

Моделирование процесса формообразования клеток зародыша растения как анизотропных неоднородных оболочек

АМЕЛИНА Е.В.¹, ВОРОНКОВА К.С.¹, ГОЛУШКО С.К.^{1, 2},
ЮРЧЕНКО А.В.², НИКОЛАЕВ С.В.³

¹*Конструкторско-технологический институт вычислительной техники СО РАН,*

²*Институт вычислительных технологий СО РАН,*

³*Институт цитологии и генетики СО РАН*

e-mail: s.k.golushko@gmail.com

Математическое и численное моделирование широко используется при изучении сложных физических и биологических процессов и явлений и, в частности, при исследовании процессов формообразования зародышей растений. Несмотря на сложное строение клетки растения, ее механическое поведение в первом приближении определяется клеточной стенкой. В таком приближении клетка представляет собой упругую оболочку, заполненную жидкостью.

В растительной клетке материалом, механические свойства которого определяют морфодинамику клетки, является материал стенки клетки, который состоит, как минимум, из двух фаз, чем схож с конструкционными композиционными материалами. Одна из фаз – волокна целлюлозы, образующие «скелет» стенки, которые, по аналогии с композиционными материалами, будем называть волокнами или наполнителем. Другая фаза, которая представлена в клеточной стенке сильно гидратированной матрицей из молекул гемицеллюлозы и/или пектина, заполняет пространство между волокнами, и в терминологии композиционных материалов называется связующим или матрицей.

По имеющимся представлениям, целлюлозные волокна в клеточной стенке зрелых клеток формируют слои с различающейся от слоя к слою преимущественной ориентацией волокон – так называемая вторичная клеточная стенка. В то же время, в активно растущей ткани клетки разделены первичной клеточной стенкой, и волокна в матрице такой стенки не образуют какой-либо строго упорядоченной структуры. Таким образом, материал клеточной стенки существенно неоднороден и анизотропен на микроуровне вследствие наличия фаз с механическими свойствами, отличающимися на порядки. Для описания механических свойств первичной клеточной стенки с точки зрения композитных материалов можно использовать осредненные механические характеристики целлюлозного скелета в матрице.

Обобщенная форма соотношений между напряжениями и деформациями в линейном случае имеет вид

$$\{\sigma\} = [D] \{\varepsilon\}, \quad (1)$$

где $\{\sigma\}$ – вектор напряжений, содержащий 6 независимых компонент тензора напряжений, $\{\varepsilon\}$ – аналогичный вектор деформаций, $[D]$ – матрица упругости или упругой жесткости.

Пренебрегая микроструктурными особенностями строения стенки клетки, можно считать, что интенсивности армирования (относительное количество волокон) в каж-

дом направлении заданы некоторым распределением $p(\theta)$, где θ – угол между выделенным направлением и волокном. Тогда, используя сходство материала стенки клетки с конструкционными композитами и сделанные предположения, для прогнозирования усредненных механических характеристик и построения физических соотношений можно применить структурные модели композиционного материала, например приведенные в [1, 2].

Учет такой особенности рассматриваемой системы как медленное протекание ростовых процессов, приводит к возможности использования квазистатических моделей деформирования, в частности, метода последовательных нагружений, широко применяемого при решении нелинейных задач механики деформируемых тел. Квазистатическое деформирование клеточной структуры в процессе роста позволяет пренебречь скоростями деформирования и проводить расчеты с использованием состояний равновесия.

Предполагается, что в результате упругого деформирования под действием тургорного давления происходит увеличение размеров растительной клетки. Затем происходит релаксация механических напряжений клеточной стенки за счет разрыва части связей между молекулами-волокнами целлюлозы, что схоже с пластической деформацией при ослаблении материала. После этого материал клеточной стенки достраивается и упрочняется при дальнейшем увеличении объема клетки, что в целом схоже с поведением гиперупругих материалов. Возникающие циклы «упругое растяжение–релаксация» можно заменить непрерывным упругим деформированием при увеличивающейся нагрузке, что существенно упрощает математическую и численную модель процесса. Даже при описанном упрощении модели аналитическое решение задачи об упругом деформировании клеток зародыша возможно только в случаях простой геометрии, т.е. на самых первых стадиях. Для более поздних стадий и, соответственно, сложных форм зародыша необходимо применять численные методы решения. Одним из универсальных методов дискретного представления геометрического объекта для последующего численного анализа является использование неструктурированных сеток, а наиболее развитым методом решения задач механики на неструктурированных сетках – метод конечных элементов.

Изучение различных стадий развития зародыша позволяет получить представление об эволюции его формы и формы клеток, из которых он состоит, а также их характерных размеров. Из экспериментальных данных известно, что на двух-, четырех- и восьмиклеточной стадиях форма зародыша остается близкой к сферической. При этом форма одноклеточного зародыша сразу после деления зиготы близка к полуэллиптической, практически совпадающей по радиусу с клеткой-суспензором. Как показали первичные модельные расчеты, деформирование полуэллиптической клетки в сферическую со стенками из однородного изотропного материала под действием избыточного давления может происходить только с существенным увеличением объема исходной клетки. В то же время, экспериментальные наблюдения показывают, что округление одноклеточного зародыша происходит при незначительном увеличении исходного объема (примерно на 1/3 от начального). Как отмечалось, у клетки существуют возможности по упрочнению и ослаблению своих стенок, в том числе локальному. Кроме того клетка может строить целлюлозный скелет стенки с преимущественным направлением волокон, в результате чего может возникнуть анизотропия механических свойств стенки, характерная также для армированных длинными волокнами композиционных материалов. Имея ввиду изложенную выше механическую модель поведения клетки, можно предположить, что клетка зародыша может изменять механические свойства отдельных

участков стенки так, чтобы происходила наблюдаемая ростовая деформация клетки. В связи с этим нами была поставлена задача поиска механических параметров оболочки, позволяющих получить заданный переход формы клетки от исходного к деформированному по действием избыточного (тургорного) давления. Подобная задача ставилась и авторами работы [3] при моделировании апикального роста пыльцевой трубки.

В настоящей работе для поиска законов распределения механических характеристик материала оболочки, представляющая зародыш, разбита на слои с помощью плоскостей, перпендикулярных оси вращения, после чего осуществлен поиск требуемых параметров для каждого из слоев. При этом для эффективных механических характеристик материала использованы соотношения из работы [2], а для решения задачи линейного упругого деформирования применен комплекс программ ANSYS MechanicalTM с трехмерными (объемными) конечными элементами.

На основании данных, полученных с помощью конфокального изображения (см. рис. 1, слева), были получены размеры конечного состояния клетки и из опубликованных данных оценены механические параметры ее стенок. На рис. 1 справа представлена геометрическая модель одноклеточного зародыша с исходной и конечной его формы. Модель построена в цилиндрической системе координат r, φ, z . Суспензор (ножка) смоделирован в виде цилиндрической оболочки высоты H и радиуса R_0 : $0 \leq z \leq H$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $r = R_0$, мембрана (стенка между суспензором и зародышем) – в виде круга радиуса R_0 : $z = H$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, $r \leq R_0$. Начальная форма клетки зародыша – полуэллипсоид вращения: $r^2/R_0^2 + (z-H)^2/z_0^2 = 1$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, $H \leq z \leq H+z_0$. Форма клетки зародыша после деформирования – часть сфероида: $r^2 + (z-H-S)^2 = R_1^2$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, $H \leq z \leq H+S+R_1$.

Предполагалось, что толщина оболочки (стенки) до деформирования постоянна и равна 0.6 мкм. Оболочки нагружены равномерно распределенным внутренним давлением величины p . Расчеты проводились для следующих значений геометрических параметров: $H = 10$ мкм, $R_0 = 5.5$ мкм, $z_0 = 13$ мкм. $R_1 = 8.5$ мкм, $S = 6.48$ мкм. При моделировании использовались изотропные и анизотропные модели материалов.

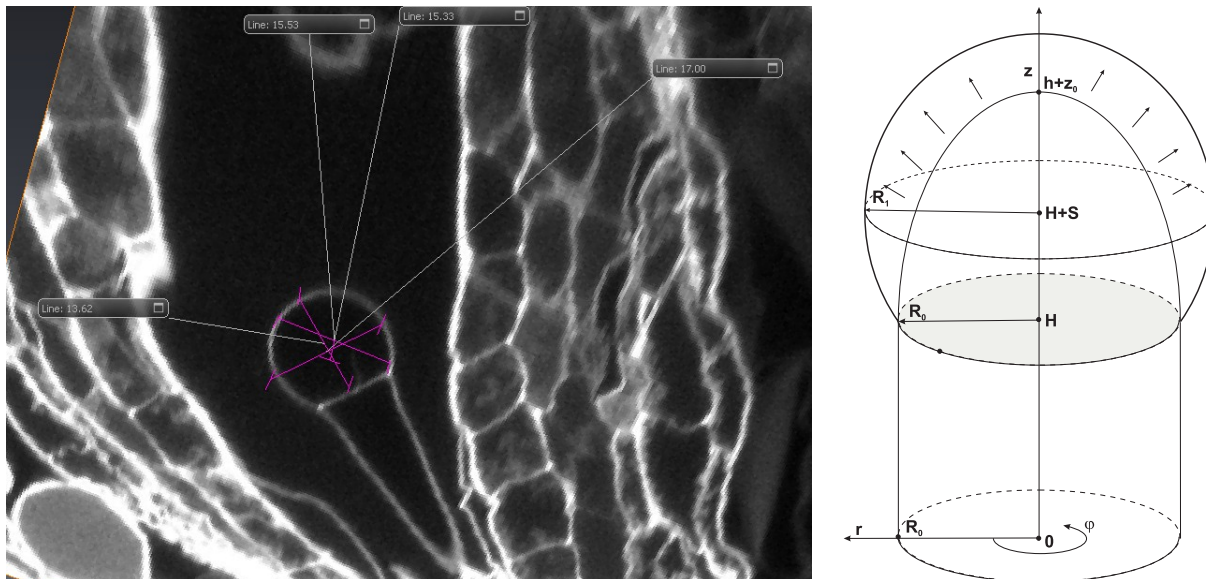


Рис. 1. Данные конфокального изображения и геометрическая модель зародыша

Характеристики анизотропных (ортотропных) материалов вычисляются по анало-

гии с конструкционными композиционными материалами с использованием структурных моделей. При этом предполагается, что стенки клеток суспензора и зародыша могут упрочняться/ослабляться в окружном направлении, а разница свойств в меридиональном и нормальном к оболочке направлениям может компенсироваться за счет варьирования толщины оболочки. В таком случае выражения для эффективных характеристик материала имеют вид [2]:

$$E_r = E_z = \frac{E_a E_c}{\psi_a E_c + \psi_c E_a}, \quad E_\varphi = \psi_c E_c + \psi_a E_a, \quad \nu_{r\varphi} = \nu_{z\varphi} = \psi_c \nu_c + \psi_a \nu_a, \\ \nu_{rz} = \frac{\psi_c \nu_c E_a + \psi_a \nu_a E_c}{\psi_c E_a + \psi_a E_c}, \quad G = \frac{G_a G_c}{\psi_c E_a + \psi_a E_c}. \quad (2)$$

Здесь E_a , E_c – модули Юнга; ν_a , ν_c – коэффициенты Пуассона; ψ_a , $\psi_c = 1 - \psi_a$ – удельное объемное содержание арматуры и связующего, E_r , E_z , E_φ – эффективные модули упругости, $\nu_{r\varphi}$, $\nu_{z\varphi}$, ν_{rz} – эффективные сдвиговые коэффициенты, G – эффективный модуль сдвига. Далее в расчетах используются безразмерные модули Юнга равные отношению модулей Юнга к внутреннему давлению. Задача линейного упругого деформирования ортотропной оболочки решалась в среде ANSYS Mechanical с использованием трехмерных (объемных) конечных элементов.

Поиск требуемых законов распределения механических характеристик материала осуществлен путем разбиения оболочки, представляющей зародыш, на слои плоскостями $z = const$, после чего определялись искомые механические параметры для всех слоев. Рассмотрены три варианта достижения требуемой формы зародыша:

1. оболочкой с изотропными слоями (управляющие параметры – модули упругости материалов слоев),
2. анизотропной оболочкой с различным уровнем упрочнения слоев в окружном направлении (управляющие параметры – интенсивности армирования и модули упругости материалов слоев);
3. комбинированной оболочкой: содержащей упрочненные окружной арматурой и изотропные слои с различными механическими характеристиками.

В таблице 1 приведены примеры законов распределения управляющих параметров и толщин слоев для перечисленных выше вариантов. В варианте (б) безразмерные модули упругости матрицы $E'_c = 6$ и волокон $E'_a = 26.7$. В варианте (с) в первом слое – композитный материал, аналогичный материалу оболочки (б), а слои 2-7 изотропные с различными механическими характеристиками.

На рис. 2 для всех вариантов приведены по два состояния оболочки – до и после деформации с обозначением расчетных слоев. Величины на графиках приведены в мкм. Как видно, требуемая конечная форма оболочки может быть приближенно достигнута в результате деформирования исходных оболочек с различными свойствами материала стенок клетки зародыша. В общем случае решение рассмотренной задачи не единственно, более того, она имеет бесконечно много решений. Для уточнения законов распределения механических свойств, характерных для процессов деформирования в процессе роста реальных клеток зародыша необходимы дополнительные данные как о материале оболочки, так и о процессе изменения ее формы. Тем не менее, во всех рассмотренных вариантах можно найти общие тенденции и закономерности. В частности, механические характеристики материала по мере приближения к вершине зародыша

Т а б л и ц а 1. Результаты решения задачи формообразования

Номер слоя	Оболочка а)		Оболочка б)		Оболочка с)	
	Высота слоя по z, мкм	E'	Высота слоя по z, мкм	ψ_a	Высота слоя по z, мкм	ψ_a / E'
1	5	10	4	0.20	4	0.2 (ψ_a)
2	3	6.7	1	0.06	1	8.3
3	2	5.0	2	0.05	1	7.3
4	1	4.0	2	0.03	2	6.7
5	1	3.4	4	0.00	2	5.7
6	1	2.0	-	-	2	5.0
7	-	-	-	-	1	3.2

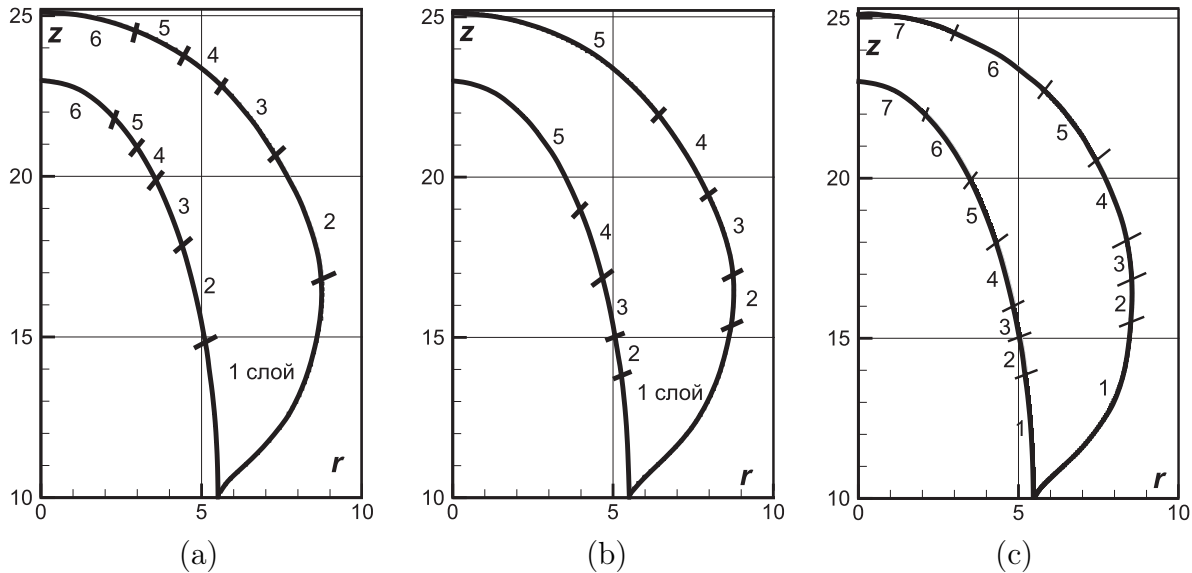


Рис. 2. Различные варианты реализации перехода от начальной к требуемой форме оболочки

уменьшаются, т.е. материал становится менее жестким. Это выражается как в уменьшении модулей упругости слоев для изотропного материала стенки клетки, так и в снижении содержания упрочняющих волокон в случае анизотропного материала.

Список литературы

[1] Голушко С.К., Немировский Ю.В. Прямые и обратные задачи механики композитных пластин и оболочек вращения. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. 432 с.

[2] Болотин В.В., Новичков Ю.Н. Механика многослойных конструкций. М.: Машиностроение, 1980. 374 с.

[3] Fayant P., Girlanda O., Chebli Y. et al. Finite element model of polar growth in pollen tubes // Plant Cell. 2010. V. 22. P. 2579–2593.