

# “MODELAGEM DO MOVIMENTO DE BACTÉRIAS MAGNETOTÁCTICAS COM UM ÚNICO FLAGELO INCLINADO”

**ELTON RODRIGUES DE SOUZA**

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:

Documento assinado digitalmente  
**gov.br** DANIEL ACOSTA AVALOS  
Data: 20/06/2024 20:43:59-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Daniel Acosta Avalos - Orientador/CBPF

Documento assinado digitalmente  
**gov.br** FERNANDA DE AVILA ABREU  
Data: 10/06/2024 15:51:26-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Fernanda de Avila Abreu - UFRJ

Documento assinado digitalmente  
**gov.br** BENJAMIN RACHE SALLES  
Data: 04/06/2024 15:18:46-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Benjamin Rache Salles – UFRJ

Rio de Janeiro, 23 de maio de 2024.



Dissertação de Mestrado

**MODELAGEM DO MOVIMENTO DE BACTÉRIAS  
MAGNETOTÁCTICAS COM UM ÚNICO FLAGELO INCLINADO**

Elton Rodrigues



Dissertação de Mestrado

**MODELAGEM DO MOVIMENTO DE BACTÉRIAS  
MAGNETOTÁCTICAS COM UM ÚNICO FLAGELO INCLINADO**

Elton Rodrigues

Dissertação submetida à Coordenação de Formação Científica do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas como requisito para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador. Dr. Daniel Acosta-Avalos

## **DEDICATÓRIA**

Aos meus filhos e esposa, fontes de amor e inspiração.

## **AGRADECIMENTOS**

A meu orientador, Daniel Acosta-Avalos, pelo hábil trabalho de orientação, demonstrando que é um grande incentivador. Também gostaria de agradecê-lo pela paciência excepcional diante das minhas limitações.

A Henrique Lins de Barros, pelas inúmeras conversas estimulantes sobre biofísica, matemática e aviação.

Ao programa de pós-graduação do CBPF, pela qualidade e cuidado diante da formação dos seus alunos.

“Mas daí resultaria também que o nosso pensamento lógico, sob sua forma puramente lógica, é incapaz de representar a verdadeira natureza da vida, o significado profundo do movimento evolutivo”

*(Henri Bergson)*

## RESUMO

Bactérias magnetotáticas são microrganismos que biomineralizam nanopartículas magnéticas de magnetita ou greigita dentro de uma membrana. O conjunto membrana mais nanopartícula é chamado de magnetossomo e eles ficam organizados em cadeias no interior da bactéria, conferindo um momento magnético ao corpo bacteriano. Através deste momento magnético a bactéria magnetotática interage com o campo geomagnético através de um torque, o que vai produzir efeitos no movimento da bactéria em função do campo magnético externo. Alguns modelos de movimento têm sido propostos. O mais simples de todos considera uma bactéria esférica com um único flagelo alinhado ao diâmetro da esfera e ao momento magnético. Neste modelo as trajetórias resultantes são hélices cilíndricas simples com uma única frequência. Porém, as trajetórias observadas experimentalmente mostram duas frequências de oscilação. O objetivo da presente dissertação é modificar o modelo simples, introduzindo uma inclinação do flagelo, relativa ao diâmetro do corpo bacteriano, para observar se as trajetórias se modificam, apresentando duas frequências de oscilação. Para isto foram reescritas as equações de movimento, introduzindo a inclinação do flagelo nas equações da força e do torque flagelar. As equações resultantes foram resolvidas numericamente usando a linguagem Python. Nas soluções numéricas pode ser observado que para inclinações até  $5^\circ$  a trajetória começa a mostrar duas frequências, sendo uma hélice de frequência maior com eixo oscilando numa hélice de frequência menor. Ambas as frequências estão relacionadas com a frequência de batimento flagelar: a soma de ambas é igual à frequência do flagelo. Outra característica observada é que a velocidade axial diminui tanto em função do campo magnético como em função da inclinação flagelar. Em função do campo magnético, se observa que para os valores baixos analisados (0,5; 1 e 2 Oe), os valores dos parâmetros são semelhantes e mudam fortemente para os valores maiores (4; 8 e 10 Oe). Os resultados obtidos mostram que uma modificação simples no modelo de movimento, que é a consideração de uma inclinação no flagelo, produz resultados semelhantes aos observados experimentalmente.

## ABSTRACT

Magnetotactic bacteria are microorganisms that biomineralize magnetic nanoparticles of magnetite or greigite within a membrane. The membrane plus nanoparticle assembly is called a magnetosome and they are organized in chains inside the bacteria, providing a magnetic moment to the bacterial body. Through this magnetic moment, the magnetotactic bacteria interacts with the geomagnetic field through a torque, which will produce effects on the movement of the bacteria depending on the external magnetic field. Some movement models have been proposed. The simplest of all considers a spherical bacterium with a single flagellum aligned with the sphere's diameter and magnetic moment. In this model, the resulting trajectories are simple cylindrical helices with a single frequency. However, the experimentally observed trajectories show two oscillation frequencies. The objective of this dissertation is to modify the simple model, introducing an inclination of the flagellum, relative to the diameter of the bacterial body, to observe whether the trajectories change, presenting two oscillation frequencies. For this purpose, the equations of motion were rewritten, introducing the inclination of the flagellum into the flagellar force and torque equations. The resulting equations were solved numerically using the Python language. In the numerical solutions it can be observed that for inclinations up to  $5^\circ$  the trajectory begins to show two frequencies, with a higher frequency helix with an axis oscillating in a lower frequency helix. Both frequencies are related to the flagellar beating frequency: the sum of both is equal to the flagellum frequency. Another characteristic observed is that the axial velocity decreases both as a function of the magnetic field and as a function of the flagellar inclination. Depending on the magnetic field, it is observed that for the low values analyzed (0.5; 1 and 2 Oe), the parameter values are similar and change strongly for higher values (4; 8 and 10 Oe). The results obtained show that a simple modification in the movement model, which is the consideration of an inclination in the flagellum, produces results like those observed experimentally.

## Sumário

CAPÍTULO 1: INTRODUÇÃO .....	9
1.1 MOVIMENTO DE MICROORGANISMOS .....	9
1.2 NÚMERO DE REYNOLDS E MICROORGANISMOS .....	10
1.3 HIDRODINÂMICA .....	12
1.4 MECANISMOS DE MOVIMENTO .....	13
1.5 MAGNETOTAXIA .....	14
CAPÍTULO 2: MODELO DE MOVIMENTO SIMPLES .....	16
2.1 INTRODUÇÃO MATEMÁTICA .....	16
2.2 MODELO PROPOSTO (NOGUEIRA E LINS DE BARROS 1995) .....	16
2.2.1 ROTAÇÃO DO CORPO CELULAR .....	17
2.2.2 TRANSLAÇÃO DO CORPO CELULAR .....	19
CAPÍTULO 3: MODELO SIMPLES MODIFICADO .....	25
CAPÍTULO 4: RESULTADOS DA SOLUÇÃO NUMÉRICA.....	28
4.1 SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA AS COORDENADAS $x, y, z$ .....	29
4.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA OS ÂNGULOS DE EULER .....	30
4.3 VARIAÇÃO DO CAMPO MAGNÉTICO E DO ÂNGULO $\delta$ .....	31
4.3.1 COORDENADAS $x, y, z$ .....	31
4.3.1.1 AMPLITUDES $A_{x1}, A_{x2}, A_{y1}$ e $A_{y2}$ .....	31
4.3.1.2 FREQUÊNCIAS $f_{x1}, f_{x2}, f_{y1}$ e $f_{y2}$ .....	33
4.3.1.3 PARÂMETROS $V_z, A_z$ e $f_z$ .....	33
4.3.2 COORDENADAS $\phi, \psi, \theta$ .....	35
4.4 VARIAÇÃO DAS FORÇAS FLAGELARES .....	37
4.4.1 COORDENADAS $x, y, z$ .....	37
CAPÍTULO 5 DISCUSSÃO .....	45
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	48
ANEXO 1: CÓDIGO FONTE NA LINGUAGEM DE PROGRAMAÇÃO PYTHON PARA A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE MOVIMENTO .....	52
ANEXO 2: PARÂMETROS DAS COORDENADAS $x$ E $y$ EM FUNÇÃO DE $\beta$ E $\delta$ .....	62
ANEXO 3: PARÂMETROS DA COORDENADA $z$ EM FUNÇÃO DE $\beta$ E $\delta$ .....	63
ANEXO 4: PARÂMETROS DAS COORDENADAS ANGULARES EM FUNÇÃO DE $\beta$ E $\delta$ .....	64
ANEXO 5: PARÂMETROS DAS COORDENADAS $x$ E $y$ EM FUNÇÃO DE $F_{12}/F_3$ .....	65
ANEXO 6: PARÂMETROS DA COORDENADA $z$ EM FUNÇÃO DE $F_{12}/F_3$ .....	65
ANEXO 7: PARÂMETROS DAS COORDENADAS ANGULARES EM FUNÇÃO DE $F_{12}/F_3$ .....	65

# CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

## 1.1 – Movimento de microrganismos

O movimento (motilidade) de um ser vivo, que é definido como a habilidade de um organismo mudar sua localização espacial em função do tempo, é uma característica fundamental da vida, impulsionado por processos que dependerão das particularidades do ser vivo e do meio no qual ele se encontra (Nathan et al., 2008). Diversos organismos obtêm, processam e utilizam informações externas, selecionando onde e/ou quando se deslocar. Os organismos movem-se em seus ambientes em busca de comida, parceiros, temperatura adequada, pH correto, luz solar e muitos outros fatores importantes para a vida. A probabilidade de uma busca bem-sucedida é amplificada se o organismo for capaz de se orientar para os estímulos apropriados (Crenshaw, 1996). O movimento dos organismos, portanto, tem sido amplamente estudado para entender os mecanismos fisiológicos subjacentes ao movimento e as consequências ecológicas das distribuições resultantes desses organismos. Além disso, um entendimento mais consistente sobre os mecanismos e repercussões do movimento dos seres vivos é fundamental para a recuperação da história evolutiva dos seres, restauração de áreas degradadas, controle de pragas e de espécies exóticas e para aplicações médicas e biotecnológicas mais eficientes. Por essa razão, o estudo do movimento dos seres vivos é de interesse de inúmeras áreas do conhecimento, o que ocasiona um grande número de publicações (Holyoaka et al., 2008).

Já o estudo do movimento dos microrganismos é um caso específico da investigação do movimento de seres vivos, por apresentar aspectos distintos no que diz respeito, principalmente, à morfologia, filogenia e à influência do meio no deslocamento desses indivíduos. Enquanto os estudos da orientação de animais terrestres ou bentônicos são realizados, quase que exclusivamente, em duas dimensões, sem grandes prejuízos para a compreensão do fenômeno, porque o movimento na terceira dimensão (geralmente vertical ou paralelo quanto à ação da gravidade) é uma pequena componente de seu movimento, essa simplificação pode obscurecer importantes aspectos da orientação de microrganismos. Isso é particularmente verdadeiro para microrganismos que nadam livremente. O movimento desses microrganismos é verdadeiramente tridimensional (3D), pois os eixos ou planos de movimento preferidos não são óbvios (Crenshaw, 1996).

Segundo Jahn e Bovee (1965), “É certo que a mecânica e a química da locomoção [dos microrganismos] são regidas interna e externamente pelas leis termodinâmicas e hidrodinâmicas, e, portanto, suas verdadeiras descrições devem ser lógicas. Em suma, os organismos devem se mover de acordo com os princípios práticos de engenharia, mesmo que a aplicação de alguns desses princípios a microrganismos seria surpreendente para a maioria dos engenheiros. Nosso dever é determinar esses princípios.”

## 1.2 – Número de Reynolds e microrganismos

O número de Reynolds é a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas. O número de Reynolds é um número adimensional usado para categorizar os sistemas de fluidos em que o efeito da viscosidade é importante para controlar as velocidades ou o padrão de fluxo de um fluido (Rehm et al., 2008). Matematicamente, o número de Reynolds,  $Re$ , é definido como

$$Re = \frac{\rho v d}{\mu} \quad (1.1)$$

onde

$\rho$  = densidade do fluido;

$v$  = velocidade de escoamento;

$d$  = dimensão característica envolvida no escoamento, por exemplo, o diâmetro do tubo, ou de uma esfera posta no fluido etc;

$\mu$  = viscosidade do fluido.

Assim, o número de Reynolds pode ser interpretado como a razão entre forças inerciais ( $\rho v$ ) e forças viscosas ( $\mu/d$ ). O fluxo laminar é então caracterizado pelo domínio das forças de natureza viscosa, enquanto o regime turbulento caracteriza-se pelo predomínio de forças inerciais. A figura abaixo ilustra a transição entre o fluxo laminar e o fluxo turbulento para a fumaça de uma vela. Próxima do pavio, ainda com velocidade baixa, a fumaça sobe em escoamento laminar, mas à medida que a velocidade aumenta (e consequentemente o número de Reynolds), devido à aceleração causada pelo empuxo do ar, atinge-se finalmente o regime turbulento.



Figura 1.1 – Transição de fases no escoamento da fumaça de uma vela. Fonte: Simonkr, Istock, 2019.

Algumas características do número de Reynolds podem ser observadas na tabela 1.1. Nesta tabela é apresentada uma relação entre o tamanho dos animais, suas velocidades médias e o número de Reynolds. A densidade e a viscosidade utilizadas são da água, i.e.,  $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$  e  $\mu = 1 \text{ mPa}\cdot\text{s}$  ou do ar, i.e.,  $\rho = 1.2 \text{ kg/m}^3$  e  $\mu = 0.018 \text{ mPa}\cdot\text{s}$  (Vogel, 1994). É possível observar uma redução no número de Reynolds partindo de um valor extremamente alto, no exemplo da baleia, até chegar em um valor extremamente baixo, no caso do nado de uma bactéria. No caso da baleia, os efeitos inerciais são dominantes. Dessa forma, quando a baleia para de nadar, ela continua a se mover por um tempo e por uma distância consideráveis. Já no caso da bactéria, por outro lado, os efeitos inerciais são irrelevantes, quando comparados com os efeitos viscosos. Por conseguinte, a bactéria irá parar quase que instantaneamente, percorrendo uma distância na ordem de  $10^{-9} \text{ m}$  (Berg, 1993).

Consequentemente, o padrão de movimento dos microrganismos encontrados na natureza sempre será determinado por seu estado presente, sendo o seu estado passado irrelevante. Isto é, a visão newtoniana de que devemos fornecer duas condições iniciais para determinar o movimento de um objeto não é válida no mundo das bactérias e outros microrganismos (Purcell, 1977). A única condição inicial necessária é a localização inicial.

	<b>Número de Reynolds</b>
Uma grande baleia nadando a 10 m/s	300.000.000
Um atum nadando com a mesma velocidade	30.000.000
Um pato voando a 20 m/s	300.000
Uma grande libélula indo a 7 m/s	30.000
Um copépode a uma velocidade de 0.2 m/s	300
O bater de asas de um pequeno inseto voador	30
Uma larva, com 0.3 mm de comprimento, a 1 mm/s	0.3
Espermatozoide de ouriço do mar a 0.2 mm/s	0.03
Uma bactéria, nadando a 0.01 mm/s	0.00001

Tabela 1.1 – Espectro de números de Reynolds para organismos autônomos. Fonte: Vogel, S. (1994) *Life in Moving Fluids*, Princeton University Press, Princeton.

### 1.3 – Hidrodinâmica

Foi observado que no caso de microrganismos nadando em água, o número de Reynolds é da ordem de  $10^{-5}$ . Em hidrodinâmica é possível identificar que nesse regime a força de atrito viscoso que age sobre os corpos é proporcional às suas velocidades. Nesse sentido, torna-se necessário apresentar a equação de Navier-Stokes para um fluido incompressível.

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\nabla\rho + \mu\nabla^2\mathbf{v} \quad (1.2)$$

Para movimentos em baixos números de Reynolds, podemos aproximar os termos  $\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$  e  $\rho(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}$  a zero. Assim, para  $Re \ll 1$ , temos:

$$0 = -\nabla\rho + \mu\nabla^2\mathbf{v} \quad (1.3)$$

A equação acima é conhecida como equação de Stokes e um fluxo em baixo número de Reynolds é chamado de fluxo de Stokes. Esta equação indica que um fluxo nesse regime é independente do tempo, isto é, dadas as condições de contorno do fluxo de Stokes, o fluxo pode ser encontrado sem conhecimento das características do fluxo em outro

instante. Além disso, a equação de Stokes é linear, o que significa que a resposta de um fluxo de Stokes será proporcional às forças aplicadas a ele.

Um outro tópico de interesse no que se refere ao movimento de microrganismos é o estudo dos mecanismos de propulsão. Existem diversos meios de propulsão, como cílios, flagelos e pseudópode. A capacidade de movimentar-se é uma etapa importante da evolução, visto que esses organismos podem, por exemplo, buscar regiões mais favoráveis para a sua adaptabilidade e sobrevivência. Neste trabalho, enfatizaremos o estudo da propulsão por flagelos.

#### **1.4 – Mecanismos de movimento**

O estudo dos microrganismos não é recente, como pode ser demonstrado a partir da publicação de Jennings (1901), um trabalho do início do século XX, e de diversas referências utilizadas por Crenshaw (1990).

A motilidade bacteriana é um tema extremamente intrigante sob vários aspectos científicos. Compreender o movimento das bactérias auxilia, por exemplo, ao entendimento dos princípios físicos envolvidos na conversão de energia, geração de força e mecanismos de acoplamento mecanoquímicos (Ishikawa, 2011).

O flagelo bacteriano é uma organela filamentosa helicoidal responsável pela motilidade da bactéria. São os flagelos, em movimentos rotatórios, que impulsionam as bactérias que possuem flagelos no exterior da célula.

O motor flagelar bacteriano é alimentado pelo gradiente eletroquímico transmembrana de íons, o qual corresponde com uma força motriz iônica que gira o filamento flagelar para gerar impulso, impulsionando o corpo celular. A frequência máxima do motor flagelar atinge 300 Hz em *Escherichia coli* e salmonella (Chen, 2000) e 1700 Hz na bactéria marinha *Vibrio alginolyticus* (Magariyama, 1994). Assim, a velocidade de rotação do motor flagelar é muito maior do que a de um motor de carro (um motor de carro de Fórmula 1 possui rotação entre 180 e 200 Hz). O motor flagelar é composto por um rotor e várias unidades de estator. Cada unidade do estator atua como um canal iônico transmembrana para conduzir cátions como prótons (H<sup>+</sup>) ou íons de sódio (Na<sup>+</sup>), gerando força no rotor (Morimoto, 2014; Minamino, 2018).

Medições precisas da rotação são importantes para elucidar o mecanismo de geração de torque do motor flagelar. A evidência direta de que o flagelo bacteriano é um motor

rotativo é obtida a partir de um experimento chamado de “célula amarrada”, em livre tradução, em que o corpo da célula gira enquanto o filamento está amarrado a uma superfície de vidro (Silverman, 1974).

### **1.5 – Magnetotaxia**

Várias espécies animais interagem, de alguma forma, com o campo magnético terrestre, sendo um importante fator de adaptação (Kirschvink, 1985). A magnetorecepção em bactérias e vertebrados foi claramente comprovada, para ambos os grupos, durante o mesmo período, no final da década de 1970 (Blakemore, 1975; Walcott, 1979; Gould, 1978; Frankel, 1979). Enquanto a magnetorecepção é o sentido pelo qual os organismos se geolocalizam e navegam em resposta às linhas do campo magnético da Terra, a magnetotaxia é, como o nome indica, a orientação a partir de um estímulo magnético, não significando que o estímulo magnético seja o único responsável pela orientação ou movimentação desses organismos. A magnetotaxia corresponde com a orientação passiva do corpo celular relativa às linhas do campo magnético, o que permite a orientação de nado de vários microorganismos (bactérias, procariotos multicelulares, algas etc.), sendo o eixo de movimento paralelo às linhas do campo magnético o que permite uma velocidade de migração muito elevada. Em alguns casos esta velocidade pode atingir valores maiores que 200  $\mu\text{m/s}$ . A migração rápida é um fator importante na escala microscópica (Margato et al., 2007).

Vários mecanismos estão supostamente envolvidos na magnetorecepção dos vertebrados; entre eles estão um magnetorreceptor baseado em magnetita, uma reação de transferência de elétrons conduzida por luz em fotorreceptores e indução eletromagnética por eletorreceptores (Nordmann et al., 2017). No entanto, apenas um mecanismo é conhecido em microorganismos: a biomineralização de nanoímãs permanentes em bactérias, dentro de organelas específicas chamadas magnetossomos (Monteil e Lefevre, 2019). O magnetossomo é formado por uma membrana lipídica que contém no seu interior uma nanopartícula magnética. Os magnetossomos se encontram organizados em cadeias dentro do citoplasma bacteriano. Isto é possível porque as membranas dos magnetossomos se ligam a filamentos proteicos do citoesqueleto os quais mantêm os magnetossomos enfileirados. Esta cadeia de magnetossomos vai funcionar como a agulha magnetizada de uma bússola: a cadeia confere um momento magnético ao corpo bacteriano e nele age o torque magnético que produz a orientação passiva do corpo da bactéria com as linhas do campo magnético (Figura 1.2). O momento magnético de uma

bactéria magnetotática pode ser da ordem de  $1,5 \times 10^{-15} \text{ Am}^2$  (medido em *Magnetospirillum magnetotacticum*, cepa MS1) até  $8 \times 10^{-15} \text{ Am}^2$  (determinado numa bactéria magnetotática com forma de coco, da Lagoa Rodrigo de Freitas, Rio de Janeiro).

Os cristais magnéticos usualmente encontrados em bactérias magnetotáticas são os formados por magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) ou greigita ( $\text{Fe}_3\text{S}_4$ ) (Lefèvre e Bazylinski, 2013). Embora os cristais de magnetita e greigita possam ter diferentes morfologias, ambos os minerais estão, geralmente, dentro da faixa de tamanho de domínio magnético único (monodomínio magnético), isto é, de 35 a 120 nm, na qual eles têm o maior momento magnético possível por unidade de volume (Bazylinski, 2004). As bactérias magnéticas foram descritas pela primeira vez por Salvatore Bellini, em 1963, a partir de água doce coletada em diferentes ambientes da Pavia, comuna italiana da região da Lombardia (Bellini, 2009a; Bellini, 2009b). Porém, Salvatore Bellini não conseguiu publicar sua descoberta. A primeira publicação oficial comunicando o descobrimento das bactérias magnetotáticas foi feito pelo Richard Blakemore em 1975 (Blakemore, 1975). Acredita-se que a magnetotaxia, em conjunto com a quimiotaxia, seja uma forma eficiente de localização e manutenção de uma posição ótima em gradientes verticais de concentração química apropriada para as bactérias magnéticas, reduzindo um problema tridimensional para uma única dimensão (Frankel, 1997). Ou seja, o campo geomagnético age como fator seletivo.

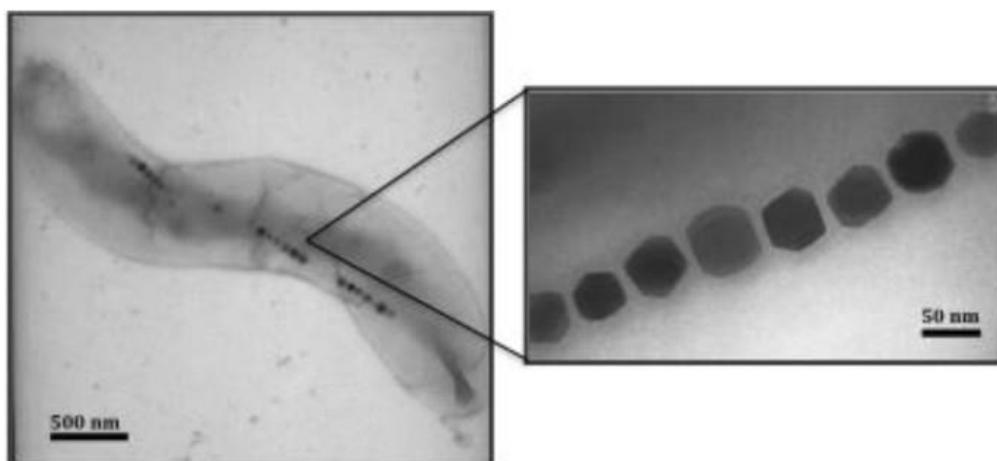


Figura 1.2 – Cadeia de nanoímãs em uma bactéria magnética. Fonte: Dieudonné, A., Pignol, D. & Prévéral, S. Magnetosomes: biogenic iron nanoparticles produced by environmental bacteria. *Appl Microbiol Biotechnol* 103, 3637–3649 (2019). <https://doi.org/10.1007/s00253-019-09728-9>

## CAPÍTULO 2 – MODELO DE MOVIMENTO SIMPLES

### 2.1 – Introdução Matemática

O movimento dos microrganismos é caracterizado pela condição de baixo número de Reynolds (capítulo 1). Devido ao flagelo, a força resultante sobre o corpo celular gera uma trajetória helicoidal. O torque gerado pela rotação do flagelo, girando a uma frequência  $\omega$ , no sentido anti-horário, fará que o corpo gire com uma frequência  $\gamma < \omega$ , no sentido horário. Como as forças viscosas dominam, pela condição de baixo número de Reynolds, o torque sobre o corpo celular é proporcional à sua velocidade angular. Além disso, o movimento flagelar imprime uma velocidade  $\mathbf{v}$  ao centro de massa do corpo celular. Por conseguinte, a força que impulsiona a bactéria é proporcional à sua velocidade de translação. Um flagelo completamente simétrico não é consistente com as trajetórias helicoidais (Shum e Gaffney, 2012). Para que haja trajetória helicoidal é necessário que a força resultante precesse em torno do centro de massa. E isso só é possível se existirem, além das forças que resultem na translação do corpo celular, forças que produzam torque.

### 2.2 – Modelo Proposto (Nogueira e Lins de Barros, 1995)

No artigo de Acosta-Avalos e Rodrigues (2019) é analisado o modelo proposto por Nogueira e Lins de Barros (1995), onde é considerado uma bactéria esférica com raio  $R$ , de centro  $O$ , com a rotação flagelar responsável pela propulsão da bactéria, devida à força  $\mathbf{F}$ , que atua em um ponto fixo  $P$ .

A força  $\mathbf{F}$  é decomposta em  $\mathbf{F}_3$  e  $\mathbf{F}_{12}$ .  $\mathbf{F}_3$  é a componente longitudinal, com direção ao longo daquela que a bactéria seguiria caso não houvesse simetria. Podemos definir essa direção como sendo a mesma do segmento  $OP$ . Já  $\mathbf{F}_{12}$  é a componente perpendicular, ou transversal, ao segmento  $OP$ , que também age no ponto  $P$ . O momento magnético  $\mathbf{m}$  é considerado como paralelo ao segmento  $OP$  (Figura 2.1). Finalmente, foi considerado que a bactéria nada em um meio com viscosidade  $\eta$ .

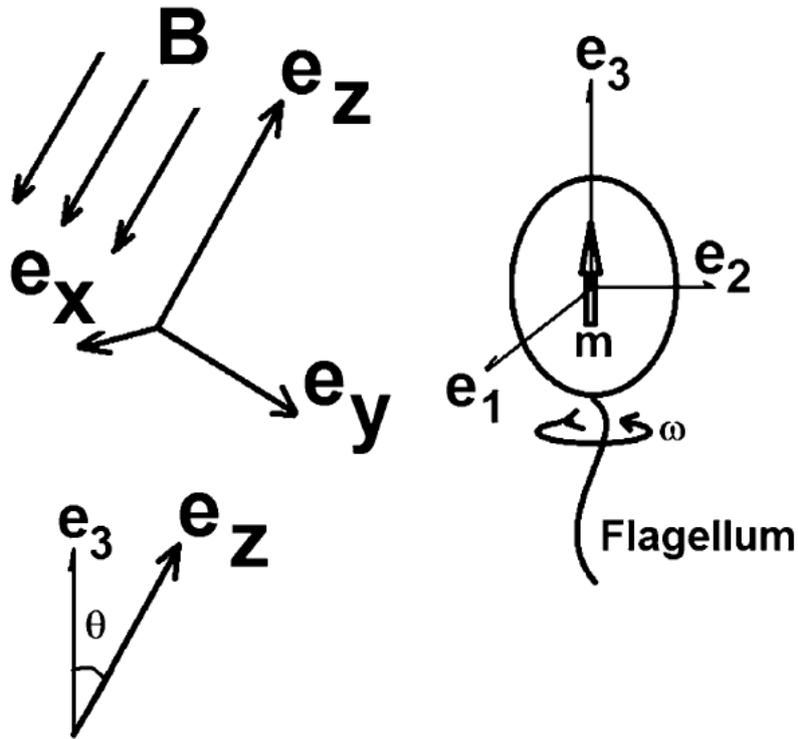


Figura 2.1: Representação esquemática do sistema de referência utilizado no modelo teórico para movimento de bactérias magnetotáticas. A bactéria magnetotática é assumida como esferoidal, com um único flagelo girando com velocidade angular  $\omega$  e um momento magnético  $m$  fixo no centro do corpo bacteriano e orientado paralelamente ao flagelo.  $e_1, e_2$  e  $e_3$  são vetores ortonormais fixados ao corpo bacteriano.  $e_x, e_y$  e  $e_z$  são vetores ortonormais fixados no laboratório. O campo magnético aplicado  $B$  é direcionado na direção  $-e_z$ . O ângulo de Euler  $\theta$  é o ângulo entre  $e_3$  e  $e_z$ . Fonte: Acosta-Avalos e Rodrigues (2019)

Seis coordenadas são utilizadas para descrever o movimento geral da bactéria. Três dessas coordenadas descrevem a rotação, a partir do referencial do centro de massa, considerando que esse esteja em repouso, e três coordenadas descrevem a translação do centro de massa com respeito a uma referencial inercial.

### 2.2.1 – Rotação do Corpo Celular

Desprezando efeitos inerciais, as equações do movimento no referencial do centro de massa são dadas, em forma vetorial, por

$$N_C + N_T + N_\eta + N_m = \mathbf{0} \quad (2.1)$$

Na equação acima,  $\mathbf{N}_C$  representa o torque de reação sobre o corpo celular devido ao torque que gera a rotação flagelar com frequência igual a  $\omega$ .  $\mathbf{N}_T$  representa o torque produzido pela componente  $\mathbf{F}_{12}$ .  $\mathbf{N}_\eta$  é o torque viscoso e  $\mathbf{N}_m$  é o torque magnético.

Considerando o flagelo girando com uma frequência angular constante  $\omega$ , o torque de reação tem módulo constante igual a

$$\mathbf{N}_C = -|\mathbf{N}_C|\mathbf{e}_3 \quad (2.2)$$

onde  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  é um conjunto de vetores unitários associados com um conjunto de eixos ortogonais,  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ , fixos no corpo celular, cuja origem está no centro de massa  $O$ .  $\mathbf{e}_3$  é tomado como colinear ao segmento  $OP$ .

Assumindo que as assimetrias do flagelo não mudam com o tempo, isto é, que permanece rígido, e que  $\mathbf{F}_{12}$  gira com frequência angular  $\omega$  constante em um plano perpendicular ao segmento  $OP$ , a força transversal terá módulo constante igual a

$$\mathbf{F}_{12} = |\mathbf{F}_{12}|(\cos \omega t \mathbf{e}_1 + \sin \omega t \mathbf{e}_2) \quad (2.3)$$

$\mathbf{F}_{12}$  é aplicada no ponto  $P$ , que pode ser definido por  $\mathbf{R} = R\mathbf{e}_3$ . Dessa forma,

$$\mathbf{N}_T = \mathbf{R} \times \mathbf{F}_{12} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{N}_T = R|\mathbf{F}_{12}|(-\sin \omega t \mathbf{e}_1 + \cos \omega t \mathbf{e}_2) \quad (2.5)$$

onde  $|\mathbf{N}_T| = R|\mathbf{F}_{12}|$  é constante.

O torque viscoso,  $\mathbf{N}_\eta$ , é uma consequência do atrito viscoso rotacional sobre o corpo celular esférico. Para uma esfera rotacionando em baixo número de Reynolds (Landau e Lifshitz, 1989), o torque viscoso será igual a

$$\mathbf{N}_\eta = -8\pi\eta R^3 \boldsymbol{\Omega} \quad (2.6)$$

onde  $\boldsymbol{\Omega}$  é o vetor velocidade angular do corpo celular, cujas componentes são escritas, em termos dos ângulos de Euler (Goldstein, 1980), como

$$\omega_1 = \dot{\varphi} \sin \theta \sin \psi + \dot{\theta} \cos \psi \quad (2.7)$$

$$\omega_2 = \dot{\varphi} \sin \theta \cos \psi - \dot{\theta} \sin \psi \quad (2.8)$$

$$\omega_3 = \dot{\varphi} \cos \theta + \dot{\psi} \quad (2.9)$$

Para o cálculo de  $\mathbf{N}_m$  é necessário assumir um campo magnético externo  $\mathbf{B}$ . Se  $(x, y, z)$  é um conjunto de eixos ortogonais representando um referencial inercial onde a translação

do centro de massa é especificada, não há perda de generalidade assumir  $\mathbf{B}$  alinhado à direção  $z$ .

Então,

$$\mathbf{m} = |\mathbf{m}|\mathbf{e}_3 \quad (2.10)$$

$$\mathbf{B} = -|\mathbf{B}|\mathbf{e}_z \quad (2.11)$$

Resultando no torque magnético igual a

$$\mathbf{N}_m = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = |\mathbf{m}||\mathbf{B}|\mathbf{e}_n \quad (2.12)$$

onde  $\mathbf{e}_n$  é um vetor unitário cuja direção é ao longo da linha de nós

$$\mathbf{e}_n = \cos \psi \mathbf{e}_1 - \sin \psi \mathbf{e}_2 \quad (2.13)$$

Fazendo as devidas substituições, temos:

$$\omega_1 = -\alpha \sin \omega t + \beta \sin \theta \cos \psi \quad (2.14)$$

$$\omega_2 = \alpha \cos \omega t - \beta \sin \theta \sin \psi \quad (2.15)$$

$$\omega_3 = -\gamma \quad (2.16)$$

onde

$$\alpha = \frac{|\mathbf{N}_t|}{8\pi\eta R^3} \quad (2.17)$$

$$\beta = \frac{|\mathbf{m}||\mathbf{B}|}{8\pi\eta R^3} \quad (2.18)$$

$$\gamma = \frac{|\mathbf{N}_c|}{8\pi\eta R^3} \quad (2.19)$$

Resolvendo as equações de  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  para as velocidades angulares  $\dot{\phi}, \dot{\theta}$  e  $\dot{\psi}$ , obtemos

$$\dot{\phi} = \alpha \csc \theta \cos(\omega t + \psi) \quad (2.20)$$

$$\dot{\theta} = \beta \sin \theta - \alpha \sin(\omega t + \psi) \quad (2.21)$$

$$\dot{\psi} = -\gamma - \alpha \cot \theta \cos(\omega t + \psi) \quad (2.22)$$

## 2.2.2 – Translação do Corpo Celular

Ainda desprezando os efeitos inerciais, a equação de Newton para a translação do corpo celular será

$$\mathbf{F}_3 + \mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_\eta = \mathbf{0} \quad (2.23)$$

onde  $\mathbf{F}_\eta$  é a força viscosa. Para uma esfera, pela lei de Stokes (Landau e Lifshitz, 1987),

$$\mathbf{F}_\eta = -6\pi\eta R\mathbf{v} \quad (2.24)$$

sendo  $\eta$  a viscosidade do líquido,  $R$  o raio da bactéria e  $\mathbf{v}$  é o vetor velocidade, cujas componentes são  $\dot{x}$ ,  $\dot{y}$  e  $\dot{z}$ .

Dessa forma, a equação 2.23 pode ser reescrita como:

$$|\mathbf{F}_3|\mathbf{e}_3 + |\mathbf{F}_{12}|(\cos \omega t \mathbf{e}_1 + \sin \omega t \mathbf{e}_2) = 6\pi\eta R\mathbf{v} \quad (2.25)$$

$$\mathbf{v} = \frac{|\mathbf{F}_{12}|(\cos \omega t \mathbf{e}_1 + \sin \omega t \mathbf{e}_2)}{6\pi\eta R} + \frac{|\mathbf{F}_3|\mathbf{e}_3}{6\pi\eta R} = \dot{x}\mathbf{e}_x + \dot{y}\mathbf{e}_y + \dot{z}\mathbf{e}_z \quad (2.26)$$

$$\mathbf{v} = v_{12}(\cos \omega t \mathbf{e}_1 + \sin \omega t \mathbf{e}_2) + v_3\mathbf{e}_3 \quad (2.27)$$

com

$$v_{12} = \frac{F_{12}}{6\pi\eta R} \quad (2.28)$$

e

$$v_3 = \frac{F_3}{6\pi\eta R} \quad (2.29)$$

O movimento do centro de massa pode ser escrito a partir do sistema fixo no referencial do laboratório, utilizando a equação 2.26, fazendo as devidas transformações do sistema  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  para o sistema  $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ . Para isso, usaremos a transformação dada por (Goldstein, 1980):

$$\mathbf{e}_1 = (\cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi)\mathbf{e}_x + (\cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi)\mathbf{e}_y + (\sin \psi \sin \theta)\mathbf{e}_z \quad (2.30)$$

$$\mathbf{e}_2 = (-\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi)\mathbf{e}_x + (-\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi)\mathbf{e}_y + (\cos \psi \sin \theta)\mathbf{e}_z \quad (2.31)$$

$$\mathbf{e}_3 = (\sin \theta \sin \varphi)\mathbf{e}_x - (\sin \theta \cos \varphi)\mathbf{e}_y + (\cos \theta)\mathbf{e}_z \quad (2.32)$$

Assim, segundo Nogueira e Lins de Barros (1995) e Acosta-Avalos e Rodrigues (2019), temos:

$$\dot{x} = v_{12}[\cos \varphi \cos(\omega t + \psi) - \sin \varphi \cos \theta \sin(\omega t + \psi)] + v_3 \sin \varphi \sin \theta \quad (2.33)$$

$$\dot{y} = v_{12}[\sin \varphi \cos(\omega t + \psi) + \cos \varphi \cos \theta \sin(\omega t + \psi)] - v_3 \cos \varphi \sin \theta \quad (2.34)$$

$$\dot{z} = v_{12} \sin \theta \sin(\omega t + \psi) + v_3 \cos \theta \quad (2.35)$$

Dessa forma, é possível obter a trajetória da bactéria com seis equações diferenciais de primeira ordem e acopladas, que somente podem ser resolvidas numericamente. A solução numérica encontrada por Nogueira e Lins de Barros (1995) e Acosta-Avalos e Rodrigues (2019) corresponde visualmente a uma hélice cilíndrica, cujo eixo é paralelo com as linhas do campo magnético (Figura 2.2)

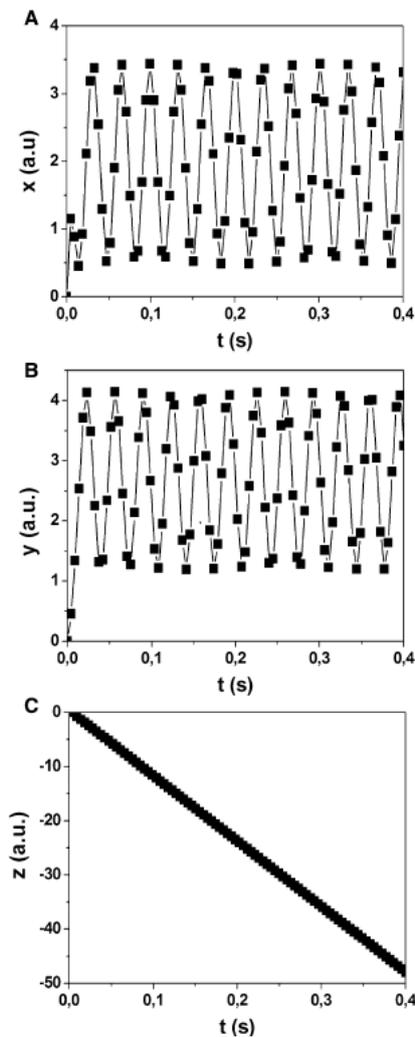


Figura 2.2: Solução numérica para as coordenadas  $x$ ,  $y$ ,  $z$  nas equações 2.33, 2.34 e 2.35. Fonte: Acosta-Avalos e Rodrigues (2019).

Porém, Acosta-Avalos e Rodrigues (2019) observaram que após um tempo os ângulos de Euler adquirem um comportamento uniforme, como pode ser observado na Figura 2.3.

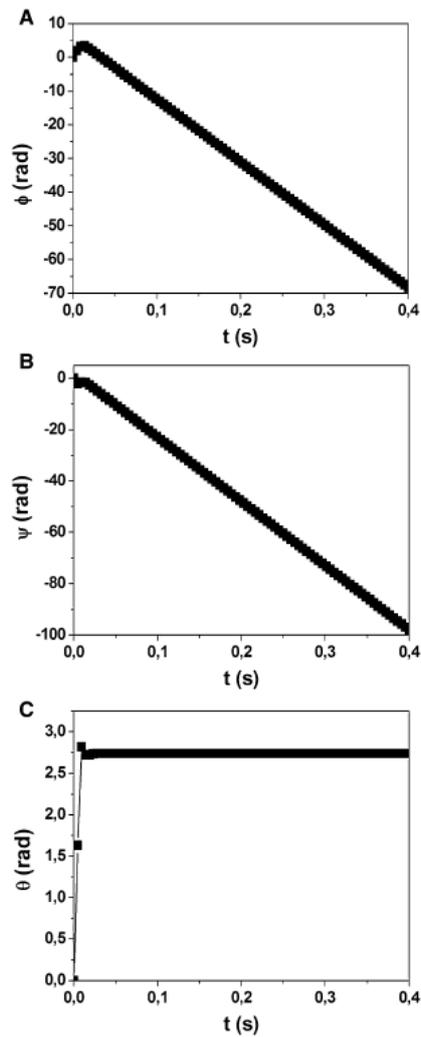


Figura 2.3: Solução numérica para os ângulos de Euler  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\theta$ . Pode-se observar que após um tempo o ângulo  $\theta$  é constante e que os ângulos  $\phi$  e  $\psi$  variam linearmente. Fonte: Acosta-Avalos e Rodrigues (2019).

Usando este fato, é possível escrever a solução analítica para os ângulos de Euler e com isso encontrar uma solução para as coordenadas da trajetória. O que Acosta-Avalos e Rodrigues (2019) mostraram é que a trajetória analítica é uma hélice oscilando com uma única frequência. Porém, experimentos feitos com cocos magnetotáticos do rio Ubatiba, Maricá, e da lagoa Rodrigo de Freitas, Rio de Janeiro, mostram que a trajetória é mais complexa, tendo no mínimo duas frequências de oscilação (Figura 2.4).

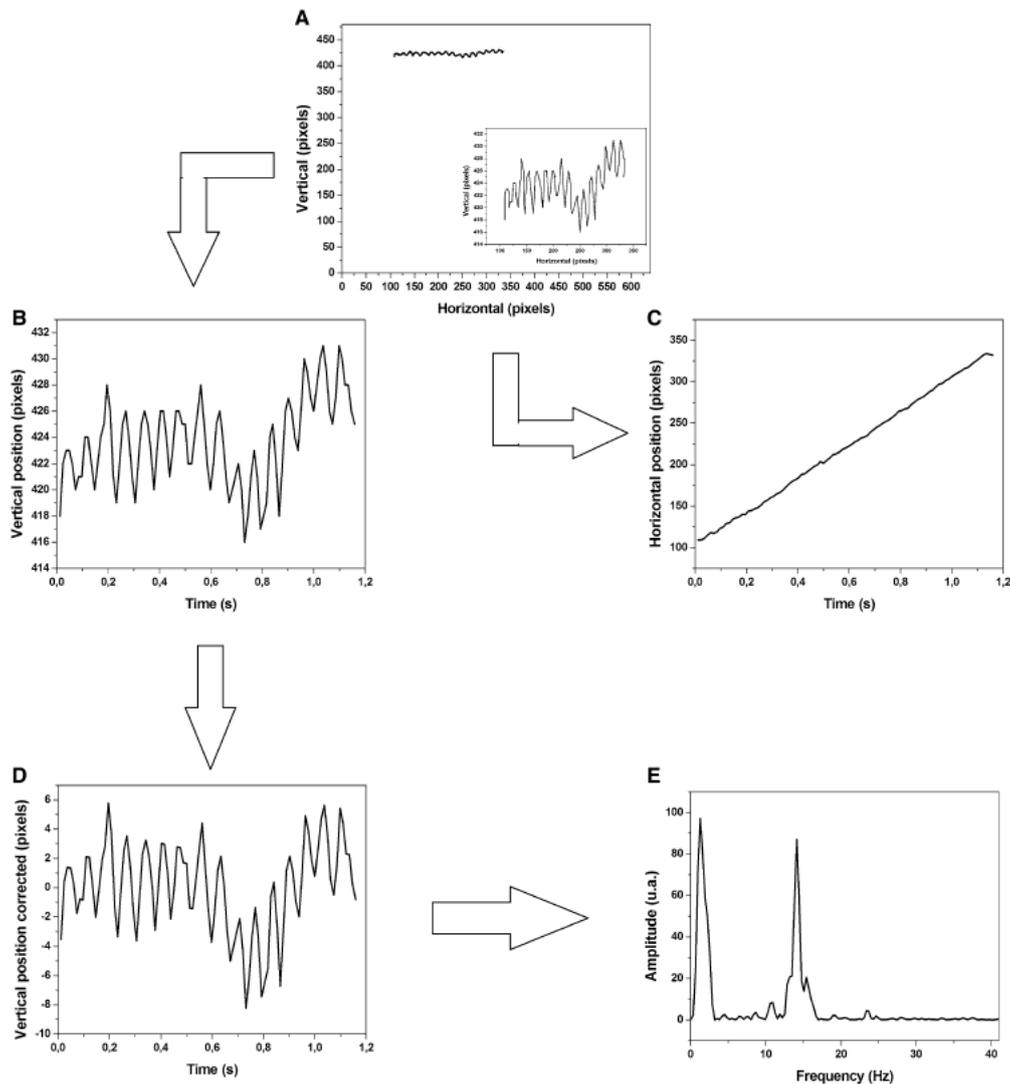


Figura 2.4: Exemplo de trajetória experimental obtida para cocos magnetotáticos não cultivados do rio Ubatiba, Maricá. Pode-se observar que a trajetória não corresponde com uma hélice oscilando com uma frequência, mas oscilando com duas frequências, como pode ser observado no FFT da coordenada vertical (painel E).

Para explicar a presença de duas frequências na trajetória helicoidal, o modelo apresentado neste capítulo tem que ser modificado. Lowe et al. (1987) descrevem uma forma disso acontecer: se o eixo longitudinal do tufo flagelar e o eixo do corpo celular não são colineares, então a projeção do corpo celular, no plano de observação do microscópio, deve oscilar de lado a lado. Ao mesmo tempo, o corpo celular deve girar em torno dele mesmo como já foi mostrado no modelo deste capítulo. Estes dois movimentos produzem um movimento resultante do corpo celular parecido com um funil, e ambos os movimentos têm frequências diferentes.

Assim, o objetivo da presente dissertação de mestrado foi modificar o modelo simples de Nogueira e Lins de Barros (1995), introduzindo uma inclinação do eixo do flagelo, relativo ao diâmetro do corpo celular, no ponto de contato do flagelo com a parede celular, para observar se a solução numérica das equações de movimento produz trajetórias com duas frequências.

### CAPÍTULO 3 – MODELO SIMPLES MODIFICADO

A partir do modelo proposto por Nogueira e Lins de Barros (1995), discutido no capítulo 2, incluímos uma inclinação  $\delta$ , entre o diâmetro do corpo celular e o eixo do flagelo (Figura 3.1). A inclinação do flagelo, em relação ao segmento  $OP$ , será chamada de  $\delta$ , e terá inclinação máxima de 1.5 rad.

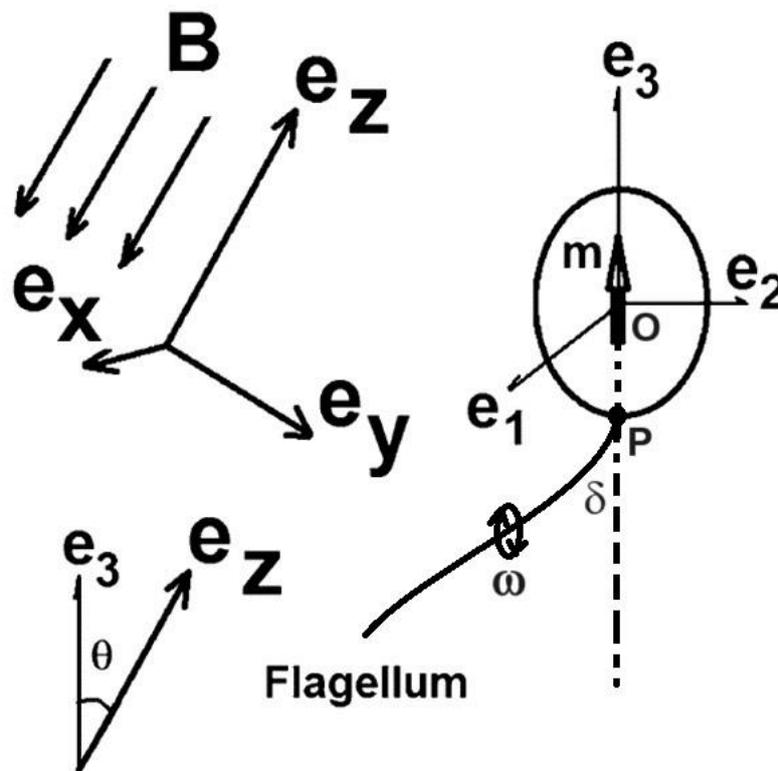


Figura 3.1. Representação esquemática do sistema de referência utilizado no modelo teórico para movimento de bactérias magnetotáticas na presente dissertação. A bactéria magnetotática é assumida como esferoidal, com um único flagelo inclinado num ângulo  $\delta$  no ponto de contato com a membrana, girando com velocidade angular  $\omega$ , e um momento magnético  $m$  fixo no centro do corpo bacteriano e orientado paralelamente à linha  $OP$ .  $e_1$ ,  $e_2$  e  $e_3$  são vetores ortonormais fixados ao corpo bacteriano.  $e_x$ ,  $e_y$  e  $e_z$  são vetores ortonormais fixados no laboratório. O campo magnético aplicado  $B$  é direcionado na direção  $-e_x$ . O ângulo de Euler  $\theta$  é o ângulo entre  $e_3$  e  $e_z$ .

Com a inclusão da inclinação  $\delta$ , o modelo de Nogueira e Lins de Barros (1995) sofreu algumas alterações.

Considerando que a inclinação  $\delta$  esteja no plano XZ, faremos, inicialmente, uma rotação matricial, passando do sistema  $(e_1, e_2, e_3)$  para o sistema  $(e'_1, e'_2, e'_3)$ .

Considere

$$\begin{pmatrix} e'_1 \\ e'_2 \\ e'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & 0 & \sin \delta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \delta & 0 & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

Assim, temos:

$$e'_1 = \cos \delta e_1 + \sin \delta e_2 \quad (3.2)$$

$$e'_2 = e_2 \quad (3.3)$$

$$e'_3 = -\sin \delta e_1 + \cos \delta e_2 \quad (3.4)$$

Nesse novo sistema, as forças  $F_{12}$  e  $F_3$  ficarão com o seguinte aspecto:

$$F_{12} = |F_{12}|(\cos \omega t \cos \delta e_1 + \sin \omega t e_2 + \cos \omega t \sin \delta e_3) \quad (3.5)$$

$$F_3 = |F_3|(-\sin \delta e_1 + \cos \delta e_3) \quad (3.6)$$

Já o torque de reação tem módulo constante igual a

$$N_C = -|N_C|e'_3 \quad (3.7)$$

$$N_C = -|N_C|(-\sin \delta e_1 + \cos \delta e_2) \quad (3.8)$$

Além disso,

$$N_T = R \times F \quad (3.9)$$

onde  $F = F_{12} + F_3$ . Assim, considerando  $F$  no sistema  $(e'_1, e'_2, e'_3)$

$$N_T = R[(-F_{12} \sin \omega t)e_1 + (F_{12} \cos \omega t \cos \delta - F_3 \sin \delta)e_2] \quad (3.10)$$

Como  $N_\eta$  e  $N_m$  não estão no sistema  $(e'_1, e'_2, e'_3)$ , as equações desses torques não sofrerão modificações. Assim,

$$N_\eta = -8\pi\eta R^3 \Omega \quad (3.11)$$

$$\mathbf{N}_m = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = |\mathbf{m}||\mathbf{B}|\mathbf{e}_n \quad (3.12)$$

Substituindo todos os torques na equação

$$\mathbf{N}_C + \mathbf{N}_T + \mathbf{N}_\eta + \mathbf{N}_m = \mathbf{0} \quad (3.13)$$

e resolvendo para  $\omega_1, \omega_2, e \omega_3$ , temos:

$$\omega_1 = \gamma \operatorname{sen} \delta - \alpha \operatorname{sen} \omega t + \beta \operatorname{sen} \theta \cos \psi \quad (3.14)$$

$$\omega_2 = \alpha \cos \omega t \cos \delta - \xi \operatorname{sen} \delta - \beta \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \psi \quad (3.15)$$

$$\omega_3 = -\gamma \cos \delta \quad (3.16)$$

onde

$$\alpha = \frac{|\mathbf{F}_{12}|R}{8\pi\eta R^3} \quad (3.17)$$

$$\beta = \frac{|\mathbf{m}||\mathbf{B}|}{8\pi\eta R^3} \quad (3.18)$$

$$\gamma = \frac{|\mathbf{N}_c|}{8\pi\eta R^3} \quad (3.19)$$

$$\xi = \frac{|\mathbf{F}_3|R}{8\pi\eta R^3} \quad (3.20)$$

Resolvendo as equações de  $\omega_1, \omega_2, \omega_3$  para as velocidades angulares  $\dot{\phi}, \dot{\theta}$  e  $\dot{\psi}$ , obtemos

$$\dot{\phi} = -\dot{\theta} \operatorname{csc} \theta \cot \psi + \gamma \operatorname{csc} \theta \operatorname{csc} \psi \operatorname{sen} \delta - \alpha \operatorname{csc} \theta \operatorname{csc} \psi \operatorname{sen} \omega t + \beta \cot \psi \quad (3.21)$$

$$\dot{\theta} = \gamma \operatorname{sen} \delta \cos \psi - \alpha \operatorname{sen} \omega t \cos \psi + \beta \operatorname{sen} \theta - \alpha \cos \omega t \cos \delta \operatorname{sen} \psi + \xi \operatorname{sen} \delta \operatorname{sen} \psi \quad (3.22)$$

$$\dot{\psi} = -\gamma \cos \delta - \dot{\phi} \cos \theta \quad (3.23)$$

### 3.2 – Translação do Corpo Celular

Como a equação de Newton para a translação do corpo celular será

$$\mathbf{F}_3 + \mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_\eta = \mathbf{0} \quad (3.24)$$

Teremos

$$\mathbf{F}_{12}(\cos \omega t \cos \delta \mathbf{e}_1 + \operatorname{sen} \omega t \mathbf{e}_2 + \cos \omega t \operatorname{sen} \delta \mathbf{e}_3) + \mathbf{F}_3(-\operatorname{sen} \delta \mathbf{e}_1 + \cos \delta \mathbf{e}_3) - 6\pi\eta R\mathbf{v} = \mathbf{0} \quad (3.25)$$

Assim,

$$\mathbf{v} = (v_{12} \cos \omega t \cos \delta - v_3 \sin \delta) \mathbf{e}_1 + v_{12} \sin \omega t \mathbf{e}_2 + (v_{12} \cos \omega t \sin \delta + v_3 \cos \delta) \mathbf{e}_3 \quad (3.26)$$

com

$$v_{12} = \frac{F_{12}}{6\pi\eta R} \quad (3.27)$$

e

$$v_3 = \frac{F_3}{6\pi\eta R} \quad (3.28)$$

Novamente, o movimento do centro de massa pode ser escrito a partir do sistema fixo no referencial do laboratório, utilizando a equação 3.26 e 2.26, e fazendo as devidas transformações do sistema  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  para o sistema  $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ . Para isso, usaremos a transformação dada pelas equações 2.30, 2.31 e 2.32.

Assim, obteremos as seguintes equações para  $\dot{x}$ ,  $\dot{y}$  e  $\dot{z}$ :

$$\begin{aligned} \dot{x} = & (v_{12} \cos \omega t \cos \delta - v_3 \sin \delta)(\cos \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \sin \psi) + \\ & (v_{12} \sin \omega t)(-\sin \psi \cos \varphi - \cos \theta \sin \varphi \cos \psi) + \\ & (v_{12} \cos \omega t \sin \delta + v_3 \cos \delta)(\sin \theta \sin \varphi) \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \dot{y} = & (v_{12} \cos \omega t \cos \delta - v_3 \sin \delta)(\cos \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \sin \psi) + \\ & (v_{12} \sin \omega t)(-\sin \psi \sin \varphi + \cos \theta \cos \varphi \cos \psi) + \\ & (v_{12} \cos \omega t \sin \delta + v_3 \cos \delta)(-\sin \theta \cos \varphi) \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \dot{z} = & (v_{12} \cos \omega t \cos \delta - v_3 \sin \delta)(\sin \psi \sin \theta) + (v_{12} \sin \omega t)(\cos \psi \sin \theta) + \\ & (v_{12} \cos \omega t \sin \delta + v_3 \cos \delta)(\cos \theta) \end{aligned} \quad (3.31)$$

As equações 3.21, 3.22, 3.23, 3.29, 3.30 e 3.31 determinam completamente o movimento da bactéria magnetotática.

## CAPÍTULO 4 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO NUMÉRICA

As equações diferenciais 3.21, 3.22, 3.23, 3.29, 3.30 e 3.31 são acopladas. Para resolvê-las numericamente, foi utilizado o integrador LSODA, da biblioteca ODEPACK, disponível na linguagem Python (Hindmarsh, 1983). O código fonte pode ser lido no Anexo 1 desta dissertação.

Dividimos as simulações em duas etapas. Na primeira etapa, variamos o campo magnético B em (0.5, 1, 2, 4, 8, 10) Oe, fixando as forças  $F_{12}$  e  $F_3$  em  $F_{12} = 4 \times 10^{-12}$  N e  $F_3 = 1 \times 10^{-12}$  N. O ângulo  $\delta$  variou de  $0^\circ$  até  $10^\circ$ , com passo de  $2^\circ$ . Por fim, temos os parâmetros:

$$\eta = 1 \times 10^{-3} \text{Pa}\cdot\text{s}$$

$$m = 1.5 \times 10^{-15} \text{A}\cdot\text{m}^2$$

$$N_c = 2 \times 10^{-18} \text{N}\cdot\text{m}$$

$$R = 1 \mu\text{m}$$

$$\omega = 250 \text{ rad/s}$$

$$\alpha = 159 \text{ rad/s}$$

$$\xi = 40 \text{ rad/s}$$

$$\gamma = 80 \text{ rad/s}$$

$$v_{12} = 212 \mu\text{m/s}$$

$$v_3 = 53 \mu\text{m/s}$$

Na segunda etapa, fixamos o ângulo  $\delta$  em  $4^\circ$ , o campo B em 4 Oe e variamos as forças da seguinte forma:  $F_{12} = 0.1F_3$ ,  $F_{12} = 0.5F_3$ ,  $F_{12} = 0.8F_3$ ,  $F_{12} = F_3$ ,  $F_{12} = 2F_3$ ,  $F_{12} = 5F_3$ .

Para as coordenadas x, y e z e para os ângulos de Euler Euler  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\theta$  foram calculados os seguintes parâmetros: as frequências de oscilação das coordenadas x e y, a inclinação e a oscilação da coordenada z, a frequência de oscilação dos ângulos de Euler, a inclinação dos ângulos  $\phi$  e  $\psi$ , e o valor médio do ângulo  $\theta$ .

#### 4.1 Solução numérica para as coordenadas x, y e z

A figura 4.1 mostra um exemplo da solução para as coordenadas em função do tempo e para a trajetória resultante. O resultado é semelhante ao que é observado experimentalmente na figura 2.4.

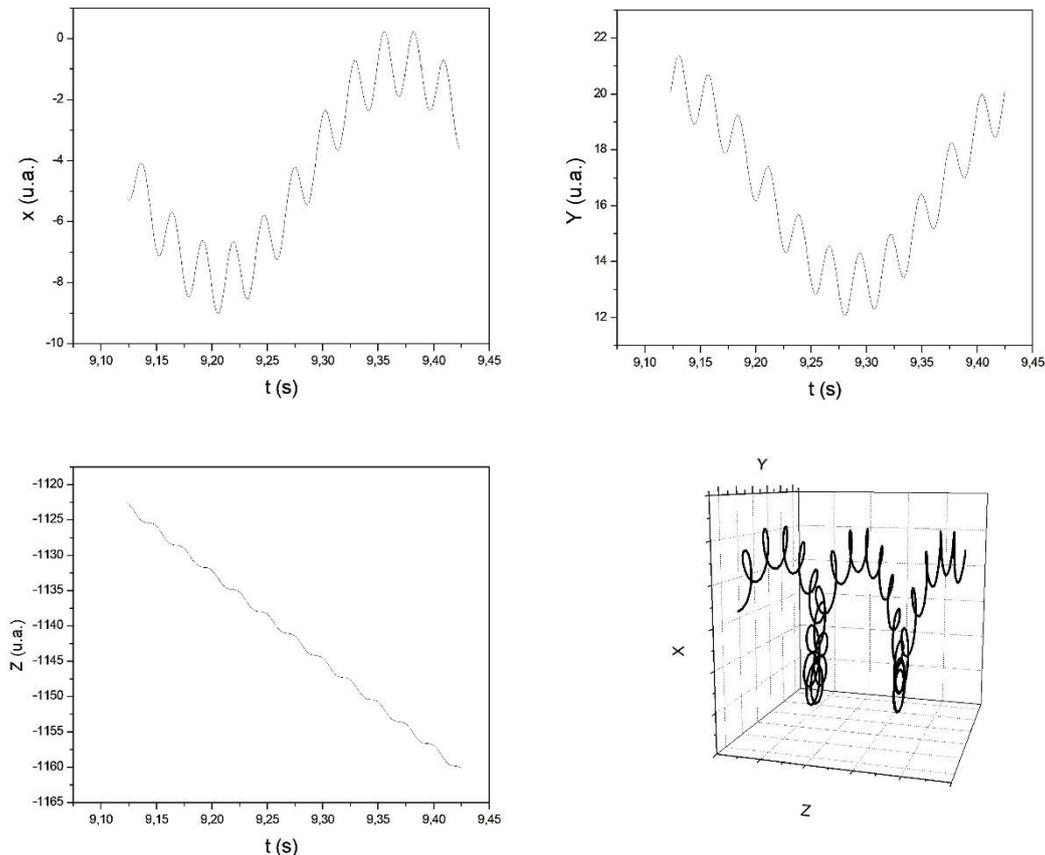


Figura 4.1 – Soluções numéricas para as coordenadas x, y e z em função do tempo e composição tridimensional.

A partir das soluções numéricas é possível observar que as coordenadas têm as seguintes soluções analíticas, após um determinado tempo, no qual a solução permanece:

As coordenadas x e y oscilam de uma forma parecida com a soma de duas ondas. Assim, é possível escrever as soluções analíticas delas da seguinte forma:

$$x(t) = x_0 + A_{x1} \cdot \cos(\omega_{x1} \cdot t) + A_{x2} \cdot \cos(\omega_{x2} \cdot t) \quad (4.1)$$

$$y(t) = y_0 + A_{y1} \cdot \cos(\omega_{y1} \cdot t) + A_{y2} \cdot \cos(\omega_{y2} \cdot t) \quad (4.2)$$

A coordenada z se comporta como uma linha reta com uma onda senoidal somada nela:

$$z(t) = z_0 + V_z \cdot t + A_z \cdot \cos(\omega_z \cdot t) \quad (4.3)$$

#### 4.2 Solução numérica para os ângulos de Euler

A figura 4.2 mostra a solução numérica dos ângulos de Euler associada com a solução para as coordenadas mostrada na figura 4.1.

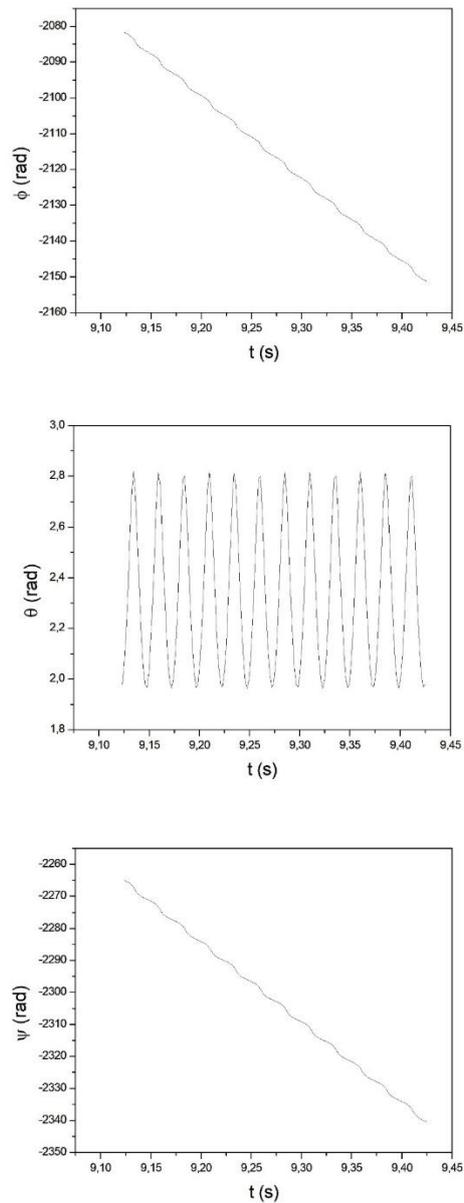


Figura 4.2 – Soluções numéricas para os ângulos de Euler  $\theta$ ,  $\psi$  e  $\phi$ , em função do tempo.

A partir das soluções numéricas é possível observar que os ângulos têm as seguintes soluções analíticas após um determinado tempo, no qual a solução permanece:

$$\phi(t) = \phi_0 - \omega_f \cdot t + A_\phi \cdot \text{sen}(\omega_\phi' \cdot t) \quad (4.4)$$

$$\psi(t) = \psi_0 - \omega_y \cdot t + A_\psi \cdot \text{sen}(\omega_\psi' \cdot t) \quad (4.5)$$

$$\theta(t) = \theta_0 + A_\theta \cdot \text{sen}(\omega_\theta' \cdot t) \quad (4.6)$$

### 4.3 Variação do campo magnético e do ângulo $\delta$

#### 4.3.1 - Coordenadas x, y, z

A partir das soluções analíticas observadas para x, y e z, foram obtidos os seguintes parâmetros em função do campo magnético e da inclinação  $\delta$  do flagelo:

##### 4.3.1.1 Amplitudes Ax1, Ax2, Ay1 e Ay2

As figuras 4.3 e 4.4 mostram as amplitudes Ax1 e Ax2, respectivamente, em função da inclinação do flagelo ( $\delta$ ) para os diferentes valores de  $\beta$  testados. Já a figura 4.5 mostra o comportamento da razão entre Ax2 e Ax1 em função, também, da inclinação  $\delta$ . O comportamento de Ay1 e Ay2 é igual ao observado para as amplitudes em x. Em geral pode ser observado que Ax1 diminui seu valor quando aumenta o campo magnético. Por outro lado, Ax1 aumenta seu valor quando o valor da inclinação flagelar aumenta. Para a amplitude Ax2 não aparece uma tendência de comportamento óbvia. Aparentemente o valor de Ax2 inicialmente diminui e depois aumentam em função do ângulo do flagelo para os valores iniciais do campo magnético. Interessantemente, a razão Ax2/Ax1 tem um comportamento semelhante para todos os valores do campo magnético analisados: ela decai quando a inclinação flagelar aumenta.

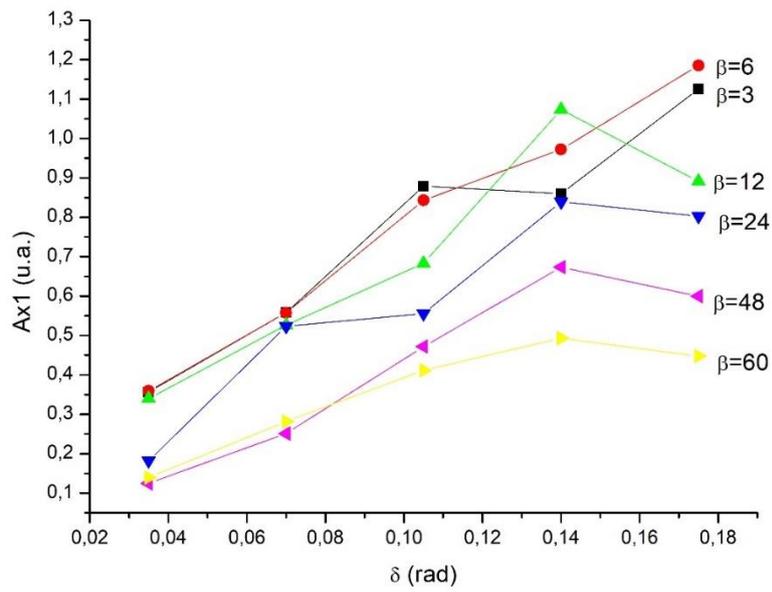


Figura 4.3 – Comportamento da amplitude  $Ax1$  em função da inclinação  $\delta$  do flagelo.

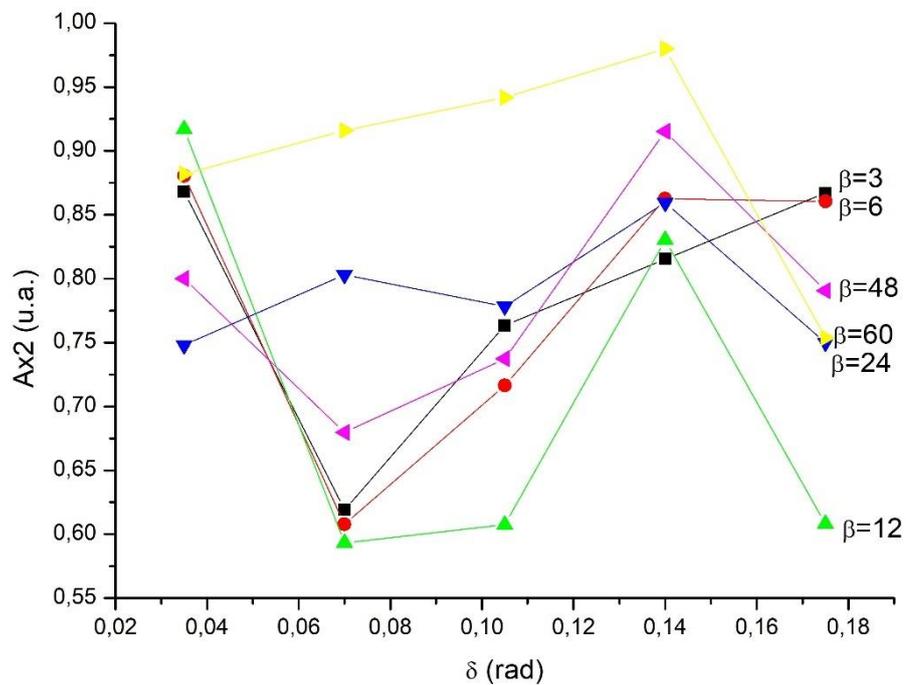


Figura 4.4 - Comportamento da amplitude  $Ax2$  em função da inclinação  $\delta$  do flagelo.

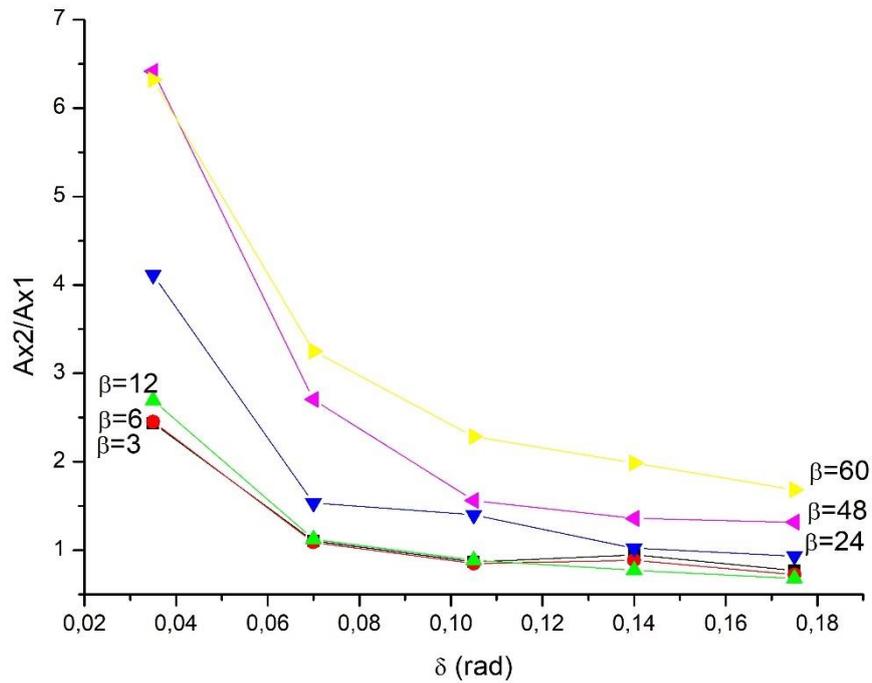


Figura 4.5 - Comportamento da razão entre as amplitudes  $A_{x2}$  e  $A_{x1}$  em função da inclinação  $\delta$  do flagelo.

#### 4.3.1.2 Frequências $f_{x1}$ , $f_{x2}$ , $f_{y1}$ e $f_{y2}$

Os resultados numéricos mostram que  $f_{x1} = f_{y1}$  e  $f_{x2} = f_{y2}$ . Também pode ser observado que  $f_{x1} + f_{x2} = 39,77$  Hz, que corresponde com a frequência do flagelo na velocidade angular de 250 rad/s. A figura 4.6 mostra  $f_{x1}$  em função do ângulo  $\delta$  para os diferentes valores de  $\beta$ . Pode ser observado nos valores de  $\beta = 3, 6$  e  $12$  os valores são iguais e mudam para os seguintes valores de  $\beta$ . Para  $\beta = 60$  os valores de  $f_{x1}$  e  $f_{x2}$  são constantes para todos os valores de  $\delta$ .



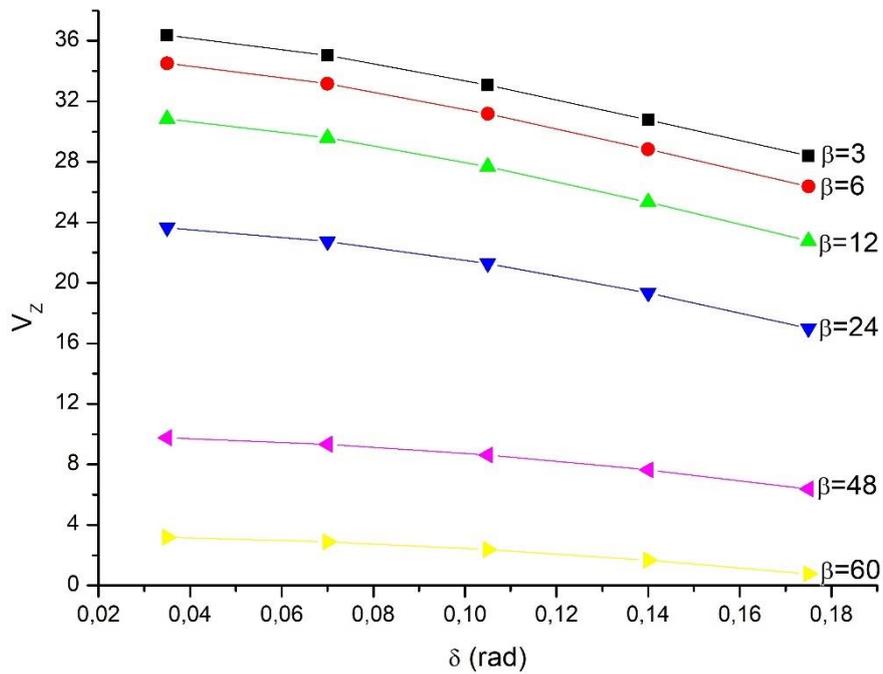


Figura 4.7 – Comportamento da velocidade axial  $V_z$  em função do ângulo  $\delta$  para todos os valores de  $\beta$ .

Para o caso da amplitude  $A_z$ , ela é mostrada na figura 4.8 em função da inclinação flagelar  $\delta$  para todos os valores de  $\beta$ . O que se observa é que a amplitude aumenta quando a inclinação flagelar aumenta, mas ela diminui quando  $\beta$  aumenta. É interessante observar que para  $\beta = 3, 6$  e  $12$  os valores de  $A_z$  são semelhantes e eles ficam diferentes para os seguintes valores de  $\beta$ .

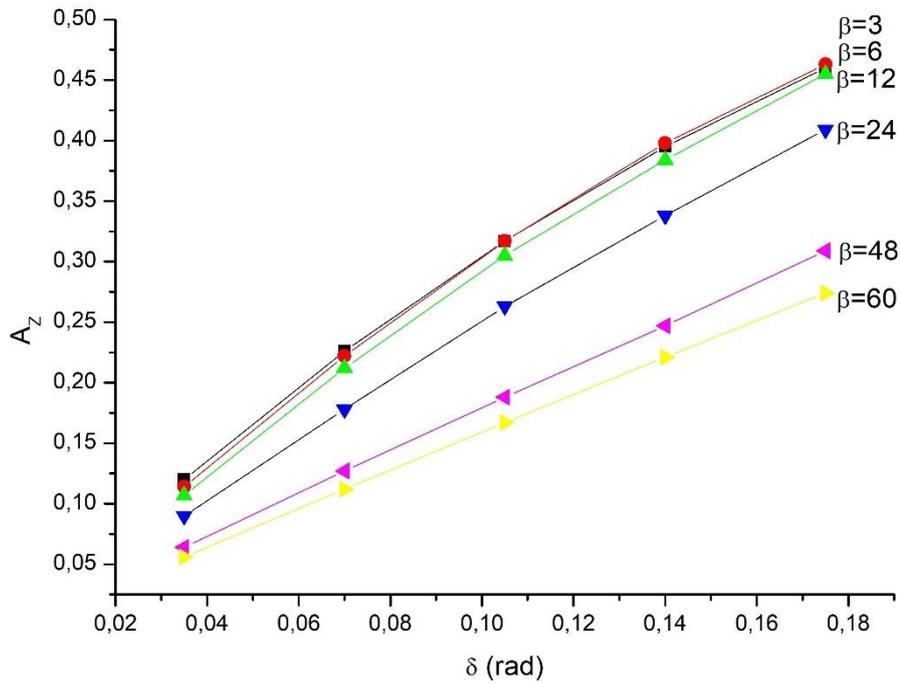


Figura 4.8 – Comportamento da amplitude axial  $A_z$  em função do ângulo  $\delta$  para todos os valores de  $\beta$ .

Finalmente, a frequência observada na coordenada  $z$  se mantém constante, com valor de 39,77 Hz, que corresponde com a velocidade angular do flagelo de 250 rad/s.

#### 4.3.2 - Coordenadas $\phi$ , $\psi$ , $\theta$

Na figura 4.9 observamos a velocidade angular  $\omega_\phi$  em função da inclinação flagelar  $\delta$  para cada valor de  $\beta$ . A velocidade angular  $\omega_\psi$  tem valor fixo de 250 rad/s. A frequência obtida a partir da diferença  $\omega_\psi - \omega_\phi$  é semelhante à frequência  $f_{x1}$ . As frequências  $f_\phi$ ,  $f_\psi$ , e  $f_\theta$  são constantes e têm o valor de 39,77 Hz, que corresponde com a velocidade angular flagelar de 250 rad/s. O ângulo  $\theta$  oscila em volta de um valor médio, que é aproximadamente 2,4 rad. Como mostrado por (Acosta-Avalos e Rodrigues, 2019), este ângulo deveria ser  $\pi$  rad, quando a trajetória está estável. Não sendo esse valor, isso indica que o momento magnético está precessando em volta do campo magnético.

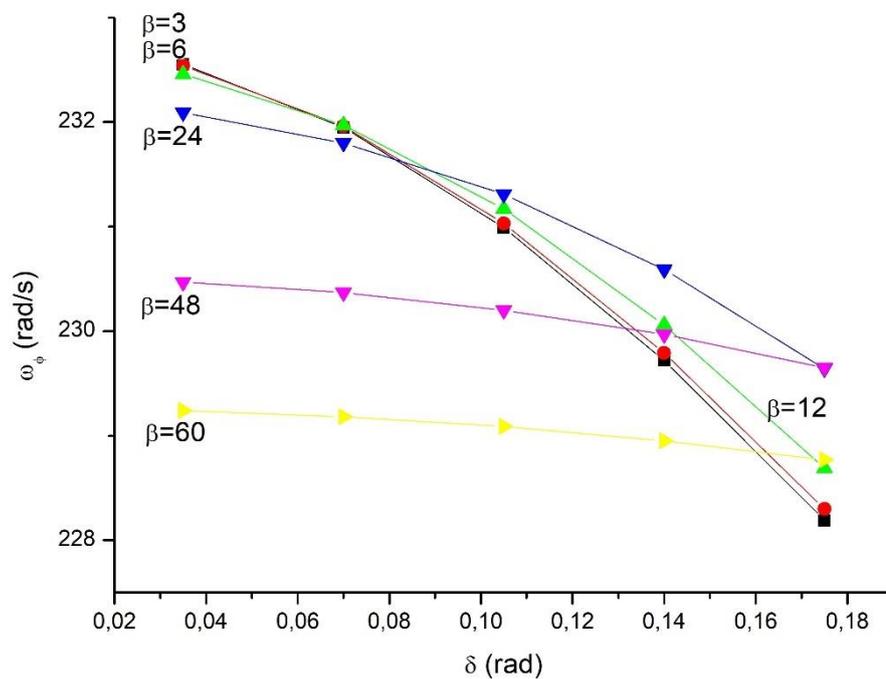


Figura 4.9: Comportamento da velocidade angular  $\omega_\phi$  em função do ângulo  $\delta$  para todos os valores de  $\beta$ .

A figura 4.10 mostra a amplitude  $A_\phi$  em função da inclinação flagelar  $\delta$  e do parametro  $\beta$ . Pode-se observar que  $A_\phi$  aumenta quando a inclinação  $\delta$  aumenta e que diminui quando  $\beta$  aumenta. Novamente, como na figura 4.8, se observa que os valores são muito próximos até  $\beta = 12$ , após o qual os valores de  $A_\phi$  diminuem fortemente. Para  $A_\psi$  e  $A_\theta$  o comportamento é semelhante.

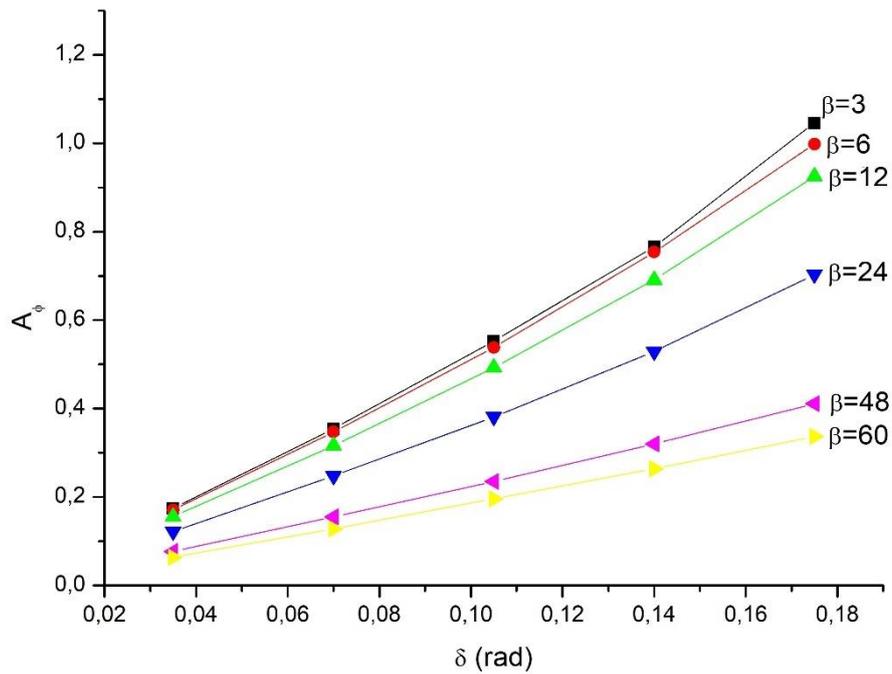


Figura 4.10: Comportamento da amplitude  $A_\phi$  em função do ângulo  $\delta$  para todos os valores de  $\beta$ .

## 4.4 Variação das forças flagelares

### 4.4.1 - Coordenadas x, y, z

Na figura 4.11 podemos observar  $A_{x1}$  e  $A_{x2}$  em função do quociente  $F_{12}/F_3$ . Pode-se observar que para  $F_{12}/F_3 < 1$  as amplitudes são semelhantes e para  $F_{12}/F_3 > 1$  a amplitude  $A_{x2}$  é maior que  $A_{x1}$ , havendo uma mudança brusca de comportamento quando  $F_{12}/F_3 = 1$ . O mesmo acontece com  $A_{y1}$  e  $A_{y2}$ .

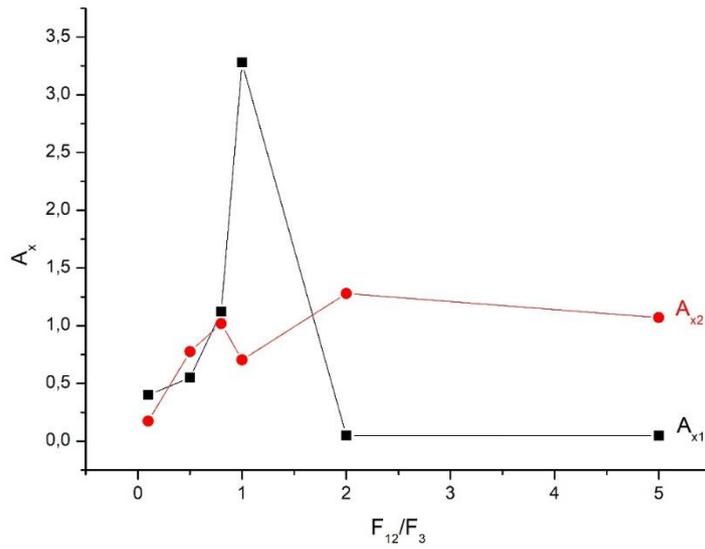


Figura 4.11: Comportamento da amplitude  $A_x$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

Na figura 4.12 observamos as frequências  $f_{x1}$  e  $f_{x2}$  ( $f_{x1} < f_{x2}$ ). Pode-se observar que para  $F_{12}/F_3 \leq 1$  temos a seguinte relação:  $f_{x1} + f_{x2} = 39,77$  Hz e para  $F_{12}/F_3 > 1$  temos a seguinte relação:  $f_{x2} - f_{x1} = 39,77$  Hz, onde esta última frequência corresponde com a frequência de rotação do flagelo associado à velocidade angular de 250 rad/s.

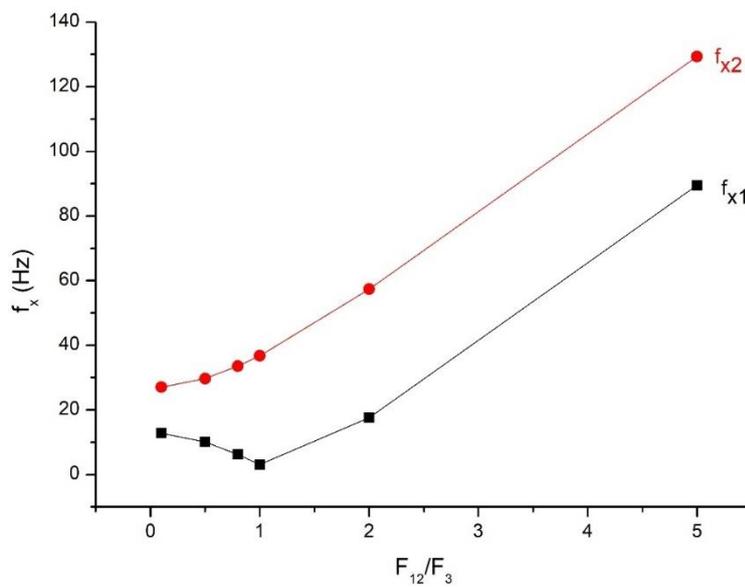


Figura 4.12: Comportamento da frequência  $f_x$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

A figura 4.13 mostra a amplitude das oscilações na coordenada z ( $A_z$ ) em função do quociente  $F_{12}/F_3$ . Ela tem um comportamento semelhante ao de  $A_{x1}$ : a amplitude aumenta até  $F_{12}/F_3 = 1$  e depois diminui. A frequência das oscilações é constante, com valor de 39,77 Hz, correspondente com a frequência de oscilação flagelar.

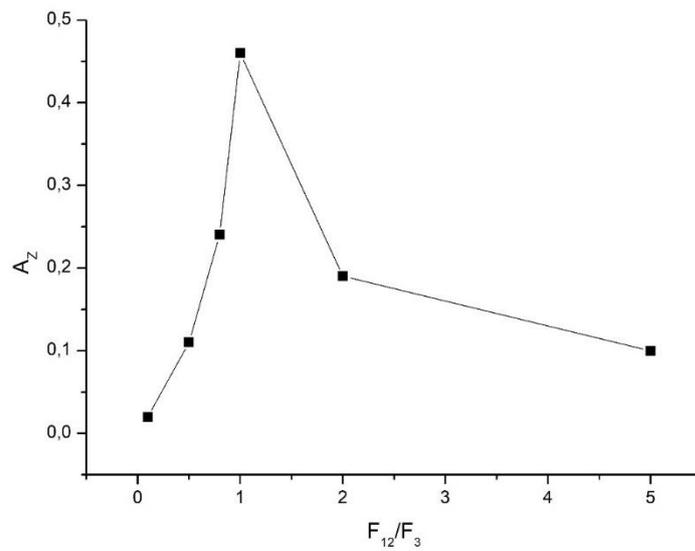


Figura 4.13: Comportamento da amplitude  $A_z$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

A figura 4.14 mostra a velocidade axial  $V_z$  em função de  $F_{12}/F_3$ . Pode-se observar a dependência em  $F_3$ : conforme  $F_3$  diminui com respeito a  $F_{12}$ , a velocidade também diminui.

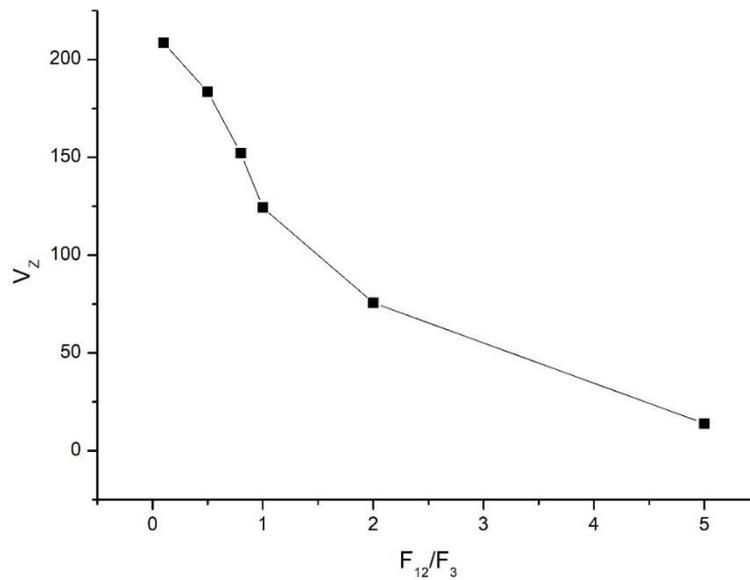


Figura 4.14: Comportamento da velocidade  $V_z$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

A figura 4.15 mostra a velocidade angular  $\omega_\phi$  em função de  $F_{12}/F_3$ . Pode-se observar que a velocidade aumenta quando  $F_{12}$  aumenta. Interessantemente, as frequências associadas a  $\omega_\phi$  são as mesmas de  $f_{x2}$  e  $f_{y2}$ . Para todos os valores de  $F_{12}/F_3$  o valor da velocidade angular  $\omega_\psi$  é constante e igual a 250 rad/s que corresponde com a velocidade de rotação flagelar. Interessante observar o comportamento de  $V_z$  e  $\omega_\phi$ : quando  $V_z$  diminui a velocidade angular  $\omega_\phi$  aumenta, devido à predominância de  $F_3$  no aumento de  $V_z$  ou à predominância de  $F_{12}$  no aumento de  $\omega_\phi$ .

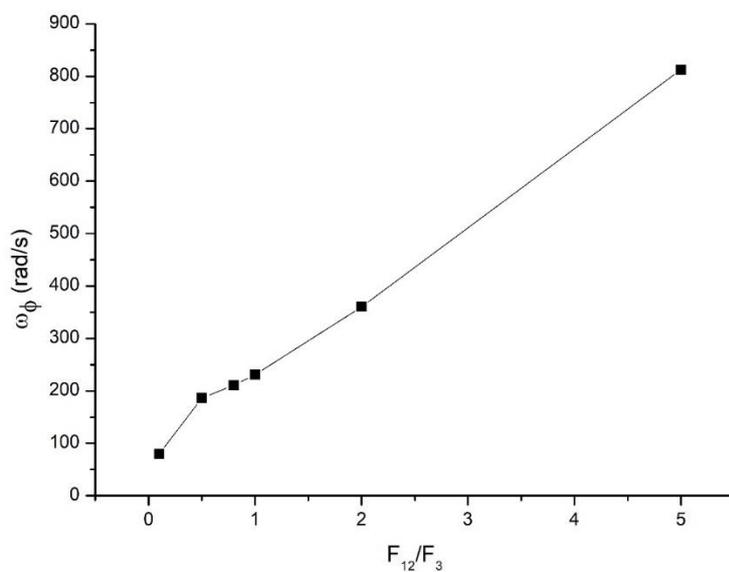


Figura 4.15: Comportamento da velocidade angular  $\omega_\phi$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

Na figura 4.16 observamos o ângulo  $\theta_0$  em função de  $F_{12}/F_3$ . Observa-se que este ângulo diminui quando  $F_{12}/F_3$  aumenta, implicando novamente que o momento magnético não se alinha com o campo magnético, ficando cada vez mais desalinhado quando  $F_{12} > F_3$ .

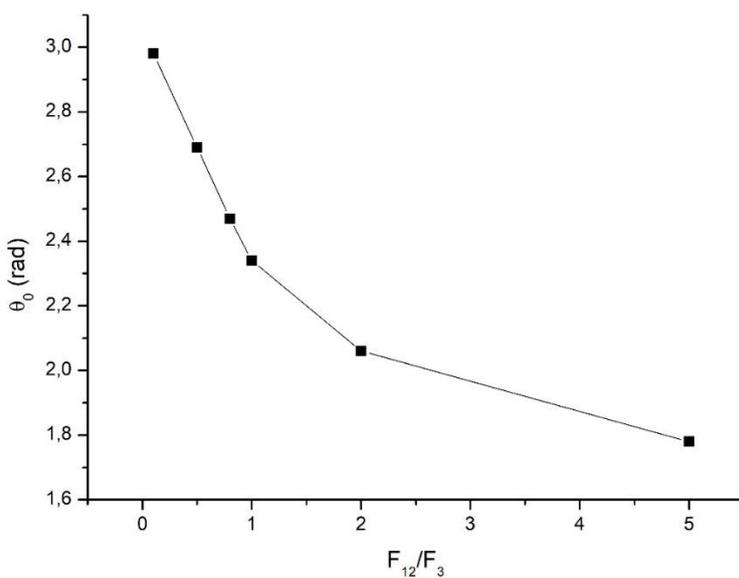


Figura 4.16: Comportamento do parâmetro  $\theta_0$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

A figura 4.17 mostra a amplitude de oscilação de  $\phi$  ( $A_\phi$ ) em função de  $F_{12}/F_3$ . As amplitudes  $A_\psi$  e  $A_\theta$  seguem um comportamento semelhante. O comportamento de  $A_\phi$  não tem uma descrição simples, porém quando  $F_{12}/F_3$  aumenta  $A_\phi$  tende a diminuir.

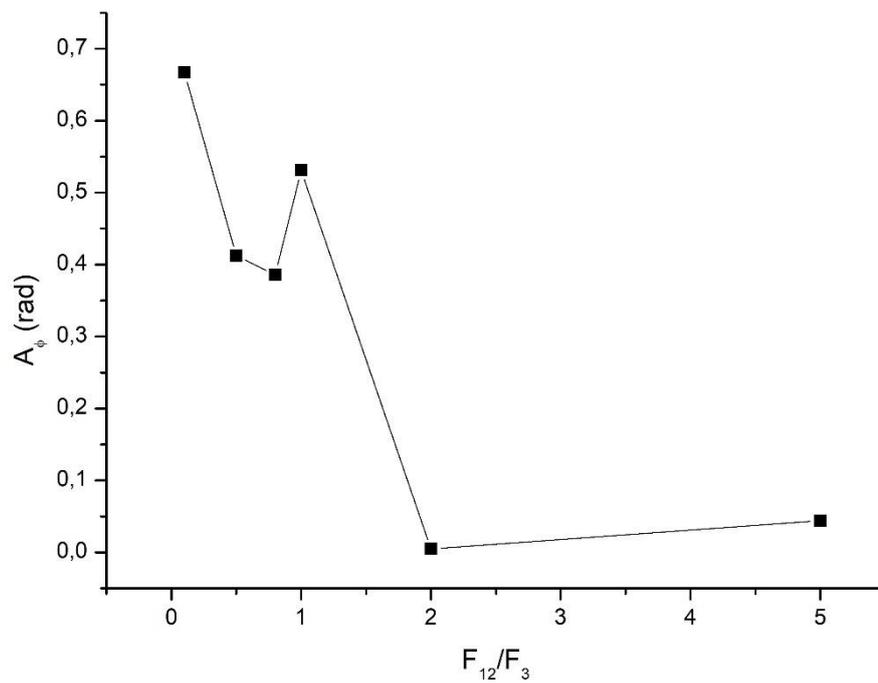


Figura 4.17: Comportamento da amplitude  $A_\phi$  em função do quociente de forças  $F_{12}/F_3$

## CAPÍTULO 5 - DISCUSSÃO

Nos capítulos anteriores foram apresentadas as soluções numéricas de Acosta-Avalos e Rodrigues (2019), a partir do modelo proposto por Nogueira e Lins de Barros (1995). Essas soluções mostram que é possível escrever a solução analítica para os ângulos de Euler e, com isso, encontrar uma solução para as coordenadas da trajetória. Além disso, Acosta-Avalos e Rodrigues (2019) indicam que a trajetória analítica é uma hélice oscilando com uma única frequência. Por outro lado, experimentos realizados com cocos magnetotáticos do rio Ubatiba, Maricá, e da lagoa Rodrigo de Freitas, Rio de Janeiro, mostram que a trajetória é mais complexa, tendo no mínimo duas frequências de oscilação. Desse modo, houve a necessidade do modelo ser modificado, com o objetivo de explicar a presença de duas frequências na trajetória helicoidal. Lowe et al. (1987) descrevem uma forma disso acontecer: se o eixo longitudinal do tufo flagelar e o eixo do corpo celular não são colineares, então a projeção do corpo celular, no plano de observação do microscópio, deve oscilar de lado a lado. Ao mesmo tempo, o corpo celular deve girar em torno dele mesmo, como mostrado no capítulo 2. Observamos que esses dois movimentos produzem um movimento resultante do corpo celular parecido com um funil, e ambos os movimentos têm frequências diferentes. Portanto, o objetivo da presente dissertação de mestrado foi modificar o modelo simples de Nogueira e Lins de Barros (1995), introduzindo uma inclinação do eixo do flagelo, relativo ao diâmetro do corpo celular, no ponto de contato do flagelo com a parede celular, para observar se a solução numérica das equações de movimento produz trajetórias com duas frequências.

A figura 4.1 mostra que as trajetórias obtidas a partir das equações de movimento tem duas frequências, da mesma forma que é observado experimentalmente na figura 2.4. Isto mostra que a ideia de Lowe et al. (1987) explica de forma simples o movimento observado nas bacterias. Um estudo teorico feito com cocos magnetotacticos apresentando dois tufos de flagelos estudou um problema semelhante, mas não foi feita uma inclinação nos flagelos e sim uma inclinação do momento dipolar interno com respeito ao eixo principal do corpo (Yang et al. 2012). Esta inclinação determina o surgimento de trajetorias com duas frequencias. Infelizmente, o objetivo dos autores não foi estudar os parametros da trajetoria e sim comparar os resultados da solução numerica com os dados experimentais de movimento num campo magnetico oscilante circular. Com isso, a presente dissertação é o primeiro trabalho estudando os parametros das trajetorias com duas frequencias de bacterias magnetotacticas.

Um dos resultados é que a soma das duas frequências é igual à frequência flagelar:

$$f_1 + f_2 = f_{\text{flagelar}} \quad (5.1)$$

sendo  $f_2$  semelhante a  $f_{\text{flagelar}}$ . Isto pode ser entendido como  $f_1$  sendo a frequência de batimento de  $f_2$  e  $f_{\text{flagelar}}$ . Assim, a trajetória com menor frequência é o resultado do batimento das oscilações do flagelo e do corpo.

A partir das soluções numéricas para os ângulos de Euler  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\theta$  foi possível observar uma solução analítica para estes ângulos em função do tempo (equações 4.4, 4.5 e 4.6). Porém, diferente do que foi feito por Acosta-Avalos e Rodrigues (2019), não tem uma integração simples nas coordenadas uma vez que estas funções são substituídas nas equações 3.29, 3.30 e 3.31. O que se observa é que as coordenadas  $x$  e  $y$  oscilam de uma forma parecida com a soma de duas ondas, enquanto a coordenada  $z$  se comportou como uma linha reta com uma onda senoidal somada a ela.

Para a velocidade axial  $V_z$  em função do ângulo  $\delta$  (figura 4.7), foi observado um comportamento diferente daquele descrito por Acosta-Avalos e Rodrigues (2019), para  $\delta = 0$ , quando  $V_z$ , em função de  $\beta$ , diminui no início para depois crescer até atingir um valor de saturação. No presente estudo, a velocidade  $V_z$  diminui com o aumento da inclinação flagelar e com o aumento de  $\beta$  para o valor de  $\delta$  fixo. Algo semelhante é observado no trabalho de Yang et al. (2012), onde o aumento do campo magnético faz a velocidade de translação diminuir, devido ao conflito entre uma maior orientação da cadeia de magnetossomos com o campo magnético e o impulso do flagelo numa direção diferente. Da mesma forma acontece no modelo proposto aqui: o impulso do flagelo sempre vai ser numa direção diferente daquela da orientação da cadeia de magnetossomos com o campo magnético. Isto se vê refletido na amplitude  $A_z$ , a qual aumenta quando a inclinação  $\delta$  aumenta, o que significa que ela oscila fortemente enquanto se translada, atrapalhando o movimento para frente. Finalmente, a mudança da inclinação do flagelo e do valor do campo magnético não alteram a frequência da coordenada  $z$ , ficando com valor constante, de 39,77 Hz, que corresponde com a velocidade angular do flagelo de 250 rad/s.

Na segunda etapa das simulações do presente trabalho, com  $\delta$  e  $B$  fixos e com as forças  $F_{12}$  e  $F_3$  variando, pode-se observar que para  $F_{12}/F_3 < 1$  as amplitudes  $A_{x1}$  e  $A_{x2}$  aumentam quando  $F_{12}$  aumenta, o que está relacionado ao fato de que esta componente

de força produz a maior parte da rotação do corpo. Algo similar acontece com a amplitude  $A_z$ , em função do quociente  $F_{12}/F_3$ : a amplitude aumenta até  $F_{12}/F_3 = 1$  e depois diminui. Já para as frequências  $f_{x1}$  e  $f_{x2}$ , foi possível observar que para  $F_{12}/F_3 \leq 1$ , temos a seguinte relação:  $f_{x1} + f_{x2} = 39,77$  Hz. Para  $F_{12}/F_3 > 1$  temos a seguinte relação:  $f_{x2} - f_{x1} = 39,77$  Hz. Assim, enquanto a componente de força associada à translação domina, a relação entre as frequências é de um batimento ondulatorio, e quando a componente de força associada à oscilação domina o batimento deixa de existir e duas oscilações de alta frequência são observadas ao mesmo tempo na trajetória. Já a frequência  $f_z$  é constante, com valor de 39,77 Hz, correspondente com a frequência de oscilação flagelar.

Para a velocidade axial  $V_z$  em função de  $F_{12}/F_3$ , é possível observar a dependência em  $F_3$ : conforme  $F_3$  diminui com respeito a  $F_{12}$ , a velocidade também diminui (figura 4.14), indicando a relação entre translação e oscilação: quando a componente de força associada à oscilação aumenta a velocidade de translação diminui. Isso se observa também no comportamento de  $V_z$  e  $\omega_\phi$ : quando  $V_z$  diminui a velocidade angular  $\omega_\phi$  aumenta, devido à predominância de componente de força de translação  $F_3$  no aumento de  $V_z$  ou à predominância da componente de força de oscilação  $F_{12}$  no aumento de  $\omega_\phi$ .

Quando observamos o ângulo  $\theta_0$  em função de  $F_{12}/F_3$  (figura 4.16), constatamos que este ângulo diminui quando  $F_{12}/F_3$  aumenta, implicando novamente que o momento magnético não se alinha com o campo magnético. Este ângulo  $\theta_0$  não é o valor inicial do ângulo e sim o valor médio do ângulo, uma vez que ele está oscilando em função do tempo. Se o momento magnético estivesse alinhado com o campo magnético este ângulo deveria ter o valor de  $\pi$  rad (Acosta-Avalos e Rodrigues, 2019). Assim, a bactéria magnetotática nada seguindo as linhas do campo geomagnético mas não com o corpo alinhado ao mesmo campo.

Essa dissertação mostra a necessidade de inserirmos uma inclinação no flagelo, visando uma representação mais realística do movimento de uma bactéria magnetotática. Por outro lado, esses mesmos resultados indicam que ainda há muito a ser explorado e compreendido sobre essas trajetórias. Julgamos oportuno considerar outras influências e efeitos em modelos futuros, como orientação do vetor momento magnético, forma do corpo celular e uma caracterização mais complexa do flagelo.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Acosta-Avalos D, Rodrigues E. (2019). On the motion of magnetotactic bacteria: theoretical predictions and experimental observations. *Eur. Bioph. J.* 48: 691 – 700.
- Bazylinski DA, Frankel RB. (2004). Magnetosome formation in prokaryotes. *Nat. Rev. Microbiol.* 2:217–230.
- Bellini S. (2009a). Further studies on “magneto-sensitive bacteria.” *Chin. J. Oceanol. Limnol.* 27:6 –12.
- Bellini S. (2009b). On a unique behavior of freshwater bacteria. *Chin. J. Oceanol. Limnol.* 27:3–5.
- Berg, H.C. (1993). *Random walks in biology*. Princeton University Press
- Blakemore, R. (1975) Magnetotactic bacteria. *Science* 190, 377–379
- Chen X., Berg H.C. (2000). Torque-speed relationship of the flagellar rotary motor of *Escherichia coli*. *Biophys. J.*; 78:1036–1041. doi: 10.1016/S0006-3495(00)76662-8.
- Crenshaw, H.C. (1990). Helical Orientation — A Novel Mechanism for the Orientation of Microorganisms. In: Alt, W., Hoffmann, G. (eds) *Biological Motion. Lecture Notes in Biomathematics*, vol 89. Springer, Berlin, Heidelberg. [https://doi.org/10.1007/978-3-642-51664-1\\_26](https://doi.org/10.1007/978-3-642-51664-1_26)
- Crenshaw, H. C. (1996). A New Look at Locomotion in Microorganisms: Rotating and Translating. *Integrative and Comparative Biology*, 36 (6), 608–618. doi:10.1093/icb/36.6.608
- Frankel, R., Blakemore, R., Wolfe, R. (1979) Magnetite in freshwater magnetotactic bacteria. *Science* 203, 1355–1356
- Frankel, R.B., Bazylinski, D.A., Johnson, M.S., Taylor, B.L. (1997). Magneto-aerotaxis in marine coccoid bacteria. *Biophys. J.* 73:994 –1000.
- Gould, J.L., Kirschvink, J.L., Deffeyes, K.S. (1978) Bees have magnetic remanence. *Science* 201, 1026–1028

Hindmarsh, A. (1983). ODEPACK, a Systematized Collection of ODE Solvers, in Scientific Computing, edited by Robert Stepleman, Elsevier, ISBN13: 978-0444866073, LC: Q172.S35.

Holyoak, M.; Casagrandi, R.; Nathan, R.; Revilla, E.; Spiegel, O. (2008). Trends and missing parts in the study of movement ecology. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105(49), 19060–19065. doi:10.1073/pnas.0800483105

Ishikawa T., Yoshida N., Ueno H., Wiedeman M., Imai Y., Yamaguchi T. (2011). Energy transport in a concentrated suspension of bacteria. *Phys. Rev. Lett.*;107:028102. doi: 10.1103/PhysRevLett.107.028102.

Jahn, T L; Bovee, E. C. (1965). Movement and Locomotion of Microorganisms. *Annual Review of Microbiology*, 19(1), 21–58. doi:10.1146/annurev.mi.19.100165.000321

Jennings, H. S.; Crosby, J. H. (1901). Studies on reactions to stimuli in unicellular organisms. – VII. The manner in which bacteria react to stimuli, especially to chemical stimuli. <https://doi.org/10.1152/ajplegacy.1901.6.1.31>

Kirschvink J.L., Jones D.S. and MacFadden B.J. (1985). Magnetic Biomineralization and Magnetoreception in Organisms. *Topics in Geobiology - v. 5* (Plenum Press, Nova Iorque, 1985)

Lefèvre CT, Bazylinski DA. (2013). Ecology, diversity, and evolution of magnetotactic bacteria. *Microbiol Mol Biol Rev.*; 77(3):497-526. doi: 10.1128/MMBR.00021-13. PMID: 24006473; PMCID: PMC3811606.

Lins U., Bazylinski D.A. (2009). Magnetotaxis, Editor(s): Moselio Schaechter, *Encyclopedia of Microbiology (Third Edition)*, Academic Press, 2009, Pages 229-241, ISBN 9780123739445, doi:10.1016/B978-012373944-5.00103-6.

Lowe G., Meister M., Berg H.C. (1987). Rapid rotation of flagellar bundles in swimming bacteria. *Nature* 325: 637 – 640.

Magariyama Y., Sugiyama S., Muramoto K., Maekawa Y., Kawagishi I., Imae Y., Kudo S. (1994). Very fast flagellar rotation. *Nature.*; 371:752. doi: 10.1038/371752b0.

Margato, B., Santos, M. dos, Barros, H. L. (2007). Propriedades magnéticas de organismos magnetotáticos: um trabalho multidisciplinar. *Revista Brasileira De Ensino De Física*, 29(3), 347–353. <https://doi.org/10.1590/S0102-47442007000300006>

- Minamino T., Terahara N., Kojima S., Namba K. (2018). Autonomous control mechanism of stator assembly in the bacterial flagellar motor in response to changes in the environment. *Mol. Microbiol.*; 109:723–734. doi: 10.1111/mmi.14092.
- Monteil, C. L., Lefevre, C. T. (2020). Magnetoreception in Microorganisms. *Trends in Microbiology*, 28(4), 266–275. doi:10.1016/j.tim.2019.10.012
- Morimoto Y.V., Minamino T. (2014). Structure and function of the bi-directional bacterial flagellar motor. *Biomolecules.*; 4:217–234. doi: 10.3390/biom4010217.
- Nathan, R., Getz, W. M., Revilla, E., Holyoak, M., Kadmon, R., Saltz, D., & Smouse, P. E. (2008). A movement ecology paradigm for unifying organismal movement research. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 105 (49), 19052–19059. doi:10.1073/pnas.0800375105
- Nogueira, F.S., de Barros, H.G.P.L. (1995). Study of the motion of magnetotactic bacteria. *Eur Biophys J* 24, 13–21. <https://doi.org/10.1007/BF00216826>
- Nordmann, G.C., Hochstoeger, T., Keays, D.A. (2017). Magnetoreception – a sense without a receptor. *PLoS Biol.* 15, e2003234. <https://doi.org/10.1371/journal.pbio.2003234>
- Purcell, E.M. (1977). Life at low Reynolds number, *American Journal of Physics* 45: 3-11
- Rehm, B., Consultant, D., Haghshenas, A., Paknejad, A. S., & Schubert, J. (2008). Situational Problems in MPD. *Managed Pressure Drilling*, 39–80. doi:10.1016/b978-1-933762-24-1.50008-5
- Rott, N (1990). Note on the History of the Reynolds Number., 22(1), 1–12. doi:10.1146/annurev.fl.22.010190.000245
- Silverman M., Simon M. (1974). Flagellar rotation and the mechanism of bacterial motility. *Nature*. 1974;249:73–74. doi: 10.1038/249073a0.
- Shum H., Gaffney E.A. (2012) Chapter 2 - Mathematical Models for Individual Swimming Bacteria, Editor(s): MinJun Kim, A. Agung Julius, Edward Steager, In *Micro and Nano Technologies, Microbiorobotics*, William Andrew Publishing, 2012, Pages 29-54

Vogel, S. (1994). *Life in Moving Fluids. The Physical Biology of Flow* (Second Edition). Princeton University Press, Princeton.

Walcott, C., Gould, J. L., & Kirschvink, J. L. (1979). Pigeons have magnets. *Science*, 205(4410), 1027–1028. <https://doi.org/10.1126/science.472725>

Yang, C., Chen, C., Ma, Q., Wu, L., & Song, T. (2012). Dynamic Model and Motion Mechanism of Magnetotactic Bacteria with Two Lateral Flagellar Bundles. *Journal of Bionic Engineering*, 9(2), 200–210. doi:10.1016/s1672-6529(11)60108-x

## **Anexo 1: Código fonte na linguagem de programação Python para a solução das equações de movimento.**

```
from typing import Tuple  
  
from time import time  
  
import numpy as np  
import scipy.integrate as integrate  
import matplotlib.pyplot as plt  
from numba import jit  
  
##### Parâmetros de Entrada #####  
  
# Constantes (conferir unidades)  
  
ALPHA = 795.77 #rad/s  
  
BETA = 24 #rad/s  
  
GAMMA = 80 #rad/s  
  
OMEGA = 250 #rad/s  
  
CSI = 159.15 #rad/s  
  
DELTA = 0.070 #rad  
  
V12 = 1061.03  
  
V3 = 212.21
```

```
# 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 do tempo a serem computados
```

```
t = np.linspace(0, 3 * np.pi, 5000)
```

```
print("t->", t)
```

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

```
@jit(nopython=True)
```

```
defderiv(
```

```
    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.
```

.....

**defcot(x):**

**# cotangente**

**return 1 / np.tan(x)**

**defcsc(x):**

**# cossecante**

**return 1 / np.sin(x)**

**defsec(x):**

**# secante**

**return 1 / np.cos(x)**

**phi, theta, psi, \_, \_, \_ = f**

**phi\_ = (**

**(- 1) \* (GAMMA \* np.sin(DELTA) \* np.cos(psi) - ALPHA \*  
np.sin(OMEGA\*t) \* np.cos(psi)**

**+ BETA \* np.sin(theta) - ALPHA \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) \*  
np.sin(psi)**

**+ CSI \* np.sin(DELTA) \* np.sin(psi) \* csc(theta) \* cot(psi)**

**+ GAMMA \* csc(theta) \* csc(psi) \* np.sin(DELTA)**

**- ALPHA \* csc(theta) \* csc(psi) \* np.sin(OMEGA\*t)**

**+ BETA \* cot(psi)**

)

**theta\_ = (**

**GAMMA \* np.sin(DELTA) \* np.cos(psi) - ALPHA \* np.sin(OMEGA\*t) \*  
np.cos(psi)**

**+ BETA \* np.sin(theta) - ALPHA \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) \*  
np.sin(psi)**

**+ CSI \* np.sin(DELTA) \* np.sin(psi)**

)

**psi\_ = (**

**- GAMMA \* np.cos(DELTA)**

**- (((- 1) \* (GAMMA \* np.sin(DELTA) \* np.cos(psi) - ALPHA \*  
np.sin(OMEGA\*t) \* np.cos(psi)**

**+ BETA \* np.sin(theta) - ALPHA \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) \*  
np.sin(psi)**

**+ CSI \* np.sin(DELTA) \* np.sin(psi) \* csc(theta) \* cot(psi)**

**+ GAMMA \* csc(theta) \* csc(psi) \* np.sin(DELTA)**

**- ALPHA \* csc(theta) \* csc(psi) \* np.sin(OMEGA\*t)**

**+ BETA \* cot(psi) \* np.cos(theta))**

)

**x\_ = (**

**(V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) - V3 \* np.sin(DELTA))**

**\* (np.cos(psi) \* np.cos(phi) - np.cos(theta) \* np.sin(phi) \* np.sin(psi))**

+ (V12 \* np.sin(OMEGA\*t)) \* (- np.sin(psi) \* np.cos(phi) - np.cos(theta) \* np.sin(phi) \* np.cos(psi))

+ (V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.sin(DELTA) + V3 \* np.cos(DELTA)) \* (np.sin(theta) \* np.sin(phi))

)

y\_ = (

(V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) - V3 \* np.sin(DELTA))

\* (np.cos(psi) \* np.sin(phi) + np.cos(theta) \* np.cos(phi) \* np.sin(psi))

+ (V12 \* np.sin(OMEGA\*t)) \* (- np.sin(psi) \* np.sin(phi) + np.cos(theta) \* np.cos(phi) \* np.cos(psi))

+ (V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.sin(DELTA) + V3 \* np.cos(DELTA)) \* (- np.sin(theta) \* np.cos(phi))

)

z\_ = (

(V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.cos(DELTA) - V3 \* np.sin(DELTA))

\* (np.sin(psi) \* np.sin(theta))

+ (V12 \* np.sin(OMEGA\*t)) \* (np.cos(psi) \* np.sin(theta))

+ (V12 \* np.cos(OMEGA\*t) \* np.sin(DELTA) + V3 \* np.cos(DELTA)) \* np.cos(theta)

)

return (phi\_, theta\_, psi\_, x\_, y\_, z\_)

```

# Resolve a equação

print("startingintegration...")

t0 = time()

f = integrate.odeint(deriv, f0, t, mxstep=5000000)

print(f"Finishedintegrating in {time()-t0:.2f} s")

# print(f)

# Calcula as derivadas

derivadas = np.array([deriv(variaveis, tempo) for variaveis, tempo in zip(f, t)])

# Graficando as 6 funções em relação ao tempo

# Gráfico

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(r"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("edo_solucao_0006.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("edo_solucão_z_pto_0006.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("edo_solucão_3d_0006.pdf")
```

```
# Junta os vetores tempo (t) e a matriz com os valores da integração
```

```
# Note que é necessário mudar o formato do vetor 't'.
```

```
matriz = np.hstack((t.reshape((-1, 1)), f))
```

```
# Adiciona a matriz a derivada de z
```

```
matriz = np.column_stack((matriz, derivadas[:, -1]))
```

```
# Salva a matriz final em um arquivo chamado 'data.csv'
```

```
np.savetxt("data_0006.csv", matriz, delimiter=",",
```

```
header="t,phi,theta,psi,x,y,z,z_pto")
```

```
# Salva as derivadas em uma arquivo
```

```
derivadas = np.hstack((t.reshape((-1, 1)), derivadas))
```

```
np.savetxt(
```

```
    "data_derivadas_0006.csv",
```

```
    derivadas,
```

```
delimiter=",",
```

```
    header="t,phi_pto,theta_pto,psi_pto,x_pto,y_pto,z_pto",
```

```
)
```

## Anexo 2: Parâmetros das coordenadas x e y em função de $\beta$ e $\delta$

$\beta$	$\delta$	$A_{x1}$	$A_{x2}$	$A_{y1}$	$A_{y2}$	$f_{x1}$	$f_{x2}$	$f_{y1}$	$f_{y2}$
3	0,035	0,356	0,868	0,346	0,866	2,784	36,987	2,784	36,987
3	0,07	0,558	0,619	0,552	0,618	2,916	36,854	2,916	36,854
3	0,105	0,879	0,763	0,886	0,764	3,049	36,722	3,049	36,722
3	0,14	0,859	0,815	0,888	0,819	3,182	36,589	3,182	36,589
3	0,175	1,126	0,867	1,126	0,868	3,447	36,324	3,447	36,324
6	0,035	0,359	0,880	0,359	0,880	2,784	36,987	2,784	36,987
6	0,07	0,558	0,608	0,547	0,607	2,916	36,854	2,916	36,854
6	0,105	0,843	0,716	0,845	0,716	3,049	36,722	3,049	36,722
6	0,14	0,972	0,863	0,983	0,865	3,182	36,589	3,182	36,589
6	0,175	1,185	0,860	1,186	0,859	3,447	36,324	3,447	36,324
12	0,035	0,340	0,917	0,340	0,917	2,784	36,987	2,784	36,987
12	0,07	0,527	0,593	0,516	0,592	2,916	36,854	2,916	36,854
12	0,105	0,683	0,607	0,696	0,605	3,049	36,854	3,049	36,854
12	0,14	1,073	0,830	1,077	0,830	3,182	36,589	3,182	36,589
12	0,175	0,891	0,608	0,879	0,611	3,447	36,457	3,447	36,457
24	0,035	0,182	0,748	0,179	0,748	2,784	36,987	2,783	36,987
24	0,07	0,523	0,803	0,525	0,804	2,916	36,854	2,916	36,854
24	0,105	0,556	0,778	0,551	0,778	2,916	36,854	2,916	36,854
24	0,14	0,839	0,859	0,836	0,858	3,049	36,722	3,049	36,721
24	0,175	0,802	0,749	0,787	0,748	3,181	36,589	3,181	36,589
48	0,035	0,125	0,800	0,122	0,799	3,049	36,722	3,049	36,722
48	0,07	0,251	0,679	0,249	0,68	3,182	36,722	3,182	36,722
48	0,105	0,472	0,737	0,469	0,736	3,182	36,589	3,182	36,589
48	0,14	0,673	0,915	0,674	0,915	3,182	36,589	3,182	36,589
48	0,175	0,599	0,790	0,595	0,791	3,182	36,589	3,182	36,589
60	0,035	0,139	0,882	0,141	0,881	3,314	36,457	3,314	36,457
60	0,07	0,282	0,916	0,282	0,915	3,314	36,457	3,314	36,457
60	0,105	0,412	0,942	0,412	0,942	3,314	36,457	3,314	36,457
60	0,14	0,493	0,980	0,488	0,909	3,314	36,457	3,314	36,457
60	0,175	0,447	0,754	0,451	0,753	3,314	36,457	3,314	36,457

### Anexo 3: Parâmetros da coordenada z em função de $\beta$ e $\delta$

$\beta$	$\delta$	$V_z$	$A_z$	$f_z$
3	0,035	36,364	0,12	39,77
3	0,07	35,029	0,226	39,78
3	0,105	33,073	0,317	39,77
3	0,14	30,780	0,395	39,77
3	0,175	28,388	0,46	39,83
6	0,035	34,506	0,114	39,77
6	0,07	33,165	0,222	39,77
6	0,105	31,184	0,317	39,77
6	0,14	28,837	0,398	39,77
6	0,175	26,368	0,463	39,77
12	0,035	30,841	0,107	39,77
12	0,07	29,589	0,212	39,77
12	0,105	27,679	0,305	39,77
12	0,14	25,330	0,384	39,77
12	0,175	22,771	0,455	39,77
24	0,035	23,651	0,09	39,77
24	0,07	22,745	0,178	39,77
24	0,105	21,281	0,263	39,77
24	0,14	19,332	0,338	39,77
24	0,175	17,001	0,409	39,77
48	0,035	9,759	0,064	39,77
48	0,07	9,334	0,127	39,77
48	0,105	8,627	0,188	39,77
48	0,14	7,641	0,247	39,77
48	0,175	6,379	0,309	39,77
60	0,035	3,187	0,056	39,77
60	0,07	2,885	0,112	39,77
60	0,105	2,382	0,167	39,77
60	0,14	1,677	0,221	39,77
60	0,175	0,771	0,274	39,77

#### Anexo 4: Parâmetros das coordenadas angulares em função de $\beta$ e $\delta$

$\beta$	$\delta$	$\omega_\phi$	$\theta_0$	$A_\phi$	$A_\psi$	$A_\theta$
3	0,035	232,55	2,38	0,175	0,226	0,162
3	0,07	231,95	2,36	0,354	0,449	0,33
3	0,105	230,99	2,33	0,553	0,663	0,482
3	0,14	229,72	2,29	0,766	0,89	0,625
3	0,175	228,19	2,25	1,046	1,117	0,659
6	0,035	232,54	2,38	0,171	0,218	0,158
6	0,07	231,96	2,36	0,347	0,439	0,32
6	0,105	231,03	2,34	0,538	0,654	0,489
6	0,14	229,79	2,29	0,754	0,874	0,648
6	0,175	228,30	2,26	0,998	0,998	0,656
12	0,035	232,46	2,38	0,156	0,201	0,145
12	0,07	231,97	2,37	0,316	0,404	0,297
12	0,105	231,17	2,34	0,493	0,605	0,398
12	0,14	230,06	2,31	0,691	0,811	0,522
12	0,175	228,69	2,27	0,925	1,04	0,629
24	0,035	232,09	2,39	0,122	0,158	0,112
24	0,07	231,80	2,38	0,248	0,317	0,229
24	0,105	231,31	2,36	0,381	0,478	0,353
24	0,14	230,59	2,34	0,529	0,647	0,476
24	0,175	229,64	2,31	0,703	0,826	0,611
48	0,035	230,47	2,39	0,077	0,099	0,068
48	0,07	230,37	2,39	0,155	0,198	0,14
48	0,105	230,20	2,39	0,235	0,3	0,214
48	0,14	229,97	2,38	0,32	0,403	0,291
48	0,175	229,65	2,37	0,411	0,506	0,37
60	0,035	229,24	2,40	0,064	0,081	0,056
60	0,07	229,18	2,40	0,128	0,165	0,113
60	0,105	229,09	2,39	0,196	0,248	0,173
60	0,14	228,95	2,39	0,264	0,332	0,233
60	0,175	228,77	2,38	0,337	0,416	0,300

**Anexo 5: Parâmetros das coordenadas x e y em função  $F_{12}/F_3$** 

$F_{12}/F_3$	$A_{x1}$	$A_{x2}$	$A_{y1}$	$A_{y2}$	$A_{x2}/A_{x1}$	$f_{x1}$	$f_{x2}$	$f_{y1}$	$f_{y2}$
0,1	0,40	0,175	0,40	0,175	0,44	12,73	27,04	12,73	27,04
0,5	0,55	0,776	0,55	0,776	1,41	10,07	29,70	10,07	29,70
0,8	1,12	1,019	1,12	1,018	0,91	6,23	33,54	6,23	33,54
1	3,28	0,704	3,26	0,704	0,21	3,05	36,72	3,05	36,72
2	0,049	1,28	0,049	1,28	26,12	17,61	57,36	17,61	57,36
5	0,046	1,07	0,046	1,07	23,26	89,48	129,36	89,48	129,36

**Anexo 6: Parâmetros da coordenada z em função  $F_{12}/F_3$** 

$F_{12}/F_3$	$V_z$	$A_z$	$f_z$
0,1	208,54	0,02	39,77
0,5	183,35	0,11	39,77
0,8	152,09	0,24	39,77
1	124,36	0,46	39,77
2	75,66	0,19	39,77
5	13,98	0,10	39,77

**Anexo 7: Parâmetros das coordenadas angulares em função  $F_{12}/F_3$** 

$F_{12}/F_3$	$\omega_\phi$	$\theta_0$	$A_\phi$	$A_\psi$	$A_\theta$
0,1	79,97	2,98	0,667	0,549	0,107
0,5	186,57	2,69	0,412	0,424	0,196
0,8	210,68	2,47	0,386	0,438	0,287
1	230,66	2,34	0,531	0,648	0,477
2	360,38	2,06	0,005	0,097	0,073
5	812,54	1,78	0,044	0,02	0,01