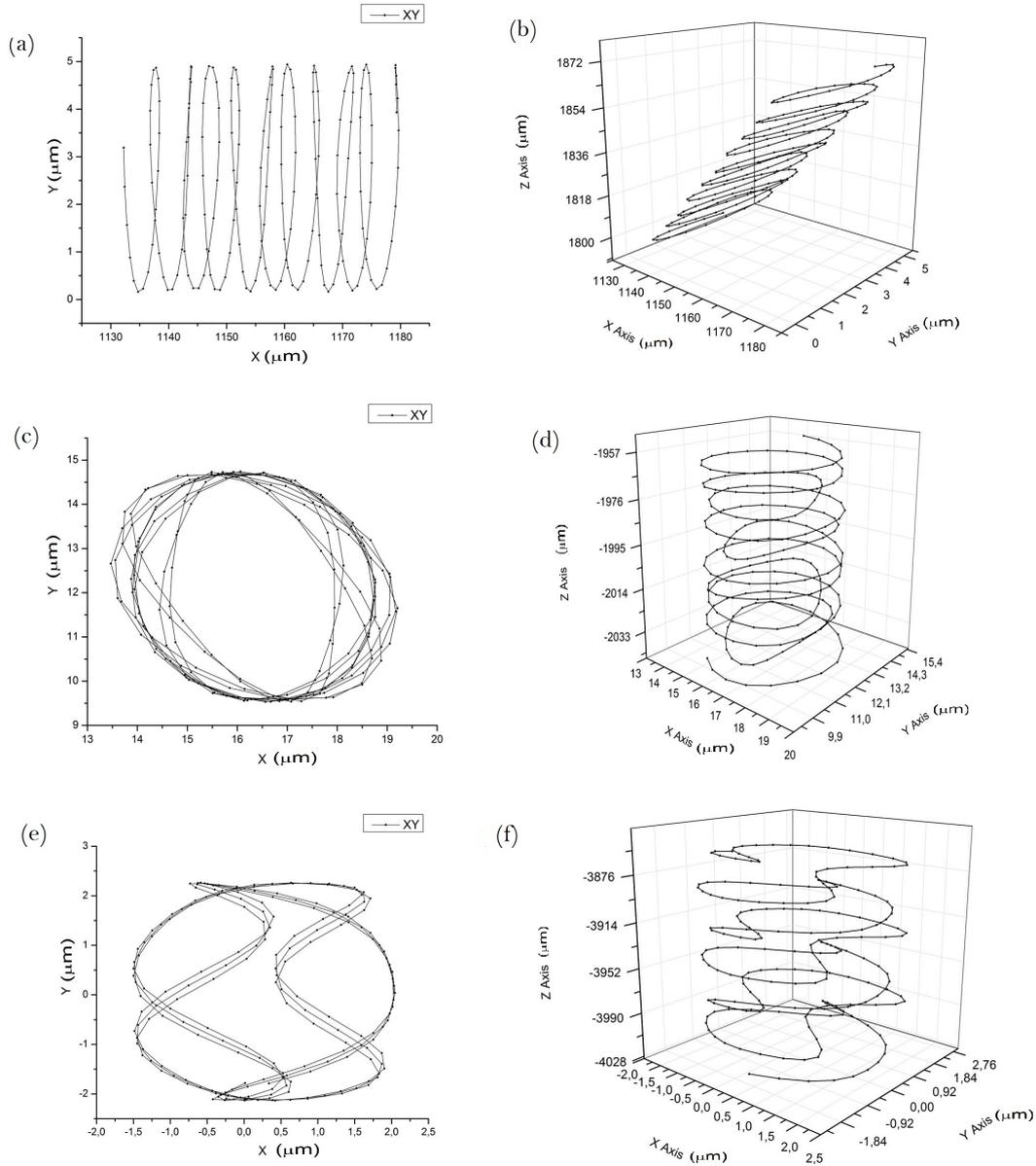


Figura 4.8: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos para forças iguais; $F_{f1} = F_{f2}$; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15}$ A.m², $\gamma = 20^\circ$ (a) $B=0$ (0T) Oe, (b) $B= 10$ Oe (0,001 T), (c) $B=800$ Oe (0,08T).

Para campos pequenos entre 1 Oe (0,0001 T) e 10 Oe (0,001 T) as trajetórias são hélices cilíndricas com diâmetros variáveis (Figura 4.8c), para campos acima de 50 Oe (0,005 T) a forma de hélice é deformada e apresenta padrões como os mostrados na figura (4.8f).
Caso 1 : Forças dos flagelos iguais $F_f^1 = F_f^2$ e $\gamma = 60^\circ$

Para $B=0$ (0 T), a trajetória calculada é mostrada na Figura (4.9a). Novamente a trajetória é uma hélice com seção transversal elíptica, com excentricidade maior que a trajetória observada com $\gamma=20^\circ$. Para $B > 0$ a forma da trajetória é uma hélice cilíndrica com diâmetro variável (Figura 4.9b).

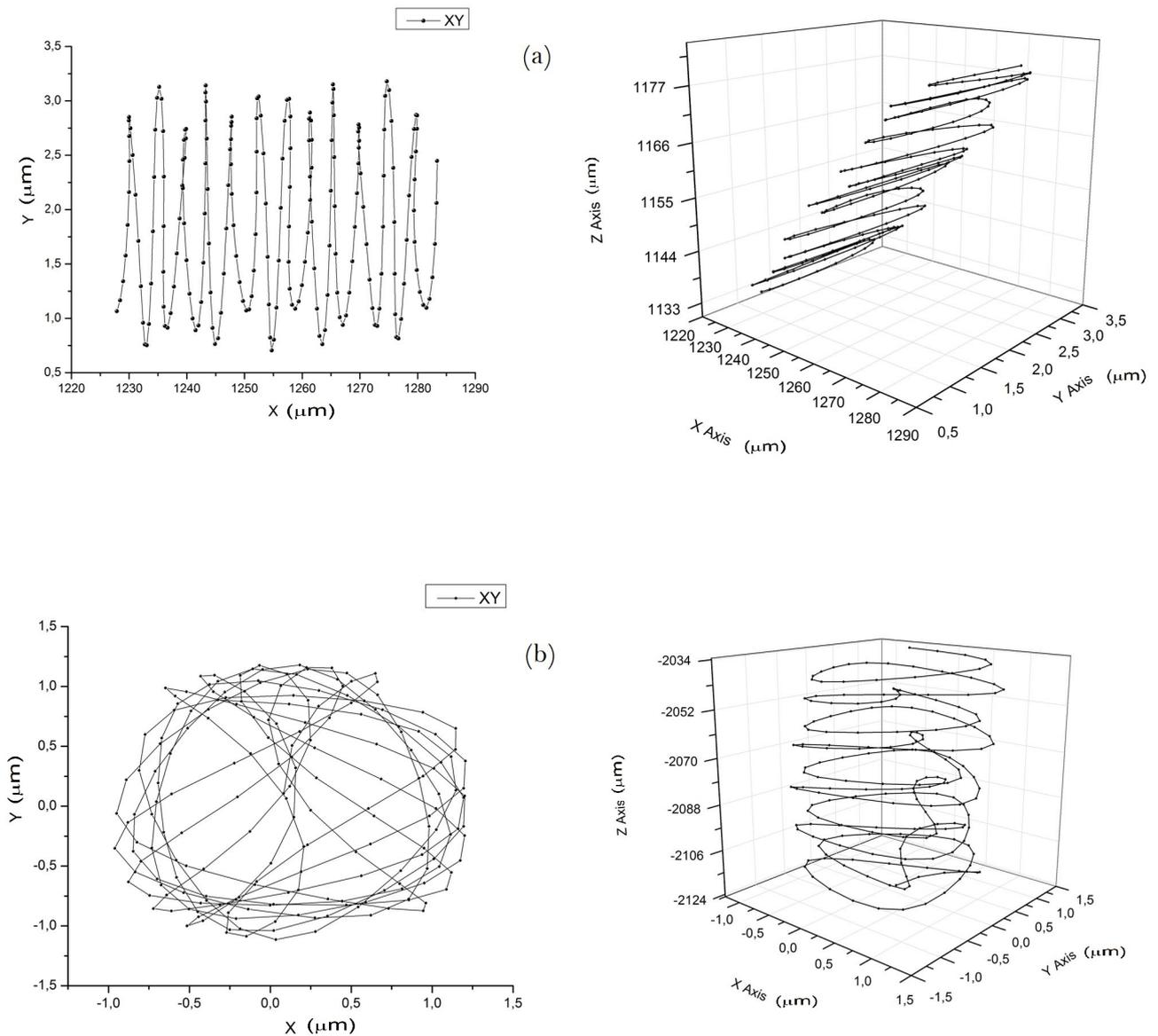


Figura 4.9: Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças iguais; $F_{f1} = F_{f2}$; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15}$ A.m², $\gamma = 60^\circ$. (b) $B=0$ (0T) Oe, (c) $B=100$ Oe (0,001 T)

Caso 2 : Forças dos flagelos diferentes $F_f^1 > F_f^2$ e $\gamma = 20^\circ$
 Para $B=0$, novamente se observa uma trajetória helicoidal com eixo mudando de direção (Figura 4.10 a e b). Para campos magnéticos entre 1 Oe (0,0001 T) e 10 Oe (0,001 T) as trajetórias são semelhantes àquela mostrada nas Figuras 4.10 c e d. Para campos magnéticos $B > 50(0.005T)$ as projeções no plano XY e trajetórias tem um comportamento semelhante àquela mostrado nas Figuras 4.10 e e f.

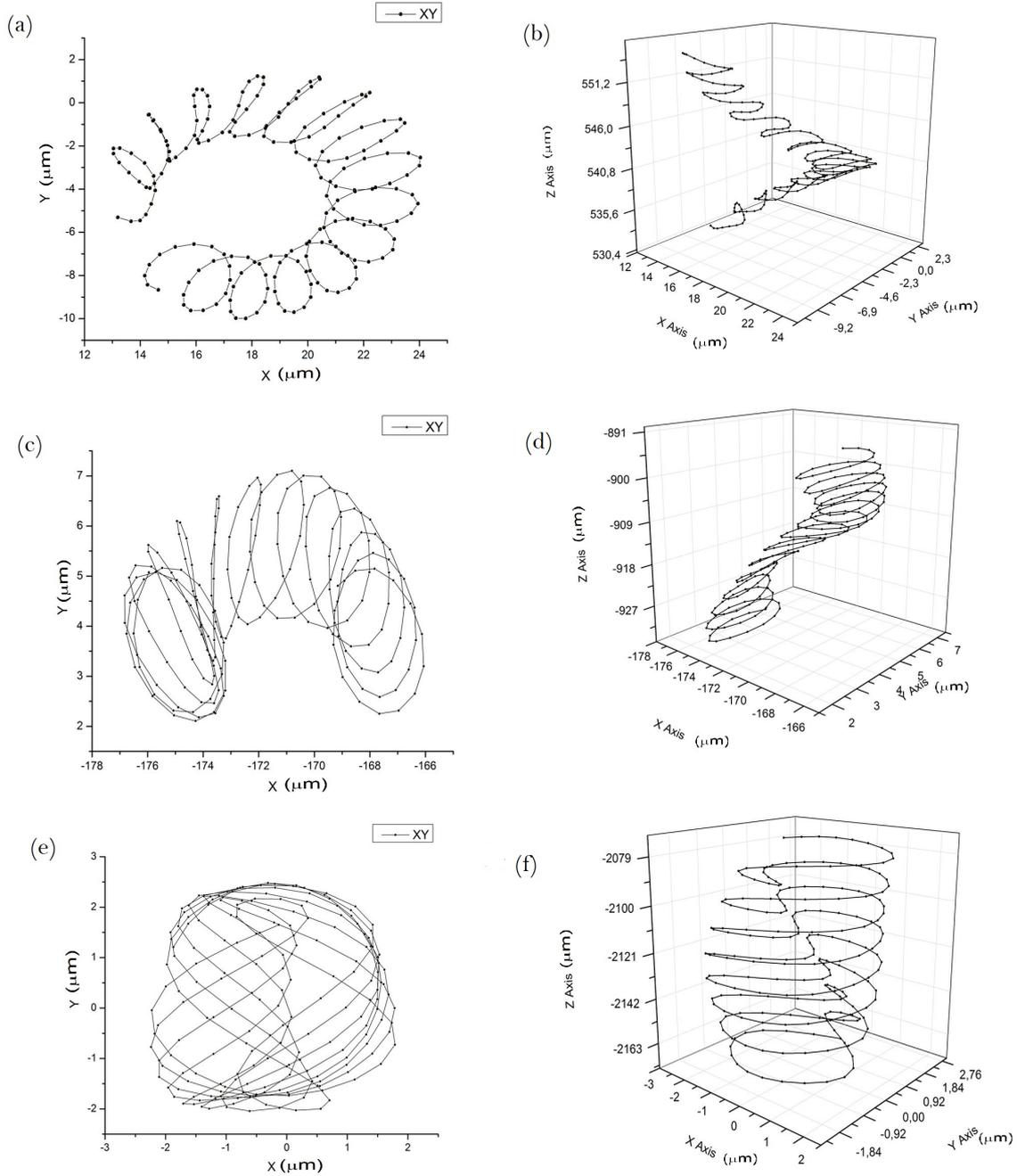


Figura 4.10: : Trajetórias simuladas no plano XY e tridimensionais em campos magnéticos uniformes para forças diferentes; $F_{f1} > F_{f2}$; $F_1 = 3 \times 10^{-12}$ N , $F_{23} = 2,646 \times 10^{-12}$ N e $F_{1n} = 2 \times 10^{-12}$ N , $F_{23n} = 2,497 \times 10^{-12}$ N , $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15}$ A.m² , $\gamma = 60^\circ$. P $B=0$ (a e b) $B=10$ Oe (0,001 T) (c e d) $B=1000$ Oe (0,1T) (e e f).

4.2.1 Frequências e velocidades para coordenadas cartesianas

As velocidades, frequências e amplitudes das coordenadas cartesianas medidas no programa Origin foram organizadas em tabelas para serem posteriormente representadas graficamente conforme apresentado a seguir.

Grupo A. Variação do ângulo γ

A Figura 4.11 mostra os gráficos obtidos a partir dos parâmetros na Tabela 4.1 . Observamos que para o caso 1 a frequência de oscilação da trajetória aumenta a medida que o ângulo de inclinação flagelar aumenta (Figura 4.11a); a amplitude da coordenada y diminui quando aumenta o valor de γ (Figura 4.11b) e a velocidade aumenta ate atingir um máximo em $\gamma = 30^\circ$ e diminui ate zero em $\gamma = 90^\circ$ (Figura 4.11c).

Tabela 4.1: Medições das amplitudes frequências e inclinações com respeito a γ , para forças iguais (Caso 1); $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $B = 1$ Oe (0.0001T).

γ (Graus)	Amplitude Y (μm)	Frequência XY (Hz)	velocidade axial Vz ($\mu\text{m/s}$)
0	2,49	29,23	238,40
1	2,56	29,41	238,55
5	2,57	28,73	239,18
10	2,56	29,23	241,02
15	2,47	29,17	243,75
20	2,40	29,23	246,92
25	2,27	29,76	249,78
30	2,09	29,76	251,60
35	1,94	29,76	251,51
40	1,92	30,29	248,59
45	1,69	30,82	242,12
50	1,53	31,35	231,47
55	1,21	31,88	216,24
60	1,20	32,95	196,05
65	1,10	34,01	171,51
70	0,97	35,07	142,82
75	0,93	36,13	110,20
80	0,84	37,20	75,17
85	0,85	38,79	38,24
90	0,67	39,96	0,35

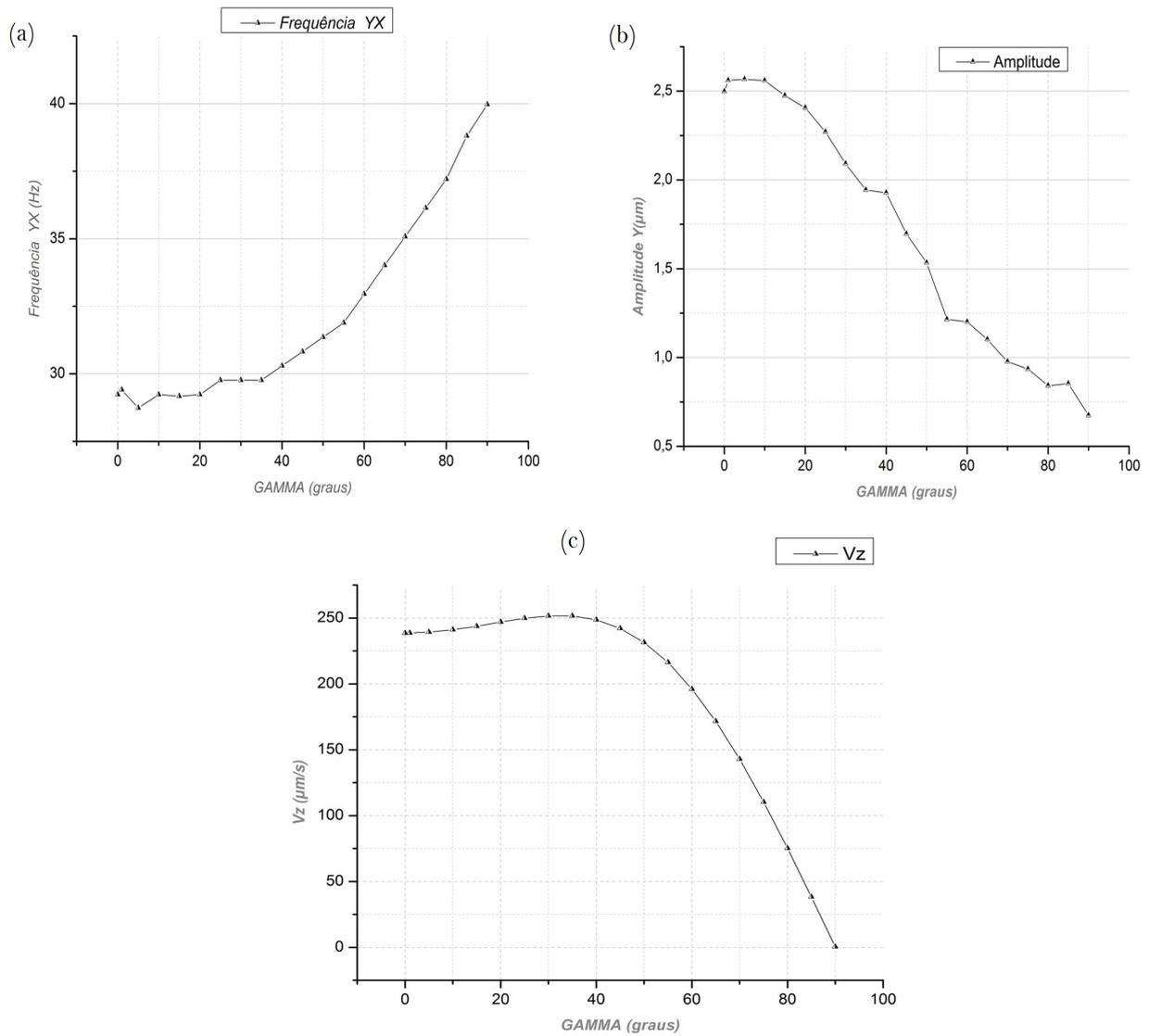


Figura 4.11: (a)Frequências, (b)Amplitude da coordenada y e (c) velocidade axial em função γ , para forças iguais; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250 \text{ rad/s}$, $m = 1.5 \times 10^{-15} \text{ A.m}^2$, $B = 1 \text{ Oe (0.0001T)}$.

Grupo B. Variação do campo magnético B

Para este grupo os dados obtidos são exibidos na tabela (4.2). Na tabela fica evidente que para $\gamma=90^\circ$ as velocidades são nulas, resultado que coincide com aqueles do grupo A.

Tabela 4.2: Amplitude da coordenada y, frequência de oscilação das coordenadas x e y e velocidade axial em função do campo magnético para o caso de forças iguais; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15}$ A.m²

Campo B (Oe)	Frequência XY (Hz)	Amplitude Y (μm)	velocidade axial Vz ($\mu\text{m/s}$)
$\gamma = 20^\circ$			
0	29,23	2,35	-211,02
1	39,86	2,36	246,92
5	39,86	2,42	238,37
10	39,86	2,56	232,66
50	39,86	3,49	355,30
100	39,86	3,02	416,96
200	39,86	2,63	440,67
400	39,86	2,33	450,06
600	39,86	2,26	452,68
800	39,86	2,19	454,09
1000	39,86	2,15	454,84
$\gamma = 60^\circ$			
0	32,95	1,18	-133,39
1	32,95	1,1	196,05
5	32,95	1,09	192,88
10	32,41	1,26	190,45
50	28,69	1,29	209,21
100	27,63	1,18	226,14
200	27,10	1,14	235,42
400	27,10	1,15	239,74
600	27,10	1,07	241,03
800	27,10	1,10	241,74
1000	27,10	1,09	242,12
$\gamma = 90^\circ$			
0	39,86	0,67	39,97
1	39,86	0,67	0,34
5	39,86	0,67	0,34
10	39,86	0,65	0,33
50	39,86	0,69	0,34
100	39,86	0,43	0,36
200	39,86	0,37	0,37
400	39,86	0,36	0,38
600	38,86	0,75	0,38
800	38,86	0,38	0,38
1000	38,86	0,36	0,38

Os dados mostrados na Tabela 4.2 estão representados graficamente na Figura (4.12). A Fig.(4.12a) mostra que a frequência em função do campo apresenta um comportamento semelhante para os dois ângulos propostos, para $\gamma = 20^\circ$ (vermelho), em campos diferentes de $B= 0$ Oe (0 T) a frequência é constante 250,4 rad/s (39,86 Hz), para $\gamma 60^\circ$ (azul) a frequência diminui entre $B= 0$ Oe (0 T) e $B = 200$ Oe (0.02), então permanece constante 170,27 rad/s (27,10 Hz). A amplitude (Figura4.12b) para $\gamma= 20^\circ$ aumenta entre $B=0$ Oe (0 T) e $B= 50$ Oe (0.005 T), depois desse valor diminui, para $\gamma= 60^\circ$ ela aumenta entre $B=0$ (0 T) e $B= 50$ (0.005 T), depois fica quase estável. As velocidades em função do campo (Figura4.12c), mostram valores negativos no início e depois de atingir um máximo apresentam um comportamento quase constante.

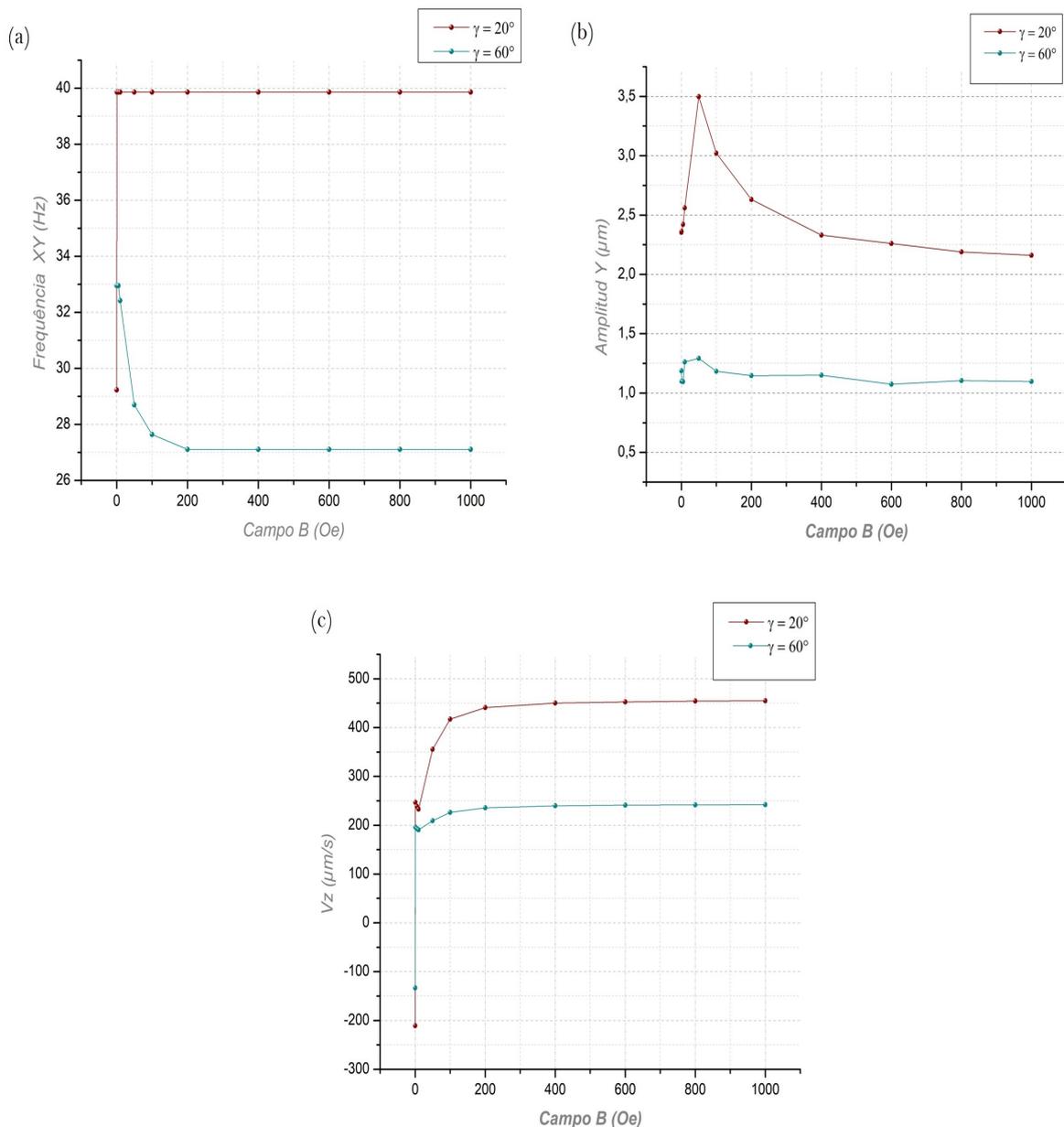


Figura 4.12: (a)Frequências, (b)Amplitude da coordenada y e (c)velocidade axial em função do campo magnético B, para forças iguais; $F_1 = 4.59 \times 10^{-12} = F_{1n}$ e $F_{23} = 2 \times 10^{-12} = F_{23n}$, $\omega = 250$ rad/s, $m = 1.5 \times 10^{-15}$ A.m², $\gamma = 20^\circ$ em vermelho, $\gamma = 60^\circ$ em azul.

4.3 Discussão

A partir de um modelo de 6 equações diferenciais de primeira ordem acopladas para tratar o movimento de uma MTB esférica com dois flagelos, no regime de baixo número de Reynolds, se obtiveram trajetórias que correspondem em primeira aproximação com hélices cilíndricas para os diversos campos magnéticos B e ângulos de inclinação flagelar γ estudados, no caso de forças dos flagelos iguais.

No modelo, as forças e as direções de os flagelos bem como os campos magnéticos podem ser alterados à vontade. Assim, o modelo proposto é uma extensão do modelo mostrado na referência [10] que é útil para estudar as características das trajetórias para uma MTB com geometria esférica.

A partir dos resultados numéricos obtidos foi feita uma análise descritiva das trajetórias 3D assim como das coordenadas cartesianas e dos ângulos de Euler. A partir das coordenadas do centro de massa se observa a formação de trajetórias helicoidais, nas quais dois tipos diferentes de oscilações podem ser observadas na dependência temporal da coordenada x , resultado mostrado na Figura 4.3a e que pode ser interpretado como uma variação no diâmetro da hélice em função do tempo. Também se observa que quanto maior é o ângulo de inclinação flagelar γ a mudança no diâmetro é mais visível. O mesmo pode ser observado quando o campo magnético muda: para valores maiores do campo magnético o diâmetro apresenta variações mais pronunciadas. Em geral o diâmetro tem outra dinâmica, pois para uma hélice comum o diâmetro é uma constante, aqui ele oscila. No caso dos ângulos de Euler ψ e θ eles oscilam em volta de um valor fixo, enquanto ϕ está variando continuamente com velocidade angular ω_ϕ , o que significa que o corpo da bactéria está girando em volta do campo magnético externo. Porém a cadeia de magnetossomas está inclinada e vibrando enquanto gira. Isto é bem diferente da ideia de que a bactéria magnetotactica alinha o momento magnético na direção das linhas do campo geomagnético enquanto nada. Na verdade, enquanto nada a bactéria tenta alinhar seu momento magnético com as linhas do campo sendo desalinhado pelos torques flagelares.

Por outro lado, a frequência da oscilação principal para as coordenadas x e y se mostra sensível à variação dos parâmetros que foram analisados, evidenciando os seguintes comportamentos:

No Grupo A para forças iguais, a medida que o ângulo γ aumenta a frequência também aumenta; no **Grupo B** para forças iguais a medida que o campo magnético aumenta a frequência permanece constante para valores de γ pequenos, e para valores de γ maiores a frequência apresenta um decaimento assintótico. Ao que parece, valores pequenos da inclinação flagelar favorecem uma maior frequência de oscilação das coordenadas.

Outra medida importante feita nas coordenadas foi a inclinação da coordenada z que corresponde à velocidade axial V_z . Dos resultados podemos observar para forças flagelares iguais:

(I) **Grupo A:** a velocidade V_z apresenta um aumento em função do ângulo γ , atingindo seu máximo em $\gamma = 30^\circ$ e diminuído seu valor a partir deste ângulo e atingindo um valor de zero em $\gamma = 90^\circ$. Este é um dos resultados principais, pois significa que a separação ótima entre os flagelos é para um ângulo de 30 graus, permitindo que a bactéria se movimente com a máxima velocidade possível

(II) **Grupo B:** a velocidade V_z em todos os casos propostos é negativa (a bactéria está se movendo no sentido inicial negativo em relação ao eixo) em $B = 0$ e depois cresce ate atingir um valor máximo e permanecer constante. Este comportamento lembra a

uma função de Langevin, como tem sido proposto o comportamento da velocidade de movimento de uma MTB [75].

Finalmente, para as trajetórias 3D em geral, além de se observar a variação na forma das trajetórias para os dois grupos analisados (A e B), também pode se observar que para o caso de forças flagelares iguais o eixo das hélices esta alinhado com o campo magnético, e para o caso das forças flagelares diferentes as trajetórias são dispersas e perdem esse alinhamento, mostrando outros padrões de movimento. Isto significa que o caso de forças flagelares diferentes produz resultados que não correspondem com o que se observa no laboratório, pois para bactérias magnetotacticas o eixo da trajetória helicoidal sempre esta alinhado ao campo magnético. Assim, outro resultado importante do presente estudo é que este modelo somente produz trajetórias semelhantes ao que se observa no laboratório para o caso de forças flagelares iguais.

Pode-se inferir que as MTBs são orientadas passivamente pelo campo magnético o que faz que elas nadem ao longo das linhas de campo magnético, o que concorda com os resultados teóricos e experimentais dos modelos anteriores [11] [14]. As variações na separação dos flagelos e no valor do campo magnético provocam câmbios na trajetória que podem ser quantificadas na frequência de oscilação das coordenadas e na velocidade axial.

Conclusões

Neste trabalho foi proposto um modelo teórico de movimento para bactérias magnetotáticas com geometria esférica, incluindo dois feixes flagelares e uma cadeia de magnetossomos posicionada no centro da esfera entre os dois feixes flagelares. Este modelo leva a um sistema de 6 equações diferenciais ordinárias acopladas que descrevem o movimento. Por serem acopladas o sistema foi resolvido usando métodos numéricos.

Trajatórias 3D e suas respectivas projeções no plano XY foram obtidas para cada simulação, as quais descreveram trajetórias com forma aproximada de hélice cilíndrica quando as componentes de força flagelar tem o mesmo modulo. No caso em que as componentes das forças flagelares são diferentes as trajetórias não seguem o campo magnético e elas não foram analisadas por não descreverem o que se observa experimentalmente.

A análise das coordenadas x , y , z confirmaram a formação de trajetórias helicoidais, dois tipos de oscilações foram observadas na evolução individual de x em função do tempo, resultado que foi verificado com o uso da transformada de Fourier, sendo assim interpretado como uma variação no diâmetro da hélice. No caso dos ângulos de Euler permite afirmar que o corpo da bactéria magnetotática gira em volta do campo magnético externo, porém a cadeia de magnetossomos esta inclinada e vibrando enquanto gira.

A velocidade axial V_z mostrou dois resultados importantes: em função da inclinação γ a velocidade apresenta um aumento em função de γ , atingindo seu máximo em $\gamma=30^\circ$, significando que uma separação de 60° entre os dois feixes flagelares é a inclinação ótima para que a bactéria magnetotática se movimente com a máxima velocidade possível; em função do campo magnético a velocidade aumenta ate atingir um valor máximo ou de saturação, comportamento que lembra a função de Langevin.

Os resultados obtidos na presente dissertação indicam que a inclinação dos flagelos e a intensidade da força aplicada por eles influenciam as características das trajetórias como a frequência de oscilação e a velocidade axial. Infelizmente, as trajetórias observadas na nossa solução numérica não são parecidas com as trajetórias observadas experimentalmente na referencia [11].

Como consequência, entre as perspectivas futuras para o presente trabalho estão a comparação dos resultados teóricos com resultados experimentais do movimento de bactérias magnetotáticas para testar o modelo proposto, e modificações do modelo que incluam a inclinação da cadeia de magnetossomos em relação aos feixes flagelares e/ou a interação dos flagelos com o fluido. Estas modificações permitirão a obtenção de resultados que auxiliem com maior precisão pesquisas em nanotecnologia e biomedicina.

Apêndice A

Cinemática do Corpo Rígido

Definição: Um corpo rígido é um grupo, geralmente contínuo, de partículas com uma propriedade fundamental: a distância entre duas partículas do corpo rígido permanece inalterado; isto é, constante. Outra maneira de definir um corpo rígido é dizer que é um corpo que não admite deformação; isto é, indeformável. É importante observar que, no curso da dinâmica de corpos rígidos, uma partícula é sempre considerada como objeto de dimensões tão pequenas que não gira, somente se translada. [76]

A.0.1 Coordenadas independentes de um corpo rígido

Como ponto de partida, é necessário esclarecer quais são os graus independentes de liberdade de um corpo rígido, ou seja, as coordenadas necessárias para especificar completamente sua localização em um determinado momento de tempo.

Para localizar espacialmente um sólido rígido, é necessário especificar a posição de um ponto de referência do corpo (por exemplo, seu centro de massa, um ponto fixo etc.), e a orientação relativa deste corpo, tudo com respeito a um sistema inercial fixo de coordenadas que chamaremos de sistema de laboratório (S), veja a Fig. A.1

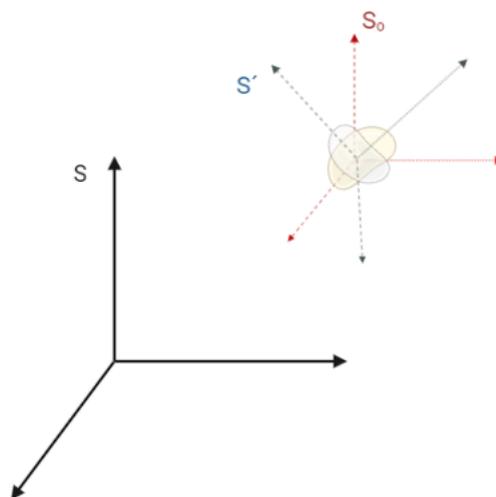


Figura A.1: Orientação relativa de um corpo rígido. O sistema S é inercial, S0 é um sistema cuja origem é fixado em algum ponto de referência do corpo e cujos eixos são paralelos aos de S. O sistema S' está fixo ao corpo e tem origem comum com S0 [76].

A orientação relativa é obtida utilizando um sistema S' cujos eixos são fixados ao corpo rígido e, portanto, eles seguem sua dinâmica. O sistema S' está geralmente girando em relação a S_0 , mas com origem comum. Portanto, S' pode ser obtido por pura rotação do sistema S_0 (sem translação).

São necessários seis graus de liberdade para definir a configuração do corpo rígido de S : 3 para definir o ponto de referência (origem de S_0 e S') e 3 para definir a orientação relativa de S' em relação a S (ou o que é o mesmo, em relação a S_0). Observe que o referido número de graus de liberdade é independente do número de partículas do sólido e até de sua natureza discreta ou contínua.

A.0.2 Atribuição dos graus de liberdade de um corpo rígido

Como a determinação da posição da origem de S_0 em relação a S não representa uma dificuldade específica, nos restringiremos a estudar como parametrizar a orientação relativa de S' em relação a S_0 . Há várias maneiras de executar essa parametrização. Uma delas é a determinação de cossenos diretores dos eixos primários de S em relação aos eixos não primos de S_0 .

Para simplificar, usaremos uma notação de índice em vez da nomenclatura x, y, z ou seja, x_1, x_2, x_3 .

A direção do eixo x'_1 pode ser especificada através dos ângulos que esse eixo faz com cada um dos eixos x_1, x_2, x_3 . Os cossenos diretores são definidos da seguinte forma

$$\cos \theta_{ij} = \cos(\mathbf{e}'_i \mathbf{e}_j) = \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i \quad (\text{A.1})$$

onde \mathbf{e}_j são os vetores unitários cartesianos ao longo dos eixos X_j e \mathbf{e}'_i os análogos para o sistema S' . Em θ_{ij} , o primeiro índice refere-se ao índice primado e o segundo ao índice não primado.

A projeção de um vetor \mathbf{e}'_i ao longo de \mathbf{e}_1 é dada por $(\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_1) \mathbf{e}_1$, de modo que o componente de \mathbf{e}'_i ao longo de \mathbf{e}_1 é dada por $(\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_1) \mathbf{e}_1$, de modo semelhantes, os componentes de \mathbf{e}'_i são obtidos ao longo de \mathbf{e}_2 e \mathbf{e}_3 .

lembrando-se da definição dos cossenos diretores e usando a notação de somatório através de índices repetidos, obtem-se:

$$\mathbf{e}'_i = (\cos \theta_{ij}) \mathbf{e}_j \quad (\text{A.2})$$

Podemos escrever então

$$\vec{r} = x_i \mathbf{e}_j = x'_j \mathbf{e}'_i \quad (\text{A.3})$$

O vetor de posição em essência não muda, apenas mudam as componentes na base vetorial na qual o vetor é medido:

$$x'_i = \vec{r} \cdot \mathbf{e}'_i = (x_j \mathbf{e}_j) \cdot \mathbf{e}'_i = x_j (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}'_i) \quad (\text{A.4})$$

$$x'_i = \cos \theta_{ij} x_j \quad (\text{A.5})$$

9 cossenos diretores fornecem a transformação completa entre os dois sistemas de coordenadas. Os cossenos diretores são muito úteis para estudar a conexão entre os dois sistemas cartesianos e para expressar de uma maneira mais simples e geral vários teoremas relacionados a corpos rígidos.

A.0.3 Transformações ortogonais

Por notação vamos definir

$$a_{ij} \equiv (\cos \theta_{ij}) \quad (\text{A.6})$$

As equações (A.4) e (A.5) constituem um conjunto de transformações lineares, sendo a_{ij} um conjunto de coeficientes constantes (independentes de x, x'). Na nova notação, podemos sintetizar essas transformações como:

$$x'_i = a_{ij}x_j \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A.7})$$

A transformação linear (A.7) é chamada transformação ortogonal se os coeficientes a_{ij} da transformação satisfizerem

$$a_{ij}a_{ik} = \delta_{jk} \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A.8})$$

conhecidas como condições de ortogonalidade.

Assim, a transformação entre as coordenadas de S_0 e as de S' é realizada através de uma transformação ortogonal. Os coeficientes de transformação podem ser escritos em uma matriz de formato:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Vejamos como exemplo, o movimento num plano. Se por simplicidade, nos restringirmos à rotação no plano $X_1 X_2$, o eixo de rotação é o eixo X_3 , de modo que $e'_3 = e_3$. Vamos pensar que, em um dado momento, o ângulo entre X_1 e X'_1 seja ϕ , temos então que

$$\begin{aligned} a_{11} = \cos \theta_{11} = (\mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}_1) = \cos \phi \quad ; \quad a_{12} = (\mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}_2) = \cos\left(\frac{\pi}{2} - \phi\right) = \sin \phi \quad a_{13} = (\mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}_3) = (\mathbf{e}'_1 \cdot \mathbf{e}'_3) = 0; \\ a_{21} = (\mathbf{e}'_2 \cdot \mathbf{e}_1) = \cos\left(\frac{\pi}{2} + \phi\right) = -\sin \phi \quad ; \quad a_{22} = (\mathbf{e}'_2 \cdot \mathbf{e}_2) = \cos(\phi) \quad ; \quad a_{23} = (\mathbf{e}'_2 \cdot \mathbf{e}_3) = (\mathbf{e}'_2 \cdot \mathbf{e}_3) = 0 \\ a_{31} = a_{32} = 0 \quad ; \quad a_{33} = (\mathbf{e}'_3 \cdot \mathbf{e}_3) = 1 \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A matriz de transformação é da forma

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

E a transformação de coordenadas é

$$\begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ x'_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$x'_1 = x_1 \cos \phi + x_2 \sin \phi \quad ; \quad x'_2 = -x_1 \sin \phi + x_2 \cos \phi \quad ; \quad x'_3 = x_3 \quad (\text{A.12})$$

A.0.4 Ângulos de Euler

Vimos que os 9 cossenos diretores não formam um conjunto independente, é necessário procurar três parâmetros independentes com os quais a matriz de rotação ortogonal possa ser escrita. Esses parâmetros poderiam então ser usados como coordenadas generalizadas independentes para um formalismo lagrangiano ou hamiltoniano. Por outro lado, como as rotações são transformações contínuas, segue-se que, além das condições de ortogonalidade, as matrizes ortogonais associadas devem ser próprias e seu determinante deve ser +1.

A transformação do sistema cartesiano (X_1, X_2, X_3) para o sistema (X'_1, X'_2, X'_3) se realizada em três passos sucessivos, cada um deles servindo para definir um dos ângulos de Euler

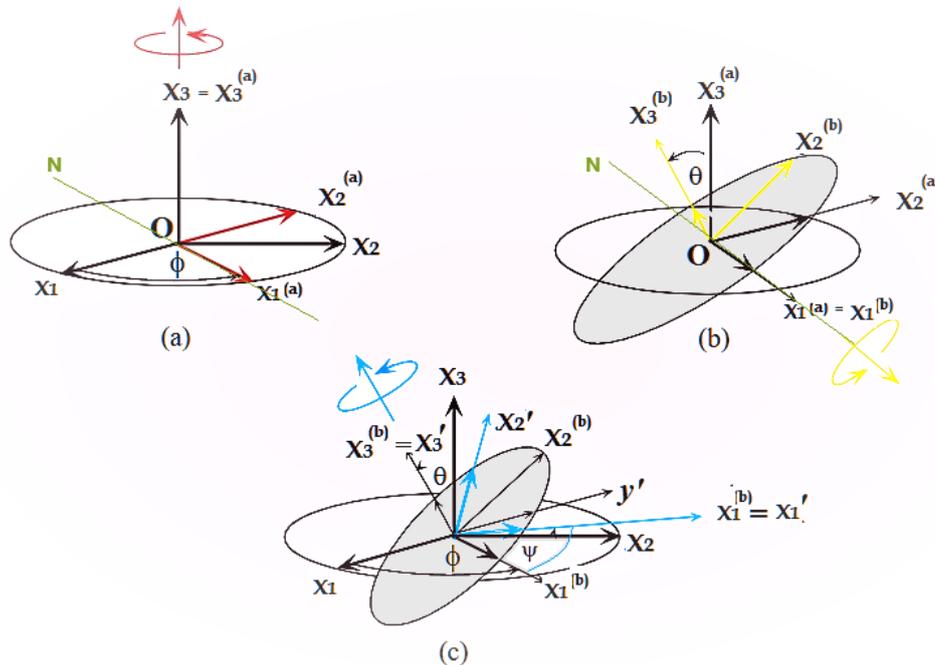


Figura A.2: Conjunto de rotações para ir dos eixos $x_1x_2x_3$ aos eixos $x'_1x'_2x'_3$ [76].

Vejamos o processo: (a) Primeiro, passamos do sistema $X_1X_2X_3$ para o sistema $X_1^{(a)}X_2^{(a)}X_3^{(a)}$ girando em torno do eixo X_3 em um ângulo ϕ para que o novo eixo $X_1^{(a)}$ fique junto a linha nodal N, que $X_1^{(a)}$ está dentro do plano sombreado, neste caso, é claro que $X_3^{(a)} = X_3$

b) Na próxima etapa, passamos do sistema $X_1^{(a)}X_2^{(a)}X_3^{(a)}$ para o sistema $X_1^{(b)}X_2^{(b)}X_3^{(b)}$ de tal forma que o novo eixo $X_2^{(b)}$ permaneça no plano sombreado, mas sem remover o eixo que já foi introduzido nesse plano. Portanto, segue-se que a rotação deve ser realizada em torno de $X_1^{(a)}$ para que este eixo não saia do plano sombreado.

Faremos então uma rotação em um ângulo θ ao redor de $X_1^{(a)}$, onde θ é o ângulo reto para o $X_2^{(b)}$ fique dentro do plano sombreado. Nesse caso, é claro que $X_1^{(b)} = X_1^{(a)}$ e com esta etapa, conseguimos que os novos eixos $X_1^{(b)}$ e $X_2^{(b)}$ estejam no plano gerado por X'_1 e X'_2

Só é necessário fazer uma rotação dentro deste plano que nos leva de $X_1^{(b)}X_2^{(b)}$ para os eixos X'_1 e X'_2 , o que é atingido com uma rotação em torno do Eixo $X_3^{(b)}$ em um ângulo

ψ (passo c). Nesse caso, $X'_1 = X_3^{(b)}$. Conseqüentemente, uma rotação arbitrária do sistema de coordenadas (X_1, X_2, X_3) para o sistema (X'_1, X'_2, X'_3) pode ser feita da maneira mostrada na Fig.(A.2)

Os elementos de uma transformação completa são podem ser obtidos pela composição das três operações descritas aqui. A rotação inicial (em torno de X_3) transforma um vetor (ou suas componentes) da seguinte forma:

$$\mathbf{x}^{(a)} = \mathbf{D}\mathbf{x}; \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

onde \mathbf{D} é uma matriz que descreve uma alteração de base na forma $(X_1, X_2, X_3) \rightarrow X_1^{(a)} X_2^{(a)} X_3^{(a)}$. A segunda rotação em torno de $X_1^{(a)}$ descreve uma mudança da base $X_1^{(a)} X_2^{(a)} X_3^{(a)}$ para a base $X_1^{(b)} X_2^{(b)} X_3^{(b)}$ e dá

$$\mathbf{x}^{(b)} = \mathbf{C}\mathbf{x}^{(a)}; \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.14})$$

e finalmente descrevemos a mudança de base $X_1^{(a)} X_2^{(a)} X_3^{(a)} \rightarrow (X'_1, X'_2, X'_3)$ com a rotação em torno $X_3^{(b)}$:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(b)}; \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.15})$$

usando essas transformações sucessivamente, chegamos à transformação que nos leva de \mathbf{x} para \mathbf{x}'

$$\mathbf{x}' = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(b)} = \mathbf{B}(\mathbf{C}\mathbf{x}^{(a)}) = \mathbf{BC}\mathbf{x}^{(a)} = \mathbf{BC}(\mathbf{D}\mathbf{x}) \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A} \mathbf{X} \quad ; \quad \mathbf{A} \equiv \mathbf{BCD} \quad (\text{A.17})$$

A traves do produto das três matrizes é obtida a matriz de rotação mais geral em termos dos ângulos de Euler:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi & -\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi & \sin \theta \sin \phi \\ \cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi & -\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & -\sin \theta \cos \phi \\ \sin \psi \sin \theta & \cos \psi \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

A faixa de ângulos na matriz de rotação é dada por

$$0 \leq \phi \leq 2\pi \quad ; \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad ; \quad 0 \leq \psi \leq 2\pi \quad (\text{A.19})$$

Pode-se mostrar que $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^t$ e que $\det \mathbf{A} = +1$ Ou seja, \mathbf{A} é efetivamente uma matriz ortogonal real própria [76].

Referências Bibliográficas

- [1] F. Abreu and D. Acosta-Avalos, “Biology and physics of magnetotactic bacteria,” in *Journal of Experimental biology, Microorganisms*, IntechOpen London, 2018.
- [2] R. Blakemore, “Magnetotactic bacteria,” *Science*, vol. 190, no. 4212, pp. 377–379, 1975.
- [3] D. A. Bazylinski and R. B. Frankel, “Magnetosome formation in prokaryotes,” *Nature Reviews Microbiology*, vol. 2, no. 3, pp. 217–230, 2004.
- [4] H. C. Berg, “The rotary motor of bacterial flagella,” *Annual review of biochemistry*, vol. 72, no. 1, pp. 19–54, 2003.
- [5] M. Pérez and M. Mota, “Morfología y estructura bacteriana,” *Temas de bacteriología y virología médica*, pp. 23–42, 2006.
- [6] D. M. S. Esquivel and H. d. P. de Barros, “Motion of magnetotactic microorganisms,” tech. rep., Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 1985.
- [7] K. Ērglis, Q. Wen, V. Ose, A. Zeltins, A. Sharipo, P. A. Janmey, and A. Cēbers, “Dynamics of magnetotactic bacteria in a rotating magnetic field,” *Biophysical journal*, vol. 93, no. 4, pp. 1402–1412, 2007.
- [8] B. Steinberger, N. Petersen, H. Petermann, and D. G. Weiss, “Movement of magnetic bacteria in time-varying magnetic fields,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 273, pp. 189–211, 1994.
- [9] P. Aragão and M. Simões, “Chaotic motion of magnetotactic bacteria,” *Chaos, Solitons & Fractals*, vol. 11, no. 6, pp. 923–928, 2000.
- [10] F. S. Nogueiral and H. G. de Barros, “Study of the motion of magnetotactic bacteria,” *European Biophysics Journal*, vol. 24, no. 1, pp. 13–21, 1995.
- [11] D. Acosta-Avalos and E. Rodrigues, “On the motion of magnetotactic bacteria: theoretical predictions and experimental observations,” *European Biophysics Journal*, vol. 48, no. 8, pp. 691–700, 2019.
- [12] S. Spring and K.-H. Schleifer, “Diversity of magnetotactic bacteria,” *Systematic and Applied Microbiology*, vol. 18, no. 2, pp. 147–153, 1995.
- [13] C. K. Batchelor and G. Batchelor, *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge University Press, 2000.

- [14] C. Yang, C. Chen, Q. Ma, L. Wu, and T. Song, “Dynamic model and motion mechanism of magnetotactic bacteria with two lateral flagellar bundles,” *Journal of Bionic Engineering*, vol. 9, no. 2, pp. 200–210, 2012.
- [15] S. Klumpp and D. Faivre, “Magnetotactic bacteria,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 225, no. 11, pp. 2173–2188, 2016.
- [16] W. Lin, D. A. Bazylinski, T. Xiao, L.-F. Wu, and Y. Pan, “Life with compass: diversity and biogeography of magnetotactic bacteria,” *Environmental Microbiology*, vol. 16, no. 9, pp. 2646–2658, 2014.
- [17] W. Lin, J. Li, D. Schüller, C. Jogler, and Y. Pan, “Diversity analysis of magnetotactic bacteria in Lake Miyun, northern China, by restriction fragment length polymorphism,” *Systematic and Applied Microbiology*, vol. 32, no. 5, pp. 342–350, 2009.
- [18] W.-J. Zhang, C.-L. Santini, A. Bernadac, J. Ruan, S.-D. Zhang, T. Kato, Y. Li, K. Namba, and L.-F. Wu, “Complex spatial organization and flagellin composition of flagellar propeller from marine magnetotactic ovoid strain mo-1,” *Journal of Molecular Biology*, vol. 416, no. 4, pp. 558–570, 2012.
- [19] C. N. Keim, F. Abreu, U. Lins, H. L. de Barros, and M. Farina, “Cell organization and ultrastructure of a magnetotactic multicellular organism,” *Journal of Structural Biology*, vol. 145, no. 3, pp. 254–262, 2004.
- [20] R. B. Frankel, D. A. Bazylinski, M. S. Johnson, and B. L. Taylor, “Magneto-aerotaxis in marine coccoid bacteria,” *Biophysical Journal*, vol. 73, no. 2, pp. 994–1000, 1997.
- [21] R. B. Frankel, “The discovery of magnetotactic/magneto-sensitive bacteria,” *Chinese Journal of Oceanology and Limnology*, vol. 27, no. 1, p. 1, 2009.
- [22] S. Bellini, “On a unique behavior of freshwater bacteria,” *Chinese Journal of Oceanology and Limnology*, vol. 27, no. 1, p. 3, 2009.
- [23] S. Mann, N. H. Sparks, and R. G. Board, “Magnetotactic bacteria: microbiology, biomineralization, palaeomagnetism and biotechnology,” *Advances in Microbial Physiology*, vol. 31, pp. 125–181, 1990.
- [24] C. T. Lefèvre and D. A. Bazylinski, “Ecology, diversity, and evolution of magnetotactic bacteria,” *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, vol. 77, no. 3, pp. 497–526, 2013.
- [25] W. Lin, Y. Pan, and D. A. Bazylinski, “Diversity and ecology of and biomineralization by magnetotactic bacteria,” *Environmental Microbiology Reports*, vol. 9, no. 4, pp. 345–356, 2017.
- [26] X. Wang, Y. Li, J. Zhao, H. Yao, S. Chu, Z. Song, Z. He, and W. Zhang, “Magnetotactic bacteria: Characteristics and environmental applications,” *Frontiers of Environmental Science & Engineering*, vol. 14, no. 4, pp. 1–14, 2020.
- [27] C. R. Barr, M. Bedrossian, K. J. Lohmann, and K. H. Nealson, “Magnetotactic bacteria: concepts, conundrums, and insights from a novel in situ approach using digital holographic microscopy (dhm),” *Journal of Comparative Physiology A*, pp. 1–18, 2022.

- [28] G. Ying, G. Zhang, J. Yang, Z. Hao, W. Xing, D. Lu, S. Zhang, and L. Yan, “Biomineralization and biotechnological applications of bacterial magnetosomes,” *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, p. 112556, 2022.
- [29] J. J. Jacob and K. Suthindhiran, “Magnetotactic bacteria and magnetosomes—scope and challenges,” *Materials Science and Engineering: C*, vol. 68, pp. 919–928, 2016.
- [30] G. Vargas, J. Cypriano, T. Correa, P. Leão, D. A. Bazylinski, and F. Abreu, “Applications of magnetotactic bacteria, magnetosomes and magnetosome crystals in biotechnology and nanotechnology: mini-review,” *Molecules*, vol. 23, no. 10, p. 2438, 2018.
- [31] U. Lins, C. N. Keim, F. F. Evans, M. Farina, and P. R. Buseck, “Magnetite (Fe₃O₄) and greigite (Fe₃S₄) crystals in multicellular magnetotactic prokaryotes,” *Geomicrobiology Journal*, vol. 24, no. 1, pp. 43–50, 2007.
- [32] U. Heyen and D. Schüler, “Growth and magnetosome formation by microaerophilic magnetospirillum strains in an oxygen-controlled fermentor,” *Applied microbiology and biotechnology*, vol. 61, no. 5, pp. 536–544, 2003.
- [33] M. R. Cartney, U. Lins, M. Farina, P. R. Buseck, and R. B. Frankel, “Magnetic microstructure of bacterial magnetite by electron holography,” *European Journal of Mineralogy*, vol. 13, no. 4, pp. 685–689, 2001.
- [34] B. R. Heywood, D. A. Bazylinski, A. J. Garratt-Reed, S. Mann, and R. B. Frankel, “Controlled biosynthesis of greigite (Fe₃S₄) in magnetotactic bacteria,” *Naturwissenschaften*, vol. 77, no. 11, p. 536, 1990.
- [35] C. T. Lefèvre, N. Menguy, F. Abreu, U. Lins, M. Pósfai, T. Prozorov, D. Pignol, R. B. Frankel, and D. A. Bazylinski, “A cultured greigite-producing magnetotactic bacterium in a novel group of sulfate-reducing bacteria,” *Science*, vol. 334, no. 6063, pp. 1720–1723, 2011.
- [36] L. Yan, S. Zhang, P. Chen, H. Liu, H. Yin, and H. Li, “Magnetotactic bacteria, magnetosomes and their application,” *Microbiological Research*, vol. 167, no. 9, pp. 507–519, 2012.
- [37] J. Sun, Y. Li, X.-J. Liang, and P. C. Wang, “Bacterial magnetosome: a novel biogenetic magnetic targeted drug carrier with potential multifunctions,” *Journal of Nanomaterials*, vol. 2011, 2011.
- [38] R. B. Frankel and R. Blakemore, “Navigational compass in magnetic bacteria,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 15, pp. 1562–1564, 1980.
- [39] M. Winklhofer, L. G. Abraçado, A. F. Davila, C. N. Keim, and H. G. L. de Barros, “Magnetic optimization in a multicellular magnetotactic organism,” *Biophysical Journal*, vol. 92, no. 2, pp. 661–670, 2007.
- [40] M. Hanzlik, M. Winklhofer, and N. Petersen, “Pulsed-field-remanence measurements on individual magnetotactic bacteria,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 248, no. 2, pp. 258–267, 2002.

- [41] A. Cēbers and M. Ozols, “Dynamics of an active magnetic particle in a rotating magnetic field,” *Physical Review E*, vol. 73, no. 2, p. 021505, 2006.
- [42] H. L. de Barros and D. Acosta-Avalos, “A simple method to estimate the magnetic moment of magnetic micro-particles,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 320, no. 14, pp. e215–e217, 2008.
- [43] A. Bahaj, P. James, and F. Moeschler, “An alternative method for the estimation of the magnetic moment of non-spherical magnetotactic bacteria,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 32, no. 5, pp. 5133–5135, 1996.
- [44] Y. Pan, W. Lin, L. Tian, R. Zhu, and N. Petersen, “Combined approaches for characterization of an uncultivated magnetotactic coccus from Lake Miyun near Beijing,” *Geomicrobiology Journal*, vol. 26, no. 5, pp. 313–320, 2009.
- [45] C. Rosenblatt, F. F. T. de Araujo, and R. B. Frankel, “Light scattering determination of magnetic moments of magnetotactic bacteria,” *Journal of Applied Physics*, vol. 53, no. 3, pp. 2727–2729, 1982.
- [46] P. C. Logofătu, I. Ardelean, D. Apostol, I. Iordache, M. Bojan, C. Moiescu, and B. Ioniță, “Determination of the magnetic moment and geometrical dimensions of the magnetotactic bacteria using an optical scattering method,” *Journal of Applied Physics*, vol. 103, no. 9, p. 094911, 2008.
- [47] C. Rosenblatt, F. F. T. de Araujo, and R. B. Frankel, “Birefringence determination of magnetic moments of magnetotactic bacteria,” *Biophysical Journal*, vol. 40, no. 1, pp. 83–85, 1982.
- [48] N. Petersen, D. G. Weiss, and H. Vali, “Magnetic bacteria in lake sediments,” in *Geomagnetism and Palaeomagnetism*, pp. 231–241, Springer, 1989.
- [49] C. Zahn, S. Keller, M. Toro-Nahuelpan, P. Dorscht, W. Gross, M. Laumann, S. Gekle, W. Zimmermann, D. Schüler, and H. Kress, “Measurement of the magnetic moment of single magnetospirillum gryphiswaldense cells by magnetic tweezers,” *Scientific Reports*, vol. 7, no. 1, pp. 1–14, 2017.
- [50] R. B. Frankel, “Magnetic guidance of organisms,” *Annual Review of Biophysics and Bioengineering*, vol. 13, p. 85, 1984.
- [51] R. P. Blakemore, R. B. Frankel, and A. J. Kalmijn, “South-seeking magnetotactic bacteria in the southern hemisphere,” *Nature*, vol. 286, no. 5771, pp. 384–385, 1980.
- [52] C. T. Lefèvre, M. Bennet, L. Landau, P. Vach, D. Pignol, D. A. Bazylnski, R. B. Frankel, S. Klumpp, and D. Faivre, “Diversity of magneto-aerotactic behaviors and oxygen sensing mechanisms in cultured magnetotactic bacteria,” *Biophysical Journal*, vol. 107, no. 2, pp. 527–538, 2014.
- [53] S. Nakamura and T. Minamino, “Flagella-driven motility of bacteria,” *Biomolecules*, vol. 9, no. 7, p. 279, 2019.
- [54] Y. Gebremichael, G. S. Ayton, and G. A. Voth, “Mesoscopic modeling of bacterial flagellar microhydrodynamics,” *Biophysical journal*, vol. 91, no. 10, pp. 3640–3652, 2006.

- [55] W.-J. Zhang and L.-F. Wu, “Flagella and swimming behavior of marine magnetotactic bacteria,” *Biomolecules*, vol. 10, no. 3, p. 460, 2020.
- [56] F. Abreu, D. Acosta, and D. Bazyliniski, “Magnetotaxis,” *Biomedical Sciences*, 2018.
- [57] M. Holwill and R. Burge, “A hydrodynamic study of the motility of flagellated bacteria,” *Archives of Biochemistry and Biophysics*, vol. 101, no. 2, pp. 249–260, 1963.
- [58] J. Lighthill, “Helical distributions of stokeslets,” *Journal of Engineering Mathematics*, vol. 30, no. 1, pp. 35–78, 1996.
- [59] J. Higdon, “The hydrodynamics of flagellar propulsion: helical waves,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 94, no. 2, pp. 331–351, 1979.
- [60] M. Kim and T. R. Powers, “Hydrodynamic interactions between rotating helices,” *Physical Review E*, vol. 69, no. 6, p. 061910, 2004.
- [61] M. Kim and T. R. Powers, “Deformation of a helical filament by flow and electric or magnetic fields,” *Physical Review E*, vol. 71, no. 2, p. 021914, 2005.
- [62] M. Ramia, D. Tullock, and N. Phan-Thien, “The role of hydrodynamic interaction in the locomotion of microorganisms,” *Biophysical Journal*, vol. 65, no. 2, pp. 755–778, 1993.
- [63] A. T. Chwang and T. Y. Wu, “Hydromechanics of low-Reynolds-number flow. part 4. translation of spheroids,” *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 75, no. 4, pp. 677–689, 1976.
- [64] H. C. Crenshaw, “A new look at locomotion in microorganisms: rotating and translating,” *American Zoologist*, vol. 36, no. 6, pp. 608–618, 1996.
- [65] C. Zhen, K. Dali, Z. Keke, P. Yongxin, *et al.*, “On the swimming motion of spheroidal magnetotactic bacteria,” *Fluid Dynamics Research (Online)*, vol. 44, 2012.
- [66] D. Kong, Z. Cui, Y. Pan, and K. Zhang, “On the Papkovitch-Neuber formulation for Stokes flows driven by a translating/rotating prolate spheroid at arbitrary angles,” *Int. J. Pure Appl. Math*, vol. 75, pp. 455–483, 2012.
- [67] R. Johnson and C. Brokaw, “Flagellar hydrodynamics. a comparison between resistive-force theory and slender-body theory,” *Biophysical Journal*, vol. 25, no. 1, pp. 113–127, 1979.
- [68] C. T. Lefèvre, A. Bernadac, K. Yu-Zhang, N. Pradel, and L.-F. Wu, “Isolation and characterization of a magnetotactic bacterial culture from the mediterranean sea,” *Environmental Microbiology*, vol. 11, no. 7, pp. 1646–1657, 2009.
- [69] E. M. Purcell, “Life at low Reynolds number,” *American journal of physics*, vol. 45, no. 1, pp. 3–11, 1977.
- [70] J. Estévez-Fernández, “Deducción de la fuerza de Stokes a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes,” 2016.

- [71] O. Reynolds, “Xxix. an experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, no. 174, pp. 935–982, 1883.
- [72] F. R. M. M. Morales, *Aplicación de la ecuación de Boltzmann al movimiento de bacterias con agelos*. PhD thesis, Universidad Autónoma Metropolitana, Colombia., 2010.
- [73] H. Lamb, “Hydrodynamics, section 259,” *Dover, New York*, vol. 4, no. 18-42, p. 894, 1932.
- [74] A. Hindmarch, “Odepack: A systemized collection of ODE solvers,” *Scientific Computing*, pp. 55–64, 1982.
- [75] A. Kalmijn, “Biophysics of geomagnetic field detection,” *IEEE Transactions on Magnetics*, vol. 17, no. 1, pp. 1113–1124, 1981.
- [76] R. Diaz Sanchez, “Mecánica Analítica: Notas de clase.” (Documento inédito), Universidad Nacional de Colombia, 2012.