

Una aproximación computacional para generar patrones de rugosidad superficial del pericarpio y la testa de algunas plantas: coincidencias en los resultados numéricos¹

A Computer Assisted Approximation for the Generation of Patterns of Superficial Coarseness of the Pericarp and of the Seedhead of Some Plants: Coincidences in the Numerical Results²

Uma aproximação computacional para gerar padrões de rugosidade superficial do pericarpio e a casca de algumas plantas: coincidências nos resultados numéricos³

Código SICI: 0123-2126(201206)16:1<27:UACPRS>2.3.TX;2-6

Diego Garzón-Alvarado⁴

Angélica María Ramírez-Martínez⁵

¹ Fecha de recepción: 26 de enero de 2011. Fecha de aceptación: 21 de junio de 2011. Artículo desarrollado por el Grupo de Modelado y Métodos Numéricos en Ingeniería, de la Universidad Nacional de Colombia y el Grupo de Bioingeniería de la Universidad Central, Bogotá, Colombia.

² Submitted on January 26, 2011. Accepted on June 21, 2011. Developed by the research group Modelado y Métodos Numéricos en Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia; and the research group Grupo de Bioingeniería, Universidad Central, Bogotá, Colombia.

³ Data de recepção: 26 de janeiro de 2011. Data de aceitação: 21 de junho de 2011. Artigo desenvolvido pelo Grupo de Modelagem e Métodos Numéricos em Engenharia, da Universidade Nacional da Colômbia e o Grupo de Bioengenharia da Universidade Central, Bogotá, Colômbia.

⁴ Ingeniero mecánico, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. Máster en Ingeniería Mecánica, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia. Doctor en Mecánica Computacional, Universidad de Zaragoza, España. Profesor asociado, Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica, Universidad Nacional de Colombia. Correo electrónico: dagarzona@bt.unal.edu.co.

⁵ Ingeniera mecánica, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, Colombia. Maestría y Doctorado Ingeniera biomédica, Universidad de Zaragoza, España. Profesora del Departamento de Ingeniería Mecánica, Fundación Universidad Central, Bogotá, Colombia. Correo electrónico: aramirez3@ucentral.edu.co.

Resumen

En este artículo se propone un modelo fenomenológico que describe la formación de los patrones de la corteza (testa) de las semillas vegetales mediante ecuaciones de reacción-difusión con parámetros en el espacio de Turing. A fin de estudiar la formación de patrones se resuelven varios ejemplos numéricos sobre geometrías simplificadas de una semilla. Para la solución numérica se utilizó el método de los elementos finitos, en conjunto con el método de Newton-Raphson para la aproximación de las ecuaciones diferenciales parciales no lineales. Los ejemplos numéricos muestran que el modelo puede representar la formación de diferentes tipos de cortezas de semillas vegetales.

Palabras clave

Botánica, pruebas de descendencia, desarrollo de las semillas, método de elementos finitos prueba de Turing.

Abstract

This article proposes a phenomenological model that describes the pattern formation of the seedcoat (seedhead) of plant seeds through reaction-diffusion equations with parameters within Turing's space. With the purpose of studying pattern formation, several numerical examples concerning simplified geometries of a seed are solved. The finite element method is used for the numerical solution along with the Newton-Raphson method for the approximation of partial non-linear differential equations. The numerical examples show that the model may represent the formation of different types of plant seedcoats.

Key words

Botanics, progeny testing, seeds development, finite element method Turing test.

Resumo

Neste artigo se propõe um modelo fenomenológico que descreve a formação dos padrões da casca das sementes vegetais mediante equações de reação-difusão com parâmetros no espaço de Turing. Com o objetivo de estudar a formação de padrões resolvem-se vários exemplos numéricos sobre geometrías simplificadas de uma semente. Para a solução numérica utilizou-se o método dos elementos finitos, em conjunto com o método de Newton-Raphson para a aproximação das equações diferenciais parciais não lineares. Os exemplos numéricos mostram que o modo pode representar a formação de diferentes tipos de cascas de sementes vegetais.

Palavras chave

Botânica, provas de descendência, desenvolvimento das sementes, método de elementos finitos-processamento de dados, prova de Turing.

Introducción

Todas las semillas están rodeadas por una cubierta llamada testa, la cual puede tener muy distintas texturas y apariencias (Font Quer, 1982). Generalmente es dura y está formada por una capa interna y una externa de cutícula y una o más capas de tejido grueso que sirve de protección. En algunas semillas dichas estructuras de la testa están ausentes y quedan al descubierto el pericarpio del fruto y no la testa, por ejemplo, en el caso del girasol (*Helianthus annuus*), que pertenece a la familia de las compuestas, y de la lechuga (Parodi, 1987; Strassburger, 1994).

La función de la testa es conferir impermeabilidad al agua y a los gases en la semilla. Esto le permite regular el metabolismo y el crecimiento (Parodi, 1987). Además, esta parte de la semilla es fuerte e impide la entrada de parásitos (Font Quer, 1982). Por otro lado, las cubiertas duras pueden impedir daños mecánicos (Parodi, 1987). En consecuencia, la testa es un modulador de las interacciones internas de la semilla y su medio ambiente (Karcz, Ksiazczyk y Maluszynska, 2005).

Al igual que las formas de las semillas, la testa exhibe una compleja y diversa morfología y anatomía, lo que provee una característica taxonómica de alto valor (Barthlott, 1981 y 1990). En especial, la macroestructura de la testa varía ampliamente entre diferentes especies de plantas. Adicionalmente, se han encontrado características microestructurales particulares en la superficie de las semillas (Karcz, Ksiazczyk y Maluszynska, 2005).

La micromorfología de la testa ha sido estudiada con el uso de microscopía electrónica. Por ejemplo (Karcz, Ksiazczyk y Maluszynska, 2005) han investigado los patrones de las superficies de las testas y han encontrado superficies reticuladas, aleatoriamente reticuladas y rugosas. En aquel artículo se presentó una buena correlación experimental entre las superficies estudiadas y su clasificación taxonómica. De igual manera, se ha estudiado la testa de la Musaceae por microscopía electrónica y microscopía de luz (Graven, De Koster, Boon y Bouman, 1996). En dicho artículo se explora la composición molecular de la

superficie con el ánimo de ampliar el conocimiento del funcionamiento de la testa de esta especie. Sin embargo, el trabajo sobre el estudio de la corteza de las semillas se ha enfocado, principalmente, en la variación de las propiedades mecánicas y germinativas de la testa (8 nn), en el efecto del almacenamiento sobre las características bioquímicas y mecánicas (Heatherly, Kenty y Kilen, 1995) y el efecto que la testa tiene en la protección ante diferentes enfermedades vegetales (Edde y Amatobi, 2003).

Desde el punto de vista de la morfología y evolución de la testa se tiene escaso conocimiento (Graven, De Koster, Boon y Bouman, 1996). La literatura sobre morfología, bioquímica e histoquímica en semillas está centrada en la composición del embrión y el endospermo (Graven, De Koster, Boon y Bouman, 1996; Strassburger, 1994). La interpretación funcional y la explicación de la aparición de la morfología de la cubierta de la semilla es un campo casi inexplorado de investigación, aunque en la actualidad es posible describir la anatomía con más detalle mediante técnicas microscópicas e histoquímicas y estudiar la composición de las capas de la testa de la semilla madura con técnicas de espectrometría de masa (Graven, De Koster, Boon y Bouman, 1996).

A partir de este punto de vista, el objetivo de este artículo es proponer un modelo fenomenológico-matemático sobre la aparición de diferentes tipos de patrones sobre las cubiertas de la semilla. Con este fin, se utilizan las ecuaciones de reacción-difusión con parámetros que pertenecen al espacio de Turing. Por lo tanto, se encuentran patrones estables en el tiempo e inestables en el espacio que pueden representar la morfología de la testa. En este sentido, la hipótesis se centra en un sistema bioquímico de reacción-difusión que tiene un activador y un inhibidor que permite generar el patrón superficial de la semilla.

Siguiendo un planteamiento similar al utilizado en (Strassburger, 1994; Lefevre y Mangin, 2010; Cartwright, 2002), se utiliza el modelo de reacción de glucólisis y de Schnakenberg, para simular la aparición de los patrones de la corteza de las semillas (rugosidad superficial). Para la solución de las ecuaciones de reacción-difusión se presenta un método de solución en superficies en tres dimensiones bajo el uso de la formulación lagrangiana total. Este trabajo se enfoca en desarrollar los patrones superficiales cualitativamente próximos a la rugosidad superficial que presentan algunas semillas vegetales. En futuros trabajos se desarrollarán aspectos cuantitativos que permitan hacer una comparación exhaustiva de los patrones obtenidos y la realidad.

El artículo está organizado como sigue: en primer lugar, se muestran las ecuaciones de reacción-difusión y las condiciones necesarias para generar patro-

nes de Turing; en segundo lugar, se indica el procedimiento de solución de las ecuaciones no lineales resultantes; en tercer lugar, se presentan los ejemplos numéricos para diferentes tipos de patrones de formación de la testa. Por último, se presentan la discusión y las conclusiones.

1. Materiales y métodos

1.1. Sistema de reacción-difusión

Siguiendo el enfoque bioquímico, se puede suponer que un sistema de reacción difusión (RD) puede controlar la formación de los patrones que se presentan en la corteza de las semillas. Para este fin se define un sistema de RD, para dos especies, dado por (1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} - \nabla^2 u_1 &= \gamma \cdot f(u_1, u_2) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} - d \nabla^2 u_2 &= \gamma \cdot g(u_1, u_2) \end{aligned} \quad (1)$$

Donde u_1 y u_2 son las concentraciones de las especies químicas presentes en los términos de reacción, f y g ; d es el coeficiente de difusión adimensional y γ es una constante de adimensionalización del sistema (Madzvamuse, 2000).

Los sistemas de RD han sido estudiados ampliamente para determinar su comportamiento en diferentes escenarios de parámetros (Madzvamuse, 2000; Meinhardt, 1982), geométricos (Meinhardt, 1982; Madzvamuse, 2005) y para diferentes aplicaciones biológicas (Madzvamuse et ál., 2002 y 2003; Madzvamuse, Maini y Wathen, 2003). Una de las áreas en que se ha desarrollado gran trabajo sobre las ecuaciones de RD es la formación de patrones que son estables en el tiempo e inestables en el espacio (Geirer y Meinhardt, 1972; Chaplain, Ganesh y Graham, 2001). En especial, Turing (1952), en su libro *The Chemical Basis of Morphogenesis*, desarrolló las condiciones necesarias para la formación de patrones espaciales. Las condiciones para la formación de patrones determinan el espacio de Turing dado por las siguientes restricciones (2):

$$\begin{aligned} f_{u_1} g_{u_2} - f_{u_2} g_{u_1} &> 0 \\ f_{u_1} + g_{u_2} &< 0 \\ df_{u_1} + g_{u_2} &> 0 \\ \left(df_{u_1} + g_{u_2} \right)^2 &> 4d \left(f_{u_1} g_{u_2} - f_{u_2} g_{u_1} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

Donde f_1 y g_1 indican las derivadas de las funciones de reacción con respecto a las variables de concentración, por ejemplo $f_u = \frac{\partial f}{\partial u}$ (Cartwright, 2002). Estas restricciones están evaluadas en el punto de equilibrio que se obtiene haciendo $f(u_1, u_2) = g(u_1, u_2) = 0$.

Las ecuaciones (1) y sus restricciones (2) permitieron el desarrollo de rama de investigación de los sistemas dinámicos (Cartwright, 2002; Geirer y Meinhardt, 1972): las inestabilidades de Turing. La teoría acerca de los patrones de Turing ha permitido explicar la formación de patrones biológicamente complejos, como las manchas que se encuentran en la piel de algunos animales (Madzvamuse et ál., 2003; Madzvamuse, Maini y Wathen, 2003) y en problemas de morfogénesis (Lefevre y Mangin, 2010). Además, recientemente se ha comprobado, de forma experimental, que el comportamiento de algunos sistemas de RD generan patrones de ondas viajeras y patrones espaciales estables (Mei, 2000; De Wit, 1999; Maini, Painter y Chau, 1997; Kapral y Showalter, 1995).

En este artículo, las ecuaciones utilizadas para predecir la formación de patrones son las de glucólisis (Garzón, 2007) y las de Schnakenberg (Garzón, 2007; Madzvamuse, 2000), dadas por:

$$\begin{aligned} f(u_1, u_2) &= \delta - \kappa u_1 - u_1 u_2^2 \\ g(u_1, u_2) &= \kappa u_1 + u_1 u_2^2 - u_2 \end{aligned} \quad (3a)$$

Y

$$\begin{aligned} f(u_1, u_2) &= a - u_1 + u_1^2 u_2 \\ g(u_1, u_2) &= b - u_1^2 u_2 \end{aligned} \quad (3b)$$

Donde δ , κ , a y b son parámetros adimensionales del modelo. Los puntos de estado estable están dados por $(u_1, u_2)_0 = \left(\frac{\delta}{\kappa + \delta^2}, \delta \right)$ y $(u_1, u_2)_0 = \left(a + b, \frac{b}{(a+b)^2} \right)$ para el modelo de glucólisis y de Schnakenberg, respectivamente. Aplicando las restricciones (2) al modelo (3) en el punto de estado estable $(u_1, u_2)_0$ se obtiene un conjunto de restricciones que permite establecer el sitio geométrico de los parámetros en el espacio de Turing (Garzón, 2007).

1.2. Deformación de la corteza de las semillas

Para deformar la corteza de la semilla se utilizaron las ideas sugeridas en (Lefevre y Mangin, 2010; Harrison, Wehner y Holloway, 2002; Holloway y Harrison, 2008), donde la superficie se deforma en función de las sustancias (morfogen) presentes en el dominio. Esto es, la superficie S se deforma en función de su

normal N y de la cantidad de activador existente en cada punto material; por lo tanto:

$$\frac{dS}{dt} = Ku_2(x, y, z)\mathbf{N} \quad (4)$$

Donde K es una constante que determina la tasa de crecimiento.

Al incluirse el término de crecimiento de la superficie ecuación (4), se modifican las ecuaciones (1), donde se presenta un nuevo término que tiene en cuenta la convección y la dilatación del dominio, dado por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} + \text{div}(u_1 \mathbf{v}) - \nabla^2 u_1 &= \gamma \cdot f(u_1, u_2) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \text{div}(u_2 \mathbf{v}) - d\nabla^2 u_2 &= \gamma \cdot g(u_1, u_2) \end{aligned} \quad (5)$$

Donde el término nuevo $\text{div}(u_i \mathbf{v})$ incluye la convección y dilatación que se debe al crecimiento del dominio, dado por la velocidad $\mathbf{v} = dS/dt$.

Para solucionar el sistema de reacción difusión convección descrito en (5) se utiliza el método de los elementos finitos (Hughes, 2003) y el método de Newton-Raphson (Hoffman, 1992) para solucionar el sistema no lineal de ecuaciones diferenciales parciales que se derive de la formulación. La imposición del campo de crecimiento de los patrones de la superficie de la testa se hace mediante la solución de la ecuación (4), con lo que se obtiene la nueva configuración (actual) y el campo de velocidades que se incluirá en el problema de RD.

En primer lugar se muestra la solución de las ecuaciones de reacción difusión con ayuda del método de los elementos finitos.

1.3. Solución del sistema de reacción-convección-difusión

La formulación del sistema de RD incluyendo el transporte convectivo se puede escribir como (6) (Garzón, 2007):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} + \text{div}(u_1 \mathbf{v}) &= \nabla^2 u_1 + \gamma \cdot f(u_1, u_2) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \text{div}(u_2 \mathbf{v}) &= d\nabla^2 u_2 + \gamma \cdot g(u_1, u_2) \end{aligned} \quad (6)$$

Donde u_1 y u_2 son las variables químicas del sistema de reacción difusión. Esta ecuación también se puede escribir en términos de la derivada total (7) (Garzón, 2007):

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} + u_1 \operatorname{div}(\mathbf{v}) &= \nabla^2 u_1 + \gamma \cdot f(u_1, u_2) \\ \frac{du_2}{dt} + u_2 \operatorname{div}(\mathbf{v}) &= d\nabla^2 u_2 + \gamma \cdot g(u_1, u_2) \end{aligned} \tag{7}$$

Donde se debe tener en cuenta que $\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{v} \bullet \operatorname{grad}(u)$ (Holzapfel, 2000; Belytschko, Liu y Moran, 2000). Según como se describe en (Holzapfel, 2000), se llega a que el sistema de RD-convección en la configuración inicial o de referencia Ω_0 (con coordenadas $\mathbf{X}[\mathbf{x}]$), está dada por la siguiente ecuación escrita en términos de las coordenadas materiales:

$$\frac{dU_1}{dt} + U_1 \frac{\partial v^i}{\partial x^i} = \gamma F(U_1, U_2) + (F^{-1})'_i \frac{\partial}{\partial X^i} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x^j} \right) \delta^{ij} \tag{8a}$$

$$\frac{dU_2}{dt} + U_2 \frac{\partial v^i}{\partial x^i} = \gamma G(U_1, U_2) + d(F^{-1})'_i \frac{\partial}{\partial X^i} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x^j} \right) \delta^{ij} \tag{8b}$$

Donde U_1 y U_2 son las concentraciones de cada una de las especies en la configuración inicial Ω_0 , esto es, $U(\mathbf{X}, t) = u(\mathbf{x}[\mathbf{X}, t], t)$. Además, $(F^{-1})'_i$ es el inverso del gradiente de deformación dado por $F'_i = \frac{\partial x^i}{\partial X^i}$ (Holzapfel, 2000), x^i son las coordenadas actuales (en cada instante de tiempo) y X^i son las coordenadas iniciales (de referencia, donde se realizarán los cálculos) (Holzapfel, 2000; Belytschko, Liu y Moran, 2000). Por lo tanto, a partir de la ecuación (8) se obtiene la forma débil general por lo que se llega a (9) (Hughes, 2003).

$$\int_{\Omega_0} W \left(\frac{d(U)}{dt} J + J \operatorname{div}(\mathbf{v}) U - \gamma F(U, V) J \right) d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \frac{\partial W}{\partial X^i} J \underbrace{\delta^{ij} (F^{-1})'_i (F^{-1})'_j}_{(C^{-1})^u} \frac{\partial U}{\partial X^j} d\Omega_0 = 0 \tag{9}$$

Donde U es cualquiera de las dos especies en estudio (U_1 o U_2), W es la función de peso (o ponderación), J es el jacobiano (y es igual al determinante del gradiente de deformación F) y C^{-1} es el inverso del tensor Cauchy-Green por la derecha (Hughes, 2003; Hoffman, 1992).

En el caso de la formulación lagrangiana total, el cálculo se realiza, siempre, en la configuración inicial de referencia. Por lo tanto, la solución del sistema (8) y (9) se inicia con la desratización de las variables U_1 y U_2 mediante (10) (Hughes, 2003):

$$U_1^h = \mathbf{N}_U(X, Y) \mathbf{U}_1 = \sum_{p=1}^{nmod} N_p U_{1p} \tag{10a}$$

$$U_2^h = \mathbf{N}_V(X, Y) \mathbf{U}_2 = \sum_{p=1}^{nmod} N_p U_{2p} \tag{10b}$$

Donde $nnod$ es el número de nodos, \mathbf{U}_1 y \mathbf{U}_2 son los vectores que contienen los valores de U_1 y U_2 en los puntos nodales, y el superíndice h indica la discretización de la variable en elementos finitos. Mediante la elección de las funciones de peso igual a las funciones de forma (Galerkin estándar) se obtienen los vectores residuo del método de Newton-Raphson, dado por (Hughes, 2003) (11):

$$\mathbf{r}_{\mathbf{U}_1}^h = \int_{\Omega_0} N_p J \frac{dU_1^h}{dt} d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} N_p \frac{dJ}{dt} U_1^h d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} N_p J \gamma F(U_1, U_2) d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \frac{\partial N_p}{\partial X^i} J (C^{-1})^{ij} \frac{\partial U_1}{\partial X^j} d\Omega_0 \quad (11a)$$

$$\mathbf{r}_{\mathbf{U}_2}^h = \int_{\Omega_0} N_p J \frac{dU_2^h}{dt} d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} N_p \frac{dJ}{dt} U_2^h d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} N_p J \gamma G(U_1, U_2) d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \frac{\partial N_p}{\partial X^i} dJ (C^{-1})^{ij} \frac{\partial U_2}{\partial X^j} d\Omega_0 \quad (11b)$$

Con $p = 1, \dots, nnod$. Donde $\mathbf{r}_{\mathbf{U}_1}^h$ y $\mathbf{r}_{\mathbf{U}_2}^h$ son los vectores residuos que están calculados en el nuevo tiempo. Por su parte, cada una de las posiciones (entradas) de la matriz jacobiana está dada por (12):

$$\frac{\partial \mathbf{r}_{\mathbf{U}_1}^h}{\partial \mathbf{U}_1} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_0} N_p J N_s d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} N_p \frac{dJ}{dt} N_s d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} N_p \gamma J \frac{\partial F(U_1, U_2)}{\partial U_1} N_s d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \frac{\partial N_p}{\partial X^i} J (C^{-1})^{ij} \frac{\partial N_s}{\partial X^j} d\Omega_0 \quad (12a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}_{\mathbf{U}_1}^h}{\partial \mathbf{U}_2} = - \int_{\Omega_0} N_p \gamma J \frac{\partial F(U_1, U_2)}{\partial U_2} N_s d\Omega_0 \quad (12b)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}_{\mathbf{U}_2}^h}{\partial \mathbf{U}_1} = - \int_{\Omega_0} N_p \gamma J \frac{\partial G(U_1, U_2)}{\partial U_1} N_s d\Omega_0 \quad (12c)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}_{\mathbf{U}_2}^h}{\partial \mathbf{U}_2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega_0} N_p J N_s d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} N_p \frac{dJ}{dt} N_s d\Omega_0 - \int_{\Omega_0} N_p \gamma J \frac{\partial G(U_1, U_2)}{\partial U_2} N_s d\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \frac{\partial N_p}{\partial X^i} dJ (C^{-1})^{ij} \frac{\partial N_s}{\partial X^j} d\Omega_0 \quad (12d)$$

Donde J es el determinante del gradiente de deformación, C^{-1} es el inverso del tensor de Cauchy-Green por la derecha y $p, s = 1, \dots, nnod$ e $I, J = 1, \dots, dim$. Donde dim representa la dimensión en la cual se resuelve el problema. Por lo tanto, utilizando las ecuaciones (11) y (12) se puede implementar el método de Newton-Raphson para solucionar el sistema de RD utilizando su descripción material. En este sentido, se debe anotar que la integración de (11) y (12) se hace sobre la configuración inicial (Holzapfel, 2000). Una deducción detallada de las ecuaciones A.

1.4. Aplicación del campo de velocidades

Para calcular el movimiento de la malla y la velocidad a la cual se deforma el dominio se utiliza la ecuación (4), la cual se integra mediante el método de Euler, dado por (Hoffman, 1992):

$$S_{t+dt} = S_t + Ku_2(x, y, z, t) \mathbf{N} dt \quad (13)$$

Donde S_{t+dt} y S_t son la configuración de la superficie en el estado t y $t+dt$. Por lo tanto, la velocidad se obtiene mediante (14):

$$\mathbf{v} = \frac{S_{t+dt} - S_t}{dt} \quad (14)$$

Donde el término de velocidad tiene dirección y magnitud que depende del punto material de la superficie S .

1.5. Aspectos de la implementación computacional

Para implementar el modelo de RD en elementos finitos se utiliza la formulación descrita. Es importante anotar que, aunque la superficie se encuentra orientada en el espacio 3D, los cálculos numéricos se hacen en 2D. Para este objetivo se encuentra la normal a cada elemento (Z') y se ubican los ejes primos ($X'Y'$) formando un plano paralelo al plano del elemento. Para enmallar la geometría se utilizan elementos triangulares de primer orden con tres nodos. Por lo tanto, el cálculo se simplifica pasando de un sistema 3D a un sistema bidimensional en el cual se solucionan los modelos de RD en cada instante de tiempo. La relación existente entre los ejes $X'Y'Z'$ y XYZ se puede obtener mediante una matriz de transformación T (Holzapfel, 2000).

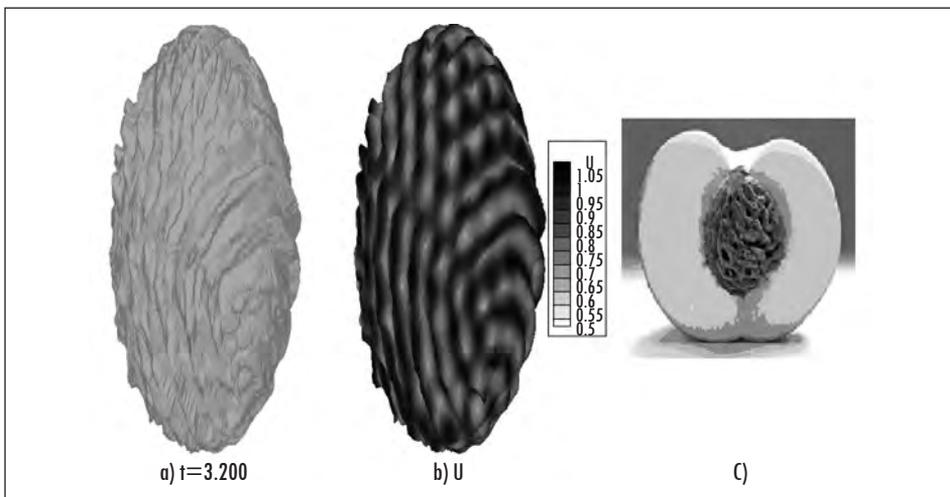
Para solucionar el sistema de ecuaciones resultantes del método de los elementos finitos con el método de Newton-Raphson se hizo un programa en FORTRAN y se solucionaron los siguientes ejemplos en un computador portátil de 4096 MB en RAM y 800 MHz de velocidad de procesador. En todos los casos, se solucionó el problema adimensional con condiciones aleatorias alrededor del estado estable (Madzvamuse, 2000; Garzón, 2007) para el sistema de RD.

2. Ejemplos de aplicación y resultados numéricos

Inicialmente se desarrolla un ejemplo numérico para la formación normal de la rugosidad de la cubierta de la semilla de melocotón (semilla de *Prunus persica* [figura 1]). Para este objetivo se utiliza una geometría simplificada, en este caso, un elipsoide. La figura se enmalla con 49.446 elementos triangulares y 24.725 nodos (figura 3a). Los parámetros adimensionales del sistema de reacción difusión de glucólisis están dados por $d = 0,08$, $\delta = 1,2$ y $\kappa = 0,06$. Por lo tanto, el estado estable está dado en el punto de equilibrio $(u_1, u_2)_0 = (0,8, 1,2)$, de tal manera que las condiciones iniciales son aleatorias alrededor del estado estable (Font Quer, 1982; Lefevre y Mangin, 2010). Para todas las simulaciones de glucólisis se ha utilizado $K = 0,05$ en las ecuaciones (4) y (13).

En la figura 1a se observa la evolución de los patrones superficiales de la semilla de melocotón en $t = 3.200$. Así mismo, se observa la formación de laberintos y puntos ciegos de los surcos que se aproxima a la forma de la semilla en estudio (figura 1c). El patrón obtenido está dado por bandas de alta concentración de una de las especies químicas, por lo cual el dominio ha crecido en dirección normal a la superficie y, en consecuencia, han generado los surcos propios de la corteza de esta semilla.

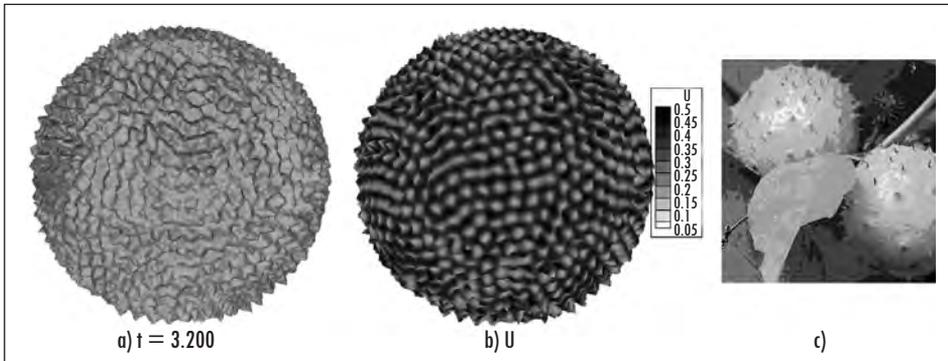
Figura 1. Ejemplo numérico que representa la superficie de la semilla de *Prunus persica*, se han utilizado los parámetros $d = 0,08$, $\delta = 1,2$ y $\kappa = 0,06$ para el sistema reactivo de glucólisis:
a) Configuración en $t = 3.200$, b) valor de concentración para U_1 , c) foto de la semilla



Fuente: presentación propia de los autores.

Se observa en la figura 2 una simulación en un dominio esférico. Los parámetros adimensionales (del modelo de glucólisis) utilizados son $d = 0,0125$, $\delta = 2,8$ y $\kappa = 0,06$. Por tanto, el estado estable está dado en el punto de equilibrio $(u_1, u_2)_0 = (0,35, 2,8)$. En este caso los resultados de la simulación generan patrones en forma de puntos con poco espacio entre sí. Obsérvese que toda la superficie contiene estos puntos y gracias a la ecuación de crecimiento (4) se deforma el dominio en dirección normal y produce una gran cantidad de resaltos pequeños y redondos, lo que recuerda a la semilla de Ohio Buckeye (*Aesculus glabra*). En la figura 2c, la foto revela una alta concordancia con los resultados finales de la simulación (véase figura 2b).

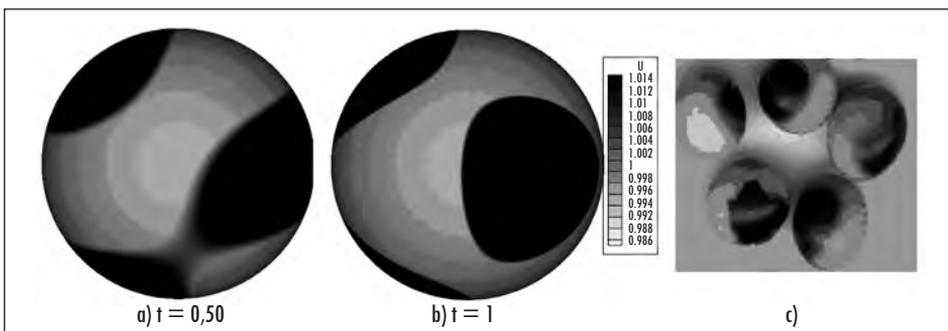
Figura 2. Ejemplo numérico que representa la superficie de la semilla de *Aesculus glabra*, se han utilizado los parámetros $d = 0,0125$, $\delta = 2,8$ y $\kappa = 0,06$ para el sistema reactivo de glucólisis: a) $t = 3.200$ (tiempo adimensional), b) valor de concentración para U_1 y c) foto de la semilla



Fuente: presentación propia de los autores.

En el último caso, en la figura 3, se utilizan valores nulos de la constante de crecimiento K de la ecuación (4). Se propone el modelo de reacción de Schnakenberg y se eligen los siguientes parámetros $d = 10$, $a = 0,1$, $b = 0,9$ y $\gamma = 29$. La esfera se enmalla con 49.446 elementos triangulares y 24.725 nodos. Por lo tanto, el estado estable está dado en el punto de equilibrio $(u_1, u_2)_0 = (1, 0,9)$. Se obtiene un patrón de puntos con gran espacio entre sí, similar a los puntos observados en la semilla de soja (*Glycine max*). Nótese que el sistema se estabiliza en $t = 1$ (tiempo adimensional).

Figura 3. Ejemplo numérico que representa la superficie de la semilla de *Glycine max*, se han utilizado los parámetros $d = 10$, $a = 0,1$, $b = 0,9$ y $\gamma = 29$ para el sistema reactivo de Schnakenberg: a) $t = 0,5$ (tiempo adimensional), b) $t = 1$, c) foto de la semilla



Fuente: presentación propia de los autores.

3. Discusión y conclusiones

En este artículo se ha presentado un modelo fenomenológico a partir de ecuaciones de RD para predecir la formación de los patrones rugosos y lisos de las superficies de las semillas. La aplicación de los modelos de RD con parámetros en el espacio de Turing es un área de constante trabajo y controversia en la biología (Crampin y Maini, 2001; Sick et ál., 2006) y que ha despertado un reciente interés gracias al trabajo de (Sick et ál., 2006), donde se confirma la validez de las ecuaciones de RD en un modelo sobre la aparición del folículo de cabello. Desde este punto de vista, el trabajo desarrollado en este artículo ilustra la validez de las ecuaciones de RD para representar patrones biológicos complejos, como son los patrones que se forman en las superficies de las semillas.

De este trabajo se puede especular acerca de la existencia de un sistema reactivo (activador-inhibidor) en las superficies de las semillas que puede dar una explicación para los patrones hallados. Adicionalmente, se puede explicar la alta estabilidad de la aparición de los patrones de una misma especie y familia. Esto es, la repetitividad de los patrones se debe a un sistema bioquímico especializado en cada especie vegetal que permite la formación de rugosidades o pigmentación en la superficie de las semillas. Por lo tanto, se confirman los hallazgos de otros trabajos (Garzón, 2007), que establecen que los patrones son altamente estables en el tiempo y repetibles bajo ciertas características geométricas, siempre que los parámetros del sistema reactivo se encuentren en el espacio de Turing. De igual manera, los patrones son repetibles ante diversas condiciones iniciales (Madzvamuse, 2000; Garzón, 2007).

Para probar esta hipótesis se ha programado la formulación de un sistema de ecuaciones de RD bajo la acción de la deformación del dominio. Para este objetivo se utilizó la mecánica de medio continuo, con lo cual se llega a la forma general de las ecuaciones de RD en dos y tres dimensiones sobre dominios que presentan deformación. Las ecuaciones resultantes son similares a las mostradas en (Madzvamuse y Maini, 2007), en que se llevan a cabo simplificaciones importantes sobre el campo de dilatación. El sistema de RD se soluciona mediante el método de los elementos finitos, utilizando un enfoque de Newton-Raphson para solucionar el problema no lineal. Esto permite utilizar pasos de tiempo más largos y obtener soluciones más próximas a la real. Los resultados muestran que las ecuaciones de RD presentan patrones que cambian continuamente en el tiempo.

Adicionalmente, se debe tener en cuenta que los resultados obtenidos con el modelo matemático de RD está basado en suposiciones y simplificaciones que deben ser discutidas para futuros modelos.

El modelo se basa en la suposición de un sistema bioquímico altamente acoplado (de forma no lineal) entre un activador y un inhibidor que generan patrones de Turing. Hasta donde los autores conocen, esta suposición no se ha comprobado experimentalmente, por lo cual el modelo es una hipótesis que debe ser comprobada en futuras investigaciones. Además, es factible, al igual que en otros modelos biológicos (véase Garzón-Alvarado, García-Aznar y Doblaré, 2009), que estén involucrados muchos factores químicos (morfogenes) que interactúen para formar los patrones superficiales que se encuentran en las semillas. En el caso de los patrones con rugosidad superficial, el sistema bioquímico puede interactuar, además, con factores mecánicos propios del crecimiento de la semilla.

Por lo tanto, la determinación de la influencia exacta de cada uno de los factores, bioquímicos y mecánicos, sobre la formación de los patrones superficiales, se convierte en un desafío experimental que permitirá conocer la morfogénesis de las semillas. Se debe notar que existen diferencias apreciables entre los patrones superficiales y los tridimensionales en el proceso de formación. En este sentido, se debe acotar que en este artículo se ha desarrollado un modelo para la formación de patrones superficiales de las semillas y testas de los frutos de diversas especies vegetales.

Por otro lado, el modelo exacto de reacción difusión que rige el proceso de formación de patrones superficiales de la semilla es desconocido y, en consecuencia, este trabajo plantea la necesidad de hallar las relaciones existentes y medir los parámetros del sistema. En este sentido, las relaciones aquí utilizadas son simplificaciones y suposiciones que se basan en la alta concordancia de los resultados obtenidos con los patrones que se presentan en la formación de los patrones superficiales de las semillas.

Referencias

- BARTHLOTT, W. Epidermal and seed surface characters of plants: systematic applicability and some evolutionary aspects. *Nordic Journal of Botany*. 1981, vol. 1, pp. 345-355.
- BARTHLOTT, W. Scanning electron microscopy of the epidermal surface in plants. En Claugher, D (ed.). *Scanning electron microscopy in taxonomy and functional morphology*. Oxford: Clarendon Press, 1990.
- BELYTSCHKO, T.; LIU, W. K. y MORAN, B. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. New York: John Wiley and Sons, 2000.

- BOLEK, Y.; OGLAKCI, M. y OZDIN, K. Genetic variation among cotton (*G. hirsutum* L.) cultivars for moles, seed-coat fragments and loading force. *Field Crops Research*. 2007, vol. 101, núm 2, pp. 155-159.
- CARTWRIGHT, J. Labyrinthine turing pattern formation in the cerebral cortex. *Journal of Theoretical Biology*. 2002, vol. 217, pp. 97-103.
- CHAPLAIN, M.; GANESH, A. J. y GRAHAM, I. G. Spatio-temporal pattern formation on spherical surfaces: Numerical simulation and application to solid tumor growth. *Journal of Mathematical Biology*. 2001, vol. 42, pp. 387-423.
- CRAMPIN, E. J. y MAINI, P. K. Reaction–diffusion models for biological pattern formation. *Methods and Applications of Analysis*. 2001, vol. 8, núm. 3, pp. 415-428.
- DE WIT, A. Spatial patterns and spatiotemporal dynamics in chemical systems. *Advances in Chemical Physics*. 1999, vol. 109, pp. 435-513.
- EDDE, P. y AMATOBI, C. I. Seed coat has no value in protecting cowpea seed against attack by *Callosobruchus maculatus* (F.). *Journal of Stored Products Research*. 2003, vol. 39, núm. 1, pp. 1-10.
- FONT QUER, P. *Diccionario de botánica*. 8ª reimpression. Barcelona: Labor, 1982.
- GARZÓN, D. *Simulación de procesos de reacción-difusión: Aplicación a la morfogénesis del tejido óseo*. PhD tesis. Universidad de Zaragoza, España, 2007.
- GARZÓN-ALVARADO, G. A.; GARCÍA-AZNAR, J. M. y DOBLARÉ, M. Appearance and location of secondary ossification centres may be explained by a reaction–diffusion mechanism. *Computers in Biology and Medicine*. 2009, vol. 39, pp. 554-561.
- GEIRER, A. y MEINHARDT, H. A theory of biological pattern formation. *Kybernetik*. 1972, vol. 12, pp. 30-39.
- GRAVEN, P.; DE KOSTER, C.; BOON, J. y BOUMAN, F. Structure and macromolecular composition of the seed coat of the Musaceae. *Annals of Botany*. 1996, vol. 77, pp. 105-122.
- HARRISON, L.; WEHNER, S. y HOLLOWAY, D. Complex morphogenesis of surfaces: theory and experiment on coupling of reaction-diffusion patterning to growth. *Faraday Discussions*. 2002, vol. 120, pp. 277-293.
- HEATHERLY, L.; KENTY, M. y KILEN, T. Effects of storage environment and duration on impermeable seed coat in soybean. *Field Crops Research*. 1995, vol. 40, núm. 1, pp. 57-62.
- HOFFMAN, J. *Numerical methods for engineers and scientists*. New York: McGraw Hill, 1992.
- HOLLOWAY, D. y HARRISON, L. Pattern selection in plants: Coupling chemical dynamics to surface growth in three dimensions. *Annals of Botany*. 2008, vol. 101, p. 361.
- HOLZAPFEL, G. A. *Nonlinear solid mechanics*. New York: John Wiley, 2000.
- HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method: Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. New York: Courier Dover Publications, 2003.
- KAPRAL, R. y SHOWALTER, K. *Chemical waves and patterns*. New York: Kluwer, 1995.
- KARCZ, J.; KSIAZCZYK, T. y MALUSZYNSKA, J. Seed Coat Patterns in Rapid-Cycling Brassica Forms. *Acta Biologica Cracoviensia, Series Botanica*. 2005, vol. 47, núm. 1, pp. 159-165.

- LEFEVRE, J. y MANGIN, J. A reaction-diffusion model of human brain development. *PLOS Computational Biology*. 2010, vol. 6, núm. 6, pp. 1-10.
- MADZVAMUSE, A. *A numerical approach to the study of spatial pattern formation*. D Phil thesis, University of Oxford, Inglaterra, 2000.
- MADZVAMUSE, A. Time-stepping schemes for moving grid finite elements applied to reaction-diffusion systems on fixed and growing domains. *Journal of Computational Physics*. 2005, vol. 24, núm. 1, pp. 239-263.
- MADZVAMUSE, A. y MAINI, P. K. Velocity-induced numerical solutions of reaction-diffusion systems on continuously growing domains. *Journal of Computational Physics*. 2007, vol. 225, núm. 1, pp. 100-119.
- MADZVAMUSE, A.; MAINI, P. K. y WATHEN, A. J. A moving grid finite element method applied to a model biological pattern generator. *Journal of Computational Physics*. 2003, vol. 190, pp. 478-500.
- MADZVAMUSE, A.; SEKIMURA, T.; THOMAS, R. D. K.; WATHEN A. J. y MAINI, P. K. A moving grid finite element method for the study of spatial pattern formation in Biological problems. En: Sekimura, T.; Noji, S.; Nueno, N. y Maini, P. K. (eds). *Morphogenesis and Pattern Formation in Biological Systems – Experiments and Models*. Tokyo: Springer-Verlag, 2003, pp. 59-65.
- MADZVAMUSE, A.; THOMAS, R. D. K.; MAINI, P. K. y WATHEN, A. J. A numerical approach to the study of spatial pattern formation in the ligaments of arcoid bivalves. *Bulletin of Mathematical Biology*. 2002, vol. 64, pp. 501-530.
- MAINI, P. K.; PAINTER, K. J. y CHAU, H. N. P. Spatial pattern formation in chemical and biological systems. *Journal of Chemical Society., Faraday Trans*. 1997, vol. 93, pp. 3601-3610.
- MEI, Z. *Numerical bifurcation analysis for reaction-diffusion equations*. Berlín: Springer-Verlag, 2000.
- MEINHARDT, H. *Models of biological pattern formation*. New York: Academic Press, 1982.
- PARODI, L. R. Gramíneas. En *Enciclopedia argentina de agricultura y jardinería*. Tomo I, segundo volumen: *Descripción de plantas cultivadas*. Buenos Aires: ACME SACI, 1987, p. 1112.
- SICK, S.; REINKER, S.; TIMMER J. y SCHLAKE, T. WNT and DKK determine hair follicle spacing through a reaction-diffusion mechanism. *Science*. 2006, vol. 314, pp. 1447-1450.
- STRASSBURGER, E. *Tratado de botánica*. 8a ed. Barcelona: Omega, 1994.
- TURING, A. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society. Lond. B*. 1952, vol. 237, pp. 37-72.