

CIENCIAS EXACTAS - #10

REVISTA

**DE LAS JORNADAS DE
JÓVENES INVESTIGADORES**

**LA EDUCACIÓN Y LA CIENCIA
TRANSFORMAN REALIDADES**



**Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO**



**UNIVERSIDAD
NACIONAL ✦
DE TUCUMÁN**

Revista de las Jornadas de Jóvenes Investigadores
Eje Ciencias Exactas, Volúmen 10.

© 2025, Asociación de Universidades del Grupo Montevideo.

ISSN 3121-2182

Tucumán, Argentina. Noviembre de 2025.



**Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO**



**UNIVERSIDAD
NACIONAL ♦
DE TUCUMÁN**

Contenido

Influencia de las propiedades mecánicas del material de relleno en lesiones focales de cartílago.....	5
<i>Daniela Atrio</i>	
El uso de la IA en los alumnos de la carrera de Derecho: su impacto en el aprendizaje.....	25
<i>Cinthia Jara</i>	
Hibridación memética para el diseño de fármacos de-novo: una extensión al diseño de fármacos antidiabéticos.....	44
<i>Matías Rojas</i>	
Actividad insecticida y ovicida del aceite esencial de <i>Cuminum cyminum</i> L. de Artaza, Belén, Catamarca, sobre <i>Triatoma infestans</i> (Hemíptera: Reduviidae).....	59
<i>Eunice Sosa</i>	
Hielo glaciado bajo presión: un estudio experimental y computacional del crecimiento de grano.....	77
<i>Luis Gerez</i>	
Adopción de tecnologías digitales en las MIPYMES del Departamento de Concepción, Año 2024.....	94
<i>Dyrce Morales</i>	
Un enfoque del Moments Subset Sum Problem mediante sistemas de ecuaciones diagonales sobre cuerpos finitos.....	106
<i>Juan Gottig</i>	
Viabilidad y germinación de semillas de <i>Crateva tapia</i> L. en distintas condiciones de luz y temperatura.....	118
<i>María Riveros</i>	
Desarrollo de un actuador mecánico para el control autónomo de malezas en plantaciones frutícolas.....	130
<i>Agustín López</i>	
Entre la imagen y la realidad: un Análisis crítico de la ciencia y la tecnología y su comunicación pública en redes sociales.....	146
<i>Mathias Riquelme</i>	

Otimização de forma aplicada à stokes via arcabouço lagrangiano abstrato.....	156
<i>Beatriz Gomes</i>	
Caracterización de la respuesta fotoconductora y de transporte eléctrico de heteroestructuras de $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3$	174
<i>Ana Pérez</i>	
Modelo de simulación de una planta de alimento balanceado de animales domésticos.....	185
<i>Federico Castiglioni</i>	
Catalizadores ácidos soportados para reacciones pentacomponente: Evaluación estructural, actividad catalítica y aplicaciones potenciales en pinturas antiincrustantes.....	194
<i>Camila Vazquez</i>	
Efectos neuroprotectores de los bioactivos del café fermentado frente a neurotoxinas asociadas al Parkinson en un modelo celular neuroendocrino.....	211
<i>Dionisio Neto</i>	
Variação da abundância e do tamanho de <i>Hepatus pudibundus</i> (Herbst 1785) (Crustacea, Decapoda, Brachyura) em um intervalo de 30 anos, na região de Ubatuba, São Paulo, Brasil.....	222
<i>Gabriel Dioro</i>	

Tema 26: Ciencias e ingeniería de materiales

Influencia de las propiedades mecánicas del material de relleno en lesiones focales de cartílago

Autor: Atrio, Daniela Iliana, daniela.atrio@ingenieria.uner.edu.ar;

Co-autores: Di Paolo, José, jdipaolo@ingenieria.uner.edu.ar; Weiss, Brenda Anahí,
bweiss@uner.edu.ar

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Entre Ríos

Resumen

Las lesiones focales del cartílago son daños localizados en el cartílago articular y se consideran para su tratamiento distintas técnicas como las microfracturas, injertos osteocondrales o materiales de relleno comercialmente disponibles. En la actualidad, ninguna técnica para el tratamiento de lesiones focales de cartílago articular puede reproducir el cartílago hialino normal y tampoco hay consenso sobre cuál de estos materiales es superior. Con el fin de evaluar el desempeño de la articulación cuando ha sido sometida a estos procedimientos, se simula la lubricación por aplastamiento en la articulación de rodilla. Se adopta el modelo equivalente de elipsoide sobre plano que se aproxima a un sustrato elástico plano cuyas características mecánicas corresponden al cartílago hialino ($E_L=16$ MPa). En el centro del sustrato se modela una lesión cilíndrica tratada con un material de relleno (denominado parche) de módulo elástico E_c . Mediante simulación por el método de elementos finitos se resuelven las ecuaciones de lubricación de Reynolds y de elasticidad lineal para 7 casos, variando E_c ($11,5 \text{ MPa} < E_c < 20,5 \text{ MPa}$). Se presenta la distribución de presiones y la altura del canal de lubricación a lo largo y ancho del mismo, además de la tensión principal máxima. La altura mínima del canal disminuye con la variación de E_c , siendo el peor escenario el caso con $E_c = 20,5 \text{ MPa}$, en donde se predice un régimen de lubricación de tipo mixto que favorecería el desgaste del cartílago circundante. Los resultados sugieren que son deseables materiales de relleno con un módulo elástico menor a $20,5 \text{ MPa}$ y lo más cercano posible al del cartílago sano.

Palabras clave: Lubricación por aplastamiento, Lesiones focales, Biomecánica computacional

Introducción

La articulación de rodilla es una articulación sinovial, donde los huesos que la componen (fémur y tibia) están rodeados de una cápsula fibrosa que, junto a las superficies articulares, delimitan la cavidad sinovial. La cápsula articular está recubierta por la membrana sinovial la cual segrega líquido sinovial hacia el interior de la cavidad. La presencia de dicho líquido favorece la lubricación de la articulación natural, lo que le confiere características únicas: mínima fricción entre las superficies en contacto y tasas de desgaste muy bajas. Las superficies articulares se encuentran recubiertas por cartílago hialino (también llamado cartílago articular), un material deformable y poroso.

El cartílago articular (CA) proporciona una superficie de apoyo con baja fricción y desgaste y, gracias a su capacidad de deformarse, ayuda a distribuir las cargas. El CA es un tejido elástico carente de nervios, vasos sanguíneos y linfáticos, compuesto por un bajo número de condrocitos (~2%) y matriz extracelular (MEC) (Mansour, 2013; Krakowski et al. 2024). A diferencia de otros tejidos del organismo, el CA posee pobres propiedades regenerativas debido a su naturaleza avascular y a la limitada capacidad de los condrocitos para proliferar y reparar el tejido dañado.

La osteoartritis (OA), también llamada artrosis, es una enfermedad degenerativa de impacto mundial que afecta principalmente al cartílago de las articulaciones, provocando dolor, discapacidad y disminución de movilidad en las personas afectadas. La articulación más afectada suele ser la de rodilla que conforma el 70% de los casos de artrosis reportados en el año 2019 (Long et al., 2022). En los Estados Unidos, hay 27 millones de personas que sufren OA (Kraeutler et al., 2017) y se estima que el 12% de su población, en el rango etario de 25-74 años, presentan OA clínicamente definida (Lawrence et al., 2008).

Se pensaba que la creciente prevalencia de OA era consecuencia de la mayor expectativa de vida y por esto, se lo consideraba inevitable. Actualmente, no se considera la longevidad como el único factor de riesgo, sino que existen otros factores vinculados al ambiente moderno consecuencia de la era post industrial. Algunas hipótesis vinculan la OA con un cambio en la carga a la que se somete la articulación producto de caminar en pavimento, el calzado, la inactividad física y las dietas de alimentos procesados proinflamatorios (Wallace et al., 2017).

Las lesiones focales del cartílago articular se definen como daños localizados que afectan a una región específica del cartílago. Estas lesiones pueden variar en

profundidad, tamaño y localización, lo que determina en gran medida su pronóstico y enfoque en su tratamiento, pudiendo clasificarse según su severidad desde fisuras superficiales hasta defectos que exponen el hueso subcondral. Las lesiones focales del CA representan un factor de riesgo importante para la degeneración rápida del cartílago que finalmente conduce a osteoartritis sintomática (Kutaish et al., 2025).

Las lesiones del cartílago articular se observan en el 60–66% de las rodillas sometidas a artroscopia, con una edad media de los pacientes que varía entre los 30 y 39 años (Kutaish et al., 2025). Los defectos focales del cartílago están asociados con la degeneración progresiva del tejido (Venäläinen et al., 2016).

Aunque la progresión de los defectos y el desarrollo de OA de rodilla probablemente sean de origen multifactorial, los defectos articulares alteran la mecánica de contacto y la respuesta mecánica del tejido adyacente al defecto. Se han asociado niveles más altos de estrés de contacto con el desarrollo posterior de OA sintomática de rodilla, lo que sugiere que los cambios mecánicos provocados por los defectos del cartílago también pueden contribuir de manera crítica a la patogénesis de la OA (Venäläinen et al., 2016).

Se ha informado que, bajo compresión axial, las tensiones de contacto y los gradientes de tensión se elevan en las superficies de cartílago adyacentes al borde de un defecto focal. Como consecuencia, esta zona experimenta una mayor deformación y esfuerzos locales. Las tensiones y deformaciones elevadas pueden alcanzar niveles capaces de inducir la muerte celular y el daño a la matriz, lo que podría conducir a una degeneración progresiva del tejido circundante al defecto (Venäläinen et al., 2016).

El manejo de lesiones focales en la rodilla puede incluir la reorganización de las actividades habituales del paciente, la administración de medicamentos o procedimientos quirúrgicos que se diferencian en:

- paliativos: como la condroplastia
- de reparación: microfractura (MF) o nanofractura (NF), que consisten en retirar el cartílago dañado y luego realizar pequeños agujeros en el hueso subcondral, con el fin de que las células mesenquimales migren de la médula ósea a la superficie articular y se diferencien en condrocitos;
- restaurativos: donde se utiliza injertos que se trasplantan a la zona dañada, los cuales pueden ser: autoinjerto osteocondral

(OAT, del inglés Osteochondral Autograph Transfer) en el cual se retira parte del hueso y del cartílago de otra zona del propio paciente; aloinjerto osteocondral (OCA, osteochondralallograft), el cual consiste en retirar parte del hueso con su cartílago de un donante; Implantación de Condrocitos Autólogos (ACI, del inglés Autologous Chondrocyte Implantation): se extraen condrocitos y se multiplican en un laboratorio.

En cuanto a los procedimientos quirúrgicos, en general, la condroplastia paliativa es la técnica más común. Sin embargo, en los últimos años en Estados Unidos, cada vez más cirujanos optan por procedimientos de microfractura en su lugar (DeFroda et al., 2021; McCormick et al., 2014), sobre todo para lesiones de menor tamaño ($<2 \text{ cm}^2$). Como contrapartida, la OAT muestra tendencias hacia una mayor longevidad y durabilidad, así como mejores resultados en pacientes de alta demanda (Richter et al., 2016).

En los casos más avanzados y en donde los tratamientos señalados previamente no fueran suficientes, se considera la posibilidad de realizar una artroplastia total de rodilla, pero esto se evita en la medida de lo posible por las complicaciones asociadas con este

procedimiento y porque no es una solución práctica para adultos jóvenes o de mediana edad por la limitación de la vida útil de la prótesis (15-20 años) (Mostakhdemin et al. 2021).

En la actualidad, ninguna técnica para el tratamiento de lesiones focales de cartílago articular puede reproducir el cartílago hialino normal (Richter et al., 2016), y tampoco hay suficiente evidencia para afirmar cuál de estos tratamientos quirúrgicos es superior (Minas, 2011, Cap. 4). Por lo que la investigación en torno a éstas u otras técnicas y tecnologías emergentes resulta de gran interés.

Objetivo

Aportar conocimientos orientados a evaluar el desempeño de la articulación cuando ésta ha sido sometida a tratamientos quirúrgicos de reparación o restaurativos del cartílago articular, a partir del modelado y simulación de la lubricación de la articulación de rodilla natural.

Materiales Y Métodos

Características geométricas y mecánicas del modelo

Las propiedades biomecánicas del cartílago son dependientes de la organización ultraestructural, asociada a la composición bioquímica y las interacciones célula-célula y célula-matriz

extracelular. Éstas varían en función de la ubicación (heterogeneidad), dirección (anisotrópico) y escala (multi-escala); y muestra respuestas relacionadas a fenómenos de viscoelasticidad, poroelasticidad o una combinación de ambos (Mostakhdemin et al. 2021, Petitjean et al. 2023)

No obstante, algunos materiales viscoelásticos pueden aproximarse como sólidos elásticos cuando son sometidos a condiciones de carga determinadas, ante pequeñas deformaciones y rangos de temperatura acotados. Esto motiva la resolución de las ecuaciones de elasticidad lineal (Berli, 2013; Weiss et al., 2019) o modelos simplificados de elasticidad lineal en la mayoría de los trabajos vinculados a lubricación en articulaciones sinoviales.

En el presente trabajo, se adopta el modelo bidimensional elipsoide sobre plano (EoP, del inglés Ellipsoid on Plane) (Jin et al., 1999) como modelo geométrico para el análisis de la lubricación en película delgada, el cual consiste en modelar uno de los cóndilos de la articulación de rodilla como un elipsoide rígido en contacto con una capa plana o prisma pudiendo éste ser deformable (Figura 1). Esto permite expresar el conjunto de ecuaciones en coordenadas cartesianas, usualmente de más sencilla solución. El radio principal del elipsoide (1) en la dirección antero-posterior (R_x) y

el radio principal del elipsoide en la dirección medial-lateral (R_y) representan a las curvaturas equivalentes del elipsoide, las cuales se obtienen a partir de las curvaturas de las superficies articulares:

$$R_x = \frac{R_{fx}R_{tx}}{R_{tx} - R_{fx}} \quad (1)$$

donde R_{fx} corresponde al radio de la superficie femoral y R_{tx} es el radio de la superficie tibial de la articulación de rodilla, ambos en dirección anteroposterior (eje x). El radio del elipsoide en el eje medial-lateral (dirección y) (2) puede obtenerse en función de R_x (Su et al. 2011):

$$R_y = 2,844 R_x \quad (2)$$

Como ambas superficies articulares están recubiertas por cartílago hialino, el espesor del plano deformable (e) (Figura 1, Tabla 1) se toma como el doble del espesor de un único cartílago articular, el cual varía entre 1,7 y 2,6 mm (Seedhom and Shepherd, 1999). El plano deformable se asume como inmóvil y se desprecia la rugosidad de dichas superficies.

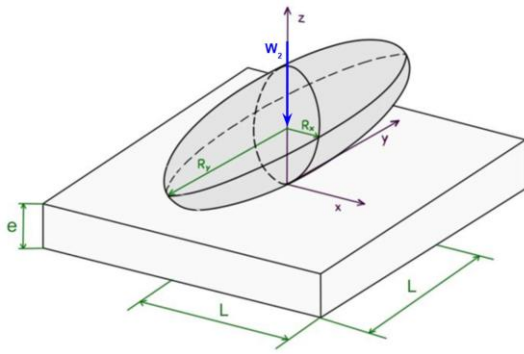


Figura 1: Esquema del modelo simplificado de elipsoide sobre plano.

Para realizar el análisis de la lubricación, se debe considerar que el régimen de lubricación depende del espesor mínimo de la película lubricante (de ahora en más denominada, altura mínima del canal h_m) y de la rugosidad equivalente de las superficies articulares (R'_a) (3), la cual se define a partir de la rugosidad de cada superficie (R_{a1} y R_{a2}):

$$R'_a = \sqrt{R_{a1}^2 + R_{a2}^2} \quad (3)$$

La relación $\phi = \frac{h_m}{R'_a}$ determina el régimen de lubricación: si $\phi < 1$, se tiene lubricación límite, si $1 < \phi < 3$, la lubricación es de tipo mixta y si $\phi > 3$, se tiene lubricación de película delgada (Di Puccio y Mattei, 2015). Si bien los dos primeros regímenes pueden ocurrir en articulaciones de miembro inferior en actividades cotidianas, es deseable la lubricación de película delgada ya que sólo en ella la película lubricante es completa y no se producirían contactos

entre las micro asperezas de ambas superficies (Weiss, 2022).

En este trabajo, se modela un material con propiedades mecánicas similares a las del cartílago, entonces se considera que la rugosidad tiene un valor de entre 1 y 6 μm (Forriol Campos, 2002) y es la misma para ambas superficies (con o sin tratamiento, $R_{a1} = R_{a2}$). Con esta consideración, la Ecuación 3 se puede simplificar como $R'_a = \sqrt{2R_a^2}$. Por lo tanto, para asegurar la existencia de lubricación de película delgada ($\phi = \frac{h_m}{R'_a} > 3$), h_m debería ser superior a 25 μm .

Altura del canal y deformación del plano

Los modelos de lubricación de película delgada implican un sistema de ecuaciones compuesto, como mínimo, por la ecuación de lubricación de Reynolds y por la ecuación que describe la separación entre las superficies articulares (región que constituye el canal de flujo del lubricante) (Figura 3). Esta última se denominará de ahora en más altura del canal y debe considerar la deformación de las fronteras del canal, es decir, de los cartílagos articulares en el caso de la articulación de rodilla natural. Este sistema de ecuaciones se caracteriza principalmente por la alta no linealidad y el fuerte acoplamiento entre ellas ya que la presión generada en el

fluido deforma las fronteras del canal de flujo, lo que a su vez influye en la distribución de presiones en el fluido.

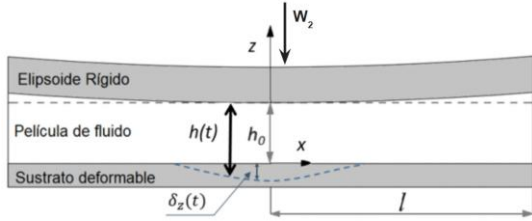


Figura 2: Modelo geométrico EoP en el plano $y=0$, donde l es la longitud del dominio en dirección x , h es el espesor de la película lubricante, W es la carga y δ_z el desplazamiento del material deformable.

La altura del canal de lubricación (h) (4) está dada por la distancia entre la superficie plana deformable y la superficie rígida del elipsoide equivalente:

$$h(x, y, t) = h_0 - W_2 t + \frac{x^2}{2R_x} + \frac{y^2}{2R_y} + \delta_z(x, y, t) \quad (4)$$

Donde:

h_0 es la menor distancia entre las dos superficies indeformadas en $x=y=0$ para $t=0$; W_2 es la velocidad con que el elipsoide se aproxima al sustrato deformable y se considera constante; $\delta_z(x, y, t)$ es el desplazamiento del material deformable en dirección z en cada punto del plano deformable debido a la deformación de mismo.

Encontrar el desplazamiento δ_z requiere modelar la deformación del sustrato. Para ello, en este trabajo el plano deformable se asume como un sólido isotrópico

elástico lineal y se resuelven las ecuaciones de elasticidad lineal.

Propiedades mecánicas

Este trabajo investiga técnicas de tratamiento de lesiones focales que implican la presencia de un parche en una región del material deformable. En la figura 3, se observa un esquema del modelo EoP modificado para considerar dicho material de relleno.

Se eligió modelar la zona tratada en el centro del material deformable. Para esto, se consideró que el defecto no debe ser mayor a 2 cm^2 ($r= 7,9 \text{ mm}$) de acuerdo a la indicación estándar proporcionada por diversos estudios, para el tratamiento de una lesión focal con MF (Kutash et al., 2025; Hinckel et al., 2021; Majtj, 2021). Se considera que la zona tratada se puede representar como un cilindro y éste va a contener el material de relleno, ya sea aquel que se forme gracias a las MF o la inserción de un autoinjerto osteocondral. Considerando dicho radio como máximo, se toma como valor aproximado $7,9 \text{ mm}$ para modelar al cilindro.

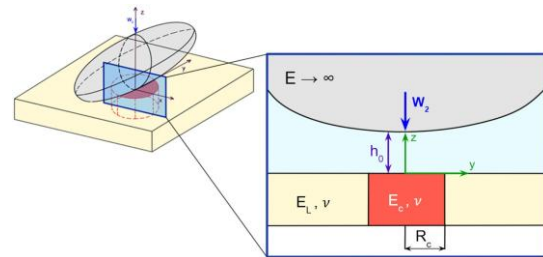


Figura 3. Vista del plano $y=0$. En amarillo (E_L) cartilago sano, en rojo (E_c) el material

de relleno. R_c es el radio del cilindro que contiene el material de relleno.

Las propiedades mecánicas del material generado a partir de MF son inferiores al del cartílago sano, esto es, el fibrocartílago es un tejido subóptimo para soportar las tensiones prolongadas asociadas con la carga de la articulación debido a su menor rigidez y su menor capacidad para tolerar el estrés por cizallamiento (Kyriacos et al. 2016, Krakowski et al. 2024). En un estudio realizado en caballos, el cartílago de reparación presentó una rigidez de contacto aproximadamente un orden de magnitud menor que la rigidez del cartílago sano. La menor rigidez a la compresión registrada en dicho estudio podría explicar la menor resistencia del fibrocartílago a la carga mecánica (Krakowski et al. 2024).

En contraposición, las propiedades mecánicas del injerto en el OAT dependen de la zona de donde se retire el mismo, ya que las mismas varían punto a punto en el cartílago articular (Hamsayeh Abbasi Niasar y Li 2023). Además, es de interés destacar que hay estudios demostrando que la rigidez del injerto varía en el tiempo luego de la operación (Krakowski et al. 2024).

Comercialmente, se encuentran disponibles otros procedimientos orientados a la reparación del CA, como por ejemplo el MACI (del inglés matrix-

induced autologous chondrocyte implantation), aprobado por la FDA en el año 2016, en la cual se utiliza una membrana de colágeno porcina con implantación de condrocitos que se coloca en el defecto para promover el relleno del mismo. Otra opción es proporcionada por Zimmer Biomet, DeNovo Natural TissueGraft, que utiliza PJAC (del inglés particulated juvenile allograft cartilage), el cual consiste en el uso de injerto juvenil (por su mayor capacidad regenerativa) junto a pegamento de fibrina (para mantenerlo anclado en la zona a tratar). Sin embargo, este último está clasificado con el grado de recomendación C, indicando evidencia de baja calidad para este procedimiento, según Wright (Majti, 2021).

En conclusión y debido a la gran variabilidad que existe en cuanto a las propiedades mecánicas del material de relleno, en este trabajo se simulan siete casos:

- Material de relleno con las mismas propiedades mecánicas que el material pre-existente: $E_c = E_L = E = 16 \text{ MPa}$
- $E_c > E_L$: el módulo elástico del material de relleno se incrementa respecto al del material pre-existente: $E_c = 17,5 \text{ MPa}$ ($E_c = 1,1 E_L$); $E_c = 19 \text{ MPa}$ ($E_c = 1,2 E_L$); $E_c = 20,5 \text{ MPa}$ ($E_c = 1,3 E_L$)

- $E_c < E_L$: el módulo elástico del material de relleno se disminuye respecto al del material pre-existente: $E_c = 14,5 \text{ MPa}$ ($E_c = 0,9 E_L$); $E_c = 13 \text{ MPa}$ ($E_c = 0,8 E_L$); $E_c = 11,5 \text{ MPa}$ ($E_c = 0,7 E_L$)

Ecuación de lubricación de Reynolds

A partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento y la ecuación de continuidad y considerando las siguientes hipótesis simplificatorias:

- Se asume fluido sinovial isotérmico, newtoniano e incompresible.
- Se desprecian los efectos inerciales y gravitacionales.
- Se utiliza la aproximación de lubricación.
- Se asume flujo laminar y predominantemente Couette, unidireccional y en estado estacionario.
- Se considera la superficie de aspereza despreciable.
- Se considera que no existe movimiento relativo de las superficies articulares en la dirección de la marcha, sino que se modela el fenómeno de aplastamiento (squeeze-film lubrication) el cual es predominante en la fase de contacto inicial del ciclo de

marcha (Jin et al., 2004; Weiss, 2019).

La ecuación de Reynolds (5) se expresa como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(h^3 \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(h^3 \frac{\partial P}{\partial y} \right) = 12\eta \frac{\partial h}{\partial t} \quad (5)$$

Donde:

h es la altura del canal definida anteriormente; P es la presión que ejerce el fluido en cada punto del material deformable; η es la viscosidad del fluido sinovial

Técnica de Resolución

Se utilizó el software comercial con licencia COMSOL Multiphysics, el cual está basado en el método de elementos finitos. El sistema de ecuaciones gobernantes consiste en la ecuación de altura del canal (4) y la ecuación de lubricación de Reynolds (5), las cuales se resuelven considerando que la cara inferior del dominio está fija y que la cara superior está sometida a la carga del fluido (W). Se considera que existe igualdad de tensiones en el límite del material de relleno y el cartílago aledaño. El resto de las superficies se suponen libres de tensiones.

La resolución de las ecuaciones da como resultado la presión en cada punto del dominio. Para obtener la carga W (6) a la que está siendo sometida la articulación, se debe integrar la presión a lo largo y a

lo ancho de la superficie del dominio deformable considerado:

$$W = \iint_{\Omega} P \, dx \, dy \quad (6)$$

El modelo utilizado representa el contacto lubricado de un único cóndilo femoral. Debido a la simetría del problema con respecto a los planos ZY –por el modelo geométrico utilizado– y ZX –dado que solo se considera el fenómeno de aplastamiento–, es posible reducir el dominio de estudio a un cuarto del original. Esta simplificación permite una reducción considerable del costo computacional (Figura 4).

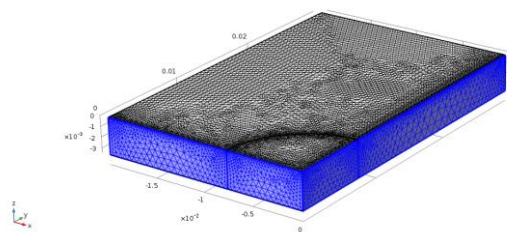


Figura 4: Malla del dominio deformable considerado. En la superficie sombreada en azul se aplican las condiciones de simetría. Longitudes expresadas en [m].

Durante la fase de apoyo simple del ciclo de marcha, la carga aplicada W (7) alcanza a ser tres veces el peso corporal de la persona (Weiss 2022). Si se considera que la masa promedio de una persona es 80 kg, su peso será de 784 N aproximadamente y la carga máxima a la que estará sometida la articulación total será de 2,352 kN. A su vez, se debe tener

en cuenta que el modelo de elipsoide sobre plano representa un único cóndilo femoral y la fase de la marcha que se estudia es el apoyo simple que ocurre al inicio de la marcha, esta carga se va a dividir en ambos cóndilos. Finalmente, como se resuelve para un cuarto del dominio original propuesto por el modelo, la carga se calcula como:

$$W(kg) = \frac{MC [kgf] * 3 * 9,8 \left[\frac{m}{s^2}\right]}{8} \quad (7)$$

donde MC es la masa corporal de la persona. En consecuencia, el valor de carga considerado es 294 N.

En la tabla 1 se exponen los valores utilizados para la resolución del problema (Seedhom et al. 1972, Di Paolo y Berli 2006, Weiss 2022).

Tabla 1. Valores de los parámetros físicos y operativos del modelo.

Descripción	Símbolo	Valor
Longitud del cartílago articular en dirección x y y	L	20 mm
Radio de la la zona articular tratada quirúrgicamente	R_c	7,5 mm
Radio equivalente en	R_x	123,7 mm

dirección antero-posterior		
Radio equivalente en dirección medial-lateral	R_y	352 mm
Altura inicial del canal de lubricación	h_0	0,1 mm
Velocidad de aproximación del elipsoide	W_2	0,1 m/s
Viscosidad del fluido sinovial	η	0,086 Pa s
Coeficiente de Poisson del cartílago	ν	0,4
Espesor del material deformable	e	3,4 mm
Módulo elástico del cartílago inferior en zona lateral	E_L	16 MPa;
Carga	W	294 N

Para garantizar la independencia de los resultados de la malla, se resolvió el mismo problema para mallas sucesivamente más finas. Si en sucesivos refinamientos la variación de las soluciones es grande (mayor al 2%), se infiere que la solución no es suficientemente precisa. Caso contrario, se puede decir que la solución es

adecuada (Fish, 2007). La malla seleccionada posee 62.613 elementos.

Resultados Y Discusión

En la Tabla 2, se presenta la tensión principal máxima en el material deformable ($\sigma_{\max}$), la presión máxima en el fluido ($P_{\max}$) y la altura mínima del canal de lubricación ($h_{\min}$) para tres casos diferentes:

- Caso C_{pe} : el material de tratamiento es el mismo que el material pre existente del material aledaño ($E_c = 16$ MPa).
- Caso $C_{\max}$: el material de tratamiento tiene un módulo de elasticidad 30% mayor ($E_c = 20,5$ MPa) que el correspondiente al material pre-existente.
- Caso $C_{\min}$: el material de tratamiento tiene un módulo de elasticidad 30% menor ($E_c = 11,5$ MPa) que el correspondiente al material pre-existente.

Tabla 2. Tensión principal máxima, presión máxima en la superficie del cartílago y altura mínima del canal para los tres casos.

Caso	E_c [MPa]	σ_{max} [MPa]	P_{max} [MPa]	h_{min} [μm]
C_{min}	11,5	3,04	3,04	27,48
Diferencia respecto a $E_c=16$ MPa	-30%	- 21,48 %	- 21,31 %	- 17,59 %
C_{pe}	16	3,86	3,86	33,35
Diferencia respecto a $E_c=16$ MPa	30%	15,43 %	15,43 %	- 27,56 %
C_{max}	20,5	4,46	4,46	24,16

Las figuras 5 y 6 muestran la presión a lo largo del canal de lubricación cuando $E_c \geq 16$ MPa y cuando $E_c \leq 16$ MPa, respectivamente. Como es de esperar, la presión máxima en todos los casos se encuentra en el centro del material deformable ($x = y = 0$). En la zona del parche, región donde $|y|$ es menor a 7,5 mm, la presión que ejerce el fluido en el material deformable debido a la aplicación de la carga aumenta con el aumento del módulo de elasticidad.

Para un $E_c = 20,5$ MPa (Figura 5, curva azul), la presión máxima es 4,46 MPa (Tabla 2) siendo 15,44% mayor que en el caso C_{pe} (curva magenta).

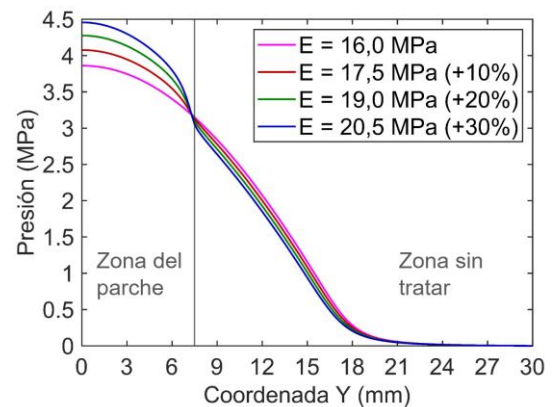


Figura 5: Presión cuando $E_c \geq 16$ MPa en el plano YZ.

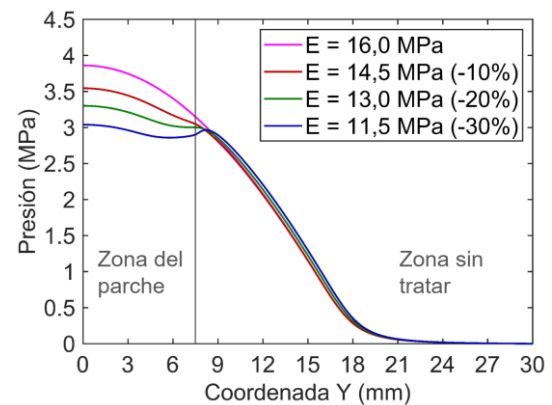


Figura 6: Presión cuando $E_c \leq 16$ MPa en el plano YZ.

Para el caso donde hay una disminución del 30% del módulo elástico del material de relleno (caso C_{min} , curva azul en la Figura 6), la presión máxima disminuye 21,3% con respecto al caso C_{pe} . Además, se observa que la presión aumenta en las zonas laterales del parche, compensando la disminución de presión en la zona tratada, dado que la carga (5) se mantiene constante.

Las figuras 7 y 8 presentan la altura del canal de lubricación a lo largo del canal de lubricación cuando $E_c \geq 16$ MPa y

cuando $E_c \leq 16$ MPa, respectivamente. Para facilitar la visualización se presenta un acercamiento de la zona de cambio del material.

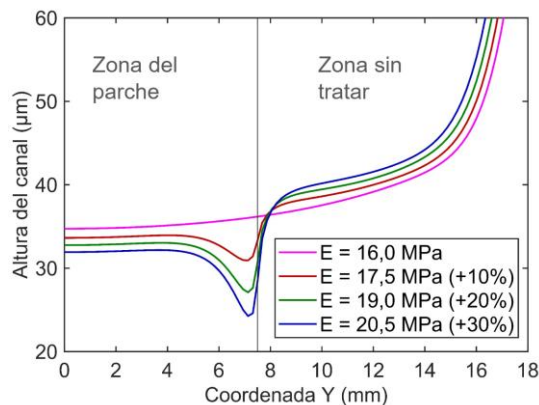


Figura 7: Altura del canal cuando $E_c \geq 16$ MPa en el plano YZ.

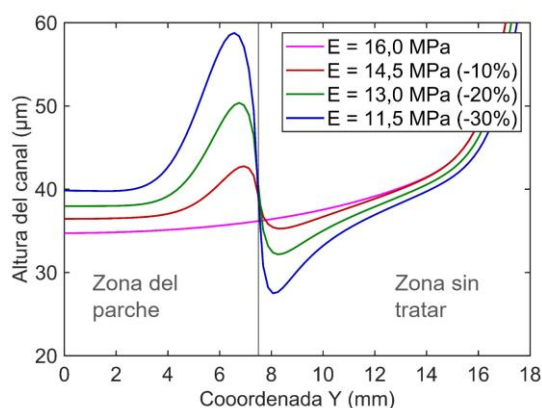


Figura 8: Altura del canal cuando $E_c \leq 16$ MPa en el plano YZ.

En los casos en que el módulo elástico del parche es mayor que el del material preexistente ($E_c \geq 16$ MPa, Figura 7), la altura del canal disminuye en la zona tratada, lo cual indica que una mayor rigidez del material de relleno conduce a una menor deformación del mismo y, en consecuencia, a una menor separación entre las superficies articulares. Se

aprecia, además, que cambia la ubicación de la altura mínima; en el caso Cpe, la altura mínima se encuentra en la desembocadura del canal (Figura 8, curva magenta), mientras que para un material con $E_c > 16$ MPa, la altura mínima se encuentra en el parche (curva azul). Para el caso Cmax, si bien la altura mínima presenta una disminución de 27,56% respecto al caso Cpe (Tabla 2), se aprecia en la Figura 8 que, en $y = 7,13$ mm, la altura del canal disminuye 32,7%. En los casos en que $E_c \leq 16$ MPa, la altura del canal aumenta en la zona del parche y disminuye en la zona sin tratar (Figura 8). Cuando $E_c = 11,5$ MPa, si bien la altura mínima presenta una disminución de 17,6% respecto al caso con $E_c = 16$ MPa (Tabla 2), se aprecia que, en $y = 8,06$ mm, la altura del canal disminuye 32% respecto al caso Cpe. En síntesis, un material de relleno con un módulo elástico (E_c) mayor o menor que el del material preexistente conduce a una reducción de la altura mínima del canal y al acercamiento de las superficies articulares. En el primer caso, la disminución ocurre en el parche y en el segundo caso, ocurre en el cartílago natural. En particular, en el caso de $E_c = 20,5$ MPa, se obtiene una altura mínima del canal de $24,16 \mu m$, valor inferior a la altura mínima límite considerada de $25 \mu m$. Esto indicaría que, para dicho caso, el régimen de lubricación sería

mixto, favoreciendo el desgaste de las superficies articulares. Por lo tanto, sería recomendable que el módulo elástico del parche sea inferior a 20,5 MPa.

Los materiales de relleno con un módulo elástico superior al del material preexistente ($E_c > 16$ MPa) conducen a una disminución de las presiones máximas de hasta un 9,37 % en la zona sin tratar. Este comportamiento sugiere un pronóstico desfavorable, ya que la ausencia de carga promovería la degeneración y osificación del cartílago (Venäläinen, 2016).

La utilización de materiales de relleno con un módulo de elasticidad menor al del material pre-existente ($E_c < 16$ MPa y hasta $E_c = 11,5$ MPa), si bien conducen a un aumento de hasta un 7% de las presiones en la zona sin tratar, presentan una altura mínima del canal que conduciría a un régimen de lubricación de película delgada y las superficies articulares estarían completamente separadas, siendo esto deseable para reducir el desgaste mecánico.

En la Figura 9 se muestra la distribución de tensiones para el parche de mayor módulo de elasticidad considerado ($E_c = 20,5$ MPa), correspondiente al caso en que las presiones en el fluido resultaron ser las mayores. La tensión principal máxima de compresión es de 4,46 MPa (15,4% mayor a la obtenida en el caso C_{pe}) y tiene el mismo valor que la presión

máxima. La tensión principal máxima se encuentra en la superficie de la región ocupada por el parche, en particular, en el centro del material de relleno. Loening et al. (2000) demostraron que se genera apoptosis de condrocitos (muerte celular programada) a una tensión de tan solo 4,5 MPa. Esto sugiere que, para un parche con módulo elástico mayor a 20,5 MPa, se debería evitar el uso de biomateriales que contengan condrocitos.

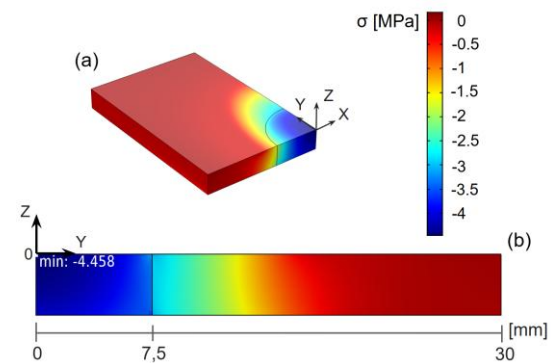


Figura 9: Tensión principal en el material deformable cuando $E_c = 20,5$ MPa. La tensión máxima en compresión es 4,46 MPa. a) Vista en 3D. b) Plano YZ.

Finalmente, en la Figura 10 se muestra la tensión principal para el caso C_{min} , cuyo valor máximo es de 3,46 MPa. En este caso, la tensión principal se encuentra en la interfase parche-cartílago a 0,12 mm de la superficie. Se destaca que la reducción de la presión máxima en un 21% no se refleja en una reducción de igual proporción para la tensión principal máxima (disminución del 10%). Estos resultados son consistentes con los hallazgos de Vanwanseele (2016), dado

que las tensiones de contacto se elevan en la región adyacente al defecto, aunque la disminución del módulo elástico simulada en este trabajo no alcanzaría a niveles de tensiones capaces de provocar la muerte celular en el tejido circundante al defecto.

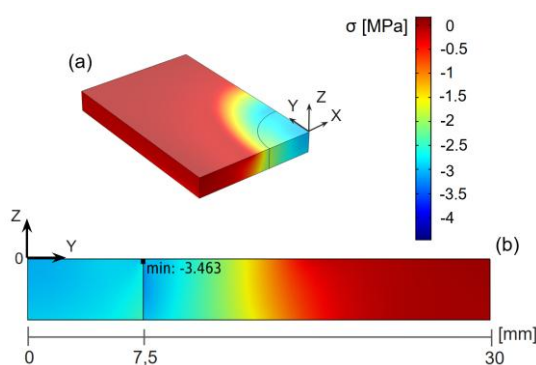


Figura 10: Tensión principal en el material deformable cuando $E_c = 11,5$ MPa. La tensión máxima en compresión es 3,46 MPa. a) Vista en 3D. b) Plano YZ.

Conclusiones

Se analizaron siete casos con el fin de comparar el desempeño de una articulación de rodilla sana en contraposición a una que haya sido sometida a un procedimiento quirúrgico como lo es la microfractura o los injertos osteocondrales.

Los principales resultados de este trabajo indican que:

- Un módulo de elasticidad del material de relleno de 20,5 MPa provoca una tensión principal máxima de 4,46 MPa en el parche, un valor bastante cercano a los 4,5 MPa que produciría

apoptosis de condrocitos. Por lo que sería desaconsejable la utilización de un material de relleno (compuesto por condrocitos) que posean un módulo elástico mayor a 20,5 MPa.

- Para el caso mínimo considerado ($E = 11,5$ MPa), la presión máxima disminuye (21%) en una proporción diferente a la disminución de la tensión principal máxima (10%). Además, esta última se encuentra debajo de la superficie del material y en la interfase parche-cartílago, lo que sugiere un comportamiento similar a una lesión focal donde las tensiones se elevan en el cartílago adyacente al defecto. Sin embargo, este valor no alcanza el umbral para el cual existe muerte celular.
- Tanto el aumento como la disminución del módulo elástico del material de relleno provocan una disminución de la altura mínima del canal de lubricación y el acercamiento de las superficies articulares. La ubicación de dicha altura mínima varía, encontrándose en la desembocadura del canal en el caso de $E_c < 16$ MPa y en la región del parche cuando $E_c > 16$ MPa.

- Para un material de $E_c = 20,5$ MPa, la altura mínima del canal correspondería a un régimen de lubricación mixta que favorece al desgaste de las superficies. Esto indica que sería deseable utilizar un material de relleno con un módulo elástico menor a dicho valor.

Los resultados fueron obtenidos a partir de un modelo de la articulación de rodilla bajo consideraciones simplificadoras relacionadas con el comportamiento del fluido sinovial, el mecanismo de deformación del cartílago articular, la geometría de la articulación, las cargas y las velocidades actuantes. Sin embargo, este modelo podría servir como base para otros modelos más realistas, donde se consideren, por ejemplo, las características no Newtonianas del fluido sinovial, la viscoelasticidad del cartílago, o estudios transitorios donde las cargas y velocidades aplicadas sobre la articulación varían a lo largo del ciclo de la marcha.

Referencias

- Berli, M.E. (2013). *Solución numérica de un modelo de lubricación visco-elastohidrodinámica de prótesis de rodilla* (Tesis de Magíster en Tecnología Química, Universidad Nacional del Litoral). Biblioteca Virtual de la UNL.
- <https://bibliotecavirtual.unl.edu.ar:8443/handle/11185/424>
- Berli, M. E., & Di Paolo, J. (2006). Numerical analysis of the effects of material parameters on the lubrication mechanism for knee prosthesis. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 9(2), 79-89. doi:10.1080/10255840500523139
- DeFroda, S. F., Bokshan, S. L., Yang, D. S., Daniels, A. H., & Owens, B. D. (2021). Trends in the surgical treatment of articular cartilage lesions in the United States from 2007 to 2016. *Journal of Knee Surgery*, 34(14), 1609–1616. doi:10.1055/s-0040-1712946
- Di Puccio, F., & Mattei, L. (2015). Biotribology of artificial hip joints. *World Journal of Orthopedics*, 6(1), 77-94. doi:10.5312/wjo.v6.i1.77
- Fish, J., & Belytschko, T. (2007). *A first course in finite elements*. Chichester, England: Wiley. doi:10.1002/9780470510858
- Forriol Campos, F. (2002). El cartílago articular: Aspectos mecánicos y su repercusión en la reparación tisular. *Revista Española de Cirugía Ortopédica y Traumatología*, 46(5), 380–390. Recuperado de <https://www.elsevier.es/es->

- [revista-revista-espanola-cirugia-
ortopedica-traumatologia-129-
pdf-13038046](#)
- Hamsayeh Abbasi Niasar, E., & Li, L. P. (2023). *Characterizing site-specific mechanical properties of knee cartilage with indentation-relaxation maps and machine learning*. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 142, 105826.
doi:10.1016/j.jmbbm.2023.105826
- Hinckel, B. B., Thomas, D., Vellios, E. E., Hancock, K. J., Calcei, J. G., Sherman, S. L., Eliasberg, C. D., Fernandes, T. L., Farr, J., Lattermann, C., & Gomoll, A. H. (2021). Algorithm for treatment of focal cartilage defects of the knee: Classic and new procedures. *Cartilage*, 13(1 Suppl), 473S–495S.
doi:10.1177/1947603521993219
- Jin, Z. M., Fisher, J., Bell, C. J., Stone, M. H., Harris, W. H., & Schmalzried, T. P. (1999). An axisymmetric contact model of ultra high molecular weight polyethylene cups against metallic femoral heads for artificial hip joint replacements. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part H: Journal of Engineering in Medicine*, 213(4), 317–327.
- Jin, Z. M., Yang, P., Cui, J., Dowson, D. (2004) Transient elastohydrodynamic analysis of elliptical contacts. Part 1: Isothermal and Newtonian lubricant solution. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology*, 218(3), pp. 211–224.
doi:10.1243/135065005X9826
- Kraeutler, M. J., Kaenkumchorn, T., Pascual-Garrido, C., Wimmer, M. A., & Chubinskaya, S. (2017). Peculiarities in ankle cartilage. *Cartilage*, 8(1), 12–18.
doi:10.1177/1947603516642572
- Krakowski, P., Rejniak, A., Sobczyk, J., & Karpiński, R. (2024). Cartilage integrity: A review of mechanical and frictional properties and repair approaches in osteoarthritis. *Healthcare*, 12(16).
doi:10.3390/healthcare12161648
- Kutaish, H., Klopfenstein, A., Obeid Adorisio, S. N., Tscholl, P. M., & Fucentese, S. (2025). Current trends in the treatment of focal cartilage lesions: A comprehensive review. *EFORT Open Reviews*, 10(4), 203–212.
doi:10.1530/EOR-2024-0083

- Kyriacos A. Athanasiou et al. Articular Cartilage (Ed.) (2016). *Articular cartilage*. CRC Press.
- Lawrence, R. C., Felson, D. T., Helmick, C. G., Arnold, L. M., Choi, H., Deyo, R. A., Gabriel, S., Hirsch, R., Hochberg, M. C., Hunder, G. G., Jordan, J. M., Katz, J. N., Kremers, H. M., & Wolfe, F.; National Arthritis Data Workgroup. (2008). Estimates of the prevalence of arthritis and other rheumatic conditions in the United States. Part II. *Arthritis & Rheumatism*, 58(1), 26–35. doi:10.1002/art.23176
- Loening, A. M., James, I. E., Levenston, M. E., Badger, A. M., Frank, E. H., Kurz, B., Nuttall, M. E., Hung, H.-H., Blake, S. M., Grodzinsky, A. J., & Lark, M. W. (2000). Injurious mechanical compression of bovine articular cartilage induces chondrocyte apoptosis. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 381(2), 205–212. doi:10.1006/abbi.2000.1988
- Long, H., Liu, Q., Yin, H., Wang, K., Diao, N., Zhang, Y., Lin, J., & Guo, A. (2022). Prevalence trends of site-specific osteoarthritis from 1990 to 2019: Findings from the Global Burden of Disease Study 2019. *Arthritis & Rheumatology*, 74(7), 1172–1183. doi:10.1002/art.42089
- Majti, D. (2021). *Chondral Lesions of the Knee: An Evidence-Based Approach*. 103(7).
- Mansour, J.M. (2013). *Biomechanics of cartilage*.
- McCormick, F., Harris, J. D., Abrams, G. D., Frank, R., Gupta, A., Hussey, K., Wilson, H., Bach, B. Jr., & Cole, B. (2014). Trends in the surgical treatment of articular cartilage lesions in the United States: An analysis of a large private-payer database over a period of 8 years. *Arthroscopy*, 30(2), 222–226. doi:10.1016/j.arthro.2013.11.001
- Minas, T. (2011). Patient evaluation, cartilage defect, and evidence: Putting it all together. En T. Minas (Ed.), *A primer in cartilage repair and joint preservation of the knee* (pp. 31–46). Elsevier.
- Mostakhdemin, M., Nand, A., & Ramezani, M. (2021). Articular and Artificial Cartilage, Characteristics, Properties and Testing Approaches—A Review. *Polymers*, 13(12), 2000. doi:10.3390/polym13122000
- Petitjean, N., Canadas, P., Royer, P., Noël, D., & Le Floc'h, S. (2023). Cartilage biomechanics: From the basic facts to the challenges of

- tissue engineering. *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 111(7). doi:10.1002/jbm.a.37478
- Richter, D. L., Schenck, R. C. Jr., Wascher, D. C., & Treme, G. (2016). Knee articular cartilage repair and restoration techniques: A review of the literature. *Sports Health*, 8(2), 153–160. doi:10.1177/1941738115611350
- Seedhom, B. B., Longton, E. B., Wright, V., & Dowson, D. (1972). Dimensions of the knee. Radiographic and autopsy study of sizes required by a knee prosthesis. *Annals of the Rheumatic Diseases*, 31(1), 54–58. doi:10.1136/ard.31.1.54
- Seedhom, B.B., Shepherd, D. E. T. (1999) Thickness of human articular cartilage in joints of the lower limb. *Annals of the Rheumatic Diseases*, 58(1), pp. 27–34. doi:10.1136/ard.58.1.27
- Sociedad Argentina de Reumatología (2010). *Guías Argentinas de Práctica Clínica para el Diagnóstico y Tratamiento de la Osteoartritis* (pp. 3–5).
- Su, Y., Wang, L., Greenberg, R. K., & Pedersen, D. R. (2011). Time-dependent elastohydrodynamic lubrication analysis of total knee replacement under walking conditions. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 14(6), 539–548. doi:10.1080/10255842.2010.524272
- Vanwanseele, B., Jessica, P., Susan, C., & Mark, R. (2002). The effects of immobilization on the characteristics of articular cartilage: Current concepts and future directions. *Osteoarthritis and Cartilage*, 10(5).
- Venäläinen, M. S., Mononen, M. E., Salo, J., Räsänen, L. P., Jurvelin, J. S., Töyräs, J., Virén, T., & Korhonen, R. K. (2016). Quantitative evaluation of the mechanical risks caused by focal cartilage defects in the knee. *Scientific Reports*, 6(1), 37538. doi:10.1038/srep37538
- Wallace, I. J., Worthington, S., Felson, D. T., Jurmain, R. D., Wren, K. T., Maijanen, H., Woods, R. J., & Lieberman, D. E. (2017). Knee osteoarthritis has doubled in prevalence since the mid-20th century. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 114(35), 9332–9336. doi:10.1073/pnas.1703856114
- Weiss, B. A., Bou-Saïd, B., Ubal, S., & Di Paolo, J. (2019). The Phan-Thien and Tanner model applied to the

lubrication of knee prostheses.

Journal of Biomechanical Engineering, 141(8), 081008.

doi:10.1115/1.4043032

Weiss, B. A. (2022). *Articulaciones sinoviales artificiales de alta movilidad: Investigaciones para el desarrollo de prótesis de por vida* [Tesis doctoral, Universidad Nacional de Entre Ríos].

Financiamiento

A la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Entre Ríos por los recursos necesarios para la realización de este trabajo a través del PID 6243.

27.- Ciencia, tecnología e innovación

El uso de la IA en los alumnos de la carrera de Derecho: su impacto en el aprendizaje

Autor: Jara, Cinthia; **E. mail:** jaracinc@gmail.com

Co-autor: Benítez, Miguel; **E. mail:** miguelbenitez099@gmail.com

Orientador/a: Villalba, Edith; **E. mail:** edithvillalba004@gmail.com

Universidad Nacional del Este / Facultad de Derecho y Ciencias Sociales

RESUMEN

La presente investigación tiene como objetivo principal el análisis del impacto que tiene la inteligencia artificial (IA) en el proceso de aprendizaje de los alumnos de la carrera de Derecho de la Universidad Nacional del Este. Herramientas de IA como ChatGPT, Copilot y otros han inundado el campo educativo creando cambios sustanciales en la forma en la que los alumnos acceden, procesan y aplican los conocimientos jurídicos.

El enfoque utilizando en la investigación es cuantitativo y descriptivo; se aplicó una encuesta en línea con preguntas cerradas a una muestra del total de la población de estudiantes. De los encuestados, se indica que el 91,3% utiliza herramientas de la IA, especialmente en tareas de investigación y redacción, durante su proceso como alumnos. Además, un alto porcentaje considera que las herramientas tecnológicas de la inteligencia artificial ayuda en la comprensión de los conceptos jurídicos, aunque es notable una percepción ambivalente respecto a su uso y el rendimiento académico y la confiabilidad en las respuestas.

Se pudo constatar también que existe una división de opiniones en torno a la sustitución de estudio tradicional por la IA. Y se evidenció una falta de unanimidad en cuanto a la necesidad de regular el uso de la IA por parte de las Universidades.

Palabras claves: Aprendizaje Jurídico, Derecho, Educación Superior, Ética educativa, Herramientas tecnológicas, Inteligencia Artificial, Rendimiento académico, ChatGPT.

INTRODUCCIÓN

En los últimos años, las incursiones de nuevas herramientas tecnológicas han tomado lugar en muchos ámbitos y aún más en la educación superior. Herramientas de inteligencia artificial (IA), como ChatGPT, y otras aplicaciones han transformado de forma decisiva el aprendizaje en los alumnos de la educación superior y, muy en específico, en la carrera de Derecho. Estas tecnologías están redefiniendo tareas fundamentales como la investigación jurídica, la redacción de escritos y la preparación de argumentos, lo que plantea tanto oportunidades significativas como desafíos eminentes para la formación profesional.

La inteligencia artificial ofrece un potencial inmenso para transformar la educación universitaria, mejorando tanto la personalización del aprendizaje como la

eficiencia administrativa (Soong y Ho, 2021). Los modelos generativos de IA han mostrado una capacidad notable para complementar, de una forma interesante, las enseñanzas en los estudiantes.

Sin embargo, este mismo progreso despierta preocupaciones legítimas. El uso de la IA podría facilitar el plagio o la presentación de trabajos sin el debido proceso de aprendizaje auténtico.

Por tanto, frente a la dualidad planteada, la presente investigación se propone explorar de manera integral cómo los estudiantes de Derecho utilizan la IA, de qué manera perciben su impacto en la comprensión de conceptos y en su rendimiento académico, y qué implicaciones éticas y pedagógicas emergen de esta nueva realidad educativa

Objetivos

- **Objetivo general:**

Analizar el impacto que tiene la Inteligencia Artificial en el proceso de aprendizaje de los alumnos.

- **Objetivos específicos:**

- Analizar el grado de uso de herramientas de inteligencia artificial por parte de estudiantes de Derecho y

las actividades académicas en las que las emplean.

- Evaluar el impacto percibido del uso de la inteligencia artificial en la comprensión de contenidos jurídicos y en el rendimiento académico de los estudiantes.
- Explorar las percepciones de los estudiantes sobre los riesgos y beneficios del uso

MARCO TEÓRICO

La Inteligencia Artificial cada día aparece más desarrollada, primeramente, debemos conocer cuál es el concepto claro del mismo. Rouhiainen (2018) indica que "es la capacidad de las máquinas para usar algoritmos, aprender de los datos y utilizar lo aprendido en la toma de decisiones tal y como lo haría un ser humano" (p.7). Dentro hay dos sub conjuntos de algoritmos importantes de explicar, el aprendizaje automático (en inglés, machine learning y el aprendizaje profundo o (deep learning). El primero trata un aspecto de la informática en el que los ordenadores o las máquinas tienen la capacidad de aprender sin estar programados para ello. Un resultado típico serían las sugerencias o predicciones que aparecen en las redes sociales hoy día, mientras que el segundo es un nivel de aprendizaje más profundo a nivel de imitar la capacidad humana incluso más allá de cada una de las capas neuronales y aprende de la anterior en un funcionamiento bastante complejo que mejora continuamente y permite realizar predicciones con mayor precisión (Gómez, 2022). A la fecha, encuentran robots guiados por la IA realizando cirugías cardíacas y cerebrales de gran complejidad.

Entre ellas se encuentra la diversidad de utilización de la misma como, por ejemplo, en el aprendizaje en el campo del Derecho, donde cabe destacar que la capacidad analítica, la comprensión de conceptos y la interpretación es fundamental. Ciertos factores preponderantes en la captación de información, es el poco interés, pereza o inclusive el bajo conocimiento léxico (Amavizca y Alvarez, 2020) factores que hacen y llevan a la utilización de plataformas y aplicativos con Inteligencia Artificial.

Desde el inicio del descubrimiento de estos sistemas, entre los años de 1980 a 1990, la IA ha evolucionado significativamente y más aún en la educación. En la actualidad se siguen adaptando para analizar grandes volúmenes de información como, por ejemplo, en el campo del Derecho. Baran (2024) menciona que estos sistemas fueron diseñados para fortalecer el conocimiento humano en entornos específicos requeridos por los mismos.

En los últimos años se ha visto un crecimiento exponencial en la implementación y utilización de la inteligencia artificial en Instituciones de Educación Superior; las mismas son

utilizadas para reunir informaciones, así como también incentivan y promueven un aprendizaje interactivo a través de plataformas que se adecuan según el desempeño individual del estudiante (Rouhiainen, 2018). En el Derecho es esencialmente útil para abordar y esclarecer algunas complejidades que plantea el sistema legal, además del marco normativo en constante evolución (Tovar, Bustamante, Bustamante y Vallejos, 2024)

El Derecho, como disciplina, se caracteriza por su enfoque analítico, interpretativo y crítico. En este sentido, la IA ha demostrado ser una herramienta clave para el análisis de casos y en ciertos casos resoluciones de casos mediante las

simulaciones prácticas. Cordon (2023) resalta que los estudiantes pueden beneficiarse enormemente de sistemas de simulación que replican escenarios judiciales reales, mejorando su capacidad para argumentar y tomar decisiones basadas en principios jurídicos.

De igual manera, la IA permite a los estudiantes explorar bases de datos legales de manera eficiente, accediendo a normativas, jurisprudencias y doctrinas que enriquecen el aprendizaje. Estas aplicaciones, junto con los avances en el procesamiento del lenguaje natural, han transformado la manera en que los futuros abogados interactúan con el conocimiento jurídico (Rouhiainen, 2018)

Bases Teóricas

Existen diversas Teorías que abordan sobre el impacto de la IA en la educación jurídica; una de ellas es el Constructivismo que, según Piaget y Vygotsky, el aprendizaje es un proceso activo que se construye a partir de la interacción con el entorno. Las plataformas de aprendizaje adaptativo basadas en IA actúan como mediadores, facilitando la personalización de contenidos según el ritmo y las necesidades del estudiante (Martínez, Guevara y Rodríguez 2024). Siemens (2004) hace mención al Conectivismo y plantea que el aprendizaje

digital se basa en la conexión y el acceso a redes de información. En este marco, la IA amplifica estas capacidades al permitir que los estudiantes exploren bases de datos jurídicas y sistemas de simulación, fomentando la colaboración y el análisis crítico (Tovar et al., 2024). Otra teoría importante es la del aprendizaje profundo, destacado por Rouhiainen (2018), utiliza redes neuronales para identificar patrones complejos en grandes volúmenes de datos, lo que resulta especialmente útil en la evaluación y retroalimentación de tareas educativas.

Es importante mencionar, el impacto de la IA en la educación jurídica puede observarse en estas áreas:

- La optimización del Aprendizaje: la IA permite un aprendizaje más eficiente al proporcionar contenidos personalizados y retroalimentación inmediata. Esto mejora la retención de conocimientos y fomenta un aprendizaje más significativo (Rouhiainen, 2018).

- Acceso Global al Conocimiento: Las plataformas de IA amplían el acceso a recursos educativos, permitiendo a los estudiantes explorar contenido jurídico de manera global y contextualizada (García, 2023).

La presente investigación abarca precisamente estos temas ya que pretende conocer la influencia de la IA en la investigación jurídica, la redacción de escritos y otras actividades académicas. El impacto que tiene esta herramienta en los alumnos de Derecho teniendo en cuenta la facilidad de información que proporciona además de la rapidez, por sobre todo información entre otros que muchas veces

no termina siendo la correcta o escritos adecuado, muchas veces terminan siendo informaciones aleatorias la que este proporciona llevando a la desinformación, Baran (2024) menciona que, por ejemplo, chatGPT usa la técnica RLHF, que significa Reinforcement Learning from Human Feedback, es decir, que hay un factor humano en medio. Lo que conlleva a una total vulnerabilidad frente a la desinformación

En síntesis, la IA representa una herramienta poderosa para transformar la educación jurídica. Al integrar tecnologías avanzadas, como el aprendizaje automático y los simuladores legales, los estudiantes pueden adquirir habilidades críticas y relevantes para su desarrollo profesional. Sin embargo, es crucial abordar los desafíos éticos y técnicos asociados con su implementación, garantizando un uso responsable y equitativo de estas herramientas. Este marco teórico establece las bases para un análisis cuantitativo que evalúe el impacto real de la IA en la educación jurídica.

MATERIALES Y MÉTODOS

Materiales:

- Cuestionario de preguntas cerradas en línea

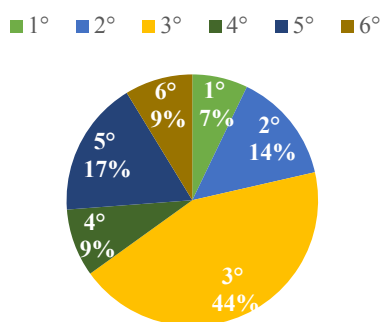
- Población: estudiantes de la carrera de Derecho de la UNE

- Muestra: 127 estudiantes de los cursos del primero al sexto año correspondiente al 18,41% del total de alumnos del año lectivo.
- Diseño de estudio: cuantitativo
- Tipo de estudio: no experimental
- Alcance: descriptivo exploratorio

Métodos:

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

¿A QUÉ CURSO PERTENECES?



Discusión

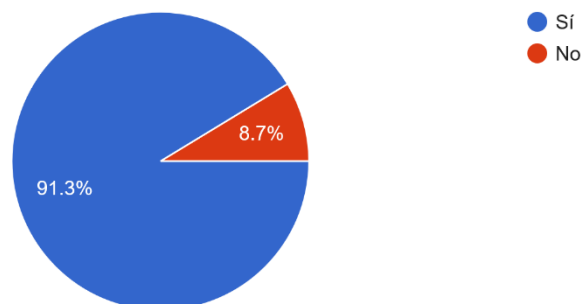
De los encuestados, el mayor porcentaje se obtuvo de los alumnos del Tercer curso, con el 44% del total; seguido del Quinto curso, con el 17%; el Segundo curso con el 14%; y los demás, con menor participación de estudiantes fueron el primero, segundo y sexto curso en donde se obtuvo el 7%,

9% y 9% respectivamente.

Cabe resaltar que la encuesta en línea estuvo abierta durante varias semanas a los alumnos de la carrera de Derecho, desde el primero al sexto curso, de los cuales muchos no quisieron responder, por lo que se obtuvo el 20% de participación.

¿Has utilizado alguna herramienta de Inteligencia Artificial (como ChatGPT, Copilot, etc.) durante tu formación en Derecho?

127 responses



Discusión

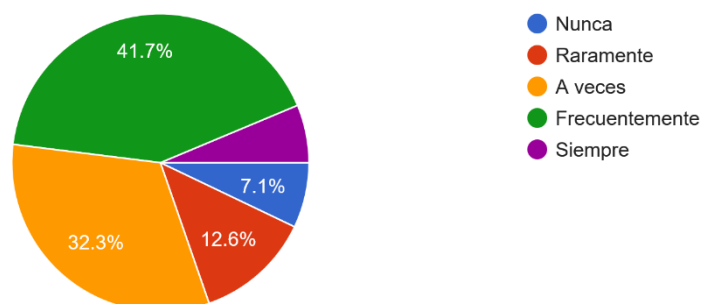
El 91,3% de los encuestados manifiesta que sí utiliza alguna herramienta de inteligencia artificial, sean estas Chat GPT, Copilot u otros durante su formación como estudiantes, frente al 8,7% que afirma no utilizar ninguna herramienta de la IA.

Varias son las investigaciones que se

realizan en torno a la utilización de la IA en los estudiantes de educación superior, como la de José Luis Escalante Jiménez y, en la mayoría de ellas, sale un porcentaje bastante positivo en cuanto a la utilización de las herramientas de inteligencia artificial por parte de los alumnos.

¿Con qué frecuencia utilizas herramientas de IA para tus estudios de Derecho?

127 responses



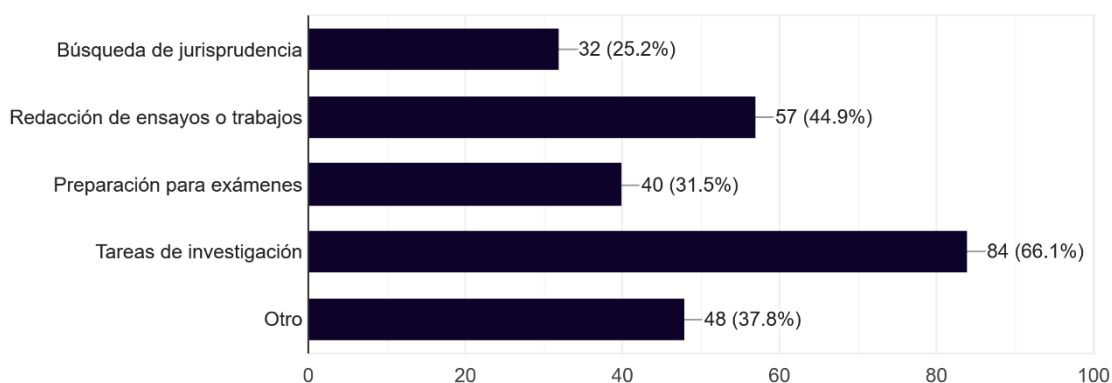
Discusión

El 41,7% respondió que utiliza la IA de forma frecuente para sus estudios de Derecho, el 32,3% lo utiliza a veces, el 12,6% raramente lo utiliza, siempre utiliza el 6,3% y nunca utiliza el 7,1%. Llama la atención ese porcentaje de 7,1% que no

utiliza ninguna herramienta de IA, pues significa que todavía hay alumnos que son reacios a la utilización de alguna de las herramientas, ya sea por desconocimiento o justamente por no confiar en las mismas.

¿Para qué actividades académicas sueles utilizar la IA? (Marca todas las que correspondan)

127 responses



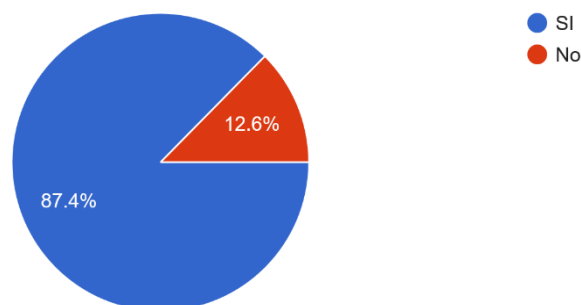
Discusión

El mayor porcentaje de alumnos utiliza la IA para tareas de investigación; seguido del 44.9% que utiliza para redacciones; el 37,8% utiliza para otras cosas no especificadas; el 31,5% lo utiliza como preparación de los exámenes y el 25,2% utiliza para búsqueda de jurisprudencia.

El porcentaje de alumnos que utiliza para prepararse ante un examen resulta bastante significativo y cabe la consulta de si realmente las informaciones otorgadas por la Inteligencia Artificial resultan verídicas y confiables como para utilizar en una preparación ante un examen.

¿Consideras que el uso de IA ha mejorado tu comprensión de los temas jurídicos?

127 responses



Discusión

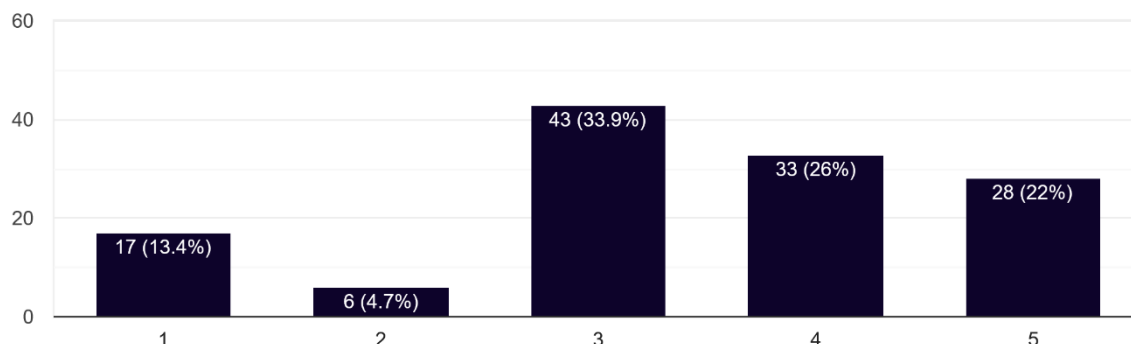
Ante la consideración de que el uso de la IA ayuda en la mejora con la comprensión de temas jurídicos, el 87,4% respondió afirmativamente frente al 12,6% que no considera a la IA como ayuda en la comprensión de temas jurídicos.

Son 16 las personas del total que no utiliza la IA para comprender los temas jurídicos,

por lo que este total de personas es probable que recurran a fuentes bibliográficas oficiales, como la propia jurisprudencia, códigos u otros mecanismos que no incluya ninguna herramienta de IA.

En una escala del 1 al 5, ¿cuánto ha mejorado tu rendimiento académico gracias al uso de IA? (1 = Nada, 5 = Mucho)

127 responses



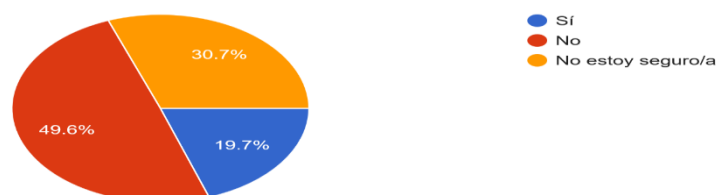
Discusión

En cuanto al mejoramiento del rendimiento académico con la utilización de la IA, el 33,9% se encuentra en el medio en donde el mínimo es nada y el máximo es mucho entendiéndose de que el rendimiento académico mejoró más o menos gracias al uso de la IA; El 26% fue más positivo acercándose al valor máximo y el 22%

afirma que mucho ha mejorado su rendimiento académico con la utilización de las herramientas de la IA. El 13,4% manifestó que no ha mejorado para nada su rendimiento académico con la utilización de la IA, seguida del 4,7% que marcó cercano a lo negativo también en cuanto al uso de la IA en su rendimiento académico.

¿Crees que la IA puede sustituir el estudio tradicional del Derecho (libros, clases, jurisprudencia manual)?

127 responses



Discusión

El 49,6% negó que la IA puede sustituir el estudio tradicional del Derecho que incluye libros, clases, jurisprudencia y manuales frente al 19,7% que afirmó que la IA sí puede sustituir ese estudio tradicional del

Derecho y el 30.7% que se encuentra en duda y, por ende, no está segura de una u otra posición.

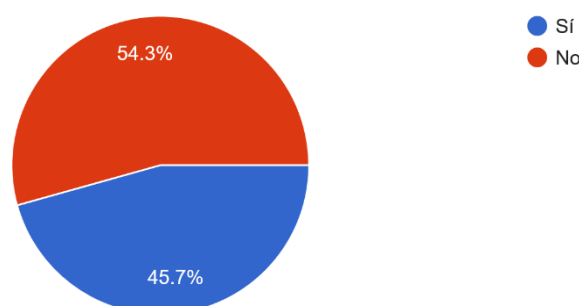
Es poco el porcentaje afirmativo frente al negativo que opina que puede sustituirse el

estudio tradicional del Derecho y es mayoritario el porcentaje de duda frente al positivo que no tiene todavía una visión futura en donde se podría pensar que la

educación tradicional finalmente será sustituida o complementada con las herramientas de la IA.

¿Te preocupa la posibilidad de depender demasiado de la IA para aprender Derecho?

127 responses



Discusión

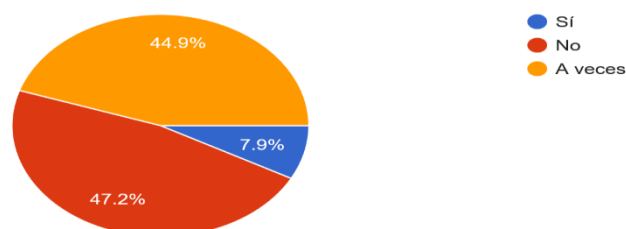
El 54,3% manifestó que no le preocupa la posibilidad de depender de la IA en su proceso de educación, y el 45,7% sí le preocupa esa dependencia a la IA en sus estudios de la carrera.

Ese alto porcentaje de preocupación indica

la dependencia que se tiene a las herramientas de la IA para el desarrollo de las actividades académicas, la comprensión de temas jurídicos y la sobrada utilización de la IA en lo cotidiano.

¿Confías plenamente en las respuestas que proporciona la IA en temas jurídicos?

127 responses



Discusión

El 47,2% no confía plenamente en las respuestas que proporciona la IA en temas

jurídicos, mientras que el 44,9% a veces confía en esas respuestas y el 7.9%

rotundamente confía en las contestaciones otorgadas por la IA en temas jurídicos.

Aunque el porcentaje de alumnos que no confía fue una respuesta mayoritaria, no obstante, ese porcentaje que a veces

confía es también llamativo y se suma al porcentaje de los gráficos anteriores en donde se vio un porcentaje elevado, de 42,7%, en los estudiantes que utiliza la IA para sus estudios de Derecho.

¿Crees que el uso de IA en la carrera de Derecho debería ser regulado por las universidades?
127 responses



Discusión

Con esta pregunta, el mayor porcentaje se obtuvo en estudiantes que no tienen una opinión formada sobre la regulación en cuanto al uso de la IA en las universidades obteniendo el 40,2%. Mientras que el 33,1% manifestó afirmativamente en cuanto a la regulación de parte de las universidades en cuanto al uso de la IA. Y el 26,8% indicó que no debería de regularse este tema en las universidades.

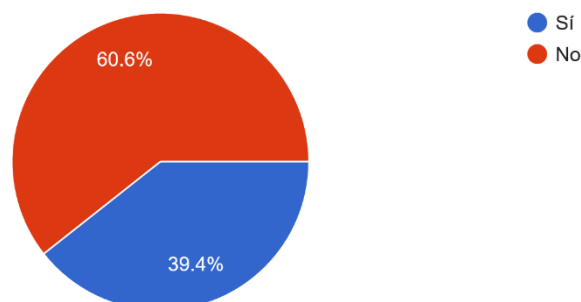
En varias partes del mundo, ya se está

dando una regulación de la utilización de la IA en las universidades, tal es el caso de la Unión Europea promulgó un marco regulatorio para la IA.

En Paraguay, un grupo de legisladores presentó un proyecto de ley que regula y promueve la creación, desarrollo, innovación e implementación de sistemas de inteligencia artificial (IA), en marzo de este año.

Crees que el uso de la IA en los alumnos puede empeorar su desarrollo de aprendizaje?

127 responses



Discusión

El 60,6% manifestó que el uso de la IA en los alumnos no empeorará su desarrollo en el aprendizaje mientras que el 39,4% dijo

que sí empeoraría ese proceso de aprendizaje con la utilización de las herramientas de Inteligencia Artificial.

CONCLUSIÓN

Teniendo en cuenta todos los aspectos analizados, se llega a la conclusión de que, según los resultados obtenidos, se se puede evidenciar un alto nivel de utilización de las herramientas de inteligencia artificial (IA) por parte de los estudiantes de Derecho ya que el 91,3% de los encuestados afirma que utiliza alguna herramienta de IA en su formación académica, siendo su uso más común para tareas de investigación, redacción y, en menor medida, para preparación de exámenes y búsqueda de jurisprudencia.

Aunque la mayoría de los encuestados se mostró de acuerdo en que la IA contribuye a mejorar la comprensión en temas jurídicos, no obstante, las

opiniones en cuanto al impacto en el rendimiento académico están divididas, pues una parte importante considera que ha mejorado su desempeño, mientras que otro grupo no percibe grandes beneficios o se muestra escéptico. Esto coincide con otras investigaciones que demuestran que, aunque la IA puede beneficiar la mejora en el rendimiento académico, su impacto no es determinante para todos (Zelaya-Guzmán et al., 2024). Además, investigaciones en educación superior advierten sobre la posibilidad de **dificultades en el pensamiento crítico y creatividad**, así como dependencia tecnológica (Rivera Merino et al., 2024; UNESCO, 2021).

Otro dato es que más de la mitad de los estudiantes no cree que la IA pueda sustituir el estudio tradicional del Derecho, por lo que se concluye que se da una valoración importante en los métodos clásicos de aprendizaje.

La confianza en el proceso educativo es algo fundamental para el alumno, pues nadie quiere leer o estudiar de fuentes poco confiables. Por tanto, según los encuestados, en cuanto a la confianza proporcionada a las respuestas que da la herramienta de IA, predomina la cautela; casi la mitad no confía plenamente en sus respuestas jurídicas. Este nivel de desconfianza es coherente con principios éticos internacionales que abogan por la transparencia, explicabilidad y supervisión humana en el uso de IA (UNESCO, 2021; Redalyc, s. f.)

Incluso, respecto a la preocupación por una posible dependencia de estas herramientas, existe una clara división en las opiniones lo que indica una conciencia crítica en torno a su uso. Con esto evidencian una **ambivalencia** compartida

en la academia: la IA aporta beneficios, pero también despierta inquietudes sobre la autonomía intelectual y el desarrollo profesional de los futuros abogados (Rivera Merino et al., 2024; Cándano Pérez et al., 2024).

Finalmente, aunque una parte considerable no tiene una postura definida sobre la necesidad de regular el uso de la IA en universidades, existe un porcentaje relevante que considera necesaria una regulación. Esta incertidumbre refleja las discusiones actuales sobre políticas institucionales, donde se destaca la creación de **comités de ética y marcos regulatorios** para supervisar el uso responsable de la IA (Trejo et al., 2020; Guillén Romero, 2023)

Se concluye que los datos muestran que la IA se ha convertido en una herramienta de apoyo ampliamente utilizada por los estudiantes de Derecho, aunque su integración plena en ese proceso educativo es aún objeto de reflexión, discusión y un profundo análisis.

BIBLIOGRAFÍA

Amavizca, S., & Álvarez, E. (2022). Comprensión lectora en universitarios: Comparativo por áreas de conocimiento. *Revista Electrónica de Investigación*

Educativa, 24, e20, 1–13.
<https://doi.org/10.24320/redie.2022.24.e20.3986>

Barán, B. (2024). *La inteligencia artificial en la educación superior*. Dirección de

- Investigación del INAES. Universidad Nacional de Asunción. <https://www.investigacioninaes.edu.py/Publicaciones/index.php/RC/article/view/iaeducsup/5ciies01>
- Cándano Pérez, M., Del Solar Duarte, N., Remeseiro Reguero, R., Bracho Fuenmayor, P. L., Baeza Ugarte, C. G., & Guzmán Sánchez, M. (2024). Aprendizaje basado en el uso de herramientas de IA: Experiencia de realidad aumentada... derecho. *Revista de Educación y Derecho*. <https://doi.org/10.1344/REYD2024.2Extraordinario.49196>
- Chicaiza Guayta, S. M., López Bermúdez, F. L., López Valencia, N. A., & Ochoa Tumbaco, G. X. (2024). Impacto de la Inteligencia Artificial (IA) en la Educación Superior. *RECIAMUC*, 8(2), 80–91. [https://doi.org/10.26820/reciamuc/8.2\).abril.2024.80-91](https://doi.org/10.26820/reciamuc/8.2).abril.2024.80-91)
- Cordon García, O. (2023). Inteligencia Artificial en Educación Superior: Oportunidades y Riesgos. *RiiTE. Revista interuniversitaria de investigación en tecnología educativa*, 15, 16–27. <https://doi.org/10.6018/riite.591581>
- Gómez, E. (2022, 8 de noviembre). Diferencia entre *machine learning* y *deep learning*. *El blog de los Estudios de Informática, Multimedia y Telecomunicación de la UOC*. <https://blogs.uoc.edu/informatica/es/machine-learning-vs-deep-learning-diferencias/>
- Guillén Romero, M., ... (2023). El uso responsable y ético de la inteligencia artificial en las instituciones de educación superior en Ecuador. *Polo del Conocimiento*. <https://polodelconocimiento.com>
- La Nación. (2025, 16 de mayo). Analizan regulación de la inteligencia artificial. https://www.lanacion.com.py/politica_edicionimpresa/2025/05/16/analizan-regulacion-de-la-inteligencia-artificial/
- Martínez Cortés, J., Guevara Bazán, I. A., & Rodríguez González, D. (2024). La inteligencia artificial en la educación superior: Estrategias claves para abordar este desafío. *Revista Neuronum*, 10(1), 23–31. <http://eduneuro.com/revista/index.php/revistaneuronum/article/view/504/564>
- Niño Carrasco, S. A., Castellanos Ramírez, J. C., Perezchica Vega, J. E., & Sepúlveda Rodríguez, J. A. (2025). Percepciones de estudiantes

universitarios sobre los usos de inteligencia artificial en educación.

Revista

Fuentes.

<https://doi.org/10.12795/revistafuentes.2025.26356>

Paguay Simbaña, M. Y., Jiménez Abad, D., Quiliguango Lanchimba, V. F., Maynaguez Canacuan, M. P., Coello García, C. de los Ángeles, & Coello Ortiz, S. M. (2024). La ética en el uso de la inteligencia artificial en los procesos educativos. *Retos de la Ciencia*, 1(4), 145–158. <https://doi.org/10.53877/rc.8.19e.202409.12>

Parlamento Europeo. (2023, 1 de junio). Ley de IA de la UE: Primera normativa sobre inteligencia artificial. <https://www.europarl.europa.eu/topics/es/article/20230601STO93804/ley-de-ia-de-la-ue-primer-normativa-sobre-inteligencia-artificial>

Redalyc. (s.f.). La inteligencia artificial y su impacto en la enseñanza y el ejercicio del derecho. <https://www.redalyc.org>

Rivera Merino, G., ... (2024). La inteligencia artificial en el proceso de enseñanza/aprendizaje de estudiantes universitarios. *Polo del*

Conocimiento.

<https://polodelconocimiento.com>

Rouhiainen, L. (2018). *Inteligencia artificial: 101 cosas que debes saber hoy sobre nuestro futuro.* https://planetadelibrosar0.cdnstatics.com/libros_contenido_extra/40/39307_Inteligencia_artificial.pdf

Siemens, G. (2004). Conectivismo: Una teoría de aprendizaje para la era digital. Recuperado de https://ateneu.xtec.cat/wiki/form/wiki/export/_media/cursos/tic/s1x1/modul_3/conectivismo.pdf

Tovar Ruiz, C. J., Bustamante Bajaña, J. A., Bustamante Bajaña, X. A., & Vallejo Flores, K. M. (2024). IA y sus implicaciones en la educación superior. *RECIAMUC*, 8(1), 519–527. <https://reciamuc.com/index.php/RECIAMUC/article/view/1295/2045>

Trejo, S., Meza, I., & López Escobedo, F. (2020, 11 de febrero). Hacia los Comités de Ética en Inteligencia Artificial [Preprint]. *arXiv*. <https://arxiv.org/abs/2002.05673>

Trejo, S., Meza, I., & López Escobedo, F. (2020). Hacia los Comités de Ética en Inteligencia Artificial [Ponencia]. *INNDOC*. <https://www.inndoc.org>

UNESCO. (2021, 23 de noviembre).
Recomendación sobre la ética de la
inteligencia artificial.
<https://www.unesco.org>

Zamora Manzano, J. L., & Ortega
González, T. Y. (2024). *IA legum:
Transformando la educación
jurídica... Revista de Educación y
Derecho*. <https://revistes.ub.edu>

Zamora Úbeda, Z., & Gómez, H. S. (2024).
Uso y percepción de la inteligencia
artificial en la carrera de Lengua y
Literatura. *Lengua y Sociedad*.

<https://doi.org/10.15381/lengsoc.v23i2.27196>

Zelaya-Guzmán, A. G., Flores Jara, P. M.,
Ortega Pardo, S., & García Coca,
R. (2024, 30 de octubre).
Percepción y uso de la Inteligencia
Artificial en la Educación Superior:
Correlación con el rendimiento
académico en estudiantes
universitarios. *YUYAY: Estrategias,
Metodologías & Didácticas
Educativas*, 4(1), 100–120.
<https://doi.org/10.59343/yuyay.v4i1.88>

ANEXO

Cuestionario en línea utilizado

Encuesta: El uso de la IA en estudiantes de Derecho y su impacto en el aprendizaje

1. ¿Has utilizado alguna herramienta de Inteligencia Artificial (como ChatGPT, Copilot, etc.) durante tu formación en Derecho?

- Sí
- No

2. ¿Con qué frecuencia utilizas herramientas de IA para tus estudios de Derecho?

- Nunca
- Raramente
- A veces
- Frecuentemente
- Siempre

3. ¿Para qué actividades académicas sueles utilizar la IA? (*Marca todas las que correspondan*)

- Búsqueda de jurisprudencia
- Redacción de ensayos o trabajos
- Preparación para exámenes
- Tareas de investigación
- Otro

4. ¿Consideras que el uso de IA ha mejorado tu comprensión de los temas jurídicos?

- Sí
- No

5. En una escala del 1 al 5, ¿cuánto ha mejorado tu rendimiento académico gracias al uso de IA?

(1 = Nada, 5 = Mucho)

- 1
- 2
- 3
- 4
- 5

6. ¿Crees que la IA puede sustituir el estudio tradicional del Derecho (libros, clases, jurisprudencia manual)?

- Sí
- No
- No estoy seguro/a

7. ¿Te preocupa la posibilidad de depender demasiado de la IA para aprender Derecho?

- Sí
- No

8. ¿Confías plenamente en las respuestas que proporciona la IA en temas jurídicos?

- Sí
- No
- A veces

9. ¿Crees que el uso de IA en la carrera de Derecho debería ser regulado por las universidades?

- Sí
- No
- No tengo una opinión formada

10. ¿Crees que el uso de la IA en los alumnos puede empeorar su desarrollo de aprendizaje?

- Sí
 - No
-

31.- Tecnologías de la información y la comunicación

Hibridación memética para el diseño de fármacos de-novo: una extensión al diseño de fármacos antidiabéticos

Autor: Rojas, Matías Gabriel; mrojas@mendoza-conicet.gov.ar

Co-autor(es): Olivera, Ana Carolina; Vidal, Pablo Javier

Orientador/a: Vidal, Pablo Javier; E. mail: pjvidal@conicet.gov.ar

Instituto Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Universidad Nacional de Cuyo. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Cuyo.

Resumen

El diseño de fármacos novedosos es una tarea costosa en términos técnicos, temporales y económicos. La complejidad del proceso hace inviable abordarlo manualmente, dado el enorme número de combinaciones atómicas posibles y la necesidad de satisfacer múltiples objetivos simultáneamente. En los últimos años, los modelos generativos han ganado protagonismo por su capacidad para captar patrones en la composición molecular, aunque presentan limitaciones para producir compuestos válidos que cumplan de forma adecuada con dichos objetivos. Las metaheurísticas surgen como una alternativa promisoría, ya que han demostrado eficacia en problemas multiobjetivo, manteniendo diversidad en las soluciones generadas. En un trabajo previo, los autores propusieron una hibridación entre optimización por enjambre de partículas y recocido simulado para la generación multiobjetivo de moléculas no orientadas a un blanco específico. En este artículo, se extiende dicha estrategia para diseñar fármacos antidiabéticos, inhibidores de la maltasa-glucoamilasa. Los resultados indican que la aproximación es capaz de generar moléculas que, a priori, superan las propiedades de medicamentos actualmente disponibles, mejorando su calidad farmacológica y su viabilidad de síntesis química.

Palabras clave: diseño de fármacos antidiabéticos, algoritmos meméticos, optimización.

Introducción

El diseño de fármacos es un proceso extremadamente costoso en tiempo y recursos económicos. Se estima que desarrollar un único medicamento puede requerir alrededor de 10 años, con una tasa de fracaso cercana al 90% y un coste que supera los mil millones de dólares, lo que hace imprescindible identificar estrategias que optimicen el proceso completo (Ocana et al., 2025).

Uno de los principales desafíos está relacionado con el armado de una librería de moléculas candidatas que tengan las características químicas y estructurales requeridas. El problema radica en que el espacio de búsqueda químico, de las posibles combinaciones atómicas, con sus enlaces, torciones y estereoquímica, se compone de aproximadamente 10^{60} combinaciones posibles, lo que hace inviable realizar una búsqueda exhaustiva. Para afrontar este desafío, suelen aplicarse reglas de combinación que orientan la exploración, aunque estas permiten recorrer solo una fracción mínima de dicho espacio (Blanchard, Stanley, & Bhowmik, 2021). A ello se suma que los fármacos deben cumplir simultáneamente múltiples objetivos, lo que convierte el diseño y descubrimiento en una tarea de gran complejidad para métodos manuales (Luukkonen, van den Maagdenberg, Emmerich, & van Westen, 2023).

Con el auge reciente de los métodos de

inteligencia artificial y computacional, ha crecido el interés en su aplicación para el diseño de fármacos, dada su capacidad para explorar de manera eficiente espacios de búsqueda complejos y acelerar el proceso de descubrimiento. Como resultado, se estima que, hasta 2023, al menos 14 fármacos fueron desarrollados íntegramente mediante tecnologías de inteligencia artificial, lo que pone de manifiesto el rol fundamental que estas herramientas desempeñan actualmente en el diseño de ligandos (Farhadi, Zamanifar, & Faezipour, 2025).

La mayoría de las propuestas basadas en inteligencia artificial se centran en los modelos generativos combinados con redes recurrentes, por su gran capacidad de aprender secuencias de caracteres y los patrones intrínsecos de las moléculas utilizadas para entrenarlas. Sin embargo, estos modelos tienen varias limitaciones que pueden comprometer su rendimiento final. En primer lugar, tienen dificultades para aprender restricciones químicas, lo que conlleva a que generen moléculas inválidas e inservibles (Schoenmaker, Béquignon, Jespers, & van Westen, 2023). En segundo lugar, las moléculas generadas se ajustan al espacio de búsqueda del conjunto de entrenamiento, lo que resulta en falta de diversidad (Abbasi et al., 2022). En último lugar, no tienen mecanismos para satisfacer múltiples objetivos, lo que representa una gran

restricción a la hora de generar nuevos fármacos (X. Liu, IJzerman, & Van Westen, 2021).

Entre las alternativas existentes a los modelos generativos, se encuentran las metaheurísticas, que son algoritmos iterativos que mejoran soluciones candidatas de manera progresiva, tomando como guía una función aptitud que evalúa la calidad de la solución generada (Xue, Sun, Zheng, Lv, & Liu, 2024). Han demostrado ser capaces de abordar efectivamente la optimización multiobjetivo, lo que las hace especialmente adecuadas para el diseño de fármacos. Además, no requieren de un conjunto de datos extenso para la generación de nuevas moléculas, ya que aplican combinaciones y modificaciones sobre las moléculas que tienen a disposición para obtener un nuevo conjunto de moléculas. También, permiten la incorporación de módulos de control, para evitar problemas como la repetición y redundancia de moléculas (X. Liu, IJzerman, et al., 2021).

Diversos trabajos han demostrado la eficiencia de las metaheurísticas en la generación de fármacos. El presentado en (Xue et al., 2024), propone un algoritmo de recocido simulado (SA, simulated annealing) para la optimización multiobjetivo de moléculas representadas mediante cadenas de caracteres, o (H.-P. Liu, Phoa, & Dutta, 2024) que emplea un

algoritmo de optimización por enjambre de partículas (PSO, particle swarm optimization) para optimizar moléculas representadas como grafos. En ambos casos, las metaheurísticas igualaron o incluso superaron el rendimiento de los modelos generativos del estado del arte, lo que evidencia su potencial para explorar espacios químicos complejos y adaptar las estructuras moleculares a objetivos específicos. Sin embargo, todavía existen situaciones en las que las metaheurísticas se quedan estancadas en óptimos locales, frenando la exploración de sectores promisorios del espacio de búsqueda.

Los algoritmos meméticos (Cotta, Mathieson, & Moscato, 2025) son hibridaciones entre una metaheurística para búsqueda global (ej. algoritmos genéticos o el algoritmo de optimización de enjambre de partículas) con otro algoritmo, heurístico o metaheurístico, que se dedica a realizar búsqueda local. Estos algoritmos son especialmente útiles para mejorar el balance entre búsqueda global y local, ayudando al algoritmo a escapar de mesetas en el espacio de búsqueda a la vez que permite diversificar la generación. En un trabajo previo (Rojas, Olivera, & Vidal, 2025), se introdujo una versión memética que combina el algoritmo de optimización por enjambre de partículas, para búsqueda global, con el algoritmo de recocido simulado que realiza búsqueda local (PSOSA, particle swarm optimization

with simulated annealing), para la generación multiobjetivo de fármacos, sin orientación hacia un blanco molecular específico.

En el presente trabajo se propone una extensión al PSOSA, orientada al diseño de fármacos antidiabéticos, en particular inhibidores de la maltasa-glucoamilasa. Para ello, se modificó la función de aptitud incorporando la afinidad de unión, calculada mediante simulación de interacciones proteína-ligando, como criterio adicional en el proceso de optimización.

Objetivos

El presente trabajo toma como guía a dos objetivos específicos.

1. Extender la propuesta presentada en (Rojas et al., 2025) al diseño de fármacos antidiabéticos inhibidores de la maltasa-glucoamilasa.
2. Comparar las moléculas obtenidas contra otros inhibidores de la maltasa-glucoamilasa ya existentes en el mercado.

Materiales y Métodos

Esta sección presentará detalles de la propuesta del manuscrito.

Aproximación memética considerada: El PSOSA

En el trabajo realizado previamente por los autores de este artículo, presentado en (Rojas et al., 2025), se introdujo al PSOSA (Particle Swarm Optimization with Simulated Annealing), que hibrida una

versión del PSO que usa operadores genéticos para búsqueda global, con el SA para realizar búsqueda local. En la Figura 1 se presenta un esquema resumido del funcionamiento del PSOSA.

El proceso comienza con la inicialización de la población de moléculas (soluciones) tomadas del conjunto de entrenamiento y evaluadas según la función de aptitud definida. A partir de esta población inicial, se inicia el ciclo iterativo del PSO, que se repite hasta cumplir el criterio de parada, en este caso, generar y evaluar un número predefinido de moléculas.

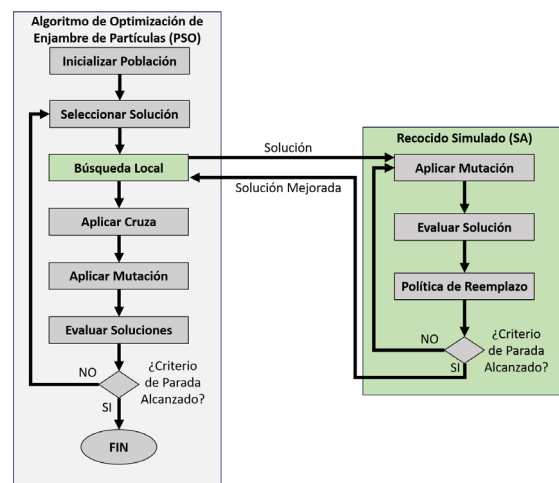


Figura 1 - Diagrama de flujo del PSOSA, propuesto en (Rojas et al., 2025).

En cada iteración, se selecciona una solución para actualizar y se mejora mediante el SA, que modifica aleatoriamente las posiciones atómicas un número determinado de veces y retorna la mejor configuración obtenida para la molécula procesada.

A continuación, se aplican los operadores genéticos, manteniendo la premisa del PSO de guiar la búsqueda en función de la

mejor solución global y del mejor estado histórico de la solución actual. Los operadores utilizados están inspirados en la propuesta de (Kwon & Lee, 2021). El operador de cruza genera tres soluciones descendientes mediante:

- La cruza entre la solución mejorada por el SA y su mejor estado previo.
- La cruza entre la solución mejorada por el SA y la mejor solución global.
- La cruza entre la mejor solución global y el mejor estado previo de la molécula mejorada.

Las moléculas resultantes de estas cruzas son sometidas al operador de mutación, que con probabilidad uniforme decide eliminar, agregar o reemplazar un átomo. Finalmente, las nuevas soluciones se evalúan y, si son novedosas, se incorporan al registro de moléculas antes de continuar con el ciclo del PSOSA.

Representación de la solución

Cada solución es una cadena de caracteres que representa al fármaco usando la nomenclatura SMILES (Weininger, 1988). Mediante esta nomenclatura, los átomos se representan mediante las letras que los identifican. Los enlaces entre átomos pueden ser simples (-), dobles (=), triples (#) o aromáticos (:). Las ramificaciones se identifican con paréntesis. Los corchetes se usan para estados de oxidación y cargas. Los ciclos se especifican colocando un número identificador inmediatamente después del

primer y el último átomo del ciclo. Las barras normales (/) o invertidas (\) se usan para indicar enlaces con isometría cis/trans.

Configuración Experimental

En los experimentos iniciales, se compara al PSOSA contra otras ocho aproximaciones del estado del arte. Tres alternativas son distintas arquitecturas de redes neuronales:

- Una red neuronal recurrente (RNN, recurrent neural network), propuesta en (X. Liu, Ye, et al., 2021).
- Un autoencoder variacional (VAE, Variational Autoencoder), propuesto en (Zhavoronkov et al., 2019).
- Una red generativa adversaria (GAN, generative adversarial network) introducida en (Sanchez-Lengeling, Outeiral, Guimaraes, & Aspuru-Guzik, 2017).

El resto de técnicas consideradas en las comparaciones son metaheurísticas, incluyendo al algoritmo genético propuesto en (Kwon & Lee, 2021) y las versiones canónicas del algoritmo de evolución diferencial (DE, differential evolution) (Storn & Price, 1997), el algoritmo de optimización del lobo gris (GWO, grey wolf optimization) (Mirjalili, Mirjalili, & Lewis, 2014), el algoritmo de optimización por enjambre de partículas (PSO, particle swarm optimization) y el algoritmo de

recosido simulado (SA, simulated annealing). Las configuraciones paramétricas son las mismas a las adoptadas en (Rojas et al., 2025).

El criterio de parada para todos los algoritmos es la generación y evaluación de 1.000.000 de moléculas.

Los experimentos fueron ejecutados en el Cluster TOKO (<https://toko.uncu.edu.ar>), que cuenta con un procesador AMD Opteron/Epyc de 64 núcleos, 128 GB de RAM, y sistema operativo Linux Ubuntu 18.04 LTS. Para las implementaciones, se utilizó Python 3.10.13. Las metaheurísticas fueron implementadas mediante la librería JMetalPy (Benítez-Hidalgo, Nebro, García-Nieto, Oregi, & Del Ser, 2019). Las evaluaciones y graficado de las moléculas se realizaron mediante la librería RDKit (<https://rdkit.org>). Para medir la afinidad de unión al blanco molecular específico, se utilizan los resultados retornados por el simulador de interacción proteína-ligando Autodock Vina 1.2.7 (Eberhardt, Santos-Martins, Tillack, & Forli, 2021). En autodock, los valores de afinidad se calculan con una exhaustividad de 6 y un máximo de 20.000 evaluaciones.

Conjunto de datos utilizado

Se utiliza la base de datos Papyrus 5.55, compuesta de 1.270.570 moléculas sin estereoquímica asociada, estandarizadas y sin sales, solventes o fragmentos duplicados (Béquignon et al., 2023).

Preparación de la estructura de la proteína

objetivo

Se utiliza como blanco molecular a la enzima *maltasa-glucoamilasa*, mediante la estructura 3D identificada por el PDB ID: 3L4U, que contiene, además, un ligando unido al sitio de unión que será utilizado de guía para definir la caja donde autodock vina probará a los ligandos generados por el PSOSA. La caja definida toma como centro los valores (X: 0.472; Y: -16.611; Z: -21.111). Los tamaños de la caja son (X: 16; Y: 24; Z: 20). A la proteína se le eliminan los ligandos unidos y se le agregan los átomos de hidrógeno necesarios para realizar la simulación.

Métricas implicadas en la evaluación de moléculas generadas

En este trabajo, la evaluación de las moléculas generadas se realiza teniendo en cuenta tres métricas ampliamente utilizadas en la literatura.

En primer lugar, la *estimación cuantitativa de atributos de fármaco* (QED, Quantitative Estimate of Drug-Likeness), mide qué tan probable es que una molécula sea un fármaco administrable a humanos, retornando un valor entre 0 y 1. El objetivo es maximizar esta métrica.

La *accesibilidad sintética* (AS) informa la dificultad para sintetizar químicamente a la molécula evaluada. $AS \cong 0$ indica que la molécula es fácil de sintetizar, mientras que $AS \cong 10$ sugiere que la molécula es compleja de sintetizar por sus propiedades químicas. Se busca minimizar esta métrica

(Bagal, Aggarwal, Vinod, & Priyakumar, 2022).

Por último, se analiza la *afinidad de unión* entre los ligandos generados y el sitio de unión del blanco molecular. El software autodock vina estima la energía libre de unión, considerando a las interacciones atómicas no covalentes como los enlaces de hidrógeno, interacciones hidrofóbicas, interacciones iónicas y fuerzas de van der Waals (Eberhardt et al., 2021). El objetivo es minimizar la afinidad de unión.

Resultados y discusión

En la presente sección, se reportan los resultados obtenidos por cada experimento y se discuten las implicancias de lo observado. En primer lugar, se compara al PSOSA con respecto a los algoritmos del estado del arte, buscando determinar qué tan efectiva es en la generación de moléculas novedosas. Posteriormente, se evalúa el rendimiento en la generación de moléculas orientadas a un blanco molecular específico, evaluando la calidad de las moléculas con respecto a fármacos conocidos y aceptados.

En las tablas de resultados, los mejores valores se muestran en **negrita** y los segundos mejores en *cursiva*.

Comparación contra técnicas del estado del arte

El primer conjunto de evaluaciones consiste en comparar al PSOSA contra algoritmos del estado del arte, en la generación de moléculas novedosas, no

orientadas a un blanco específico. Para tal fin, se considera la función aptitud presentada en la Ecuación (1).

$$\omega * QED(s) + (1 - \omega) * \left(1 - \frac{AS(s)}{10}\right) \quad (1)$$

Donde s es una solución (molécula) encontrada por la metaheurística. $QED(s)$ es la estimación de los atributos de fármaco de s . $AS(s)$ es la accesibilidad sintética de s . ω es un coeficiente de importancia en la ecuación, y se utiliza el valor de $\omega = 0.9$, acorde a lo especificado en (Kwon & Lee, 2021). De esta manera, se obtienen moléculas sintetizables, pero se prioriza la presencia de atributos relacionados a fármacos.

En la Tabla 1 se presentan los valores promedio, desviación estándar, mínimos y máximos de función aptitud, alcanzados por cada uno de los métodos comparados. En estas comparaciones, solo se consideran las 1000 mejores moléculas generadas, con el objetivo de lograr una comparación equitativa entre los modelos, para evitar los posibles efectos negativos relacionados a la redundancia y repeticiones de moléculas.

El PSOSA es el método con el mejor valor de aptitud, alcanzando un valor promedio de 0.935, lo que implica que las moléculas generadas presentan un mejor balance entre los valores de QED y AS. Además, el PSOSA es la alternativa más robusta, con un valor de desviación estándar mínimo. La segunda mejor técnica es la RNN con una

aptitud promedio de 0.930 y una desviación estándar de 0.002.

Pasando al análisis del rendimiento de los algoritmos en la optimización de cada componente de la función objetivo, en la Figura 2 se presentan los diagramas de densidad del QED para las 1000 mejores moléculas generadas por cada método. Se observa que en el caso de PSOSA, la distribución se concentra en torno a 0.95, lo que sugiere una alta probabilidad de generar compuestos con propiedades

favorables para su desarrollo como ligandos. Además, logra mejorar los valores de QED del PSO y el SA por separado, lo que indica que la hidridación de las dos aproximaciones es acertada.

En cuanto a los valores de AS, mostrados en la Figura 3, todas las moléculas del PSOSA se ubicaron por debajo del valor de 2, lo que se relaciona con una alta probabilidad de éxito a la hora de llevar a cabo la sinterización química.

Los resultados confirman que el PSOSA es

Tabla 1 - Valores de función aptitud de las 1000 mejores moléculas descubiertas por cada método comparado.

	GAN	RNN	VAE	DE	GA	GWO	SA	PSO	PSOSA
Prom.	0.728	0.930	0.915	0.909	0.905	0.894	0.907	0.917	0.935
Desv. Est.	0.031	0.002	0.007	0.010	0.015	0.013	0.013	0.006	0.001
Min.	0.696	0.927	0.905	0.896	0.880	0.875	0.905	0.909	0.934
Max	0.859	0.937	0.934	0.936	0.934	0.935	0.911	0.934	0.938

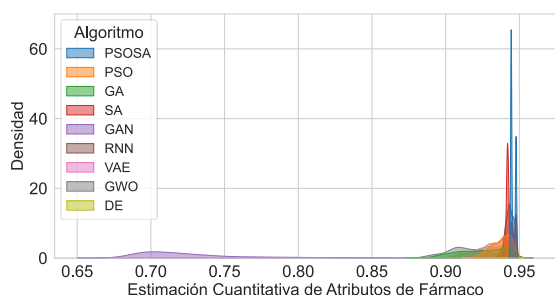


Figura 2 - Diagrama de densidad de los valores de QED por cada técnica evaluada.

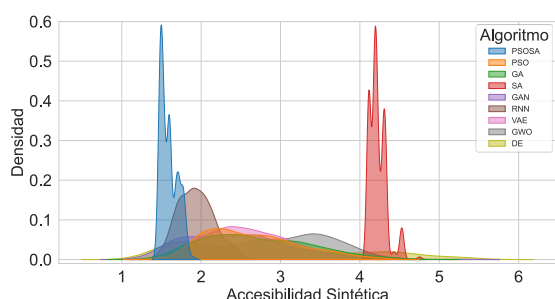


Figura 3 - Diagrama de densidad de los valores de AS obtenidos por cada técnica evaluada.

efectivo para considerar múltiples objetivos relacionados al diseño de fármacos.

Generación de fármacos antidiabéticos

El objetivo de esta sección es observar el rendimiento del PSOSA a la hora de optimizar la afinidad de unión de las moléculas a un blanco específico, a la vez que se mejoran los valores de QED y AS.

El blanco de unión que se utiliza para los experimentos corresponde al dominio N-terminal de la maltasa-glucoamilasa humana. Se trata de una enzima α -glucosidasa responsable de la hidrólisis final de oligosacáridos y maltosa a glucosa, un paso clave en la digestión de carbohidratos. La importancia de inhibirla mediante fármacos es que retrasa la liberación y absorción de glucosa, lo que representa un mecanismo terapéutico bien establecido en el tratamiento de la diabetes

mellitus tipo 2 (Mushtaq, Azam, Mehreen, & Naseer, 2023).

Para estos experimentos se considera una función aptitud que da mayor prioridad al valor de afinidad de unión, de manera que las moléculas generadas tengan la estructura adecuada para el sitio de unión, pero que también presenten mejoras en términos de QED y AS. La función aptitud propuesta se presenta en la Ecuación (2).

$$0.75 * \left(\frac{|Afinidad(s)| - 4}{11} \right) + 0.2 * QED(s) + 0.05 * \left(1 - \frac{AS(s)}{10} \right) \quad (2)$$

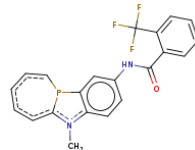
Donde la *Afinidad(s)* es el valor de afinidad de unión de la molécula *s* al blanco molecular para el que fue diseñado. Se utiliza para normalizar, un valor de máximo de 11 y un valor mínimo 4, de acuerdo con observaciones de los valores alcanzados por ligandos ya existentes.

Para medir el rendimiento de nuestra aproximación, se comparará contra tres moléculas inhibidoras de la maltasa-glucosidasa, a saber, de-O-sulfonated kotalanol (DSK), la acarbosa y el miglitol.

Primero, se comparan los valores de aptitud de las mejores 3 moléculas identificadas por el PSOSA, con la aptitud de los fármacos existentes.

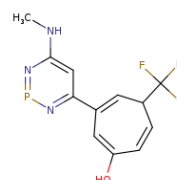
Tabla 2 - Comparación con respecto a la función aptitud de las moléculas generadas por el PSOSA contra los inhibidores del mercado.

Molécula	Aptitud
----------	---------



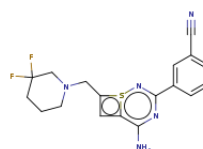
PSOSA 1

0.560



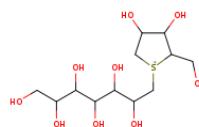
PSOSA 2

0.549



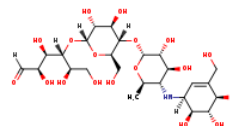
PSOSA 3

0.536



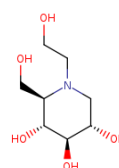
DSK

0.102



Acarbosa

0.049



Miglitol

0.198

Estos resultados se presentan en la Tabla 2. Las comparaciones indican que las tres mejores moléculas identificadas por el PSOSA presentan una mejora sustancial en los valores de aptitud en relación con los tres inhibidores comerciales, lo que sugiere

un equilibrio más favorable entre los tres componentes de la función de aptitud. En cuanto a las diferencias estructurales, las generaciones propuestas por el PSOSA se caracterizan por la ausencia de grupos hidroxilo (-OH) y una marcada presencia de átomos de flúor, lo que evidencia que la búsqueda del algoritmo exploró una región del espacio químico distinta a la ocupada por los inhibidores conocidos.

En la Tabla 3, se presentan los resultados de QED, AS y afinidad de unión para evaluar posibles diferencias en la optimización de cada objetivo por separado. Se observa que las tres moléculas generadas por PSOSA superan a los inhibidores comerciales en las tres métricas consideradas, lo que evidencia su capacidad para abordar múltiples objetivos de manera efectiva. Los resultados indican que los fármacos hallados por PSOSA poseen características comparables a las de medicamentos aprobados para uso humano y, además, exhiben un puntaje relativamente bajo de AS, lo que sugiere una síntesis química potencialmente sencilla. Por último, todos los ligandos generados por PSOSA muestran una afinidad de unión superior a la de los inhibidores conocidos de la α -glucosidasa, lo que implicaría una interacción más favorable con los aminoácidos clave del sitio activo.

En la Figura 4, se muestra un ejemplo de la mejor molécula encontrada por el PSOSA,

adherida al sitio de unión.

Tabla 3 - Análisis de valores alcanzados por las moléculas en cada componente de la función aptitud.

Molécula	QED	AS	Afinidad
PSOSA 1	0.681	3.790	-9.758
PSOSA 2	0.875	4.843	-9.107
PSOSA 3	0.885	4.383	-8.846
DSK	0.194	5.137	-4.569
Acarbosa	0.065	5.756	-4.211
Miglitol	0.333	3.830	-5.481

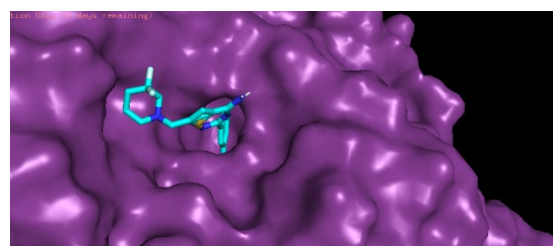


Figura 4 - El mejor fármaco identificado por el PSOSA, adherido al sitio de unión.

En este caso, el ligando se acopla en la cavidad correspondiente al sitio activo catalítico de la proteína, bloqueando la función enzimática de forma competitiva. De este modo, ocupa el lugar donde normalmente se unirían los oligosacáridos o maltosas para su conversión en glucosa.

Conclusiones

El PSOSA es una aproximación memética pensada para el diseño de fármacos que se adapten a múltiples objetivos, presentada por los autores en un artículo publicado recientemente. La versión original no contempla el diseño de ligandos orientados a blancos moleculares específicos, por lo que en este artículo se extiende la aplicación al diseño multiobjetivo de inhibidores de la α -glucosidasa, en particular, de la maltasa-glucoamilasa.

Los resultados obtenidos muestran que PSOSA supera tanto a inhibidores comerciales como a métodos alternativos en términos de QED y complejidad sintética, evidenciando su capacidad para generar moléculas con capacidad de ser consideradas en etapas posteriores del desarrollo de fármacos.

La incorporación de la afinidad de unión como criterio de la función de aptitud permitió orientar eficazmente la búsqueda hacia compuestos con interacciones más favorables con el blanco molecular.

Como trabajo futuro, se propone evaluar la generalización del enfoque a otros blancos terapéuticos y acotar la búsqueda de moléculas novedosas mediante el uso de descriptores moleculares relevantes al blanco molecular al que se apunta.

Materiales suplementarios

El código para reproducir los experimentos realizados en este artículo, está disponible en https://github.com/matigrojas/PSOSA-Drug_Design.

Referencias Bibliográficas

Abbasi, M., Santos, B. P., Pereira, T. C., Sofia, R., Monteiro, N. R. C., Simões, C. J. V., ... Arrais, J. P. (2022). Designing optimized drug candidates with Generative Adversarial Network. *Journal of Cheminformatics*, 14(1), 40.

<https://doi.org/10.1186/s13321-022-00623-6>

Bagal, V., Aggarwal, R., Vinod, P. K., & Priyakumar, U. D. (2022). MolGPT: Molecular Generation Using a Transformer-Decoder Model. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 62(9), 2064–2076. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00600>

Benítez-Hidalgo, A., Nebro, A. J., García-Nieto, J., Oregi, I., & Del Ser, J. (2019). jMetalPy: A Python framework for multi-objective optimization with metaheuristics. *Swarm and Evolutionary Computation*, 51, 100598. <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2019.100598>

Béquignon, O. J. M., Bongers, B. J., Jespers, W., IJzerman, A. P., van der Water, B., & van Westen, G. J. P. (2023). Papyrus: A large-scale curated dataset aimed at bioactivity predictions. *Journal of Cheminformatics*, 15(1), 3.

- <https://doi.org/10.1186/s13321-022-00672-x>
- Blanchard, A. E., Stanley, C., & Bhowmik, D. (2021). Using GANs with adaptive training data to search for new molecules. *Journal of Cheminformatics*, 13(1), 14. <https://doi.org/10.1186/s13321-021-00494-3>
- Cotta, C., Mathieson, L., & Moscato, P. (2025). Memetic Algorithms. En *Handbook of Heuristics* (pp. 1–42). Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-319-07153-4_29-2
- Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A. F., & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(8), 3891–3898. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00203>
- Farhadi, A., Zamanifar, A., & Faezipour, M. (2025). Application of Generative AI in Drug Discovery. En A. Zamanifar & M. Faezipour (Eds.), *Application of Generative AI in Healthcare Systems* (pp. 155–174). Cham: Springer Nature Switzerland. https://doi.org/10.1007/978-3-031-82963-5_6
- Kwon, Y., & Lee, J. (2021). MolFinder: An evolutionary algorithm for the global optimization of molecular properties and the extensive exploration of chemical space using SMILES. *Journal of Cheminformatics*, 13(1), 24. <https://doi.org/10.1186/s13321-021-00501-7>
- Liu, H.-P., Phoa, F. K. H., & Dutta, S. (2024). Molecule discovery and optimization via evolutionary swarm intelligence. *Scientific Reports*, 14(1), 24510. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-75515-w>
- Liu, X., IJzerman, A. P., & Van Westen, G. J. P. (2021). Computational Approaches for De Novo Drug Design: Past, Present, and Future. En H. Cartwright (Ed.), *Artificial Neural Networks* (pp. 139–165).

- New York, NY: Springer US.
https://doi.org/10.1007/978-1-0716-0826-5_6
- Liu, X., Ye, K., Van Vlijmen, H. W. T., Emmerich, M. T. M., IJzerman, A. P., & Van Westen, G. J. P. (2021). DrugEx v2: De novo design of drug molecules by Pareto-based multi-objective reinforcement learning in polypharmacology. *Journal of Cheminformatics*, 13(1), 85.
<https://doi.org/10.1186/s13321-021-00561-9>
- Luukkonen, S., van den Maagdenberg, H. W., Emmerich, M. T. M., & van Westen, G. J. P. (2023). Artificial intelligence in multi-objective drug design. *Current Opinion in Structural Biology*, 79, 102537.
<https://doi.org/10.1016/j.sbi.2023.102537>
- Mirjalili, S., Mirjalili, S. M., & Lewis, A. (2014). Grey Wolf Optimizer. *Advances in Engineering Software*, 69, 46–61.
<https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2013.12.007>
- Mushtaq, A., Azam, U., Mehreen, S., & Naseer, M. M. (2023). Synthetic α -glucosidase inhibitors as promising anti-diabetic agents: Recent developments and future challenges. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 249, 115119.
<https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2023.115119>
- Ocana, A., Pandiella, A., Privat, C., Bravo, I., Luengo-Oroz, M., Amir, E., & Gyorffy, B. (2025). Integrating artificial intelligence in drug discovery and early drug development: A transformative approach. *Biomarker Research*, 13(1), 45.
<https://doi.org/10.1186/s40364-025-00758-2>
- Rojas, M. G., Olivera, A. C., & Vidal, P. J. (2025). Memetic Genetic Particle Swarm Optimization for Druglike Molecule Discovery. *IEEE Latin America Transactions*, 23(3), 216–222.
<https://doi.org/10.1109/TLA.2025.10879174>

Sanchez-Lengeling, B., Outeiral, C.,
Guimaraes, G. L., & Aspuru-Guzik,
A. (2017, agosto 17). *Optimizing
distributions over molecular space.
An Objective-Reinforced
Generative Adversarial Network for
Inverse-design Chemistry
(ORGANIC).*

<https://doi.org/10.26434/chemrxiv.5309668.v3>

Schoenmaker, L., Béquignon, O. J. M.,
Jespers, W., & van Westen, G. J. P.
(2023). UnCorrupt SMILES: A novel
approach to de novo design.
Journal of Cheminformatics, 15, 22.
<https://doi.org/10.1186/s13321-023-00696-x>

Storn, R., & Price, K. (1997). Differential
Evolution – A Simple and Efficient
Heuristic for global Optimization
over Continuous Spaces. *Journal of
Global Optimization*, 11(4), 341–
359.
<https://doi.org/10.1023/A:1008202821328>

Weininger, D. (1988). SMILES, a chemical
language and information system.

1. Introduction to methodology and
encoding rules. *Journal of Chemical
Information and Computer
Sciences*, 28(1), 31–36.
<https://doi.org/10.1021/ci00057a005>

Xue, Z., Sun, C., Zheng, W., Lv, J., & Liu,
X. (2024). TargetSA: Adaptive
Simulated Annealing for Target-
Specific Drug Design.
Bioinformatics, btae730.
<https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btae730>

Zhavoronkov, A., Ivanenkov, Y. A., Aliper,
A., Veselov, M. S., Aladinskiy, V. A.,
Aladinskaya, A. V., ... Aspuru-
Guzik, A. (2019). Deep learning
enables rapid identification of
potent DDR1 kinase inhibitors.
Nature Biotechnology, 37(9), 1038–
1040.
<https://doi.org/10.1038/s41587-019-0224-x>

Agradecimientos

El presente trabajo fue realizado mediante
el proyecto 80020240100021UN (Res,
1651/2025) de la Secretaría de

Investigación, Internacionales y Posgrado
de la Universidad Nacional de Cuyo y el
proyecto del Consejo Nacional de
Investigaciones Científicas y Técnicas
(PIIBA 2022-2023 28720210101070CO).
Los Autores agradecen al Consejo
Nacional de Investigaciones Científicas y
Técnicas, Argentina.

30.- Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Actividad insecticida y ovicida del aceite esencial de *Cuminum cyminum* L. de Artaza, Belén, Catamarca, sobre *Triatoma infestans* (Hemíptera: Reduviidae)

Autor: Sosa, Eunice, esosaquirola@citedef.gob.ar

Co-autor(es): Caletti, Ulises; Marcial Lobos, Facundo

Orientador/a: Dr. Quiroga, Viviana del Valle, vquirogadb@unca.edu.ar

Dr. Toloza, Ariel, [Ceferino, atoloza@conicet.gov.ar](mailto:Ceferino_atoloza@conicet.gov.ar)

Universidad Nacional de Catamarca/ Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Resumen

En Argentina, el comino (*Cuminum cyminum* L.) se cultiva principalmente en Catamarca. Su aceite esencial (AE), rico en cuminaldehído ($18,91 \pm 3,91\%$), posee propiedades insecticidas y repelentes, aunque poco se conoce su efecto sobre *Triatoma infestans*, insecto vector de la enfermedad de Chagas, endémica en Argentina y toda Sudamérica. El objetivo fue evaluar la actividad insecticida del AE obtenido por hidrodestilación de frutos- semillas de comino de Artaza, Belén (Catamarca) sobre *T. infestans*. Ninfas y huevos del insecto fueron provistos por el Ce.Re.Ve (Punilla, Córdoba). Los bioensayos se realizaron con ninfas I–V expuestas a distintas concentraciones de AE y de cuminaldehído puro ($20 - 320 \mu\text{L/L}$ aire) por acción fumígena; y huevos tratados con papel impregnado con soluciones etanólicas de AE y de cuminaldehído (2, 10, 20%). Se emplearon controles con etanol, agua, cipermetrina y sin tratar. Se realizaron 4 réplicas por tratamiento y estadío. La incubación fue a 28°C y 50% HR. La mortalidad en ninfas se evaluó a las 24 y 48 h; en huevos hasta la eclosión de controles. Se determinaron las concentraciones letales (CL) 50 y 90 mediante análisis de regresión probit (PoloPlus V 2.0). El AE y el cuminaldehído mostraron actividad ovicida e insecticida sobre ninfas. A las 48h de exposición de ninfas al AE, la CL_{50} fue de $23,2 \mu\text{L/L}$ aire y de $55,6 \mu\text{L/L}$ aire concuminaldehído. En huevos fue 13,4 (AE), 4,3 (cuminaldehído) y 0,2 (cipermetrina) mg/cm^2 . Los resultados muestran la bioactividad del cuminaldehído y del AE sobre *T. infestans*, sugiriendo al AE como fuente de compuestos bioactivos contra este vector de la enfermedad de Chagas y como alternativa de uso en ámbitos del sistema sanitario. Los resultados destacan la importancia del comino producido en Catamarca.

Palabras clave: bioactividad, control vectorial,vinchuca.

Introducción

La enfermedad de Chagas conocida también como tripanosomiasis americana o mal de Chagas, lleva el nombre de Carlos Ribeiro Chagas, médico e investigador brasileño que la descubrió en 1909. Es una enfermedad potencialmente mortal causada por el parásito protozoo llamado *Trypanosoma cruzi* (*T. cruzi*), transmitido principalmente por insectos vectores conocidos como chinches o vinchucas (vía vectorial). Esta enfermedad es endémica de 21 países de América Latina y se estima en la actualidad que existen entre seis y siete millones de personas infestadas (Roca-Acevedo, 2014; OMS, 2021). En la Argentina, *Triatoma infestans* es el principal vector de la enfermedad de Chagas, siendo el triatominos de mayor importancia epidemiológica debido a su amplia distribución, abundancia y por sus hábitos silvestre y domiciliario. Las provincias que presentan una importante tasa de infestación domiciliar por este vector son Chaco, Catamarca, Formosa, Santiago del Estero, San Juan y Mendoza, y en menor medida Córdoba, Corrientes, La Rioja, Salta, y Tucumán (Balsalobre, 2016).

El abordaje de la enfermedad de Chagas ha estado históricamente centrado en el control químico de los vectores, mediante su eliminación en el ámbito intradomiciliario y peridomiciliario. Desde

la década de 1950, se han empleado plaguicidas organoclorados y compuestos anticolinesterásicos, como carbamatos y organofosforados. En años más recientes, la introducción de piretroides ha representado un avance significativo, constituyéndose en la herramienta de mayor relevancia para el control de triatominos, debido a sus favorables características toxicológicas (OMS, 2006; Zerba, 1999). Sin embargo, El uso crónico de insecticidas piretroides en campañas de control de *T. infestans* ha llevado al desarrollo de resistencia en las poblaciones tratadas. La primera evidencia de triatominos resistentes a insecticidas se encontró en poblaciones de *Rhodnius prolixus* y *T. infestans* en Brasil y Venezuela (Vassena et al. 2000; Mougabure-Cueto y Picollo, 2015). Posteriormente se reportaron numerosos focos de resistencia a insecticidas al norte de Argentina, al sur de la frontera argentino-boliviana y Perú (Picollo et al. 2005; Toloza et al. 2008; Germano et al. 2010; Lardeux et al. 2010). Al mismo tiempo el fenómeno de resistencia a insecticidas en varias poblaciones de triatominos empezó a observarse como causa del mal uso (Fronza et al. 2019). En conocimiento de estos problemas, es necesario contar con alternativas naturales a esta situación, constituyéndose el uso de los aceites

esenciales (AEs) en una valiosa opción (Reynoso, 2019).

Los AEs se caracterizan por ser mezclas complejas compuestas principalmente por monoterpenos, junto con otros metabolitos secundarios (Isman, 2008), y han demostrado un amplio espectro de acción insecticida (Park et al., 2003; Sfara et al., 2009; Tarelli et al., 2009; Alzogaray et al., 2011; Urzúa et al., 2010; Urzúa et al., 2011a; Urzúa et al., 2011b; Urzúa et al., 2013; Echeverría y Albuquerque, 2019).

El comino, *Cuminum cyminum* L., perteneciente a la familia Apiaceae, es una especie herbácea anual cuyo fruto ha sido valorado desde la antigüedad tanto como condimento como por sus aplicaciones en la medicina tradicional. Asimismo, constituye una fuente relevante de Aes (Bandoni et al., 1993; Quiroga et al., 2023). Existe una sólida base bibliográfica que respalda el efecto insecticida del AE de comino. Diversos estudios han identificado como componentes mayoritarios del AE al cuminaldehído, γ -terpineno y p-cimeno, moléculas ampliamente vinculadas con actividades antifúngicas, antimicrobianas, repelentes e insecticidas (Quiroga et al., 2023). Así mismo, el AE de *C. cyminum* registró actividad ovicida por acción fumigante en huevos del escarabajo confuso, *Tribolium confusum* y de la polilla del Mediterráneo, *Ephestia kuehniella*, ambos, insectos de harina almacenada,

además de actividad insecticida sobre adultos de *E. kuehniella* (Tunc et al., 2000). Se registró también actividad insecticida e inhibición de la acetilcolinesterasa (AChE) sobre adultos de *Blattella germanica*. Compuestos de este AE como 1,8-cineol, cuminaldehído, p-cimeno, γ -terpineno y carveol demostraron fuerte toxicidad (Yeom et al., 2012). En estudios de efectos electrofisiológicos, de comportamiento (repelencia, irritación) y tóxicos contra la cepa *Anopheles gambiae* (Kisumu), los aldehídos provocaron las respuestas más fuertes en ensayos de electroantenografía (EAG). En estudios conductuales y de toxicidad, varios de los compuestos individuales mostraron repelencia, irritación o toxicidad en *An. gambiae*.

El AE de comino y varios de sus componentes actuaron como larvicidas sobre el mosquito tigre asiático, *Aedes albopictus*. Los monoterpenos α -pineno y β -pineno inhibieron la actividad de AChE en *Aedes albopictus* con valores de la concentración inhibitoria al 50 % (IC₅₀) de 0,062 mg/ml y 0,190 mg/ml respectivamente (Seo et al., 2015). Particularmente, los AEs de comino de Catamarca mostraron inhibición de AChE, actividad insecticida y acción repelente sobre *Sitophilus zeamais*, aunque no se encontraron correlaciones con las abundancias relativas de compuestos puros o con fracciones de compuestos

(Quiroga, 2019).

Otros estudios también mostraron que el AE de comino y el cuminaldehído estándar exhiben toxicidad aguda y efectos antinutricionales sobre *S. zeamais* (Rosa et al., 2020).

En Argentina, el cultivo de *Cuminum cyminum* se concentra principalmente en las provincias de Catamarca, La Rioja, Salta, norte de Córdoba y, en menor medida, Tucumán. Dentro de Catamarca, los departamentos del oeste - Belén, Santa María, Andalgalá, Pomán y Tinogasta - constituyen las principales zonas productoras, aunque también se cultiva en pequeña escala en el Valle Central (Murúa Carrizo, 2013). Los antecedentes mencionados respaldan el potencial insecticida del AE de comino y de su componente mayoritario, el cuminaldehído. A pesar de la abundante producción de esta especie en regiones endémicas de la enfermedad de Chagas, hasta la fecha no se han reportado estudios que evalúen su efecto sobre *T. infestans*, vector principal de la enfermedad en Argentina. La presente investigación busca contribuir a esta línea, evaluando la actividad insecticida del AE de comino cultivado en Belén, Catamarca, sobre *T. infestans*, con el fin de explorar alternativas naturales para el control del vector en zonas donde la resistencia a insecticidas convencionales constituye un problema creciente.

Objetivos

Objetivo general

Evaluar la actividad insecticida del aceite esencial (AE) de comino (*Cuminum cyminum* L.) proveniente de cultivares de la localidad de Artaza, departamento Belén, Catamarca, sobre huevos y ninfas de *Triatoma infestans*.

Objetivos específicos

- Analizar la relación que existe entre la concentración del AE de comino y su actividad insecticida (larvicida y ovicida) sobre *T. infestans*.
- Establecer si existen diferencias en la actividad larvicida del AE de comino según el estadio de *T. infestans*.
- Determinar las CL50 y CL90 según el estadio evolutivo de las ninfas.
- Establecer las dosis de AE que impiden la eclosión del 50% (CL50) y del 90% (CL90) de los huevos de *T. infestans*.
- Analizar si el cuminaldehído puro presenta actividad ovicida e insecticida sobre *T. infestans* y si esta actividad es dependiente de la concentración del cuminaldehído.
- Analizar si la actividad larvicida del cuminaldehído sobre ninfas de *T. infestans* difiere según el estadio y establecer las CL50 y CL90 para

cada estadio.

- Determinar las dosis de cuminaldehído que impiden la eclosión del 50% (CL50) y del 90% (CL90) de los huevos.
- Comparar las actividades insecticidas del AE de comino de Artaza y del cuminaldehído puro sobre *T. infestans*.
- Comparar la actividad ovicida del AE de comino y del cuminaldehído respecto de la cipermetrina comercial.

Hipótesis general

El AE de comino (*Cuminum cyminum* L.) cultivado en la Localidad Artaza, del departamento Belén, Provincia de Catamarca, presenta actividad ovicida y larvicida sobre *T. infestans*.

Materiales y Métodos

Productos químicos

Se utilizó cuminaldehído (pureza $\geq 99\%$), cipermetrina al 10% m/v y neopyramina al 1% m/v, todos en formulación comercial y adquiridos en el mercado local.

Material biológico

Insectos

Para los bioensayos se utilizaron ninfas sanas de los estadios I, II, III, IV, V y huevos de *Triatoma infestans* (hemíptera: reduviidae) provistos por el Centro de Referencia de Vectores (Ce. Re. Ve);

Punilla, Córdoba. Las ninfas se usaron al día siguiente de la recepción (López et al., 2011).

Material vegetal

Para la obtención de AE de comino se utilizaron frutos maduros, secos y limpios de *C. cyminum* L. del barrio Artaza, departamento Belén, provincia de Catamarca, correspondientes a la cosecha realizada en el año 2015 (Quiroga, 2019).

Hidrodestilación del aceite esencial

El AE de fruto-semilla de comino se extrajo por hidrodestilación. Los granos de comino molidos se colocaron en un balón con agua a una densidad de carga de 0.05 g/ml y relación de carga 1/2 y 2/5, al que se le acopló un aparato tipo Clevenger (trampa) con un dedo frío como refrigerante como se muestra en la Figura 1 (Romero et al, 2012; Quiroga et al, 2016). Se destiló durante 5 h, con un régimen de condensación que osciló entre 20 y 45 gotas/min dependiendo del tamaño del balón, la masa de muestra y el volumen de agua. El sistema refrigerante para la condensación de los vapores agua-AE, consistió en un circuito cerrado en el que la manguera de entrada de agua al dedo frío estaba conectada a una bomba sumergida en un recipiente con agua (batea de 10 L o más), y la manguera de salida del dedo frío,

desagota en el mismo recipiente. De esta manera se evitó la pérdida de agua por refrigeración durante la destilación. En el interior del recipiente con agua que contiene la bomba, se colocaron botellas plásticas con agua congelada que se renovaban, según la necesidad, de mantener fría el agua de refrigeración. Finalizada la destilación se procedió a realizar la lectura del volumen de AE extraído, para esto se utilizó la escala de la misma trampa o bien se recogió el AE en un tubo cónico graduado (Figura 1). El AE obtenido se separó del hidrolato por decantación, se colocó en un frasco color caramelo, se agregó sulfato de sodio anhidro para desecarlo y se conservó en un equipo de frío a $-15\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 2\text{ }^{\circ}\text{C}$ hasta el momento de su uso (Quiroga, 2019).



Figura 1. Izq. Montaje del aparato de hidrodestilación para la obtención del aceite esencial de comino. **Der.** Tubo cónico graduado conteniendo el aceite esencial de comino obtenido.

Bioensayos de toxicidad

La toxicidad por acción fumigante en ninfas se realizó según la metodología descrita por Gaire et al. (2017), modificada. Para los bioensayos con ninfas III, IV y V se utilizaron frascos de vidrio de 400 mL con tapa metálica a rosca cubierta con un papel de aluminio seguido de papel de filtro, este último, impregnado con AE puro (estímulo experimental) hasta obtener concentraciones finales de: 20; 40; 80; 160 y 320 $\mu\text{L/L}$ aire. Luego se colocó una micro red evitando que el insecto entre en contacto con el AE. En cada vial se colocaron 6 insectos y se mantuvieron en oscuridad en una incubadora a $28\text{ }^{\circ}\text{C}$ (RH: 50 %), como se observa en la Figura 2. Se realizaron 4 réplicas por cada tratamiento y controles y por estadio ninfal. Para control se utilizó el papel de filtro sin impregnar.



Figura 2. Viales de 400 mL para ninfas III, IV y V conteniendo cada uno 6 individuos

La mortalidad se evaluó a las 24 y 48 h del tratamiento (Yeom et al., 2012). Para los bioensayos con ninfas I y II se utilizó el mismo procedimiento con viales de vidrio color caramelo de 30 ml de capacidad con tapa a rosca plástica, como se muestra en la Figura 3.



Figura 3. Viales de 30 ml para ninfas I y II conteniendo cada uno 6 individuos.

La actividad ovicida se trabajó según Laurent et al., (1997) con modificaciones. En una placa de Petri de vidrio de 9 cm de diámetro se colocó un disco de papel de filtro impregnado con 200 μ L de soluciones etanólicas de los AE (2 %, 10 % y 20 %, v: v) distribuido en 10 puntos con dosis de (20 μ L) por punto. Los discos se secaron a temperatura ambiente (aproximadamente 25 ° C) durante 5 min y se colocaron en placas de Petri. Sobre los puntos dosificados se colocaron los 10 huevos de *T. infestans*, de aproximadamente 1 semana, seleccionados según el color crema característico. De igual modo se trabajó con cuminaldehído en lugar del AE de comino. Se utilizaron cuatro conjuntos de controles. Un conjunto de huevos control

se colocó sobre un disco de papel impregnado solamente con etanol, otro se depositó sobre un disco de papel sin tratar, el tercero tratado con el insecticida comercial (formulación: cipermetrina 10% m/v y neopyramina 1 % m/v) y un cuarto impregnado con agua destilada. Los controles con el insecticida comercial se hicieron a concentraciones (0,125 %, 0,25 %, 0,50 % y 1% p/v), calculadas en función de la cipermetrina. Los huevos fueron incubados a 28 °C $\pm$ 3 °C y HR 50 % $\pm$ 10% hasta la eclosión de los controles de papel sin tratar y se continuó por cinco días más para observar si eclosionaron los demás controles y los sometidos a tratamiento. Tratamientos y controles se hicieron por cuadruplicado por cada concentración y en diferentes días. Las concentraciones aplicadas se calcularon teniendo en cuenta la superficie del papel y las dosis y se expresaron en mg de AE/cm² de papel. Igual procedimiento se aplicó en todos los bioensayos para ensayar con cuminaldehído puro (Aldrich). La actividad insecticida sobre *T. infestans*, del cuminaldehído, se llevó a cabo como se detalló anteriormente, pero reemplazando en cada ensayo el AE por cuminaldehído puro.

Análisis estadístico

El análisis estadístico se realizó mediante la verificación previa de los supuestos de

normalidad (prueba de Shapiro-Wilk) y homogeneidad de varianzas (prueba de Levene). En los conjuntos de datos que cumplieron dichos supuestos se aplicaron pruebas paramétricas, utilizando análisis de varianza (ANOVA) seguido de comparaciones múltiples post hoc mediante las pruebas de Tukey, Duncan o Dunnett T3. En los casos en que los datos no presentaron distribución normal se emplearon pruebas no paramétricas: U de Mann-Whitney para la comparación de dos grupos independientes y Kruskal-Wallis para más de dos grupos. El nivel de significación establecido fue $\alpha = 0,05$. El procesamiento estadístico se realizó con los programas Infostat y Microsoft Excel. Las concentraciones letales medias (CL50) y altas (CL90) se estimaron mediante análisis de regresión Probit (Robertson y Preisler, 1992), utilizando el software PoloPlusV2. Este modelo considera una variable binaria (insectos muertos vs. insectos totales) y asume una distribución normal de la respuesta de los individuos al insecticida. Se realizó una regresión lineal que permite la estimación de la tasa de cambio de actividad por unidad de incremento de concentración del estímulo (pendiente de la regresión Probit) y estimaciones puntuales de concentraciones letales a una cierta mortalidad (Tallarida 2020).

Resultados

El AE de comino de Artaza, departamento Belén, cosecha 2015, y el cuminaldehído puro, presentaron actividad insecticida significativa por acción fumígena sobre ninfas de *T. infestans*. Como se observa en la Tabla 1, a las 48 h de exposición el cuminal puro mostró elevada actividad insecticida en los primeros estadios ninfales, siendo la CL50 y CL90 (3,4 $\mu\text{L/L}$ y 4,4 $\mu\text{L/L}$) las más bajas para el estadio ninfal II.

En la Tabla 2, el AE de comino mostró la mayor actividad insecticida en ninfas del estadio I y III de *T. infestans*. La menor CL50 observada fue en estadio I (7,8 $\mu\text{L/L}$) y en estadio III (8,6 $\mu\text{L/L}$), la menor CL90 se observó también para estos estadios siendo de 12,6 $\mu\text{L/L}$ y 30,2 $\mu\text{L/L}$ respectivamente. En general la actividad insecticida del AE de comino para ninfas del estadio I, II y III fue menor que la observada por el cuminal puro. Mientras que el efecto del AE de comino observado en ninfas IV y V superó al del cuminal. Sin embargo, de los resultados expuestos en las tablas y tomando los valores medios de CL50 y CL90 de los diferentes aceites, siendo para el AE de comino 23.2 $\mu\text{L/L}$ de aire y 70 $\mu\text{L/L}$ de aire y para el cuminal puro 55.6 $\mu\text{L/L}$ de aire y 815.8 $\mu\text{L/L}$ de aire, se advierte que el AE de comino de Belén presenta mayor actividad insecticida que el cuminal.

En la Tabla 3, se muestran los resultados de la evaluación de la actividad ovicida de

soluciones etanólicas de AE de comino de Artaza, Dpto. Belén, cosecha 2015, cuminaldehído y cipermetrina (insecticida comercial). Se advierte que la actividad ovicida del AE fue menor a la presentada por el cuminaldehído y la cipermetrina.

Las CL50 expresadas en mg/cm² para los diferentes tratamientos en huevos se muestran en la Tabla 3.

Estos resultados muestran que el AE de comino de Belén, Catamarca, Argentina, presenta actividad biológica sobre huevos y ninfas de *T. infestans* sugiriendo que podría usarse como fuente de compuestos bioactivos contra este insecto vector de la enfermedad de Chagas, en ámbitos del sistema sanitario, así también revalorizando el cultivo de comino en la provincia, contribuyendo a la economía provincial y regional. Los resultados de este estudio contribuyen a llenar el vacío de conocimiento respecto de la actividad insecticida, larvicida y ovicida del AE de comino producido en la localidad Barrio Artaza del departamento Belén de la provincia de Catamarca, sobre la vinchuca (*T. infestans*), principal transmisor de la enfermedad de Chagas. Este vacío también se encuentra con respecto a compuestos que forman parte del AE de comino, como es el caso particular del aldehído cumínico frente a este vector.

El vacío de conocimiento existente sobre las propiedades insecticidas del AE de comino de Artaza, Belén, Catamarca,

sobre *T. infestans*, hace que este estudio cobre relevancia para la comunidad científica local, nacional e internacional. A través de la investigación aplicada, se podrían diseñar nuevos productos a base de AE de comino para resolver problemas concretos del sistema sanitario. Se espera que la difusión del conocimiento obtenido favorezca la revalorización de este cultivo industrial exótico, estimule su producción y comercialización con agregado de valor y contribuya a mejorar la economía familiar de los productores comineros de la provincia y de la región.

Tabla 1

*Actividad insecticida por toxicidad fumigante del cuminaldehído puro sobre ninfas de *T. infestans* (estadio I, II, III, IV y V) a las 48h de exposición.*

Estadio	n	CL50 ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	IC; $\alpha=0,05$ ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	CL90 ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	IC; $\alpha=0,05$ ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	(X^2)	Pendiente $\pm$ D.E.
I	262	6,62 A	6,20 - 7,13	8,41 B	7,71 - 9,69	7,57	12,36 $\pm$ 1,88
II	220	3,36 A	3,10 - 3,64	4,42 A	4,03 - 5,18	6,41	10,75 $\pm$ 1,79
III	159	4,36 A	0,28 - 21,15	23,16 ABC	3,74 - 147,72	6,95	0,31 $\pm$ 0,28
IV	222	21,71 A	1,43 - 54,65	158,77 CD	62,73 - 3266,46	33,01	1,48 $\pm$ 0,20
V	149	242,22 B	122,06 - 1144,01	3884,06 D	916,90 - 425555,86	5,30	1,06 $\pm$ 0,22

n= número de insectos, CL50 (concentración letal que afecta el 50% de los individuos de la población), IC= Intervalo de confianza, CL90 (concentración letal que afecta el 90% de los individuos de la población), X^2 =Chi cuadrado. Letras diferentes indican diferencias significativas al $\alpha=0,05$.

Tabla 2.

Actividad insecticida por toxicidad fumigante de AE de comino de Artaza, Belén 2015 sobre ninfas de T. infestans (estadio I, II, III, IV y V) a las 48h de exposición.

Estadio	n	CL50 ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	IC; $\alpha=0,05$ ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	CL90 ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	IC; $\alpha=0,05$ ($\mu\text{L/L}_{\text{aire}}$)	(X ²)	Pendiente $\pm$ D.E.
I	189	7,85A	4,64 - 10,59	12,58A	9,52 - 31,33	10,33	6,27 $\pm$ 1,36
II	264	19,96B	16,93 - 23,97	54,93B	42,01 - 82,28	4,95	2,91 $\pm$ 0,35
III	176	8,60A	4,42 - 11,93	30,19AB	21,67 - 59,92	2,95	2,35 $\pm$ 0,56
IV	165	30,21BC	20,36 - 42,69	82,88BC	55,91 - 181,94	6,32	2,92 $\pm$ 0,43
V	191	49,60C	38,23 - 63,29	169,52C	123,96 - 268,93	5,33	2,40 $\pm$ 0,31

n= número de insectos, CL50 (concentración letal que afecta el 50% de los individuos de la población), IC= Intervalo de confianza, CL90 (concentración letal que afecta el 90% de los individuos de la población), X²= Chi cuadrado. Letras diferentes indican diferencias significativas al $\alpha=0,05$.

Tabla 3.

Actividad ovicida por toxicidad fumigante sobre huevos de T. infestans.

Tratamiento	n	CL50 (mg/cm ²)	IC;α = 0,05 (mg/cm ²)	CL90 (mg/cm ²)	IC;α = 0,05 (mg/cm ²)	(X ²)	Pendiente ± D.E.
Bag2-2015	100	13,38C	6,46 - 37,15	126,37C	42,47 -14348,43	0,89	1,31 ±0,44
Cuminal	140	4,29B	2,66 - 6,01	15,43B	10,77-27,12	1,45	2,30 ±0,40
Cipermetrina	170	0,17A	0,03- 0,27	0,99A	0,68- 3,02	0,19	1,64±0,49

n= número de huevos, CL50 (concentración letal que afecta el 50% de los de la población), IC= Intervalo de confianza, CL90 (concentración letal que afecta el 90% de la población), X2= Chi cuadrado. Letras diferentes indican diferencias significativas al α= 0,05.

Conclusiones

El aceite esencial de comino (*Cuminum cyminum* L.) de Artaza, Belén (Catamarca, Argentina) y su componente mayoritario, el cuminaldehído, demostraron toxicidad significativa sobre huevos y ninfas de *Triatoma infestans*, con efectos dependientes de la concentración y del estadio de desarrollo del insecto. El cuminaldehído presentó mayor eficacia en estadios ninfales tempranos y en huevos, mientras que el AE mostró un mejor desempeño en ninfas de estadios más avanzados. Si bien ambos tratamientos fueron menos efectivos que la cipermetrina, los resultados evidencian el potencial del AE de comino como fuente de compuestos bioactivos aplicables al control vectorial de la enfermedad de Chagas. Estos hallazgos no solo aportan información novedosa que reduce el vacío de conocimiento existente sobre las propiedades insecticidas de este recurso vegetal, sino que también abren la posibilidad de desarrollar alternativas naturales que, además de contribuir a la salud pública, impulsen la revalorización y el agregado de valor al cultivo de comino en la región.

Referencias Bibliográficas

- Alzogaray, R. A., Lucia, A., Zerba, E. N. y Masuh, H. M. Insecticidal Activity of Essential Oils From

Eleven *Eucalyptus* spp. and Two Hybrids: Lethal and Sublethal Effects of Their Major Components on *Blattella germanica*, *Journal of Economic Entomology*, Volume 104, 2, 1 2011, 595–600, <https://doi.org/10.1603/EC10045>

- Balsalobre, A. (2016). ¿Qué especies de vinchucas modificarán su distribución geográfica en la Argentina ? : Un análisis de los microhábitats y microclimas de los triatomíneos vectores de la enfermedad de Chagas. [Tesis doctoral, Universidad Nacional de La Plata]. Archivo digital. http://sedici.unlp.edu.ar/bitstream/handle/10915/52319/Documento_completo_.pdf?sequence=4&isAllowed=y
- Bandoni, A. L., Juárez, M. A., y Mizrahi, I. (1993). *Contribución al estudio de las esencias de comino (Cuminum cyminum L.)*. *Anales de SAIPA - Sociedad Argentina para la Investigación de Productos Aromáticos*, XI, 53–59. Trabajo presentado en el V Congreso Nacional de Recursos Naturales Aromáticos y Medicinales, Salta, 1989.
- Echeverría, J. y de Albuquerque, R.D.D.G. Nanoemulsions of essential oils: New tool for control

- of vector-Borne diseases and in vitro effects on some parasitic agents, *Medicines* 6 (2019) 42–52, <https://doi.org/10.3390/medicines6020042>.
- Fronza, G., A. C. Toloza, M. I. Picollo, A. E. Carbajo, S. Rodríguez, y G. A. Mougabure-Cueto. 2019. Modelling the association between deltamethrin resistance in *Triatoma infestans* populations of the Argentinian Gran Chaco region with environmental factors. *Acta Trop.* 194: 53–61.
 - Gaire, S., O'Connell, M., Holguin, F. O., Amatya, A., Bundy, S., y Romero, A. (2017). *Propiedades insecticidas de los aceites esenciales y algunos de sus componentes en la cucaracha de Turkestán (Blattodea: Blattidae)*. *Revista de Entomología Económica*, 110(2), 584–592.
 - Germano, M.D., G. Roca Acevedo, G.A. Mougabure Cueto, A.C Toloza, C. V. Vassena, y M.I. Picollo. 2010. New findings of insecticide resistance in *Triatoma infestans* (Heteroptera: Reduviidae) from the Gran Chaco. *J. Med. Entomol.* 47: 1077- 1081.
 - Isman MB, Wilson JA, Bradbury R (2008). Insecticidal activities of commercial rosemary oils (*Rosmarinus officinalis*) against larvae of *Pseudaletia unipuncta* and *Trichoplusia ni* in relation to their chemical compositions. *Pharmaceut Biol* 46:82–87
 - Lardeux, F.; Depickère, S.; Duchon, S. & Chavez, T. (2010). Insecticide resistance of *Triatoma infestans* (Hemiptera, Reduviidae) vector of Chagas disease in Bolivia. *Trop. Med. Int. Health* 15: 1037–1048.
 - Laurent, D. (1997). Insecticidal Activity of Essential Oils on *Triatoma infestans*. *Phytotherapy research* 11, 285–290.
 - López, S. B.; López, M. L.; Aragón, L. M.; Tereschuk, M. L.; Slanis, A. C.; Feresin, G. E. & Tapia, A. A. (2011). Composition and Anti-insect Activity of Essential Oils from *Tagetes* L. Species (Asteraceae, Helenieae) on *Ceratitis capitata* Wiedemann and *Triatoma infestans* Klug. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59(10), 5286–5292. doi:10.1021/jf104966b.
 - Mougabure – Cueto, G., Picollo, M.I., 2015. Insecticide resistance in vector Chagas disease: evolution, mechanisms and management. *Acta Trop.* 149, 70–85.
 - Murua Carrizo, F. (2013). *Efecto de la época y densidad de siembra de comino (Cuminum cyminum L.)*

- sobre el rendimiento, sus componentes y la calidad de semilla. *Horticultura Argentina*, 30, 9–17.
- Organización Mundial de la Salud. (2006). Pesticides and their application for the control of vectors and pests of public health importance, 6th ed., WHO, Geneva. Pp: 64-66.
 - Organización Mundial de la Salud (2021, 1 de abril). La enfermedad de Chagas (trypanosomiasis americana). Organización Mundial de la Salud. [https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease\(american-trypanosomiasis\)](https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease(american-trypanosomiasis)).
 - Park, I., Sang-Gil L., Don-Hwa C., Ji-Doo P&Young-Joon A. (2023). Insecticidal activities of constituents identified in the essential oil from leaves of *Chamaecyparis obtusa* against *Callosobruchus chinensis* (L.) and *Sitophilus oryzae* (L.). *Journal of Stored Products Research*, Volume 39, 4, 375-384. doi.org/10.1016/S0022474X(02)00030-9.
 - Picollo, M.I., C. V. Vassena, P. Santo Orihuela, S. Barrios, M. Zaidemberg, y E.N. Zerba. 2005. High resistance to pyrethroid insecticides associated with ineffective field treatments in *Triatoma infestans* (Hemiptera: Reduviidae) from Northern Argentina. *J. Med. Entomol.* 42: 637–642.
 - Quiroga, V. del V., Pizzolitto, R. P., Zunino, M. P., Dambolena, J. S., Herrera, J. M., y Zygadlo, J. A. (2023). *Effect of cumin seed (Cuminum cyminum L.) essential oil from Catamarca, Argentina, on the stored maize pests Sitophilus zeamais and Fusarium verticillioides*. *Agriscientia*, 40(1), 29–39. <https://doi.org/10.31047/1668.298x.v1.n40.38788>.
 - Quiroga, V. del V. (2019). *Los aceites esenciales de comino (Cuminum cyminum L.) de Catamarca como fuente de compuestos bioactivos con propiedades antiinsecto, antifúngicas y antimicotoxicogénicas* (Tesis doctoral). Universidad Nacional de Catamarca. Recuperado de <http://www.editorial.unca.edu.ar/Publicacione%20on%20line/DIGITESI/S/Viviana%20Quiroga/Tesis%20Doctoral%20Viviana%20Quiroga.pdf>.
 - Quiroga, V., Uñates, J., Soriano, E., Fiad, S. y Falagüerra, T. (2016). *Robustez de la técnica de*

hidrodestilación y condiciones óptimas para la determinación del contenido en aceite esencial de comino. En VI Congreso Internacional de Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Análisis físico-químicos y sensoriales (pp. 369–378). Córdoba, Argentina.

- Reynoso, M. M. N. (2019). Interacciones toxicológicas y modificación del comportamiento en vinchucas expuestas a monoterpenos vegetales e insecticidas sintéticos. [Tesis doctoral, Universidad Nacional de San Martín]. Archivo digital. Tesis Reynoso-Corregida (2). pdf
- Robertson, J.L. y Preisler, H. K. (1992). Pesticide bioassays with arthropods. CRC, Boca Raton, FL.
- Roca Acevedo, G. (2014). Análisis toxicológico y bioquímico de la resistencia a insecticidas en estados embrionarios y post-embrionarios de *Triatoma infestans*, vector de la enfermedad de Chagas. [Tesis de posgrado, Universidad de Buenos Aires]. Archivo digital. http://repositorioubi.sisbi.uba.ar/gsdl/collect/posgraafa/index/assoc/HWA_1135.dir/1135.PDF
- Romero E., Iriarte A., Quiroga V. y Fiad S. (2012). Algunos factores

extrínsecos que influyen en la composición y rendimiento del aceite esencial de comino. VIII Jornadas de Ciencia y tecnología NOA. Tucumán 2012.

- Rosa, J., Oliveira, L., Sousa, R., Escobar, C. y Fernandes-Ferreira, M. (2020). Bioactivity of some Apiaceae essential oils and their constituents against *Sitophilus zeamais* (Coleoptera: Curculionidae). Bulletin of Entomological Research, 110(3), 406-416. doi:10.1017/S0007485319000774.
- Seo, S.M., Jung, C.S., Kang, J., Lee, H.R., Kim, S.W., Hyun, J. & Park, I.K. (2015). Larvicidal and acetylcholinesterase inhibitory activities of apiaceae plant essential oils and their constituents against *aedes albopictus* and formulation development. J. Agric Food Chem. 63(45):9977-86.
- Sfara, V., E. N. Zerba, y R. A. Alzogaray. 2009. Fumigant insecticidal activity and repellent effect of five essential oils and seven monoterpenes on first- instar nymphs of *Rhodnius prolixus*. J. Med. Entomol. 46: 511-515.
- Tarelli, G., E. N. Zerba, and R. A. Alzogaray. 2009. Toxicity to vapor exposure and topical application of essential oils and monoterpenes

- on *Musca domestica* L. (Diptera: Muscidae). J. Econ. Entomol. 102: 1383- 1388.
- Toloza, A. C. M. D. Germano, G. A. Mougabure Cueto, C. V. Vassena, E. N. Zerba, y M. I. Picollo. 2008. Differential patterns of insecticide resistance in eggs and first instars of *Triatoma infestans* (Hemiptera: Reduviidae) from Argentina and Bolivia. J. Med. Entomol. 45: 421–426.
- Tunc, I, Berger, B.M., Erler, F. y Dagli, F. (2000). Ovicidal activity of essential oils from five plants against two stored product insects. Journal of Stored Product Research. 36: 161–168.
- Urzúa A, Santander R, Echeverría J, Cabezas N, Palacios SM, Rossi Y. 2010. Insecticide properties of the essential oils from *Haplopappus foliosus* and *Bahia ambrosoides* against the house fly, *Musca domestica* L. J Chil Chem Soc 55: 392 - 395. <https://doi.org/10.4067/s0717-97072010000300026>
- Urzúa A, Di Cosmo D, Echeverría J, Santander R, Palacios SM, Rossi Y. 2011 a. Insecticidal effect of *Schinus latifolius* essential oil on the housefly, *Musca domestica* L. Bol Latinoam Caribe Plant Med Aromat 10: 470 - 475.
- Urzúa A, Echeverría J, Santander R. 2011b. Comparative chemical composition of the essential oils from *Pseudognaphalium robustum*, *P. heterotrichium* and *P. cheiranthifolium*. J Essent Oil Bear PI 14: 600 -604. <https://doi.org/10.1080/0972060x.2011.10643977>
- Urzúa A, Modak B, Santander R, Heit C, Echeverría J. 2013. Insecticidal properties of *Heliotropium stenophyllum* essential oil on the House fly, *Musca domestica* L. Bol Latinoam Caribe Plant Med Aromat 12: 196-200.
- Vassena, C. V., M. I. Picollo, y E. N. Zerba. 2000. Insecticide resistance in Brazilian *Triatoma infestans* and Venezuelan *Rhodnius prolixus*. Med. Vet. Entomol. 14: 51–55.
- Yeom, H. J., Kang, J. S., Kim, G. H., y Park, I. K. (2012). Insecticidal and acetylcholine esterase inhibition activity of Apiaceae plant essential oils and their constituents against adults of German cockroach (*Blattella germanica*). Journal of Agricultural and Food Chemistry, 60 (29), 7194–7203.
- Zerba, E.N. (1999). Susceptibility and resistance to insecticides of

Chagas disease vectors. Medicine

59: 41- 46.

33.- Geotecnologías y Ciencias de la Atmósfera

Hielo glaciar bajo presión: un estudio experimental y computacional del crecimiento de grano

Autor: Gerez, Luis Nicolas; luis.gerez@mi.unc.edu.ar

Co-autor(es): Aguirre Varela, Guillermo

A.; Druetta, Esteban; Pastor, I. Achaval

Orientador/a: Di Prinzio, Carlos Leonardo; carlos.diprinzio@unc.edu.ar

Universidad Nacional de Córdoba (UNC) / Facultad de Matemática Astrónoma, Física y Computación (FAMAF)

Resumen

En este trabajo se presenta un nuevo método experimental para registrar el crecimiento de grano dentro del volumen de un policristal de hielo. Este método permite reproducir en buena aproximación las condiciones físicas reales a las que están sometidos los hielos glaciares. Para ello se estudió el crecimiento de grano en el volumen de una muestra policristalina de hielo y en la superficie de otra a una temperatura de -5°C y 10 MPa de presión durante 40 hs. Los resultados experimentales fueron comparados con los resultados de simulaciones numéricas realizadas con el método Monte Carlo a partir de tamaños y formas de grano iniciales similares a los experimentales. La constante cinética de los granos fue obtenida en cada caso. Se observó que los resultados simulados están de acuerdo con los experimentales y dan cuenta de un comportamiento marcadamente diferente entre los granos volumétricos y superficiales, resultando una disminución en 1 orden de magnitud entre la constante cinética de los granos volumétricos con los granos superficiales.

Palabras clave: crecimiento de grano, presión hidrostática, hielo glaciar

Introducción

Las capas de hielo que conforman los glaciares se originan a partir de la acumulación y compactación progresiva

de nieve en regiones polares y continentales (DeBeer, et al., 2020). Este proceso comienza cuando la nieve reciente, de baja densidad, sufre una serie

de transformaciones físicas y estructurales inducidas por su propio peso y por las condiciones ambientales del entorno (Bennett. y Glasser. (Eds.), 2011). Con el paso del tiempo, la nieve se densifica y se convierte en firn, una forma intermedia con características tanto de nieve como de hielo, para luego transformarse en hielo glacial compacto. Este hielo está compuesto por granos que adoptan diversas orientaciones cristalográficas y que, a lo largo del tiempo, experimentan una evolución controlada por la presión, la temperatura, la deformación, las burbujas y el contenido de impurezas (Alley et al., 1986a,b).

El crecimiento de grano en los glaciares ocurre a lo largo de escalas de tiempo geológicas y está gobernado por la migración de los límites de grano, impulsada por diferencias en la energía superficial y por la presión litostática que se incrementa con la profundidad (Alley y Wood 1996). Este crecimiento produce una estructura más homogénea y con granos de mayor tamaño, lo que tiene un impacto directo en las propiedades físicas del hielo. A medida que los granos crecen, el número de límites de grano por unidad de volumen disminuye, lo que afecta la capacidad del hielo para deformarse mediante mecanismos de deslizamiento intracristalino y rotación de granos.(Fan et al., 2025 y Duval, y Castelnau 1995, Mayewski, y Bender, 1995 y Kennedy et al. 2013).

A pesar de la relevancia del crecimiento de grano en la evolución estructural del hielo glacial (Gow, 1969) y Pimienta y Duval 1987), son pocos los trabajos que han abordado este fenómeno en condiciones que reproduzcan fielmente el entorno de presión y temperatura que se encuentra en el interior de los glaciares. La mayoría de los estudios experimentales de crecimiento de grano en muestras policristalinas de hielo han observado la evolución de los granos sobre la superficie de la muestra lo cual no representa el crecimiento de grano en las masas polares profundas (Fan et al, 2022, Roos, 1966), Jellinek. y Gouda, 1969 y Levi y Ceppi, 1982). La superficie del hielo se encuentra expuesta a condiciones ambientales variables como intercambios térmicos, sublimación, presencia de impurezas y gradientes de humedad que pueden alterar los mecanismos naturales del crecimiento de grano. En particular, se ha observado que los efectos superficiales modifican el crecimiento de grano debido la interacción de los bordes de grano (BG) con la superficie (Di Prinzio y Nasello, 1997, Nasello O. et al, 2007, Nasello O. et al, 2005, Nasello O. y Di Prinzio, 2011 y Aguirre Varela G. et al., 2021). Por el contrario, los granos del interior del hielo tienen un entorno representativo de los procesos físicos dominantes que rigen la evolución del hielo glacial a escala geológica. Estudiar entonces el

crecimiento de grano en el interior del hielo bajo presión, con burbujas y contaminantes permite acceder a información más precisa sobre la dinámica real del hielo glaciar.

Algunos investigadores (Azuma y Higashi, 1983 y Wang et al., 2024) han estudiado el crecimiento de grano en hielo bajo presión con diferentes métodos experimentales y muestras de hielo sin burbujas. Estos estudios no logran representar totalmente las condiciones físicas del hielo glaciar. También algunos autores han estudiado la influencia de las burbujas en el crecimiento de grano sobre la superficie de muestras policristalinas de hielo a presión atmosférica (Roessiger et al., 2014 y Di Prinzio et al., 2024). Sin embargo Arena et al (1997) y Azuma et al. (2012) estudiaron el efecto de las burbujas sobre el crecimiento de grano en el interior de las muestras policristalinas de hielo pero a presión atmosférica.

A continuación resumimos los trabajos antes citados y mencionaremos las características experimentales empleadas. Azuma and Higashi (1983) estudiaron el crecimiento de grano en muestras de hielo artificial y hielo del glaciar Byrd a diferentes temperaturas y a las presiones 0.1 MPa, 30 MPa y 50 MPa. Las muestras policristalinas artificiales fueron realizadas congelando agua pura con pequeños cristales de hielo sobre un vidrio. Esas muestras fueron pulidas para tener muestras policristalinas delgadas y libre

de burbujas. Los autores encontraron que los diámetros medio (D) de los granos evoluciona con el tiempo (t) siguiendo la ecuación:

$$D^n - D_0^n = k(t - t_0) \quad (1)$$

Donde k es una constante cinética relacionada con el crecimiento de grano.

El crecimiento de grano se estudió en los BG que emergían a la superficie de las láminas delgadas de hielo. Los valores de k para -5°C y a presión de 10MPa y 0.1MPa fueron determinados usando ecuación (1) con $n=2$

Wang et al. (2024) investigaron el efecto de impurezas con diferentes concentraciones en la cinética de crecimiento de grano del hielo artificial bajo presión. Según los autores no se observaron burbujas en las muestras. Después de cada experimento, se obtuvieron imágenes de la superficie pulida de la muestra utilizando un microscopio óptico equipado con una platina fría. En todas las muestras se produjo un crecimiento grano que responde a la ecuación (1) pero con n que varía entre 3 y 4 dependiendo de la temperatura y concentración de las impurezas. Los valores de k obtenido por estos autores poseen diferentes unidades por lo cual no pueden compararse entre sí y tampoco con valores de k de otros autores. Sin embargo se puede calcular aproximadamente el valor de k para -5°C y a presión de 20MPa con los

datos experimentales de estos autores usando la ecuación (1) con $n=2$.

Azuma and Higashi (1983) y Wang et al (2024) han estudiado el crecimiento de grano con diferentes condiciones físicas pero en granos situados muy cerca de la superficie de la muestra de hielo y sin burbujas. Sin embargo Arena et al (1994) estudiaron el crecimiento de grano en hielo a diferentes temperaturas en el volumen de la muestra de hielo puro con y sin burbujas pero a presión atmosférica. Las muestras fueron obtenidas por recristalización de monocristales de hielo ultrapuro. Ellos pulieron las muestras policristalinas unos milímetros por debajo de la superficie inicial y obtuvieron el tamaño de grano mediante réplicas plásticas. En ese trabajo se registró el tamaño de los granos en el interior de las muestras y el valor de k con burbujas a -6°C fue calculado.

Por otro lado, Azuma et al. (2012) investigaron cómo las burbujas de aire afectan el crecimiento normal de granos en el hielo policristalino a presión atmosférica. Para ello, los investigadores prepararon muestras de hielo con y sin burbujas. Los granos estudiados estaban situados en el interior de la muestra de hielo. Ambos tipos de muestras se sometieron a experimentos de crecimiento de granos a diferentes temperaturas para medir la dependencia de k con respecto a la temperatura. El tamaño de grano medio

en las muestras sin burbujas presentó un comportamiento representado por la ecuación (1) con un exponente n cercano a 2, lo que coincide con el valor teórico para el crecimiento normal de grano. Sin embargo, en el hielo con burbujas, el valor de n fue significativamente mayor, indicando un crecimiento anómalo. Estos resultados sugieren que la presencia de burbujas de aire impide el crecimiento normal de granos en el hielo, posiblemente debido a que las burbujas ejercen una fuerza de arrastre sobre los límites de grano, ralentizando su migración (Di Prinzio et al (2024)).

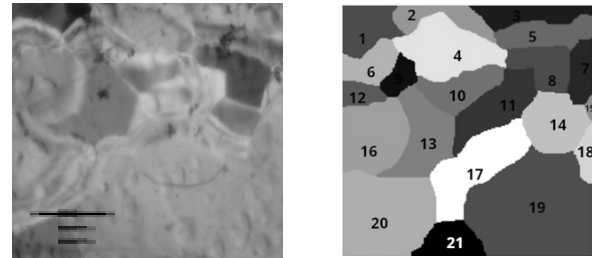
Objetivos

En el presente trabajo mostraremos que es posible estudiar los granos de hielo en el volumen con burbujas y bajo presión. Este método es más representativo del crecimiento de grano en hielo glaciar. Nos focalizaremos en encontrar diferencias entre el crecimiento de grano en hielo en los granos superficiales y los granos en el volumen de muestras policristalinas. Las muestras policristalinas de hielo fueron obtenidas artificialmente desde agua ultrapura luego presurizadas a 10MPa mediante una celda hermética y mantenida a -5°C . El tamaño de los cristales fue monitoreado con una cámara adosada a un microscopio que tomaba imágenes digitales en forma automatizada. También se compararon los datos experimentales con datos obtenidos en una simulación de crecimiento de

grano por método de Monte Carlo (MC). Esto último permitió determinar las constantes cinéticas (k) de cada tipo de crecimiento de grano.

Materiales y Métodos

En este trabajo se utilizó una muestra monocristalina de hielo puro que fue obtenida mediante la técnica desarrollada por Di Prinzio y Nasello. (1997). La muestra monocristalina tenía aproximadamente 15mm x 20mm y un espesor de 3mm. Las caras de la muestra fueron pulidas mediante un micrótopo marca Leitz®1320 y en una de sus caras se congeló una capa de 1 mm de espesor de agua ultrapura. Dicha capa de hielo fue pulida y se observó que la misma era policristalina y sin burbujas; esta fue la muestra que se estudió y se denomina S. La muestra S fue fotografiada entre polaroides cruzados y la imagen es presentada en la figura 1a. En dicha imagen podemos ver los granos como áreas de diferentes tonos de grises por la birrefringencia del hielo y algunas imperfecciones en la superficie debido al pulido. Los granos que pudieron ser detectados fueron digitalizados y numerados en la figura 1b. En la muestra S se estudió el crecimiento de grano de los granos que emergen a la superficie al igual que lo hicieron Azuma and Higashi (1983) y Wang et al (2024).

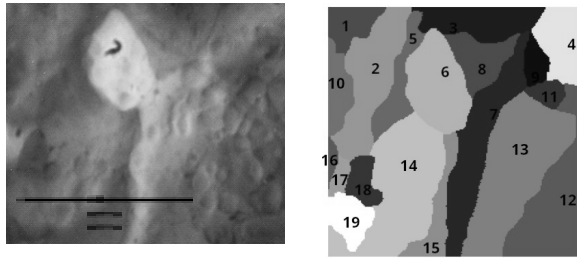


a)

b)

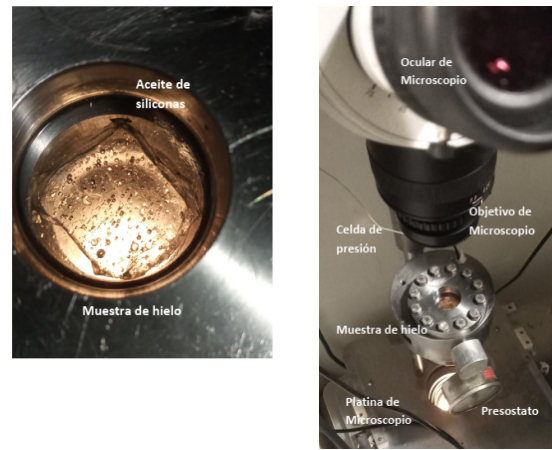
Figura 1: a) Foto de la zona del policristal S analizada en este trabajo. b) Figura que muestra las áreas digitalizadas de los granos visualizados en la zona estudiada del policristal S de la figura 1 a.

Con parte del mismo monocristal de hielo se cortaron dos muestras monocristalinas del mismo tamaño que la anterior. Una capa de agua fue congelada entre ambas muestras monocristalinas y se obtuvo una región policristalina con burbujas. El policristal de hielo se denominó muestra B. La concentración de las burbujas y su tamaño no fueron medidos. Las burbujas eran difíciles de medir por ser transparentes y encontrarse a diferentes alturas focales dentro de la muestra. Una imagen de la muestra B es presentada en la figura 2a y una representación digital de los granos enumerados de la misma es mostrada en la figura 2b. En la muestra B se estudió el crecimiento de grano de los granos en el volumen al igual que lo hicieron Azuma et al.(2012) y Arena et al (1997).



a) b)
 Figura 2: a) Foto de la zona del policristal B analizada en este trabajo. b) Figura que muestra las áreas digitalizadas de los granos visualizados en la zona estudiada del policristal B de la figura 2 a.

Las muestras policristalinas S y B fueron colocadas dentro de una celda presurizada (Nasello y Di Prinzio (2011).) como la presentada en la figura 3a. La celda tiene forma cilíndrica y en sus caras planas tiene ventanas transparentes de acrílico a fin de poder observar su interior. La celda es hermética y está llena de aceite de silicona puro. Un pistón con paso milimetrado permitía ir aumentando la presión dentro de la celda. En la figura 3b se presenta la celda presurizada con la muestra en su interior y apoyada sobre una platina motorizada de un microscopio. Todo el sistema óptico con la celda de presión fue ubicada en el interior de un freezer a temperatura regulada. El microscopio marca Leica® Wild M420 era de transmisión de luz y tenía incorporado una cámara digital controlada automáticamente.



a) b)
 Figura 3: a) Muestra de hielo en aceite de siliconas dentro de la celda presurizada. b) Microscopio y celda presurizada dentro de la cámara termostatzada.

Para las muestras S y B se sacaron fotos de las zonas presentadas en la figura 1a y 2a a intervalos de $\frac{1}{2}$ h durante aproximadamente 40 h.

Resultados y Discusión

Datos experimentales

Las fotografías obtenidas permiten estudiar la evolución del tamaño de grano medio o bien de los granos individuales de las muestras S y B. Sin embargo el tiempo de observación de las muestras no superó los 2 días por lo cual el tamaño medio de los granos no cambió. De esta manera fue imposible obtener un valor de k mediante la ecuación (1). A pesar del corto tiempo se observaron cambios en el tamaño de algunos granos individuales lo cual permite estudiar la cinética de dichos granos.

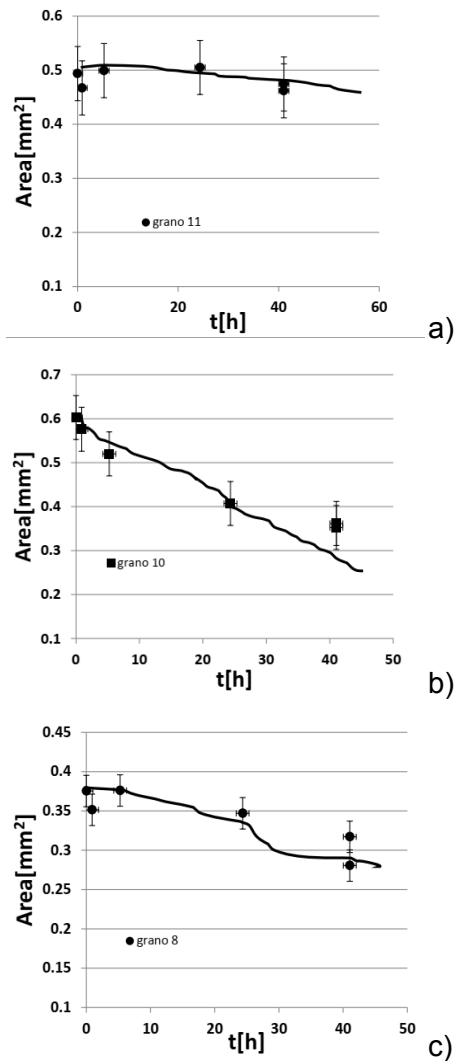


Figura 4: Áreas de los granos seleccionados de la muestra S en función del tiempo. Los puntos grandes y negros son los datos experimentales y la línea negra son los datos computacionales a) grano 11, b) grano 10 y c) grano 8.

Los granos de las muestras S y B se distinguían por el área que presentaban al plano focal de la lente del microscopio como se mostraron en la figura 1a y 2a . Los granos estudiados fueron solo aquellos cuya área total no se salía de la zona de observación inicial. Los granos

descartados fueron aquellos cuya área inicial era incompleta o parte de su área desaparecía de la zona de observación. La desaparición parcial de algunos granos de la zona de observación se debió a que la muestra dentro de la celda con silicona podía flotar libremente y moverse por efecto del leve desnivel de la platina del microscopio.

En la muestra S se tomaron solo en cuenta los granos identificados con los números 8,10 y 11 . Mientras que en la muestra B se consideraron los granos identificados con los números 5, 6, 7 y 8.

En la figura 4 se presentan los valores de áreas de los granos analizados en función del tiempo de la muestra S. Las áreas tienen una desviación estándar de 0.01 mm² y los tiempos una desviación estándar de 0.5 h.

Los granos 8 y 10 presentan una diferencia apreciable entre el área inicial y final y también se nota que ambos granos se achican. Sin embargo no se observa, dentro de los errores experimentales, cambio en el área del grano 11.

En la figura 5 se presentan los valores de áreas de los granos analizados en función del tiempo de la muestra B. En esta muestra podemos notar que los granos disminuyen levemente su área en el intervalo estudiado. Podemos notar que solo los granos 6 y 8 presentan diferencias entre el área inicial y final

considerando los errores de medición. Podemos notar en general una disminución del movimiento de los BG en la muestra B con respecto a la muestra S.

En este trabajo podremos analizar el cambio del tamaño de los granos en ambas muestras por medio de la comparación con datos provenientes de una simulación de crecimiento de grano por el método de MC.

Datos computacionales

La simulación del crecimiento de un policristal con MC usa los mismos procedimientos que el modelo computacional de crecimiento de grano con burbujas presentado por Achával et al. (2018), Achával et al. (2021), Di Prinzio et al (2022) y Di Prinzio et al (2024) (ver **APÉNDICE A**). En el modelo de MC de crecimiento de grano con burbujas desarrollado por Di Prinzio et al (2024) se separa el movimiento de las burbujas del movimiento de los BG. Esta simulación permite extraer los parámetros físicos del BG independientes de las burbujas llamados parámetros físicos intrínsecos. De esta manera Di Prinzio et al (2024) aplicaron el modelo computacional con burbujas a una muestra de hielo con burbujas y obtuvieron los parámetros físicos intrínsecos de los BG. Si el modelo de MC de crecimiento de grano no incluye burbujas y es aplicado a una muestra con burbujas se obtienen parámetros físicos

de los BG extrínsecos. Los parámetros extrínsecos de los BG dependen de las burbujas y son similares a los parámetros físicos experimentales que habitualmente se obtienen en muestras de hielo.

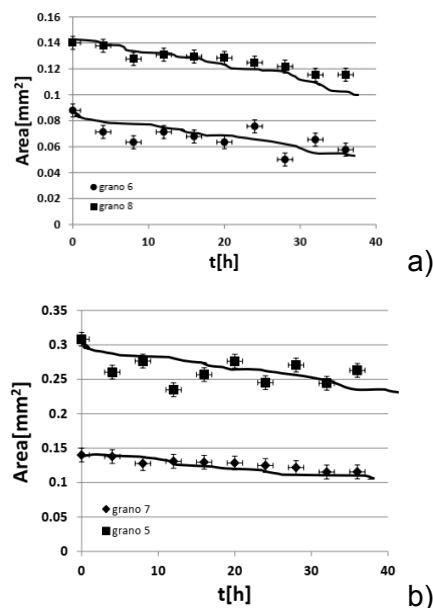


Figura 5: Áreas de los granos seleccionados de la muestra B en función del tiempo. Los puntos negros son los datos experimentales y las líneas negras son los datos computacionales. a) grano 6 y 8, b) grano 7 y 13.

En particular en este trabajo no se agregaron burbujas al modelo MC como se hizo en un trabajo previo (Di Prinzio et al (2024)) para poder obtener los parámetros extrínsecos de los BG. De esta manera podemos comparar los mismos con los obtenidos experimentalmente en los trabajos de otros autores.

La muestra S, como se mencionó anteriormente, no tenía burbujas detectables mediante la resolución del

microscopio. La muestra B tenía burbujas pero no fueron fácilmente detectables para medir adecuadamente su tamaño y su concentración.

La muestra policristalina usada en la simulación de MC fue tridimensional (3D) pero con simetría cilíndrica debido a que solo se conocía las áreas de los granos en las muestras S y B.

Los policristales 3D con simetría cilíndrica estaban dentro de una matriz de N sitios ($N_x \times N_y \times N_z = N$) y fueron similares a las muestras experimentales S y B, mostradas en las figuras 1b y 2b respectivamente. Los valores utilizados fueron $N_x = N_y = 200px$ y $N_z = 20px$. La unidad px es elegida para definir la unidad de longitud en la muestra o distancia entre dos sitios adyacentes. El MCS está definido como la unidad de tiempo computacional en el cual el algoritmo de MC es aplicado una vez a todos los N sitios que constituyen la matriz.

La simulación de MC permite estudiar la evolución del tamaño de grano medio o bien la evolución de los tamaños granos individuales de la muestra. Podemos notar que el tamaño medio de los granos no cambió. Sin embargo, podemos estudiar los cambios en el tamaño de algunos granos individuales.

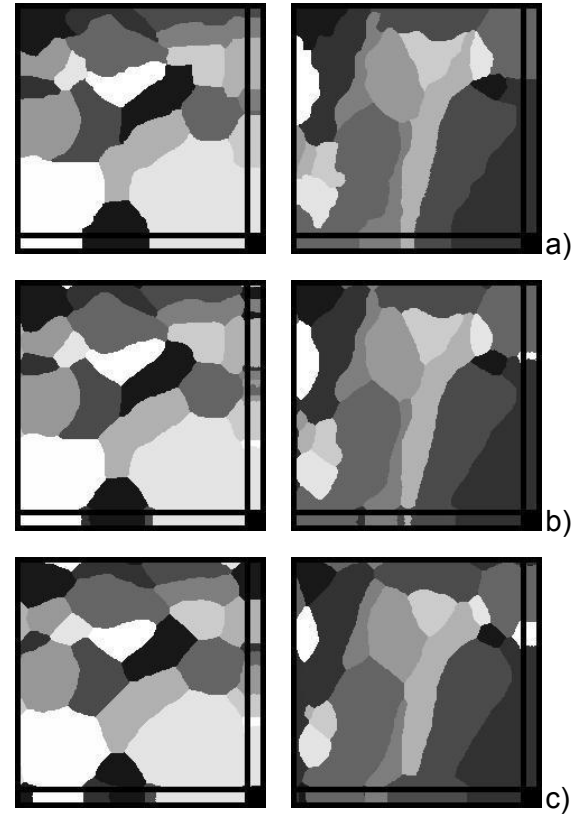


Figura 6: Evolución de la región estudiada de la muestra S (izquierda) y B (derecha) a a) 0 MCS, b) 100 MCS y c) 1000 MCS mediante el modelo de MC.

Para poder relacionar la simulación numérica con datos experimentales debemos relacionar los MCS con el tiempo real y los px con la longitud real de la zona de la muestra elegida. La zona de la muestra digitalizada S y B tenían una longitud horizontal de 200 px y las longitudes de las zonas reales eran de 3,5mm y 1,5 mm respectivamente. Siguiendo los pasos descritos en el **APÉNDICE B** podemos determinar que:

$$MCS = 0.107 px^2 / (M\gamma) \quad (2)$$

Donde $M\gamma$ es la movilidad y energía de los BG.

Los datos obtenidos en las simulaciones fueron convertidos a las mismas unidades de los datos experimentales usando un valor adecuado de $M\gamma$ para cada muestra. Cada área de cada grano evolucionó en la simulación de MC como lo hizo experimentalmente y el comportamiento del área de los mismos fue ajustado en cada muestra por el mismo valor de $M\gamma$. En la tabla 1 se presentan los valores de $M\gamma$ adoptados para lograr el mejor ajuste de los datos experimentales con los datos simulados.

En las figuras 4 y 5 se presenta la evolución de las áreas de los granos seleccionados para las muestras S y B respectivamente en las simulaciones de MC.

Tabla 1: Valores de $M\gamma$ y k experimentales para la muestra S y B y valores de k_α de otros autores.

Muestra Policrista lina	$M\gamma \left[10^{-9} \frac{cm^2}{s} \right]$ $\Delta M\gamma \left[\pm 1 \times 10^{-10} \frac{cm^2}{s} \right]$	$k \left[10^{-9} \frac{cm^2}{s} \right]$	Ref.	Presi ón [MPa]	burb ujas
S	6.0	6	Presente	10	no
		8	Azuma et al (1983)	10	no
		7	Wang et al.(2024)	20	no
		3	Azuma et al (1983)	0.1	no
B	0.6	0.6	Presente	10	si
		0.004	Arena et al (1997)	0.1	pequ eñas
		60	Azuma et al (2012)	0.1	no

		0.7	Azuma et al (2012)	0.1	pequ eñas
		0.7	Azuma et al (2012)	0.1	medi anas
		0.9	Azuma et al (2012)	0.1	gran des

En la figura 6 se presenta a modo de ejemplo la región estudiada de la muestra S (izquierda) y B (derecha) a a) 0 MCS, b) 100MCS y c) 1000 MCS mediante el modelo de MC. Podemos ver como las áreas de los granos van cambiando bajo efecto de la capilaridad.

Discusión

En este trabajo se obtuvieron los valores de $M\gamma$ para las muestras S y B. Para poder relacionar nuestros resultados con los resultados encontrados por otros autores debemos encontrar una relación entre k y $M\gamma$ en la simulación de Monte Carlos de crecimiento de grano utilizada. En el **APÉNDICE** se demuestra que $k \sim M\gamma$.

En la tabla 1 se presentan los valores de k encontrados en este trabajo y los valores k_α obtenidos por los autores Arena et al (1994), Wang et al. (2024), Azuma and Higashi (1983) y Azuma et al. (2012) en muestras artificiales de hielo puro a temperatura cercana a -5C. En la tabla 1 también se agregaron el tipo de muestra (S o B), la presión hidrostática usada y la presencia de burbujas. Las burbujas pequeñas (AS) son aquellas cuyo radio es menor a 10 micras, mientras que las burbujas grandes (AG) son mayores a 35

micras. Las burbujas medianas (AM) son aquellas cuyo radio está entre 15 y 20 micras (Arenas et al., 1994 y Azuma et al., 2012). Podemos estimar el valor de k_a en las muestras de hielo con burbujas pertenecientes al trabajo de Wang et al. (2024) y Azuma et al. (2012) a -5°C , siguiendo el método teórico empleado en el trabajo de Di Prinzio et al. (2024). El método empleado en la obtención de k_a es presentado en **APÉNDICE C**.

Podemos notar en la tabla 1 que el valor de $M\gamma$ y k son un orden de magnitud más alto en la muestra S de este trabajo que en la muestra B a la misma presión. Esto puede deberse por la presencia de burbujas en la muestra B. Las muestras con burbujas tipo S tienen también valores de k inferiores a las muestras tipo S sin burbujas a la misma presión, demostrando el efecto retardador que tienen las burbujas en el crecimiento de grano. Las muestras sin burbujas tipo S tienen en general valores de k del mismo orden a pesar de tener diferentes presiones de estudio. Esto último indica que la presión afectaría menos que la presencia de burbujas al crecimiento de grano. No fue posible estimar una diferencia en el crecimiento de grano estudiado en el volumen con el estudiado en la superficie debido a la presencia de burbujas. Sin embargo se pudo comprobar el efecto retardador de las burbujas y la poca

influencia de la presión hidrostática sobre el crecimiento de grano.

Conclusiones

En este trabajo desarrolló un nuevo método experimental para poder observar y estudiar crecimiento de grano dentro de muestra policristalina sin efectos superficiales. Mediante este método experimental se estudió el crecimiento de grano en hielo bajo presión analizando la evolución de las áreas de los granos en la superficie y en el volumen de la muestra policristalina. Un algoritmo computacional basado en método de MC permitió además modelar el crecimiento de grano en hielo. La combinación del método experimental y numérico permite estudiar el crecimiento de grano en muestras de hielo sin granos pequeños y a cortos tiempos de recocido. Los resultados obtenidos de crecimiento de grano en las superficies y en el volumen de muestras policristalinas de hielo puro podemos enumerar las siguientes conclusiones:

1. A igual presión, la muestra tipo S presenta valores de $M\gamma$ y k aproximadamente un orden de magnitud superior a los de la muestra tipo B.
2. La menor magnitud de $M\gamma$ y k en la muestra B podría atribuirse a la presencia de burbujas, que alteran el comportamiento del crecimiento de grano.

3. Dentro del mismo tipo de muestra (S), aquellas que contienen burbujas presentan valores de k inferiores respecto a las que no las tienen, lo cual evidencia el efecto inhibidor de las burbujas sobre el crecimiento de grano.
4. Las muestras tipo S sin burbujas mantienen valores de k del mismo orden a pesar de estar sometidas a diferentes presiones, lo que sugiere que la presión tiene un impacto menor que la presencia de burbujas sobre el crecimiento de grano.

APÉNDICE:

A) Crecimiento de grano en 3D mediante el método de MC

Como fue presentado en los trabajos previos de Achaval P. et al (2018), Achaval P. et al (2021), Di Prinzio et al (2022) y Di Prinzio et al (2024) la simulación de MC seguía los siguientes pasos para sitios que pertenecen a uno de los cristales:

a) La energía total del policristal, W , está dada por:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^V J \left(1 - \delta_{S_i S_j} \right) \quad (1A)$$

Con S_i y S_j orientaciones de los sitios de la red i y j respectivamente, J la energía de interacción entre sitios, V el número de

vecinos al sitio i , y δ la función delta de Kronecker. El valor de V fue 26 en todas las simulaciones de MC. En forma aleatoria se elige un sitio de la red perteneciente a un grano denominado i con una orientación S_i . Mediante la ecuación (1A) se calcula la energía alrededor del sitio i :

$$W_i^{in} = \sum_{j=1}^V J \left(1 - \delta_{S_i S_j} \right) \quad (2A)$$

donde el supra índice in significa etapa inicial. En estas simulaciones numéricas J fue tomado igual a kT , donde K es la constante de Boltzmann y T es la temperatura del policristal

b) Luego, se reemplaza la orientación del sitio i (S_i) por la orientación (S_j) del sitio j obtenida aleatoriamente de sus vecinos que pertenecen a un grano.

c) Se calcula nuevamente la energía del sitio i , W_i^{fi} , donde el supra índice fi significa final.

d) Luego se calcula la diferencia de energías:

$$\Delta W_i = W_i^{fi} - W_i^{in} \quad (3A)$$

e) Si la ecuación (3A) resulta negativa o nula el cambio se produce permanentemente, y si es positiva se calcula una probabilidad P dada por:

$$P = e^{\frac{-\Delta W_i}{KT}} \quad (4A)$$

Para permitir que el sistema produzca cambios por activación térmica, se elige un número aleatorio, Z , entre 0 y 1, y se

compara con P . Si P es más grande que Z entonces se hace el cambio de S_i por S_j , en caso contrario no.

Este procedimiento se repite para cada sitio de la matriz de N sitios ($N_x \times N_y \times N_z = N$). Un ciclo completo representa un paso de MC representado por MCS.

Para poder relacionar los MCS con el tiempo real debemos realizar la simulación numérica de un bicristal circular. En la figura 1Aa y 1Ab se presentan la evolución inicial y 300 MCS de un cristal esférico con $R_0 = 50 \text{ pixels}$ y $J = kT$, respectivamente. En la figura 2A podemos ver $R^2 - R_0^2 \text{ vs. MCS}$. Sabemos teóricamente que para ese tipo de muestra 2D, el cuadrado del radio del círculo (R) es proporcional al tiempo y la constante de proporcionalidad es $2M\gamma$, donde $M\gamma$ es la difusividad del borde de grano (donde M es la movilidad y γ la energía del borde de grano). Realizada la simulación de un BG 2D en forma circular se obtuvo $M\gamma = 0.107 \text{ px}^2/\text{MCS}$.

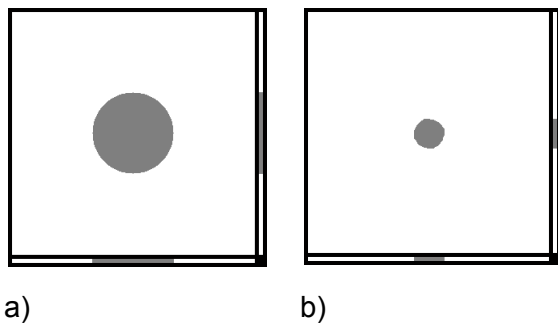


Figura 1A: a) BG circular inicial con $R_0 = 50 \text{ px}$ y $J = kT$, b) BG a los 300 MCS,

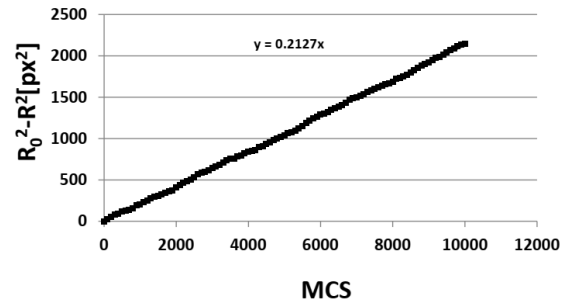


Figura 2A: $R^2 - R_0^2 \text{ vs. MCS}$.

B) Obtención de k mediante la simulación de MC para una muestra policristalina.

El diámetro medio de grano en un policristal sigue la ecuación (1) y mediante el algoritmo de MC usado en este trabajo puede obtenerse el valor de k con $n=2$.

En la figura 1B se presenta un policristal en los pasos a) MCS=100 y b) MCS=1000. El diámetro medio de los granos en función del MCS es presentado en la figura 2B.

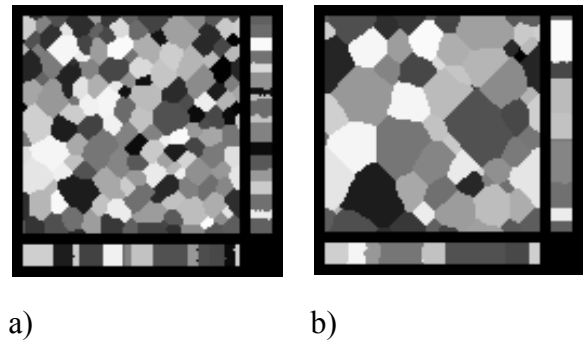


Figura 1B : Policristal 200x200x20 px en los pasos a) MCS=100 y b) MCS =1000.

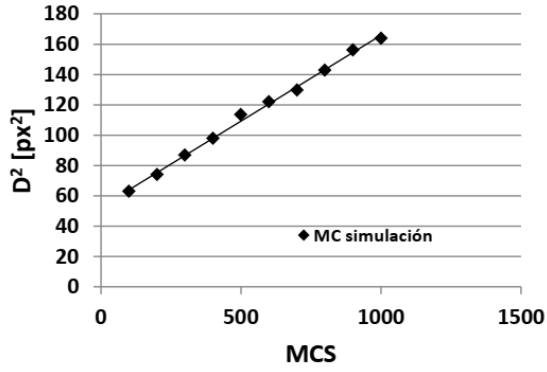


Figura 2B: Diámetro medio de los granos en función de MCS.

La evolución de un solo grano circular de radio inicial R_0 y el tamaño medio de los granos de un policristal pueden ser relacionados de acuerdo a Arena et al (1997) citando a Hillert (1965), Feltham (1955) y Ceppi y Nasello (1984), mediante la ecuación:

$$k = 2 \alpha M \gamma \quad 1B$$

Donde α es un parámetro adimensional que depende de los parámetros usados en la simulación.

Como se obtuvo que $k = 0.113 \text{ px}^2/\text{MCS}$ y en la parte A del APÉNDICE se obtuvo $M \gamma = 0.107 \text{ px}^2/\text{MCS}$, podemos encontrar que $\alpha \sim 0.5$

C) Obtención de los valores de k de datos de crecimiento de grano con burbujas de Wang et al. (2024) y Azuma et al.(2012):

Los valores del diámetro medio de los granos (D) en las muestras de hielo sin

burbujas por Wang et al. (2024) y Azuma et al (2012) fueron ajustadas por la ecuación (1) con $n = 2$ y el valor de k está presentado en la tabla 1.

Sin embargo los valores diámetro medio de los granos de las muestras con burbujas de Wang et al. (2024) y Azuma et al.(2012) fueron ajustados por la siguiente ecuación presentada por Di Prinzio (2024):

$$\frac{kt}{D_s(D_s - D_0)} = \frac{(D_0 - D)}{D_s} + \ln \left[\frac{(D_s - D_0)}{(D_s - D)} \right] \quad 1C$$

Donde D_0 y D_s son los diámetros medios iniciales y finales de los granos de la muestra de hielo con burbujas, t es el tiempo.

De dicha ecuación se obtiene el valor de k de la muestra de hielo con burbujas. Los valores de k son presentados en la tabla 1 donde AS, AM y AG indican muestras de hielo con burbujas pequeñas, medianas y grandes respectivamente. A modo de ejemplo se presenta los datos a -5°C de la muestra AS de Azuma et al (2012) con el ajuste por la ecuación (1C).

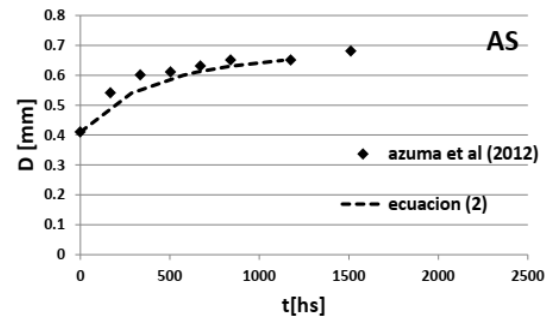


Figura 1C: Valores de D de Azuma et al (2012) para la muestra AS y el ajuste de la ecuación 1C.

Referencias Bibliográficas

Achával, P., & Di Prinzio, C. L. (2018). Crecimiento de grano tridimensional con partículas móviles usando método de Monte Carlo. *Revista Matéria*, 23(2), e12089.

doi:10.1590/s1517-707620180002.0423

Achával, P., & Di Prinzio, C. L. (2021). Drag effect of air bubbles on triple junction migration of pure ice. *Czech Polar Reports*, 11(2), 296-306.

Aguirre Varela, G., Di Prinzio, C. L., & Stoler, D. (2021). Study of ice surface: Effects on the tropospheric ice. *Polish Polar Research*, 42(4), 231-240.

Alley, R. B., & Woods, G. A. (1996). Impurity influence on normal grain growth in the GISP2 ice core, Greenland. *Journal of Glaciology*, 42(141), 255-260.

Alley, R. B., Perepezko, J. H., & Bentley, C. R. (1986a). Grain growth in polar ice: I. Theory. *Journal of Glaciology*, 32(112), 415-424.

Alley, R. B., Perepezko, J. H., & Bentley, C. R. (1986b). Grain growth in polar ice: II. Application. *Journal of Glaciology*, 32(112), 425-433.

Arena, L., Nasello, O. B., & Levi, L. (1997). Effect of bubbles on grain growth in ice. *The Journal of Physical Chemistry B*, 101(32), 6109-6112.

Azuma, N., & Higashi, A. (1983). Effects of the hydrostatic pressure on the rate of grain growth in Antarctic polycrystalline ice. *The Journal of Physical Chemistry*, 87(21), 4060-4064.

Azuma, N., Miyakoshi, T., Yokoyama, S., & Takata, M. (2012). Impeding effect of air bubbles on normal grain growth of ice. *Journal of Structural Geology*, 42, 184-193.

Bennett, M. R., & Glasser, N. F. (Eds.). (2011). *Glacial geology: Ice sheets and landforms*. John Wiley & Sons.

Ceppi, E. A., & Nasello, O. B. (1984). Computer simulation of bidimensional grain growth. *Scripta Metallurgica*, 18(11), 1221-1225.

DeBeer, C. M., Sharp, M., & Schuster-Wallace, C. (2020). Glaciers and ice sheets. [Nota: La información de la fuente original "World, 215(705,739), 1565" no pudo ser verificada y parece incorrecta. Se requiere la fuente original para una cita precisa].

Di Prinzio, C. L., & Achával, P. I. (2022). Theoretical and computer models of three-dimensional grain boundary migration with mobile particles. *Canadian Journal of Physics*, 100(4), 212-217.

- Di Prinzio, C. L., & Nasello, O. B. (1997). Study of grain boundary motion in ice bicrystals. *The Journal of Physical Chemistry B*, 101(39), 7687-7690.
- Di Prinzio, C. L., Achával, P. I., Druetta, E., & Aguirre Varela, G. A. (2024). Bubble grain growth in ice: Experiments and simulation. *Canadian Journal of Physics*, 102(10), 529-543. doi:10.1139/cjp-2023-0340
- Di Prinzio, C. L., Stoler Flores, D., Aguirre Varela, G. G., & Druetta, E. (2020). Superficial self-diffusion coefficient in Ih-ICE. *[Información de publicación incompleta]*.
- Duval, P., & Castelnau, O. (1995). Dynamic recrystallization of ice in polar ice sheets. *Le Journal de Physique IV*, 5(C3), C3-197.
- Fan, S., Prior, D. J., Pooley, B., Bowman, H., Davidson, L., Piazzolo, S., ... Hager, T. F. (2022). Grain growth of natural and synthetic ice at 0 °C. *The Cryosphere*, 16(10), 4213-4235.
- Fan, S., Wang, T., Prior, D. J., Breithaupt, T., Hager, T. F., & Wallis, D. (2025). Flow laws for ice constrained by 70 years of laboratory experiments. *Nature Geoscience*, 1-9.
- Feltham, P. (1957). Grain growth in metals. *Acta Metallurgica*, 5(2), 97-105.
- Gow, A. J. (1969). On the rates of growth of grains and crystals in South Polar firn. *Journal of Glaciology*, 8(53), 241-252.
- Hillert, M. (1965). On the theory of normal and abnormal grain growth. *Acta Metallurgica*, 13(3), 227-238.
- Jellinek, H. H. G., & Gouda, V. K. (1969). Grain growth in polycrystalline ice. *Physica Status Solidi (b)*, 31(1), 413-423.
- Kennedy, J. H., Pettit, E. C., & Di Prinzio, C. L. (2013). The evolution of crystal fabric in ice sheets and its link to climate history. *Journal of Glaciology*, 59(214), 357-373.
- Levi, L., & Ceppi, E. A. (1982). Grain growth in ice. *Il Nuovo Cimento C*, 5(4), 445-461.
- Mayewski, P. A., & Bender, M. (1995). The GISP2 ice core record—paleoclimate highlights. *Reviews of Geophysics*, 33(S2), 1287-1296.
- Nasello, O. B., & Di Prinzio, C. L. (2011). Anomalous effects of hydrostatic pressure on ice surface self-diffusion. *Surface Science*, 605(11-12), 1103-1105.
- Nasello, O. B., de Juarez, S. N., & Di Prinzio, C. L. (2007). Measurement of self-diffusion on ice surface. *Scripta Materialia*, 56(12), 1071-1073.
- Nasello, O. B., Di Prinzio, C. L., & Guzmán, P. G. (2005). Temperature dependence of “pure” ice grain boundary

mobility. *Acta Materialia*, 53(18), 4863-4869.

Pimienta, P., & Duval, P. (1987). Rate controlling processes in the creep of polar glacier ice. *Le Journal de Physique Colloques*, 48(C1), C1-243.

Roessiger, J., Bons, P. D., & Faria, S. H. (2014). Influence of bubbles on grain growth in ice. *Journal of Structural Geology*, 61, 123-132.

Roos, D. V. D. S. (1966). Two-dimensional grain growth in ice. *Journal of Glaciology*, 6(45), 411-420.

Wang, Q., Fan, S., & Qi, C. (2024). Grain growth of ice doped with soluble impurities. *The Cryosphere*, 18(3), 1053-1084.

Financiamiento

Este trabajo fue financiado por la Universidad Nacional de Córdoba, Argentina a través de la SECYT (PIP:32520230100023CB) y por CONICET (PIP12320220200113CO).

B. Eje Ciencias Humanas - 31. Tecnologías de la información y comunicación

Adopción de tecnologías digitales en las MIPYMES del Departamento de Concepción, Año 2024.

Autor: Dyrce Romina Maldonado Morales (dyrmorales@gmail.com) Co-autor(es): Aylin Araceli Ortellado (ayaraorte@gmail.com)

Orientadora: Mg. Angela Edda Litz Navarro (anavarro@fcea-unc.edu.py)

Universidad Nacional de Concepción / Facultad de Ciencias Económicas y Administrativas

RESUMEN

Este trabajo presenta un análisis descriptivo sobre la adopción de tecnologías digitales en las micro, pequeñas y medianas empresas del Departamento de Concepción durante el año 2024. Basado en datos secundarios provenientes del panel interactivo del Laboratorio de Aceleración de PNUD y el Ministerio de Industria y Comercio del Paraguay, se identifican los tipos de tecnologías más utilizadas, la frecuencia de uso y su impacto en la productividad, experiencia del cliente e innovación. Los resultados muestran que las MIPYMES se encuentran en un nivel Novato de digitalización, lo que indica una fase exploratoria de adopción y transición marcadas por el uso diario de herramientas digitales como ofimática, almacenamiento en la nube y canales de comunicación. Sin embargo, persisten desafíos como la falta de capacitación técnica y el bajo uso de herramientas avanzadas como ERP o CRM. Se concluye que la digitalización representa una oportunidad clave para que las MIPYMES mejoren sus procesos, reduzcan costos y se mantengan competitivas. Para ello, es necesario acompañar este proceso con estrategias de capacitación, acceso a financiamiento y políticas públicas que incentiven la transformación digital del sector.

Palabras clave: digitalización; MIPYMES; empresas

ABSTRACT

This paper presents a descriptive analysis of the adoption of digital technologies in micro, small and medium-sized enterprises in the Department of Concepción during the year 2024. Based on secondary data from the interactive panel of the UNDP Acceleration Lab and the Ministry of Industry and Commerce of Paraguay, the types of technologies most used, the frequency of use and their impact on productivity, customer experience and innovation are identified. The results show that MSMEs are at a Novice level of digitalization, which indicates an exploratory phase of adoption and transition marked by the daily use of digital tools such as office automation, cloud storage and communication channels. However, challenges such as lack of technical training and low use of advanced tools such as ERP or CRM persist. It is concluded that digitalization represents a key opportunity for MSMEs to improve their processes, reduce costs and remain competitive. To this end, it is necessary to accompany this process with training strategies, access to financing and public policies that encourage the digital transformation of the sector.

Keywords: digitalization; MSMEs; enterprises

INTRODUCCIÓN

En la actualidad gran parte de la competitividad mundial se basa en la utilización de las tecnologías, ya que estas permiten eficientizar los procesos tanto productivos como administrativos, disminuir costos de producción y transacción; además, son un potencializador para la ampliación de los mercados y el acceso a clientes y proveedores a distancia, por mencionar algunos beneficios. En un mundo cada vez más interconectado, las tecnologías digitales se han convertido en un factor clave para la competitividad empresarial. Las MIPYMES no son ajenas a esta

realidad y en el Departamento de Concepción, han comenzado a incorporar diversas herramientas tecnológicas que les permiten mejorar sus procesos internos, atender mejor a sus clientes e incluso innovar en su oferta. Sin embargo, este proceso no está exento de desafíos. La falta de capacitación, el costo de implementación y la resistencia al cambio siguen siendo obstáculos importantes.

OBJETIVO GENERAL

Analizar la adopción de tecnologías por parte de las MIPYMES en el Departamento de Concepción.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Identificar las principales tecnologías utilizadas por las MIPYMES del Departamento de Concepción.
2. Determinar el nivel de uso de estas tecnologías en los distintos procesos operativos de las empresas.
3. Establecer la relación entre el uso de tecnologías de la información y las iniciativas de innovación en productos, servicios o procesos

La adopción tecnológica en las MIPYMES ha sido objeto de estudio por numerosos investigadores, según Hernández y Pérez (2023), la digitalización permite a las pequeñas empresas mejorar su eficiencia operativa al automatizar procesos y optimizar la gestión de recursos. Estos autores indican que la incorporación de tecnologías no solo es una herramienta para mejorar la productividad, sino también un catalizador para la innovación y el desarrollo de nuevos productos y servicios.

López y Díaz (2024) argumentan que la adopción de tecnologías en las MIPYMES tiene un impacto directo en la reducción de costos operativos, lo que puede traducirse en un aumento significativo de la rentabilidad. Este hallazgo es consistente con los resultados del presente estudio,

donde la mayoría de las empresas encuestadas reconocen una reducción en los costos tras la digitalización de sus procesos.

Por otro lado, García y Martínez (2024) señalan que la resistencia al cambio y la falta de capacitación son barreras comunes en la adopción de tecnologías en las MIPYMES.

Esto se refleja en los desafíos reportados por las empresas de Concepción, donde el mantenimiento, la actualización continua y la capacitación del personal emergen como preocupaciones clave. En Paraguay, las micro, pequeñas y medianas empresas (MIPYMES) representan el 98% del tejido empresarial del país (Urquidí, Feal Zubimendi, Serrate, & García, 2023) y son fundamentales para la generación de empleo y el desarrollo local. Sin embargo, enfrentan desafíos significativos: informalidad, baja productividad y rezago en la adopción de tecnologías digitales. Estas limitaciones no solo afectan su competitividad, sino que también restringen su capacidad para crecer y acceder a mercados más amplios. Estudios recientes (OCDE, 2006) señalan que las tecnologías representan una parte significativa de la inversión mundial y un cuarto del crecimiento del producto interno bruto de la Unión Europea y el 40% del

incremento de su productividad se debe al uso de las TIC. Las empresas que no adopten tecnología quedarán rezagadas con respecto a sus competidores (Cotera et al., 2015). Pero las empresas en general, y las micro, pequeñas y medianas empresas (MIPYMES) en particular enfrentan una serie de inconvenientes relacionados a la adopción y a la implementación efectiva de las tecnologías digitales. Estos inconvenientes están relacionados por un lado con la tecnología misma y por otro lado con el negocio de los distintos sectores productivos (Harindranath, Dyerson et al., 2008). La necesidad de supervivencia de las organizaciones en los entornos competitivos actuales constituye el objetivo más frecuente para que las microempresas se enfoquen en la adopción de las tecnologías (Antlova, 2009; Almubarak, 2017).

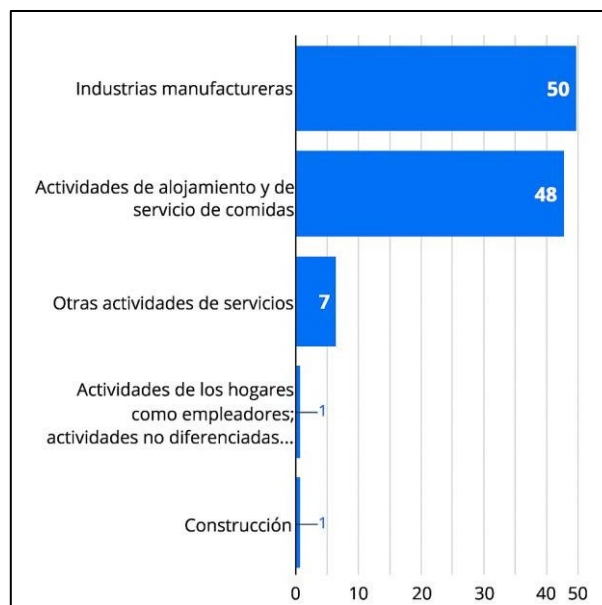
MATERIALES Y MÉTODOS

La investigación se llevó a cabo utilizando un enfoque cuantitativo, de nivel descriptivo y diseño no experimental, la investigación utilizó una base de datos provenientes del panel interactivo del Laboratorio de Aceleración del PNUD. Los datos provienen de la encuesta Chequeo Digital implementado en Paraguay mediante la iniciativa Local Digital

impulsada por el PNUD en alianza con el Viceministerio de MIPYMES del Ministerio de Industria y Comercio (MIC) y el Banco Interamericano de Desarrollo (BID), en el marco del nuevo Portafolio del Ecosistema emprendedor en Paraguay. La encuesta fue aplicada por el Centro de Atención al Emprendedor (CAE) con participación de estudiantes y docentes encuestadores de la Facultad de Ciencias Económicas y Administrativas de la UNC en el marco del ecosistema emprendedor en territorio, en las ciudades de Concepción y Horqueta en el año 2024. Del diagnóstico participaron 107 MIPYMES nucleadas en los CAEs de Horqueta y Concepción.

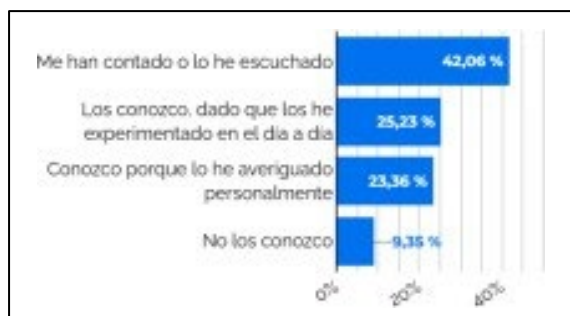
RESULTADO

Gráfico N° 1 Principales sectores de actividad.



Los rubros con mayor interacción directa con clientes priorizan herramientas digitales para mejorar la experiencia de usuario.

Gráfico N° 2 Conocimiento de los beneficios de las tecnologías digitales en las empresas



En gran proporción manifestaron poseer un conocimiento indirecto lo que indica interés por las herramientas digitales para negocios.

Gráfico N° 3 Programas y/o aplicativos más usados en las empresas.

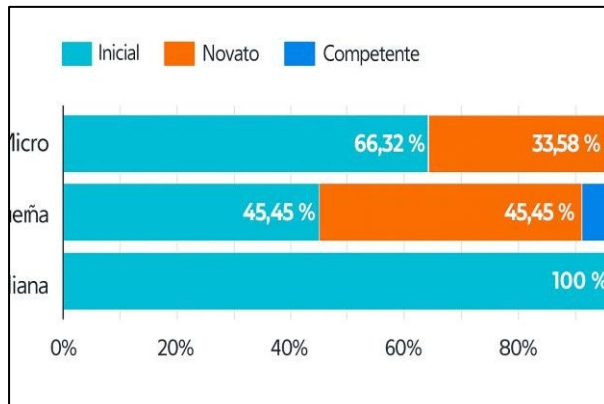
ERP: Finanzas, cadena de suministro, operaciones, recursos humanos.	4.67%
Tareas: Confluence, Asana, Slack, ClickUp, Planner, Trello.	3.74%
Avanzadas: IA, machine learning, blockchain, asistentes virtuales.	2.8%
Optimización: Idea Drop, Miro, Meister.	1.87%

(22,43%) y plataformas de comunicación (11,22%). Aplicaciones más especializadas como CRM, ERP o e-commerce presentan un uso bajo y, en muchos casos, esporádico, siendo más frecuentes en tareas puntuales como campañas de marketing o reuniones estratégicas.

Aplicativo utilizado Porcentaje de empresas (%)	
Ofimática: Word, Excel, PowerPoint, Docs, Sheets, Slides.	50.47%
Ninguno de los anteriores	35.51%
Nube: Google Drive, OneDrive, Dropbox.	22.43%
Comunicación: Zoom, Skype, Teams, Discord, Webex, Bluejeans.	11.22%
E-commerce: Shopify, Ecwid, GoDaddy, Wix.	8.41%
Seguridad: Avast, Norton, McAfee, Kaspersky, Eset, Malwarebytes.	8.41%
Marketing: Hubspot, Marketing Hub, Mailchimp.	8.41%
Contabilidad: Sage Accounting, Odoo, Wave.	6.54%
CRM: Bitrix24, HubSpot, Odoo.	5.61%

La ofimática lidera con un 50,47% de uso, seguida por herramientas en la nube

Gráfico N° 4 Madurez digital por tamaño de la empresa.



Las empresas medianas presentan un mayor grado de madurez digital en comparación con micro y pequeñas empresas, evidenciando que la disponibilidad de recursos influye directamente en la adopción de tecnologías avanzadas y el acceso a financiamiento y conocimiento del propietario del negocio sobre las herramientas digitales.

Las áreas de mejora más señaladas son invertir en marketing digital (64,42%), capacitar al personal en temas tecnológicos (39,42%) y contratar técnicos especializados (26,92%). Esto refleja la necesidad de combinar infraestructura con capital humano calificado.

Gráfico N° 5 Mejoras a implementar según porcentaje de empresas.

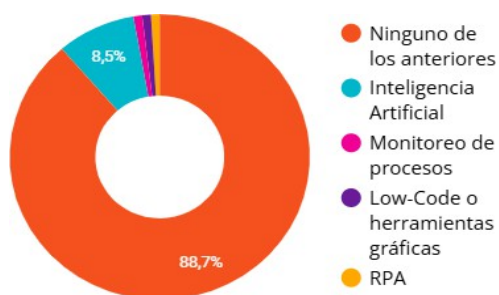
Mejora a implementar	Porcentaje de empresas (%)
Invertir en marketing digital	64.42%
Capacitar al personal en temas tecnológicos	39.42%
Contratar a algún técnico o profesional del área tecnológica	26.92%
Renovar hardware (computadoras, servidores)	20.19%
Adquirir o actualizar software	20.19%
Desarrollar o actualizar el sitio web institucional	19.23%
Ninguno de los anteriores	15.38%
Usar o actualizar sistemas en la nube	11.54%
Usar comercio electrónico	11.54%
Analizar las métricas de sus canales digitales (ventas-productos-clientes entre otros)	9.62%
Crear cuentas de redes sociales	8.65%
Contratar una conexión Internet acorde a las necesidades de la empresa	7.69%
Desarrollar interoperabilidad entre sus sistemas informáticos	4.81%

Gráfico N° 6 Utilización de tecnologías digitales para modificar procesos, bienes o servicios.

Resultado de la aplicación de la tecnología digital	Porcentaje de empresas
No hemos utilizado tecnologías digitales para modificar productos o procesos	52,9 %
Hemos mejorado al menos un bien/servicio	34,6 %
Hemos mejorado al menos un proceso	14,4 %
Hemos puesto en marcha al menos un proceso nuevo	13,5 %
Hemos introducido al mercado al menos un nuevo bien/servicio	5,8 %

La utilización de tecnologías para modificar procesos, bienes o servicios es aún incipiente en las empresas del Departamento.

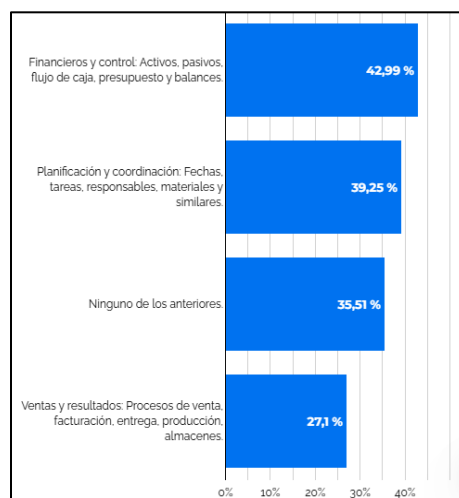
Gráfico N° 07 Tecnologías digitales utilizadas para la automatización inteligente.



El uso de tecnologías de automatización inteligente sigue siendo bajo, la región se encuentra en fase de exploración con herramientas de IA, mientras que la mayoría de las empresas no utiliza

recursos digitales para este proceso.

Gráfico N° 8 Procesos en los que la empresa recopila información.



La mayoría de las empresas recopila información en procesos administrativos y de ventas, lo que sugiere un enfoque en estas áreas críticas para la gestión del negocio.

Gráfico N° 09 Herramientas que se utiliza para recopilar y gestionar la información de proceso.



En el gráfico se puede visualizar que predominan herramientas en la nube y hojas de cálculo, lo que indica que existe una transición hacia soluciones digitales con espacio para incorporar sistemas más integrados.

DISCUSIÓN

La adopción de tecnologías digitales en las MIPYMES de Concepción revela leves avances como barreras persistentes, en línea con los estudios teóricos sobre la transformación digital en pequeñas empresas. Según autores como Pérez y Torres (2021), la adopción de herramientas tecnológicas es esencial para reducir Costos operativos y mejorar la

competitividad.

En este contexto, los resultados obtenidos reflejan una tendencia positiva, donde las empresas van transitando hacia la digitalización en forma incipiente algo que coincide con lo señalado por Hernández y García (2022), quienes destacaron que la integración de tecnologías permite a las empresas acceder a nuevas oportunidades de mercado. No obstante, la resistencia al cambio y los costos de implementación siguen siendo desafíos recurrentes. Vargas y Acosta (2022) explican que esta resistencia suele estar indicada a la falta de una cultura de innovación y de formación del personal, un fenómeno claramente observable en las MIPYMES del departamento, donde la falta de capacitación surge como una barrera significativa para la adopción de tecnologías. Este obstáculo se ve afectado por la percepción de los altos costos de mantenimiento y actualización continua. Por otro lado, el impacto de las tecnologías en el área de ventas y la experiencia del cliente es notable. Mejía y Ortega (2023) sostienen que las empresas que implementan tecnologías digitales pueden ofrecer experiencias más personalizadas, lo que a su vez mejora la satisfacción y fidelización de los clientes. Los datos obtenidos en este estudio respaldan esta afirmación, ya que muchas empresas

reportaron una mejora en la percepción de la calidad del servicio tras la adopción tecnológica. Sin embargo, se observan aún muchas empresas con escasa o nula digitalización de procesos lo que podrían representar obstáculos para las actividades operativas y la competitividad de las mismas, tal como lo sugieren Muñoz y Sánchez (2022).

Finalmente, la capacidad de innovación de las MIPYMES, potenciada por la adopción de tecnologías, es un aspecto fundamental. García y Martínez (2024) subrayan que la digitalización no solo permite optimizar procesos existentes, sino que también impulsa la creación de nuevos productos y servicios, algo que también se observó en los resultados de este estudio. Las empresas que han adoptado tecnologías han sido capaces de innovar en su oferta, mejorando así su posición competitiva.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos muestran que las MIPYMES en la ciudad de Concepción se encuentran en la fase Novato, es decir recién explorando y descubriendo la tecnología, adoptando en algunas áreas o procesos como son las áreas de venta, clientes y el área administrativa, las empresas utilizan alguna forma de

tecnología, lo que ha llevado a mejoras en los servicios prestados y productos ofrecidos. Sin embargo, no todas las empresas han percibido estos beneficios de manera uniforme. Algunas enfrentan desafíos como el alto costo de implementación, la necesidad de formación, el tamaño de la misma empresa, entre otros. Estos factores limitan el potencial de las tecnologías para generar un impacto positivo más amplio y relevante en estas empresas. A pesar de estos desafíos, la mayoría de los propietarios y gerentes de las MIPYMES reconoce la importancia de seguir invirtiendo en tecnologías digitales, no solo para mejorar su desempeño operativo, sino también para innovar en sus productos y servicios.

REFERENCIAS

Almubarak, S. (2017). Factores que influyen en la adopción de la computación en la nube por parte de los hospitales universitarios sauditas. *Revista internacional de aplicaciones y ciencias informáticas avanzadas*, 8(1), 41–48. Disponible en:
<https://pdfs.semantecnologíasscholar.org/8edf/3d966bc9d87733200b78b6aa656270bcefa5.pdf>

- Antlova, K. (2009). Motivación y barreras para la adopción de TIC en pequeñas y medianas empresas. *Economía y Gestión*, 12(2), 140–155. Disponible en: <http://www.ekonomiemanagement.z/en/archiv/%5Cnhttp://search.ebscohost.com/login.aspx?direct=true&db=ecn&AN=1047298&site=ehost-live>
- Barrios, A., & Cruz, M. (2022). Transformación digital en las MIPYMES latinoamericanas: Retos y oportunidades. Editorial Universitaria.
- Castellanos, F., & Díaz, J. (2023). Innovación tecnológica y eficiencia operativa en las pequeñas empresas. *Revista de Economía y Negocios*, 15(2), 34-56.
- Castillo, J. (2020). Tecnologías digitales y productividad en las MIPYMES: Un análisis en mercados emergentes. *Revista de Economía y Negocios*, 12(3), 45-61.
- Contreras, M., & López, P. (2022). Innovación tecnológica en MIPYMES latinoamericanas: Estrategias y desafíos. *Revista de Innovación Empresarial*, 18(2), 27
- 40.
- Cotera, E., Zavala, M., Ruiz, A., & Rodríguez, M. (2015). La Adopción de Tecnologías permite a las PYMES Incrementar la Competitividad. Congreso Internacional de Investigación Academia Journals Córdoba 2015, 3, 150–157.
- Flores, L., & Martínez, A. (2021). Productividad y tecnología en las MIPYMES: Un enfoque práctico. *Journal of Business Management*, 19(1), 22-38.
- García, L., & Martínez, P. (2024). La digitalización como motor de innovación en las MIPYMES. *Journal of Business Innovation*, 12(1), 22-35.
- Harindranath, G., Dyerson, R., & Barnes, D. (2008). ICT Adopción y uso en PYME del Reino Unido. ¿Un fracaso de las iniciativas? *Revista Electrónica de Evaluación de Sistemas de Información*, 11(2), 91–96. Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/228858188_ICT_adoption_and
- López, J., & Hernández, S. (2024). Barreras para la adopción de

tecnologías en las MIPYMES de América Latina. Estudios Latinoamericanos de Negocios, 19(3), 89-104.

Mejía, P., & Ortega, J. (2023). La experiencia del cliente en la era digital: Un estudio sobre el impacto de las TIC en las MIPYMES. Journal of Customer Experience, 11(2), 18-34.

MIC (2024) Chequeo Digital <https://chequeodigital.mipymes.gov.py/>

Muñoz, V., & Sánchez, L. (2022). El rol de las tecnologías digitales en la mejora de la experiencia del cliente en las pequeñas use_in_UK_SMEs_a_failure_of_init iatives

Hernández, C., & García, R. (2022). Adopción de tecnologías en las MIPYMES de América Latina: Retos y oportunidades. Estudios de Gestión Empresarial, 14(4), 50-72.

Hernández, M., & Pérez, R. (2023). Transformación digital y eficiencia en las MIPYMES: Un análisis crítetecnológico. Revista de Estudios Empresariales, 8(3), 45-60. empresas. Revista de

Mercadotecnia, 21(1), 55-70.

OCDE. (2006). "Tecnologías de la Información y de la Comunicación". Perspectivas de la OCDE sobre la tecnología de la información. [Versión electrónica]. Paris. Consultado el 16 de diciembre de 2012. www.oecd.org/bookshop/

Pérez, ., & Torres, A. (2021). La transformación digital en las MIPYMES: Desafíos actuales y futuros en América Latina. Journal of Digital Business, 17(1), 33-49.

Pérez, E., & Torres, A. (2023). Capacitación y soporte: Claves para la transformación digital en las pequeñas empresas.

Revista de Gestión Empresarial, 9(4), 45-60.

PNUD. Laboratorio de Aceleración (2024) https://lookerstudio.google.com/reporting/7b69a928-023f-40c0-81afc49fca824982/page/p_lxdhugaund

Rodríguez, F., & Villalobos, E. (2020). Innovación tecnológica en las MIPYMES: Un enfoque estratégico para la competitividad.

Revista de Estrategias Empresariales, 15(3), 78 92.

Banco Interamericano de Desarrollo División de Mercados Laborales

Departamento de Países del Cono
Sur. Recuperado de
<https://publications.iadb.org/es/publications/spanish/viewer/Mercado-laboral-y-empleo-en-las-micro-pequenas-y-medianas-empresas-de-Paraguay-efectos-de-la-pandemia-y-la-postpandemia-de-la-COVID-19.pdf>

Urquidi, M; Feal-Zubimendi, S; Serrate, L;
García, D. (2023) Mercado laboral y
empleo en las micro, pequeñas y
medianas empresas de Paraguay:
efectos de la pandemia y la
postpandemia de la Covid

Vargas, M., & Acosta, R. (2022).
Resistencia al cambio y adopción
de tecnologías en las MIPYMES.
Cuadernos de Administración,
10(2), 78-92.

29.- Matemática aplicada

Un enfoque del Moments Subset Sum Problem mediante sistemas de ecuaciones diagonales sobre cuerpos finitos

Autor: Gottig, Juan Francisco; gottig21@gmail.com

Orientadoras: Pérez, Mariana; mariana.perez@unahur.edu.ar; Privitelli, Melina;
melina.privitelli@unahur.edu.ar

Universidad Nacional de Hurlingham / Laboratorio de Investigación en Geometría y Álgebra
(LIGA)

Resumen

Sea F_q el cuerpo finito con q elementos. Sean m, k enteros positivos, $b \in F_q^m$ y $D \subset F_q$ con $k \leq |D|$. Nuestro objetivo es determinar la existencia de un subconjunto $S \subset D$ de cardinalidad k tal que:

$$\sum_{a \in S} a^i = b_i \text{ para } i=1, \dots, m.$$

Este problema es conocido como el *moments subset sum problem* (SSP). Proponemos un enfoque novedoso al establecer una conexión entre la existencia de tal subconjunto S y el problema de determinar si cierto sistema de ecuaciones diagonales admite al menos una solución racional con coordenadas distintas. Para ello, estudiamos algunas propiedades geométricas relevantes del conjunto de soluciones de dicho sistema. Este análisis nos permite obtener estimaciones sobre el número de soluciones racionales de sistemas de ecuaciones diagonales, y aplicamos estos resultados posteriormente para abordar el MSSP.

Palabras clave: Subset Sum Problem, Cuerpos Finitos, Ecuaciones Diagonales.

Introducción

Sea F_q el cuerpo finito con q elementos. Sean m, k enteros positivos, $b := (b_1, \dots, b_m) \in F_q^m$ y D un subconjunto no vacío de F_q con $k \leq |D|$. Definimos $N_m(k, b, D)$ como el número de subconjuntos $S \subset D$ de cardinal k tales que:

$$\sum_{a \in S} a^i = b_i \text{ para } i = 1, \dots, m.$$

Por ejemplo, si $q = 7$, $D = F_7$, $k = 2$, $b = (3)$ y $m = 1$, entonces $N_1(2, b, F_7)$ representa la cantidad de pares (a_1, a_2) con $a_1, a_2 \in F_7$ tales que

$$a_1 + a_2 = 3$$

En este caso es sencillo ver que $N_1(2, b, F_7) = 14$.

El problema, conocido como el *moments subset sum problem* (SSP de ahora en adelante), consiste en determinar bajo qué condiciones $N_m(k, b, D)$ es positivo.

Este problema tiene aplicaciones relevantes en teoría de códigos y criptografía. Por ejemplo, cuándo $D = F_q$ está relacionado con el *deep hole problem* en los códigos extendidos de Reed-Solomon. Este tipo de problemas ha sido estudiado en distintos contextos, principalmente cuando $m = 1$. En particular, existen fórmulas exactas para el número de soluciones en el caso en que $D = F_q$ o subconjuntos particulares, y también estimaciones asintóticas para $F_q - D$

pequeño. Sin embargo, para valores mayores de m la literatura es más escasa. En este trabajo nos centramos en el caso particular en que q es primo y $D = F_q$. Exploramos cómo herramientas geométricas permiten obtener nuevos resultados sobre la cantidad de soluciones. Para ello relacionaremos el SSP con el problema de estimar el número de soluciones F_q racionales de un sistema de ecuaciones diagonales, es decir, ecuaciones polinómicas en las que cada término involucra solo una variable elevada a una potencia: por ejemplo $X_1^2 + X_2^2 + X_3^2 = b_1$.

Hay pocos resultados generales para sistemas de este tipo. Existen algunos para casos con dos ecuaciones, y otros en los que los exponentes coinciden en columnas.

En este trabajo estudiamos el caso en que los exponentes están igualados en filas. Nuestro enfoque es novedoso ya que utilizaremos herramientas de geometría algebraica mientras que en la mayoría de los resultados existentes en la literatura abordan el problema mediante el estudio de suma de caracteres o sumas exponenciales.

Es un problema abierto aún estudiar el SSP para un conjunto D genérico.

Además de los resultados teóricos, incluimos simulaciones computacionales que permiten comparar el número real de soluciones en ejemplos concretos con las

cotas obtenidas. Estas simulaciones ilustran tanto la precisión del método como la forma en que varía el comportamiento del SSP según los parámetros elegidos.

El artículo se organiza de la siguiente manera. En la Sección 2 se presentan los objetivos de esta investigación. En la Sección 3 describimos las herramientas metodológicas utilizadas. En la Sección 4 se discuten los resultados teóricos y las simulaciones correspondientes. Finalmente, en la Sección 5 se exponen las conclusiones generales del trabajo.

Objetivos

El objetivo general de este trabajo es estudiar, utilizando las herramientas de la geometría algebraica, una versión particular del *moments subset sum problem* en cuerpos finitos. Más precisamente, el objetivo es identificar las condiciones que garantizan $N_m(k, b, D)$ dentro de determinadas familias de parámetros.

Para alcanzar este objetivo general, se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Reformular el problema como un sistema de ecuaciones polinómicas sobre F_q y establecer su interpretación geométrica como variedad algebraica.
- Obtener una cota teórica sobre la cantidad de soluciones racionales

en el caso particular en que q es primo y $D = Fq$.

- Comparar la cota obtenida con datos experimentales arrojados por las simulaciones computacionales.
- Analizar la relación entre los parámetros m , k y q , y su influencia en la existencia o no de soluciones.

Materiales y Métodos

Las simulaciones computacionales se realizaron utilizando el lenguaje de programación Python, aprovechando su ecosistema de librerías científicas. En particular, se utilizaron las siguientes bibliotecas:

- **galois**: para la construcción y manipulación de cuerpos finitos.
- **scipy**: para el cálculo de coeficientes binomiales y otras funciones especiales.
- **random** y **math**: para generación de datos aleatorios y operaciones numéricas básicas.
- **csv**: para el almacenamiento y exportación de los resultados obtenidos en formato de hojas de cálculo.

El código fue ejecutado en una computadora personal con sistema

operativo Windows 11, procesador Ryzen 5 y 16 GB de RAM. Los tiempos de ejecución varían en función de los parámetros del problema. La complejidad es del orden de $\left(\frac{q}{k}\right)$ considerando un m fijo.

El programa fue implementado de forma modular, permitiendo variar fácilmente los parámetros q , m y k , así como los vectores de términos independientes $\mathbf{b}$ y de exponentes $\mathbf{e}$. El mismo está organizado en torno a una clase principal que representa al sistema de ecuaciones y permite computar exactamente la cantidad de soluciones, utilizando fuerza bruta.

Para nuestro recorte particular del problema, una instancia queda completamente determinada al fijar los siguientes parámetros:

- Un cuerpo finito F_q , (para el cual seleccionamos algún q primo).
- Dos enteros positivos k y m que representan la cantidad de variables y de ecuaciones respectivamente.
- Un vector $\mathbf{b} := (b_1, \dots, b_m) \in F_q^m$ de términos independientes.

Cada instancia define un sistema de ecuaciones de la forma:

$$X_1 + \dots + X_k = b_1; X_1^m + \dots + X_k^m = b_m$$

Para las instancias del problema seleccionadas se calculan dos valores. Por un lado, el número exacto de soluciones, es decir, la cantidad de subconjuntos

$S \subset F_q$ cuyos elementos satisfacen las ecuaciones correspondientes. Y, por otro lado, la estimación teórica propuesta en este trabajo.

Una solución válida es un subconjunto $S \subset F_q$ de cardinal k tal que la suma de las potencias indicadas de los elementos de S coincide con el vector $\mathbf{b}$ para cada una de las m ecuaciones. La búsqueda de estas soluciones es mediante fuerza bruta iterando sobre todos los subconjuntos posibles de tamaño k . Los resultados se almacenan en archivos .csv en el que se indican los parámetros de la instancia y los resultados obtenidos para dichos parámetros. Esta organización permite comparar la precisión de las estimaciones frente a los valores reales para una amplia variedad de rangos de parámetros.

Con el objetivo de analizar cómo influyen distintos parámetros en la existencia y cantidad de soluciones del problema SSP, se definieron tres ejes principales de experimentación. En todos los casos, se trabajó con un vector fijo de términos independientes manteniendo constante la estructura del sistema.

Se realizaron los siguientes barridos de parámetros:

- **Variación de k :** Se fijaron los valores $m = 2$ y $q = 17$, y se exploraron distintos tamaños de subconjunto k . El objetivo fue observar cómo afecta la cantidad

de variables al número total de soluciones, manteniendo el resto del sistema inalterado.

- **Variación de q:** Se fijaron los valores $m = 2$ y $k = 3$ y se utilizaron distintos cuerpos finitos F_q con q primo. Esta exploración busca captar la influencia del tamaño del cuerpo sobre el problema.
- **Variación de m:** Se tomaron distintas combinaciones de q y k pues en los casos observados para $m = 3$ ya no había soluciones. Esta elección apunta a entender cómo el número de ecuaciones impone restricciones adicionales sobre el conjunto de soluciones.

Esta estrategia experimental permite estudiar de forma controlada el efecto de cada parámetro clave del modelo, respetando las hipótesis teóricas asumidas y permitiendo comparar los resultados empíricos con las cotas propuestas.

Las simulaciones realizadas presentan ciertas restricciones derivadas tanto del comportamiento del problema como de limitaciones computacionales. En primer lugar, se observó que para $m = 3$ ya no existían soluciones para muchos casos, lo que dificultó la exploración de valores mayores de m . Esta situación podría haberse compensado utilizando cuerpos finitos de mayor tamaño, pero ello implicaría un costo computacional

considerable, dado que la cantidad de subconjuntos a evaluar crece rápidamente con q .

En efecto, el algoritmo utilizado es de tipo fuerza bruta, con una complejidad que escala aproximadamente como $\left(\frac{q}{k}\right)$ para m fijo. Por esta razón, solo fue factible trabajar con valores moderados de q y k , lo que acota el rango de parámetros experimentales explorados. Esta limitación impide realizar un análisis exhaustivo sobre regiones más amplias del espacio de parámetros, aunque los casos seleccionados son suficientes para ilustrar los fenómenos que se desean estudiar.

A continuación, se presenta un esquema simplificado del algoritmo utilizado:

Entrada: q, m, k, b

1. Inicializar el cuerpo finito F_q .
2. Generar todos los subconjuntos $S \subseteq F_q$ de tamaño k .
3. Para cada subconjunto S :
 - a. Calcular la suma de las potencias de los elementos de S :

$$\left(\sum_{a \in S} a^{e_1}, \sum_{a \in S} a^{e_2}, \dots, \sum_{a \in S} a^{e_m}\right)$$
 - b. Comparar con el vector $\mathbf{b}$.
 - c. Si coinciden, contar como solución.
4. Devolver el número total de soluciones.

El recorrido de subconjuntos se realiza de manera eficiente sin repeticiones, y se validan previamente las condiciones necesarias sobre los parámetros para asegurar que la instancia del problema es

válida. Además de contar soluciones, la implementación permite comparar los resultados exactos con estimaciones teóricas propuestas en este trabajo.

El SSP en términos geométricos

Es posible reformular el SSP como un sistema de ecuaciones polinómicas. En particular si $S \subset Fq$ entonces buscamos que se verifiquen las ecuaciones:

$$X_1^i + \dots + X_k^i = b_i \text{ para } i = 1, \dots, m$$

Con esta consideración podemos reinterpretar el SSP como el problema de buscar soluciones Fq -rationales (es decir, soluciones con coordenadas en Fq) a un sistema de ecuaciones diagonales. Sin embargo, hemos de hacer la salvedad de que no todas las soluciones nos interesan. En particular, nos interesan las soluciones sin coordenadas repetidas y hemos de contar las distintas permutaciones de soluciones como una sola. Por ejemplo, si $(1,2,3)$ es una solución del sistema también lo serán $(3,2,1)$ y $(2,3,1)$. Sin embargo, todas estas soluciones representan un único subconjunto con lo que deben considerarse como una única solución válida al momento de estimar $N_m(k, b, D)$. Nos concentramos en la variedad definida por los polinomios asociados al sistema y probando ciertas propiedades geométricas de la misma podemos usar una adaptación de la cota de (Ghorpade y Lachaud, 2002) [3] para estimar la cantidad de puntos Fq racionales. Esta adaptación involucra

diversas técnicas combinatorias que nos permiten reflejar adecuadamente la naturaleza del problema. A partir de esta construcción y suponiendo $D = Fq$ obtenemos una nueva estimación teórica para el número de soluciones válidas. Para simplificar la notación en adelante notaremos este valor como $N_m(k, b)$, entendiendo que $D = Fq$.

Resultados y Discusión

En la sección anterior vimos cómo una instancia del SSP puede asociarse a un sistema de ecuaciones polinómicas. Si consideramos la variedad V definida por dichos polinomios, podemos demostrar la siguiente estimación para el número de puntos Fq -rationales:

$$\left| |V(Fq)| - q^{k-m} \right| \leq \left(\frac{7}{2} m^2 \right)^{k+1} q^{\frac{k}{2}}$$

bajo la condición $m \leq \frac{k-1}{2}$.

No existen resultados previos en la literatura que traten este tipo específico de sistemas. Sin embargo, este orden de error coincide con el obtenido en, (Perez y Privitelli, 2022) [2] donde se estudia un caso particular en el que los exponentes se repiten en columnas.

Es importante remarcar que este resultado no es directamente aplicable al SSP, ya que los puntos Fq -rationales de V no pueden ponerse en biyección con los subconjuntos buscados en el problema. No obstante, constituye un punto de partida sólido: mediante técnicas combinatorias

adicionales, esta cota podrá adaptarse para obtener una estimación específica para el SSP.

Para poder aplicar una versión adaptada de la cota de (Ghorpade y Lachaud, 2002) [3] al caso que nos interesa, resulta necesario comprobar que la variedad afín V definida por las ecuaciones asociadas al SSP satisface una colección de propiedades geométricas estructurales.

Bajo la hipótesis $m \leq \frac{k-1}{2}$ demostramos las siguientes propiedades.

Propiedades afines:

- La dimensión del lugar singular de V es menor o igual a $m-1$. En particular la codimensión del lugar singular es al menos 2.
- El ideal generado por las ecuaciones que definen V , $\langle f_1, \dots, f_m \rangle$ es radical.
- V es una intersección completa de dimensión pura $k-m$ y grado acotado por $m!$.

Notemos por $PCL(V)$ a la clausura proyectiva de V . Por definición $PCL(V) = V((f_1, \dots, f_m)^h) \subset P^k$.

- $PCL(V) = V((f_1^h, \dots, f_m^h)) \subset P^k$ es una intersección completa absolutamente irreducible de dimensión $k-m$ y grado $m!$.
- El lugar singular de $PCL(V)$ tiene codimensión al menos 2.

- La parte en el infinito $V_\infty = PCL(V) \cap \{x_0 = 0\} \subset P^{k-1}$ es una intersección completa absolutamente irreducible de dimensión $k-m-1$ cuyo lugar singular tiene codimensión al menos dos.

El punto clave para establecer estas propiedades fue acotar la dimensión del conjunto $C = \{x \in V \mid Rg(J_x) < m\}$ donde $Rg(J_x)$ es el rango del jacobiano asociado al sistema evaluado en x .

Además de la demostración teórica, se realizaron comprobaciones en Sage para varios casos concretos. En ellas se calculó la dimensión de C y se observó que coincidía con los límites teóricos, lo que constituye una confirmación empírica en instancias particulares.

Para pasar de la cota obtenida para la variedad V a una estimación aplicable al SSP, es necesario abordar dos cuestiones fundamentales.

La primera es eliminar las permutaciones de soluciones. Dado que el sistema es simétrico, si $(1,2,3)$ es una solución, también lo serán $(3,2,1)$, $(2,3,1)$ y, en general, todas las $k!$ permutaciones posibles. Sin embargo, todas ellas corresponden al mismo subconjunto de F_q . Por lo tanto, basta con dividir la cantidad de soluciones F_q -racionales por $k!$ para obtener el número de subconjuntos distintos.

La segunda cuestión es más sutil. Hemos de excluir las soluciones con coordenadas repetidas. Por ejemplo, la terna (1,1,2) podría satisfacer el sistema de ecuaciones, pero no representa un subconjunto de tamaño k , y por lo tanto no debe contabilizarse en $N_m(k, b)$. Para resolver este punto, empleamos una fórmula que relaciona el número de puntos con coordenadas no repetidas con ciclos, permutaciones y una cierta variedad auxiliar. Descomponiendo esta fórmula y aplicando diversas técnicas combinatorias, fue posible acotar el número de soluciones que presentan coordenadas repetidas. Combinando estos ajustes con la cota de variedades obtenida previamente, llegamos a las siguientes estimaciones.

Teorema (Gottig-Pérez-Privitelli, 2024 caso en que p no divide a k).

Supongamos que p no divide a k (donde p es la característica del cuerpo) y $p \geq 3$. Si $m \leq \frac{k}{20}, k \leq 2q^{0.9} - \sqrt{q}$ entonces:

$$\left| N_m(k, b) - \frac{1}{q^m} \left(\frac{q}{k} \right) \right| \leq M (-1)^k \left(\frac{-\sqrt{q}}{k} \right)$$

donde $M = 3^4 2^{m-1} (3 + m^2)^{k+1}$.

Teorema (Gottig-Pérez-Privitelli, 2024 caso en que p divide a k).

Supongamos que p divide a k (donde p es la característica del cuerpo) y $p \geq 3$. Si $m \leq \frac{k}{20}, k \leq 2q^{0.9} - \sqrt{q}$ entonces:

$$\left| N_m(k, b) - \frac{1}{q^m} \left(\frac{q}{k} \right) + v(b) (-1)^{k+\frac{k}{p}} \left(\frac{\frac{q}{p}}{\frac{k}{p}} \right) \right| \leq M (-1)^k \left(\frac{-\sqrt{q}}{k} \right)$$

donde

$$M = 3^4 2^{m-1} (3 + m^2)^{k+1}, v(b) = \{ q^m - 1, \text{ si } b = 0 - 1, \text{ si } b \neq 0 \}$$

A partir de la cota obtenida, podemos derivar el siguiente resultado de existencia:

Supongamos que

$p \geq 3, q \geq 2^{20}, k \leq 2q^{0.9} - \sqrt{q}$ entonces:

$N_m(k, b) > 0$ para todo $b \in F_q^m$.

En la literatura, los resultados más cercanos son los obtenidos por (Li & Wan, 2010) [1]:

Cota:

$$\left| N_m(k, b) - \frac{1}{q^m} \left(\frac{q}{k} \right) \right| < \left(\frac{\frac{q}{p} + (m-1)\sqrt{q}}{\sqrt{q}} \right)$$

Resultado de existencia:

Para todo $\varepsilon > 0, \exists C_\varepsilon > 0$ tal que si $m < \varepsilon \sqrt{q}$

entonces $N_m(k, b) > 0$ para todo $b \in F_q^m$.

En cuanto a las cotas, nuestro resultado presenta un mejor orden en el término del error. El nuestro es del orden de $p^{\frac{sk}{2}}$

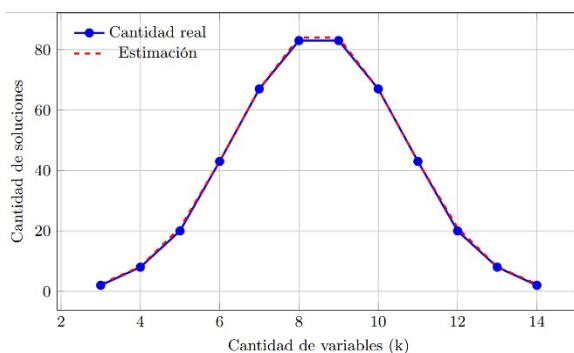
mientras que el de Li & Wan tienen un orden de $p^{(s-1)k}$. Además, en el caso en que p divide a k incorporamos un segundo

término en el desarrollo asintótico lo que mejora la precisión de la estimación.

En cuanto a los resultados de existencia, Li & Wan tienen para k y m fijos una cota superior en q mientras que nosotros no imponemos ninguna cota superior sobre q . Por otro lado nosotros establecemos una relación lineal entre m y k . Finalmente, admitimos un rango más amplio de valores de m , garantizando que $N_m(k, b) > 0$ en más casos.

A continuación comparemos nuestros resultados con simulaciones computacionales.

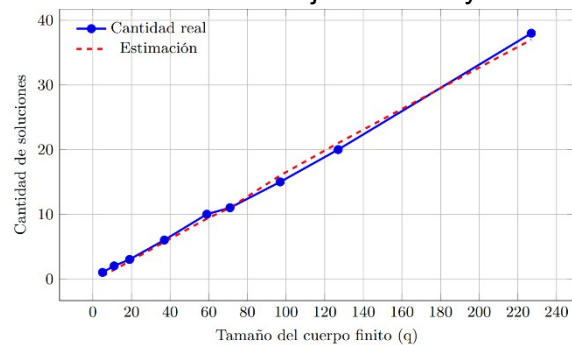
El siguiente gráfico muestra la cantidad de soluciones obtenida y la cantidad esperada moviendo el parámetro k . Dejamos $m=2$ y $q=17$ fijos así como fijos el vector de exponentes y el vector $\mathbf{b}$.



Podemos observar una simetría esperable en la curva teórica: al tener q y m fijos la estimación reduce esencialmente a una expresión combinatoria en k , lo que implica una simetría respecto de la estructura combinatoria del problema. Lo notable es que esa simetría no sólo aparece en la estimación, sino que se mantiene también en los datos reales. Además, el ajuste entre

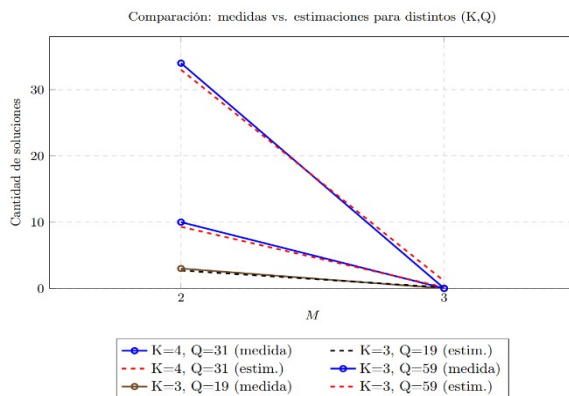
la estimación y las observaciones es bueno en todo el rango probado.

En el siguiente gráfico vemos la cantidad de soluciones obtenidas y la cantidad esperada moviendo el tamaño del cuerpo finito. En este caso dejamos $m=2$ y $k=3$.



Al aumentar q vemos el crecimiento esperado en la cantidad de soluciones; la curva observada es monótona y sigue muy de cerca la predicción teórica. Nuevamente, el ajuste es bueno, lo que indica que la fórmula estimativa captura la dependencia principal con q .

En el último gráfico vemos la cantidad de soluciones obtenidas y la cantidad esperada modificando la cantidad de ecuaciones. Por limitaciones computacionales este gráfico consiste de tres instancias de k y q y movemos el m



solamente de 2 a 3. Aquí se observa el comportamiento esperado: un descenso pronunciado en el número de soluciones al incrementar m . Aún con la exploración limitada, la estimación reproduce con buena precisión este declive.

Debido a limitaciones computacionales, los casos explorados no se encuentran estrictamente dentro de las hipótesis establecidas por el teorema. Sin embargo, la buena concordancia entre las estimaciones y los resultados reales, incluso fuera de dicho rango, indica que estas exploraciones tienen un valor significativo. En primer lugar, demuestran la robustez de nuestra fórmula estimativa más allá del régimen teórico previsto. Además, abren una línea de trabajo prometedora para intentar relajar las hipótesis originales. Por último, estas simulaciones generan preguntas

interesantes que merecen un análisis más profundo, como la justificación de la simetría observada en la cantidad real de soluciones al variar el parámetro k .

Al analizar nuestras estimaciones, es natural esperar que para valores "pequeños" de q (en relación con k y m) la cota de error sea considerablemente amplia. No obstante, cuando k y m se mantienen fijos, la fórmula presenta un comportamiento asintótico favorable: la cantidad de soluciones crece a un ritmo más rápido que el incremento del error estimado. Este efecto es especialmente pronunciado cuando p divide a k , lo que sugiere una estructura subyacente que modula el crecimiento y mejora la precisión de la cota en esos casos.

Como futuras líneas de investigación, proponemos trabajar en la relajación de las hipótesis actuales para que la estimación se ajuste mejor a casos con parámetros más pequeños. También resulta relevante optimizar los algoritmos de fuerza bruta utilizados, con el objetivo de explorar rangos más amplios de parámetros y obtener así datos más completos. Otro aspecto importante es el estudio de las simetrías estructurales del sistema, que permitiría relacionar la cantidad de soluciones entre instancias. Además, la generalización del problema para permitir que los exponentes sean crecientes, aunque no necesariamente consecutivos, ampliaría el marco teórico. Por último, se

plantea mejorar los resultados de existencia focalizándose en familias particulares de instancias del SSP, con el fin de encontrar condiciones más precisas.

Conclusiones

En este trabajo abordamos el momento subset sum problem (SSP) sobre cuerpos finitos desde una perspectiva geométrica, reformulando el conteo de subconjuntos solución como un problema de puntos F_q -rationales de un sistema de ecuaciones diagonales y estableciendo propiedades estructurales claves de la variedad asociada. A partir de esas propiedades, adaptamos una cota de conteo de puntos para obtener estimaciones asintóticas del número de soluciones válidas del SSP, corrigiendo por simetrías (permutaciones) y excluyendo soluciones con coordenadas repetidas. Ello nos permitió enunciar dos teoremas (según si p divide o no a la cantidad de variables) con un término de error más preciso que resultados previos y un criterio de existencia que no impone cota superior sobre q y admite un rango más amplio de m . Estos avances mejoran el estado del arte tanto en la calidad de las cotas como en la generalidad de las hipótesis.

La validación computacional, realizada en Python para distintos barridos de parámetros $(k, q \text{ y } m)$, mostró una

concordancia notable entre las estimaciones y los conteos exactos, incluso en escenarios que no caen estrictamente dentro del régimen teórico. En particular, observamos la aparición de una simetría esperable al variar k y un crecimiento coherente con q ; al aumentar m , el descenso en la cantidad de soluciones quedó bien capturado por la cota propuesta. Estas evidencias sugieren que la metodología es robusta y que la precisión de las estimaciones se mantiene en un rango operativo relevante, a pesar de las limitaciones computacionales que impidieron explorar valores grandes de q o $m \geq 3$ de manera exhaustiva.

En conjunto, los resultados teóricos y empíricos delinean un marco unificado para estudiar el SSP cuando $D = F_q$ y q es primo, ofreciendo cotas más ajustadas, condiciones de existencia más flexibles y una guía clara sobre cómo se entrelazan los parámetros m , k y q . Como líneas futuras, destacamos la relajación de hipótesis para cubrir casos con parámetros más pequeños, la optimización de algoritmos que permitan ampliar el rango experimental, el análisis sistemático de las simetrías estructurales y la extensión a exponentes no necesariamente consecutivos, con miras a refinar aún más los resultados de existencia en familias específicas del problema.

Referencias Bibliográficas

- [1] Li, J., & Wan, D. (2008). *On the subset sum problem over finite fields. Finite Fields and Their Applications*, 14(4), 911–929.
- [2] Pérez, M., & Privitelli, M. (2022). *On the number of simultaneous solutions of certain diagonal equations over finite fields. Journal of Number Theory*, 236, 160–187.
- [3] Ghorpade, S., & Lachaud, G. (2002). *Number of solutions of equations over finite fields and a conjecture of Lang and Wei. In A. K. Agarwal et al. (Eds.), Number Theory and Discrete Mathematics (Chandigarh, 2000) (pp. 269–291). New Delhi, India: Hindustan Book Agency.*

Agradecimientos

Quiero agradecer a LIGA y a todos sus miembros por ser un excelente ámbito de trabajo y desarrollo, tanto en lo matemático como en la investigación. Este espacio ha sido fundamental para mi crecimiento académico y profesional.

27.- Ciencia, tecnología e innovación

Viabilidad y germinación de semillas de *Crateva tapia* L. en distintas condiciones de luz y temperatura

Autor: Riveros Pineda, María Esther; E.mail: mariariveros594@gmail.com

Co-autor(es): Vogt Penzkofer, Christian.; Bareiro Britos, Jessica Lucía

Orientador/a: Benítez Núñez, Juan Venancio; E.mail: jbenitez@rec.una.py

Universidad Nacional de Asunción / Centro Multidisciplinario de Investigaciones
Tecnológicas

Resumen

Crateva tapia L. es una especie nativa perteneciente a la familia de las Capparaceae, es considerado un árbol frutal con diversos propósitos tales como medicinal, maderable y ornamental. Sus semillas presentan un bajo porcentaje de germinación y un tiempo prolongado para la emergencia, además, no se registra estudio sobre la fisiología y los factores externos que inciden en la germinación. El objetivo de la investigación fue determinar la viabilidad y germinación de las semillas de *Crateva tapia* L, en distintas condiciones de luz y temperatura. La investigación se realizó en el Laboratorio de Análisis de Calidad de Semillas de la Facultad de Ciencias Agrarias - UNA. Se utilizó un diseño completamente al azar con un arreglo factorial (2x2) donde el factor A corresponde al efecto de la luz (luz y oscuridad) y factor B a la exposición de distintas temperaturas (35 y 25°C) con cuatro repeticiones y cuatro tratamientos, totalizando 16 unidades experimentales. Las variables evaluadas fueron: porcentaje de viabilidad (PV), germinación (PG), longitud de la plántula, índice de velocidad de germinación (IVG) y velocidad de germinación (VG). Los datos fueron determinados mediante análisis de varianza (ANAVA) y test de Tukey al 5%. Los resultados obtenidos demostraron que no hay diferencias estadísticas en el porcentaje de germinación y longitud de plántulas, en cuanto al IVG y VG las altas temperaturas aceleran la germinación de la especie. Se concluye que las semillas de *Crateva tapia* germinan en condiciones indiferentes de luz y temperatura en los rangos evaluados en este estudio.

Palabras clave: *Crateva tapia* L., semillas, germinación.

Introducción

La *Crateva tapia* L. conocido comúnmente como ñandipa, naranja payaguá, naranjito y jakare pito, es una especie perteneciente a la familia Capparaceae. El nombre de la familia tiene su origen en el nombre genérico Capparis (latín), derivado del griego "kápparis" y este del árabe "kábar", usado para denominar a la alcaparra. Otra teoría relaciona Kapparis al nombre de la isla de Chipre (Kypros), donde al parecer crecen en abundancia las alcaparras (Pérez, 2021).

Es una especie nativa, con un potencial relevante recomendada para programas de recuperación de áreas degradadas, reforestación y ornamentación; sin embargo, para el éxito de estos programas es necesario realizar pruebas de calidad (Lorenzi, 2009).

Es una de las especies más importantes de los bosques ribereños y albardones. Sus Flores son polinizadas principalmente por abejas, y sus frutos son consumidos por la fauna local. Además, se le atribuyen propiedades antiespasmódico; antipirético; para tratar dolor de cabeza; disentería; infección de encías; reumatismo y vesicante (Céspedes, De Egea, Fernández & Méreles, 2022).

Las semillas son la vía de propagación más utilizada en la plantación, siendo de

fundamental interés el estudio de varios factores que interfieren en la propagación, principalmente la germinación y el vigor, que influyen directamente en la distribución de las especies (Passos, Da Silva, Da Silva, Pessoa & Santos, 2008).

Varios factores internos y externos a la semilla pueden interferir con la germinación. La temperatura afecta directamente el proceso, tanto en términos de porcentaje como de velocidad y uniformidad de la germinación, debido al efecto en la velocidad de absorción de agua y también en las reacciones bioquímicas que determinan todo el proceso de germinación. Las semillas de cada especie requieren un cierto rango de temperatura, con una temperatura óptima en la que el proceso ocurre con mayor rapidez y eficiencia (Castro, Bradford, Hilhorst, Ferreira & Borghetti, 2004).

Otro factor es la luz, un estímulo que puede ser percibido por fotorreceptores como los fitocromos, que tienen la posibilidad de captar diferentes longitudes de onda e inducir cambios en la expresión génica, que conducen a la activación de la germinación (Hartmann, Kester, Davies & Geneve, 2011).

Aunque la propagación de *Crateva tapia* se realiza principalmente por semillas, se desconoce el porcentaje de germinación y

los factores que afectan la germinación de las semillas. Por esta razón se vió la necesidad de analizar las semillas con metodologías adecuadas para el control de calidad de las mismas y que permitan una mejor comprensión de la ecofisiología de la semilla facilitando a su vez la propagación en vivero y su producción a campo.

Objetivos

La investigación tuvo como objetivo general determinar la viabilidad y germinación de las semillas de *Crateva tapia* L, en distintas condiciones de luz y temperatura, para conocer aspectos importantes de su propagación natural. Además se establecieron los siguientes objetivos específicos: Analizar la calidad de la semillas por medio de la prueba de tetrazolio, determinar el porcentaje de germinación y longitud de plántulas, determinar el índice de germinación y velocidad de germinación en las semillas de *Crateva tapia*.

Materiales y Métodos

Los frutos fueron colectados en zona de la localidad de Naranjito, Distrito de Isla Umbú, Departamento de Ñeembucú en el mes de enero del 2025 en el marco del proyecto “Fundamentos ecológicos para la restauración de bosques ribereños en zonas afectadas por obras públicas en la cuenca baja del Rio Paraguay” (PINV01-1081), ejecutado en la Facultad de

Ciencias Exactas y Naturales (UNA). Los mismos fueron llevados al laboratorio de Biotecnología del Centro Multidisciplinario de Investigaciones Tecnológicas (CEMIT) de la Universidad Nacional de Asunción (UNA). Las semillas fueron extraídas de sus frutos mediante lavado con abundante agua para retirar el mucilago y luego fueron secadas.

Los experimentos de viabilidad y germinación se llevaron a cabo en el Laboratorio de Análisis de Calidad de Semillas (LACS – UNA) de la Facultad de Ciencias Agrarias de la Universidad Nacional de Asunción, entre los meses de mayo a junio del 2025.

Prueba de Viabilidad

Se escogieron de las muestras de semillas dos repeticiones de 25 semillas con características de color verdosas representando a las semillas maduras, se evaluó la viabilidad (calidad) con el método de Tetrazolio (TZ)

Para la especie *Crateva tapia* no hay información de la metodología empleada de acuerdo a las reglas ISTA, entonces se llegó al siguiente método:

Pre-acondicionamiento: para el ablandamiento las semillas fueron remojadas en agua destilada por 24 horas a 26°C.

Preparación para la tinción: pasado las 24 horas, a cada semilla le fue retirado el tegumento y se realizó un corte longitudinal a través del embrión, con la finalidad de facilitar la penetración de la sal de tetrazolio.

Tinción: las semillas fueron sumergidas en solución de tetrazolio al 1% y sometidas a estufa por 24 horas a 30°C.

Evaluación: pasado el tiempo de tinción, la solución de tetrazolio fue reemplazado por agua destilada. Para la evaluación de las semillas se tuvo en cuenta la tinción de los embriones; si los embriones reaccionan y se tiñen de rojo se consideran viables, caso contrario aquellos embriones sin tinción o tinción incompleta se consideran como no viables de acuerdo a las Reglas Internacionales para el Análisis de las Semillas (ISTA, 2016), en la evaluación cada semilla fueron verificados con ayuda del software del esteroscopio Leica 3.4.0. La viabilidad de las semillas fue determinado mediante el porcentaje de viabilidad (PV) por la siguiente formula:

$$PV (\%): \frac{\text{Número de semillas viables}}{\text{Número total de semillas}} \times 100$$

Interpretación

La viabilidad de las semillas se clasificó según la coloración del embrión (ISTA, 2016).

Tabla 1. Clasificación para la evaluación de las semillas de *Crateva tapia* mediante la prueba de tetrazolio

Clasificación	Descripción
Semilla viable	Coloración total rosa a rojo del embrión
Semilla no viable	Semillas de coloración incompleta o menor de 50%
Semilla no viable	Semillas sin coloración

Efecto de luz y temperatura en la germinación

La siembra se realizó en bandejas de plástico y el sustrato empleado fue arena lavada esterilizada. El diseño experimental utilizado fue completamente al azar, con arreglo factorial, siendo el factor A diferentes condiciones de luz con bandejas cubiertas con papel aluminio (oscuridad) y bandejas expuestas a luz blanca continua (luz) y el factor B distintas temperaturas constantes (35 y 25°C) por cuatro repeticiones y cuatro tratamientos (Tabla 2), totalizando 16 unidades experimentales.

Tabla 2. Descripción de los tratamientos

Tratamientos	Efecto	Temperatura
T1	Luz	35°C
T2	Oscuridad	35°C
T3	Luz	25°C
T4	Oscuridad	25°C

Cada unidad experimental estuvo compuesta por 10 semillas, totalizando 160 semillas.

Las semillas de los diferentes tratamientos fueron incubados en cámaras germinadoras a humedad controlada, exposición a luz blanca fluorescentes y temperaturas constantes. En los tratamientos con oscuridad se simuló cubriendo totalmente las bandejas con papel aluminio y fueron evaluadas en sala oscura con luz verde por seguridad.

Porcentaje de germinación (PG).

Se consideró como plántulas normales aquellas con la emergencia de la radícula y el hipocotilo. El porcentaje de germinación (PG) se calculó con la siguiente fórmula

$$PG (\%): \frac{\text{Semillas germinadas}}{\text{Semillas colocadas}} \times 100$$

Índice de velocidad de germinación (IVG), Se realizaron conteos diarios después de la siembra, de las semillas germinadas a la misma hora en cada repetición, calculando con la fórmula propuesta por (Maguire, 1962), donde:

$$IVG: \frac{G_1}{N_1} + \frac{G_2}{N_2} + \dots + \frac{G_n}{N_n}$$

Velocidad de germinación (VG)

Determinado según la fórmula de Edmond & Drapala (1958):

$$VG: \frac{(N_1 G_1) + (N_2 G_2) + \dots + (N_n G_n)}{G_1 + G_2 + \dots + G_n}$$

G_1, G_2, G_n = Número de semillas germinadas en el intervalo de tiempo.

N_1, N_2, N_n = tiempo de germinación desde la siembra hasta la germinación de la última semilla.

Longitud de la plántula (brote y raíz): fue evaluada a los 35 días después de finalizar la prueba de germinación, se escogieron al azar cuatro plántulas de cada repetición, se midieron con una regla graduada, considerando la longitud total de las plántulas sumando la parte aérea y la raíz. Los resultados fueron expresados en cm.

Los datos de las variables analizadas fueron sometidos al análisis de varianza (ANOVA) al 5% de probabilidad de error y en las variables al detectarse diferencias significativas fueron comparados con el test de Tukey al 5 % de probabilidad de error, empleando el software estadístico INFOSTAT versión 2020.

Resultados y Discusión

Se obtuvo el porcentaje de viabilidad de 38% con la concentración de tetrazolio al 1% por 24 horas, significando la calidad y capacidad germinativa de la muestra de semillas (Fig. 1).

La prueba de viabilidad de tetrazolio França-Neto & Krzyzanowski (2019) es efectiva y demuestran el buen estado fisiológico de las semillas.

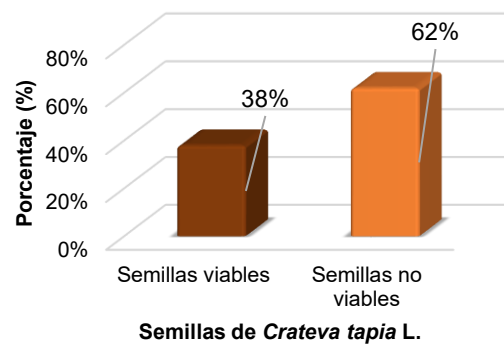


Figura 1. Porcentaje de semillas viables y no viables. San Lorenzo. Paraguay, 2025

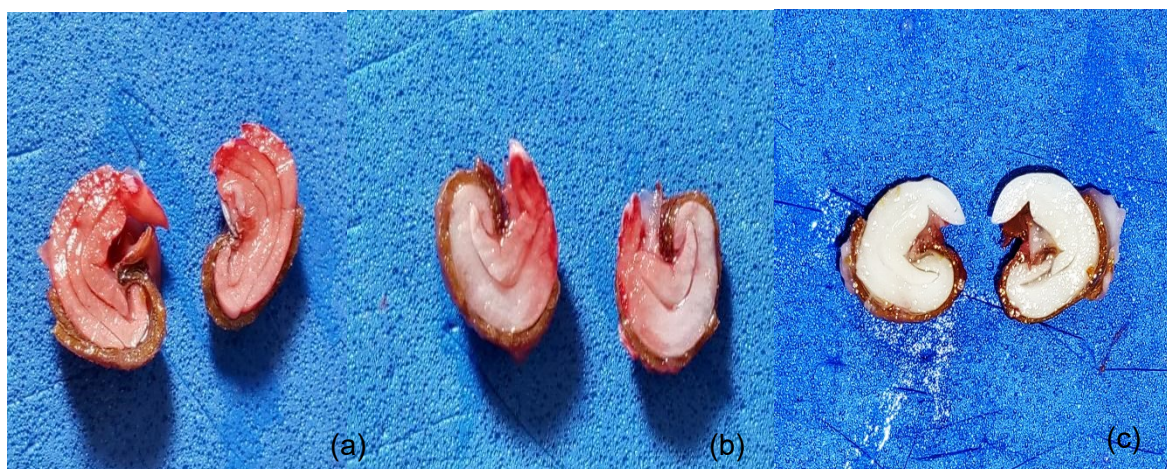


Figura 2. Semillas viables coloración rojiza (a), semillas no viable con coloración menor de 50% (b) y semillas no viable sin coloración (c).

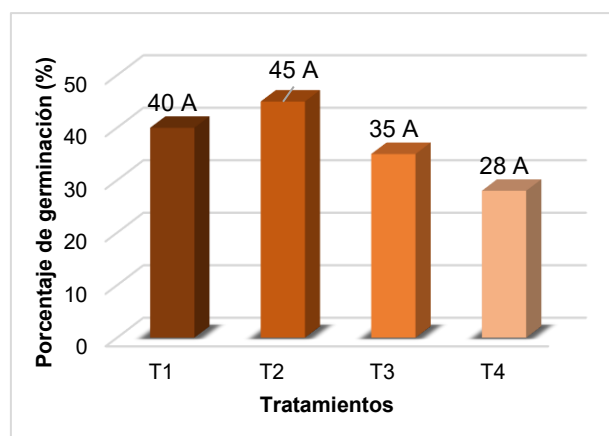


Figura 3. Porcentaje de germinación de semillas de *Crateva tapia*, evaluación hecha a los 35 días después de la siembra. FCA-UNA, San Lorenzo. Paraguay, 2025. *Significativo por el ANAVA ns= no significativo. Las medias con letras distintas en las columnas, indican diferencia significativa entre sí al 5% de probabilidad de error por el test de Tukey.

En cuanto al porcentaje de germinación, se puede observar en la figura 3, que no presentaron diferencias estadísticas significativas en condiciones de luz y ausencia de luz con temperaturas continuas de 35 y 25°C por lo tanto, las semillas de la especie pueden ser consideradas como no fotoblásticas o neutras.

En efecto Rojas & Batis (2001), mencionan que cuando las semillas germinan en condiciones de iluminación y en oscuridad, se les conoce como semillas indiferentes o neutras.

Concuerda con los resultados obtenidos de Acosta, Qadir, Mazorra & Fontes (2023), evaluando el efecto de la temperatura y la luz en la germinación de semillas de dos leguminosas de *T. labialis* y *N. wightii*, encontraron en los porcentajes de germinación fueron iguales, tanto en presencia como en ausencia de luz, así como en alternancia de luz y oscuridad, no afectando la capacidad germinativa de ambas especies.

De acuerdo a Dupuig, Pernús & Sánchez (2022), sobre las semillas del árbol de *Juniperus barbadensis*, describen que el mayor porcentaje de germinación obtuvieron a 25°C, y a esta temperatura también hubo germinación en oscuridad. El incremento de la temperatura provocó una disminución en el porcentaje de

germinación final tanto a la luz como en oscuridad.

De acuerdo a Ursulino, Da Silva, Farías de Moura, Sales & Abrantes (2012), mencionan que el hecho de que los mayores porcentajes de germinación se produzcan a temperaturas constantes de 25 y 35 °C y a temperaturas alternas de 20-30 °C evidencia una adaptación a las fluctuaciones térmicas naturales del entorno, características que confieren a la *Crateva tapia* mayor capacidad de establecimiento de plántulas en el campo, haciéndolas capaces de soportar condiciones ambientales adversas.

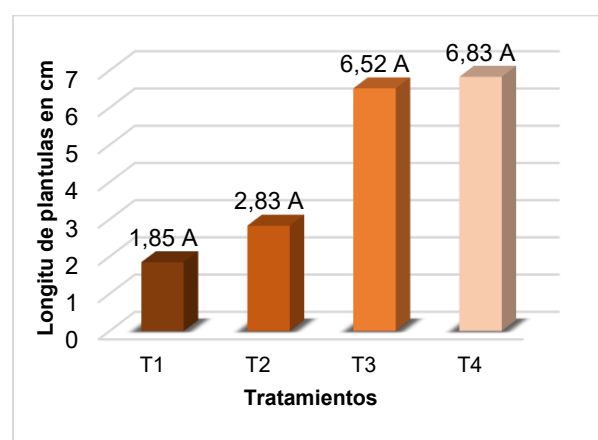


Figura 4. Longitud de plántulas de semillas de *Crateva tapia*, evaluación hecha a los 35 días después de la siembra. FCA-UNA, San Lorenzo. Paraguay, 2025.*Significativo por el ANAVA ns= no significativo. Las medias con letras distintas en las columnas, indican diferencia significativa entre sí al 5% de probabilidad de error por el test de Tukey.

Otros estudios han demostrado que las temperaturas óptimas para la germinación

de las semillas varían según la especie (Ramírez et al., 2020).

Los resultados obtenidos en la longitud de plántulas para los diferentes tratamientos, se pueden observar en la figura 4, sin diferencia significativa entre los tratamientos.

En cambio Sales & Ursulino (2011), afirman en la especie *Chorisia glaziovii*, que la temperatura de 25 °C promovió el mayor vigor en todos los sustratos evaluados, con los promedios más altos de longitud de la raíz y la parte aérea, por el contrario a temperatura de 35 °C no se registra la longitud de las partes de las plántulas, ya

que esto impidió el desarrollo.

Las condiciones ambientales extremas pueden tener un impacto negativo en la capacidad de germinación, según Caroca, Zapata & Vargas (2016).

Ursulino et al. (2012), en las longitudes promedio de las plántulas de *Crateva tapia* encontraron que los valores más altos se obtuvieron en la interacción de la temperatura de 30 °C con el sustrato entre arena, así como en la temperatura alterna de 20-30 °C entre los sustratos arena, entre la vermiculita y sustrato comercial.



Figura 5. Plántulas sometidas en luz a temperaturas a 35°C (d), plántulas sometidas en oscuridad a temperaturas a 35°C (e), plántulas en luz a temperaturas a 25°C (f) y plántulas en oscuridad a temperaturas a 25°C (g).

Aunque no hubo diferencias significativa en la longitud total de las plántulas, se puede visualizar en la figura 5 diferencias en el crecimiento y calidad del desarrollo de las plántulas, aquellos sometidos a temperaturas de 25°C en ambas condiciones, las plántulas eran esbeltas y

con desarrollo del epicotilo al contrario de las expuestas a temperatura constante de 35°C que presentaban plántulas desarrolladas hasta el hipocotilo sin observación del despliegue de las primeras hojas.

Tabla 3. Índice de velocidad de germinación (IVG) y velocidad de germinación (VG) de semillas de *Crateva tapia*. (San Lorenzo. Paraguay, 2025).

Tratamientos	IVG (Unidad)	VG (Días)
T1: Luz + 35°C	0,33 a*	15,57 a*
T2: Oscuridad + 35°C	0,36 a	17,00 a
T3: Luz + 25°C	0,11 b	29,80 b
T4: Oscuridad + 25°C	0,10 b	28,63 b
CV (%)	22,48	13,74

*Significativo por el ANAVA. Las medias con letras diferentes en las columnas, indican diferencia significativa entre sí al 5% de probabilidad de error por el test de Tukey.

CV: coeficiente de variación.

En la tabla 3, se puede observar el mayor valor obtenido de índice de velocidad de germinación en la temperatura de 35°C tanto en condiciones de luz y oscuridad, difiriendo estadísticamente de los tratamientos de 25°C.

Con respecto al VG, se verifica que a temperaturas mayores de 35°C, las semillas germinan más rápido a los 16 días en promedio después de la siembra, sin diferencia en condiciones luz y oscuridad. En cambio a temperaturas menores de 25°C las semillas germinan más lentamente observándose recién a los 29 días después de la siembra. Coincidiendo con la velocidad de germinación a mayor IVG mayor velocidad de germinación.

Trabajo realizado por Ursulino et al. (2012), en base del índice de velocidad de

germinación de semillas de *Crateva tapia*, sometidas a diferentes sustratos y temperaturas, se encontró que el valor más alto se presentaron en las interacciones del sustrato vermiculita a una temperatura de 30 °C y papel toalla a una temperatura de 20-30°C. Este resultado demuestra que, si bien la germinación ocurre en un amplio rango de temperatura, esta especie requiere una condición de temperatura más específica para una germinación más rápida y uniforme.

Sin embargo, Sales & Ursulino (2011), mencionan que los índices de velocidad de germinación más altos ocurrieron a una temperatura de 25 °C.

Se encontró el efecto positivo de la luz en la germinación de las semillas de *Puya raimondii* ya que los porcentajes de germinación e IVG de los tratamientos con luz, de todos los lotes, superaron a los tratamientos de oscuridad según Vadillo Suni & Cano (2004).

Según Marinoni, Zabala, Patiño & Pensiero (2017), explican que el rango de temperaturas en la que ocurre mayor germinación se asocia con las temperaturas típicas de la región y la época donde se siembran las especies; lo cual se pudiera interpretar como un rasgo adaptativo por parte de las especies al clima regional, de modo que la germinación

se produzca en el momento del año en el cual las probabilidades de supervivencia de las plántulas son mayores.

Conclusiones

En las condiciones en que se realizó el experimento, se puede afirmar que las semillas de *Crateva tapia* L. en el porcentaje de germinación y longitud de plántulas no fueron afectadas a las distintas condiciones de luz y temperaturas constantes, pudiendo germinar y siendo considerada como semillas neutras o indiferentes.

Al analizar el índice y la velocidad de germinación, se determinó que las altas temperaturas aceleran el proceso de germinación de la especie.

Referencias Bibliográficas

Acosta, Y; Qadir, L; Mazorra, C; Fontes, D. (2023). Efecto de la temperatura y la luz en la germinación de semillas de dos leguminosas. Revista Universidad y Ciencia. 12(2), 163-175. Recuperado de <https://doi.org/10.5281/zenodo.8091907>

Caroca, R., Zapata, N., & Vargas, M. (2016). Efecto de la temperatura sobre la germinación de cuatro genotipos de maní (*Arachis hypogaea* L.). Chilean Journal of Agricultural & Animal Sciences.

32(2), 94 - 101. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.4067/S0719-38902016000200002>

Castro, R; Bradford, KJ; Hilhorst, H; Ferreira, A; Borghetti, F. (2004). Imbibición y reactivación del metabolismo. de germinación: de básico a aplicado. Porto Alegre: Artmed, 149-162.

Céspedes, G. De Egea, J. Fernández, R. Mereles, N. (2022) Ficha técnica Guías de Biodiversidad de Asunción y su Área Metropolitana (AMA) Grupo: Flora Payaguá naranjo. Recuperado de [sedahttps://arboresdelchaco.blogspot.com/2017/10/payagua-naranjo-flor-de-seda.html?m=1](https://arboresdelchaco.blogspot.com/2017/10/payagua-naranjo-flor-de-seda.html?m=1)

Dupuig, Y; Pernús, M; Sánchez, J. (2022). Rasgos de semillas, germinación y dormancia de *Juniperus barbadensis* subsp. lucayana (Cupressaceae), árbol endémico del Caribe. Revista Acta Botánica Cubana. 221, 1-10. Recuperado de <https://cu-id.com/2402/v221e08>

Edmond, J & Drapala, W. (1958). The effects of temperature, sand and soil, and acetone on germination of okra seeds. Proc. Am. Soc. Hort. Sci. 71, 428-434.

França-Neto J & Krzyzanowski, F. (2019). Tetrazolium: an important test for physiological seed quality evaluation. Journal of Seed Science

- 41, 359-366. Recuperado de <https://doi.org/10.1590/2317-1545v41n3223104>
- Hartmann, H., Kester, D. E., Davies, F. T. & Geneve, R. L. (2011). *Hartmann Plant Propagation: Principles and Practices*. (8th ed.). Upper Saddle River, N.J.: Prentice Hall International.
- Lorenzi, H. (2009). *Árboles brasileños: identificación y cultivo de plantas arbóreas nativas en Brasil* (5ª ed.). Nueva Odessa: Instituto Plantarum.
- Maguire, J. (1962). La velocidad de germinación ayuda en la selección y evaluación de la emergencia y el vigor de las semillas. *Crop Science* Madison. 2, 176-177.
- Marinoni, L; Zabala, J; Patiño, J; Pensiero, J. (2017). Efecto de la temperatura y salinidad en la germinación y crecimiento inicial de un material naturalizado de *Lotus tenuis* Waldst. & Kit. *Revista FAVE - Ciencias Agrarias*. 6(2) 47-59. Recuperado de <https://doi.org/10.14409/fa.v16i2.7017>
- Passos, M; Da Silva, F; Da Silva, E; Pessoa, M; Santos, R. (2008). Sustrato y temperatura en la germinación de semillas de cedro rojo. *Investigación agrícola brasileña, Brasilia*. 43(2). 281-284. Recuperado de <https://www.scielo.br/j/pab/a/XLSKw4JYnLsMQGv68VNKGxp/?format=pdf>
- Pérez de Molas, L. (2021). *Algunos árboles y arbustos del chaco Guía de campo para el reconocimiento de las especies*. San Lorenzo: FCA-UNA; INFONA.
- Ramírez, D; Cruz, G; Espitia, E; Sampayo, S; Mandujano, M; Arriaga, A. (2020). Velocidad de germinación y temperaturas cardinales en *Chenopodium quinoa* Suyana y Tunkahuan. *Revista Bio Ciencias*. 7, 1-15. <https://revistabiociencias.uan.edu.mx/index.php/BIOCIENCIAS/article/view/880/pdf>
- Reglas Internacionales para el Análisis de las Semillas (2016). *Introducción a las Reglas ISTA*. Recuperado de https://vri.umayor.cl/images/ISTA_Rules_2016_Spanish.pdf
- Rojas, M. & Batis, A. (2001). Las semillas de cactáceas ¿forman bancos en el suelo? *Revista de Cactáceas y Suculentas Mexicanas* 46(1): 76-82
- Sales & Ursulino (2011). Prueba de germinación de semillas de *Chorisia glaziovii* (O. Kuntze). *Revista Cerne, Lavras*, 17(4), 525-531.
- Ursulino, E; Da Silva, S; Farías de Moura, M; Sales, R; Abrantes, F. (2012). Germinación y vigor de las semillas

Crataeva tapia L. en diferentes
sustratos y temperatura. Rev. Bras.
Frutic., Jaboticabal 34 (4), 1208-
1215. Recuperado de
[https://www.scielo.br/j/rbf/a/CXGw6
QkTtpKkSt6CtN3bSwh/?lang=pt](https://www.scielo.br/j/rbf/a/CXGw6QkTtpKkSt6CtN3bSwh/?lang=pt)

Vadillo, G; Suni, M; Cano, A. (2004).
Viabilidad y germinación de
semillas de *Puya raimondii* Harms
(Bromeliaceae). Rev. Peru. biol.
11(1): 71- 78. Recuperado de
[http://www.scielo.org.pe/scielo.php
?script=sci_arttext&pid=S1727-
99332004000100009&lng=es&nrm
=iso&tlng=es](http://www.scielo.org.pe/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1727-99332004000100009&lng=es&nrm=iso&tlng=es)

28.- Ingeniera mecánica y de la producción industrial

Desarrollo de un actuador mecánico para el control autónomo de malezas en plantaciones frutícolas

Autor: López, Agustín; alopezd@fing.edu.uy

Co-autor: Vaz, Guillermo, guillermov@fing.edu.uy

Orientador: Correa, Santiago, scorrea@fing.edu.uy

Universidad de la República / Facultad de Ingeniería

1 Resumen

En la actualidad, el uso de herbicidas químicos constituye el principal método para el control de malezas. Sin embargo, su aplicación masiva puede afectar la calidad de los productos agrícolas, exponiendo a los consumidores a residuos químicos presentes en los cultivos. Como respuesta a esta preocupación, muchos consumidores han comenzado a optar por productos catalogados como orgánicos, los cuales se caracterizan por evitar el uso de agroquímicos tradicionales, recurriendo en su lugar a métodos alternativos de control, como los métodos mecánicos de desmalezado. La principal dificultad de estos métodos orgánicos radica en alcanzar una eficacia comparable con métodos tradicionales, especialmente en plantaciones de gran escala. La robótica surge como herramienta para automatizar el proceso de desmalezado mediante herramientas mecánicas mejorando así su eficiencia. Si bien el desarrollo de la robótica en la agricultura ha logrado grandes avances en cultivos extensivos, no logra los mismos resultados en plantaciones frutícolas. La principal dificultad se encuentra en el tratamiento de malezas en las hileras de la plantación debido al espacio reducido que se tiene para actuar dada la presencia de los árboles que interrumpen la utilización de la herramienta. En este contexto, el presente trabajo se enfoca en la búsqueda de soluciones alternativas a esta problemática. Se desarrolla un actuador mecánico de tipo tornillo de excavación mediante un análisis paramétrico de las variables que afectan su funcionamiento. A su vez se diseña un sistema de posicionamiento tridimensional que posiciona el actuador en voladizo respecto de la base móvil del robot permitiendo su actuación lateral removiendo el problema de la obstaculización por parte de los árboles.

2 Introducción

La competencia por recursos entre las malezas y los cultivos frutales constituye uno de los principales factores que afectan la calidad y cantidad del producto cosechado [Gao and Su, 2024, Mia et al., 2020]. Esta desventaja es particularmente relevante en árboles, cuya baja densidad de raíces en comparación con las malezas los deja en una situación competitiva desfavorable [Mia et al., 2020]. Resulta entonces indispensable contar con algún método de control sobre las malezas en la plantación, especialmente en la cercanía de los árboles.

El uso de herbicidas químicos representa actualmente el método más difundido en gran- des plantaciones, debido a su alta eficiencia y facilidad de aplicación a gran escala. No obstante, su uso genera preocupaciones ambientales y sanitarias, principalmente por los residuos químicos presentes en los frutos y el suelo. Como consecuencia, una parte creciente de los consumidores ha comenzado a exigir productos que puedan ser clasificados como orgánicos [Langsenkamp et al., 2014], incentivando la búsqueda de métodos de control alternativos.

Entre estas alternativas, el control mecánico se presenta como una opción promete- dora. Tradicionalmente, este tipo de control se ha llevado a cabo de forma manual o median- te herramientas

traccionadas por maquinaria. En plantaciones frutícolas, donde los árboles están dispuestos en hileras, es posible realizar labores de desmalezado entre dos hileras consecutivas (inter-hileras) con maquinaria convencional sin mayor complicación. Sin embargo, el control entre árboles de una misma hilera (intra-hilera), y especialmente en las proximidades del tronco, presenta mayores desafíos. Cualquier intervención mecánica en esta zona implica el riesgo de dañar el cultivo y generar heridas que favorezcan el ingreso de patógenos en la plantación [Mia et al., 2020]. Por esta razón, el desmalezado mecánico intra-hilera suele requerir trabajo manual intensivo.

Dentro del control mecánico podemos categorizar cualquier método de control que implique la utilización de una herramienta en con- tacto directo con la planta y/o suelo. La fundamentación principal es dañar la maleza de manera periódica y perjudicar su crecimiento para disminuir su capacidad de competir contra la plantación de interés. Con esto en mente se puede considerar 3 tipos de acciones mecánicas de control

- Corte: Métodos que atacan de forma superficial o sub-superficial la maleza. Se utilizan herramientas afiladas que entran en contacto con diferentes partes de la maleza como pueden ser hojas, tallo o raíces y las separan del resto de la planta.

- **Exacción:** Es cualquier método que consista en la extracción permanente de la maleza del suelo exponiendo las raíces al ambiente para evitar la absorción de nutrientes. El movimiento de la tierra necesario para lograr la extracción de la maleza puede permitir la germinación a semillas de maleza previamente inactivas.
- **Cubrimiento:** Estos métodos se basan en evitar la fotosíntesis de las malezas mediante evitar la llegada de luz solar a la misma.

Se destaca las malezas que pueden clasificarse dentro de la categoría de plantas perennes, este tipo de plantas se caracterizan por lograr ciclos de vida de más de 2 años teniendo su período de reproducción en más de una instancia.

Estas plantas también tienen la característica de contar con reservas de nutrientes usualmente a gran profundidad.

Estas reservas generan que la extracción total de la maleza sea dificultosa por lo que la extracción total es algo poco práctico. De igual manera un control mecánico continuo logra dañar la maleza a lo largo del tiempo. Una vez la maleza es dañada, toma nutrientes de su reserva para recuperarse, si el control se hace de manera regular se logra agotar esta reserva [Mohler et al., 2021]; este proceso es conocido como agotamiento mecánico y es la base del control de malezas mecánico.

En la actualidad, los desarrollos más recientes en control de malezas se inscriben en la categoría de control mecánico avanzado, caracterizado por el uso de sensores y análisis de datos para automatizar la tarea. Entre las soluciones comerciales disponibles se encuentran el *OddBot* [Odd.Bot B.V., 2025] y el *FarmDroid FD20* [far, 2025], que emplean tecnologías como geolocalización de semillas y visión artificial para detectar y eliminar malezas en zonas intra-hilera. Si bien estas soluciones resultan comercialmente accesibles, no son adecuadas para cultivos frutales debido a la altura de la vegetación. Estos dispositivos operan desplazándose por encima de la plantación y utilizando herramientas dispuestas en su parte inferior. En el contexto de plantaciones frutícolas esto implicaría, que la estructura del robot deba superar la altura de la copa más alta en la plantación; a su vez el largo recorrido desde la copa del árbol hasta el suelo aumentaría la posibilidad de falla y por consecuente daño de la plantación. Esto resultaría en un diseño inestable y poco viable desde el punto de vista operativo.

Entre las diversas especies de malezas, las *perennes* presentan un desafío particular.

Estas plantas poseen un ciclo de vida superior a los dos años y pueden reproducirse en múltiples oportunidades. Además, disponen de reservas de nutrientes almacenadas en estructuras subterráneas profundas, generalmente

alejadas de la zona de floración. Esta última característica dificulta su eliminación completa mediante métodos mecánicos. Sin embargo, si se las somete a daños repetidos, estas reservas pueden agotarse progresivamente, llevando a la muerte de la planta. Este mecanismo, conocido como agotamiento mecánico, constituye la base de las estrategias para el control de malezas perennes y sobre el cual se desarrollará un actuador mecánico funcional.

3 Objetivos

El trabajo presentado se encuentra dentro del contexto de un proyecto de investigación llevado adelante por docentes de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República (UdelaR) con financiamiento del Instituto Nacional de Innovación Agropecuaria (INIA) para el desarrollo de un robot autónomo para el control de malezas en plantaciones frutícolas. El proyecto desarrolla la implementación de 3 prototipos de actuadores distintos siendo estos mecánicos, láser e hidráulicos.

Específicamente en este trabajo, el objetivo es el desarrollo de un actuador mecánico capaz de ser integrado en un robot autónomo para el control de malezas intra-hileras en plantaciones frutícolas.

4 Diseño del actuador

4.1 Actuador

La utilización de un tornillo de excavación como herramienta para el control de malezas permite combinar las ventajas de los métodos de corte y los métodos de extracción, al posibilitar la remoción completa de la planta, incluyendo sus raíces. El funcionamiento del sistema se basa en posicionar el tornillo de forma perpendicular al suelo, directamente sobre la maleza objetivo y posteriormente penetrar con el mismo encima de la maleza buscando dañarla durante el proceso de descenso y posteriormente la extracción de la misma en el proceso de ascenso.

Para garantizar su operatividad, resulta necesario estimar las fuerzas requeridas para que el tornillo penetre adecuadamente en el terreno. En función de ello, se desarrolla un estudio paramétrico que analiza la influencia de diferentes características geométricas y operativas del tornillo sobre las cargas involucradas. Finalmente, se lleva a cabo un análisis de resistencia mecánica con el objetivo de dimensionar adecuadamente la herramienta, asegurando su integridad estructural bajo las condiciones de carga esperadas.

4.1.1 Estimación de las cargas

El actuador entrará en contacto con el suelo y deberá llevar al mismo a un estado de falla total para poder removerlo y comenzar el avance en sentido vertical. Las cargas necesarias sobre el suelo para lograr llevarlo a este estado de falla se pueden calcular mediante la Ecuación 1 la cual es la ecuación fundamental del

movimiento de tierra [Reece, 1964].

$$P = cb^2N_c + \gamma b^3N_\gamma + qb^2N_q + c_a b^2N_a \quad (1)$$

Dónde γ es el peso específico del suelo, b representa una dimensión característica de la zona de falla, c representa la cohesión del suelo consigo mismo, c_a es el coeficiente de adhesión entre el suelo, q es cualquier carga extra que este soportando el suelo. Luego los parámetros N_i representan como se relacionan esas cargas con la forma de la zona de falla del suelo.

La zona de falla se simplifica a una cuña como la mostrada en la Figura 1 según se realizó en [Hu et al., 2013], a

partir de ello los autores logran determinar los valores de los factores N_i según las Ecuaciones (2, 3, 4, 5).

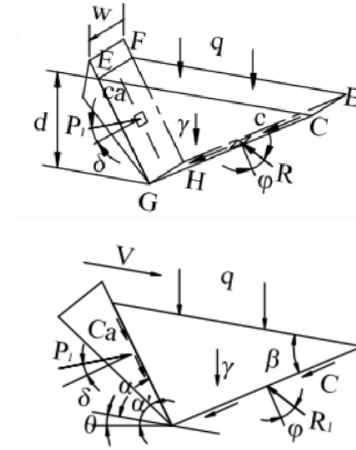


Figura 1: Descripción de la zona de falla simplificada [Hu et al., 2013]

$$N_\gamma = \frac{1}{2}(\cos\theta - \sin\theta \cot(\beta + \varphi)) \frac{(\cot\alpha + \cot\beta)(\sin(\beta + \varphi))}{\sin(\alpha + \beta + \delta + \varphi)} \left(1 + \frac{2d}{3w} \sqrt{\cot^2\beta + 2 \cot\alpha \cot\beta}\right) \quad (2)$$

$$N_q = \frac{1}{2}(\cos\theta - \sin\theta \cot(\beta + \varphi)) \frac{(\cot\alpha + \cot\beta)(\sin(\beta + \varphi))}{\sin(\alpha + \beta + \delta + \varphi)} \left(1 + \frac{d}{w} \sqrt{\cot^2\beta + 2 \cot\alpha \cot\beta}\right) \quad (3)$$

$$N_c = \left(\frac{\cos\varphi}{\sin\beta \sin(\alpha + \beta + \delta + \varphi)}\right) \left(1 + \frac{d}{w} \sqrt{\cot^2\beta + 2 \cot\alpha \cot\beta}\right) \quad (4)$$

$$N_{ca} = \frac{\cos(\alpha + \beta + \varphi)}{\sin\alpha \sin(\alpha + \beta + \delta + \varphi)} \quad (5)$$

Para poder determinar el valor de estos coeficientes es necesario primero determinar el ángulo β que cierra el triángulo. Para ello se considera que dados todos los demás parámetros, el suelo fallara de manera de minimizar el valor de N_γ la zona de falla caracterizada por N_γ [Hu et al., 2013]. Con ese criterio se determina el valor que minimiza el coeficiente N_γ y a partir de allí se computan el resto de los coeficientes.

Una vez determinados todos los coeficientes se calcula la fuerza total sobre el suelo F según Ecuación 1. Para estimar el par requerido por la herramienta para remover la tierra se considera la proyección horizontal de la fuerza neta sobre la herramienta incluida, la adhesión entre el suelo y la herramienta y se proyecta sobre el plano horizontal según la Ecuación 6.

$$F_H = P \sin(\alpha + \theta + \delta) + \frac{C_a w d \cos(\alpha + \theta)}{\sin(\alpha)} \quad (6)$$

Posteriormente es posible estimar el par según Ecuación 7.

$$T = F_H \left(R + \frac{w}{2} \right) \quad (7)$$

4.1.2 Estudio paramétrico

Se tiene en primera instancia como variables de diseño el diámetro exterior de la herramienta D , el diámetro del núcleo del tornillo d , el ángulo de instalación de la herramienta α y la velocidad de giro n .

Se realiza una exploración por fuerza de bruta para estudiar el efecto que tienen los parámetros de diseño sobre el par necesario para lograr la falla total sobre el suelo. El rango de valores estudiados comprende 36 velocidades de giro comprendidas entre 40 y 200 rpm, 30 valores de α' comprendidos entre 30° y 60° y para 8 espesores de diente variando desde 10 mm hasta 50 mm para un total de 8640 combinaciones posibles. Se debe aclarar que el ángulo α de las Ecuaciones 2, 3, 4, 5 sigue la Ecuación 8 donde θ relaciona el ángulo de corte real con la velocidad de rotación de la herramienta mediante Ecuación 9.

$$\alpha = \alpha' + \theta \quad (8)$$

Siendo α' es el ángulo de instalación entre el filo de la herramienta y el suelo.

$$\theta = \arctan\left(\frac{60v}{n\pi D}\right) \quad (9)$$

En la cual v es la velocidad lineal de penetración del tornillo, n es la velocidad de rotación, D es el diámetro exterior del hilo.

En la Figura 2 se muestran las tendencias del par necesario para el movimiento de la tierra a medida que varía el ángulo de instalación de la herramienta y la velocidad de giro.

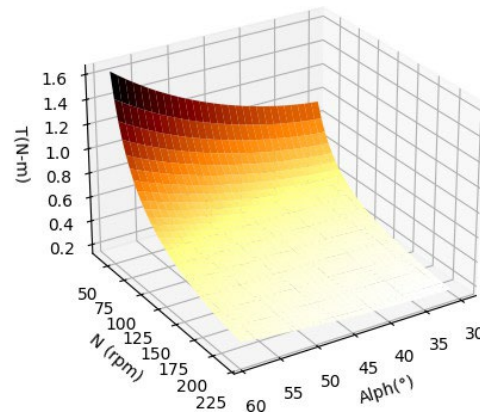


Figura 2: Tendencias del par necesario respecto a la velocidad de giro y el ángulo de instalación de la herramienta de corte.

Dadas las tendencias y la no existencia de un óptimo se decide por utilizar un ángulo de ataque de $\alpha = 45^\circ$ y se define la velocidad de giro objetivo como $n = 200 \text{ rpm}$. Con estos

parámetros definidos se estima mediante Ecuación 7 un par necesario para lograr el movimiento del suelo de $T = 0,544 \text{ Nm}$.

4.1.3 Cargas verticales

Para lograr la penetración en el suelo, es necesario superar su resistencia a la penetración vertical (*RPV*). Este parámetro se determina mediante un ensayo de penetración vertical, en el cual una masa con punta cónica de 60° de generatriz se deja caer libremente sobre la superficie del suelo [Elisei, 2024]. En dicho estudio se reportan valores de *RPV* obtenidos bajo diferentes condiciones edáficas en campos de la República Argentina. Considerando la similitud en las características de los suelos entre Argentina y Uruguay, se adoptan dichos valores como referencia para estimar las cargas verticales necesarias para la penetración. Considerando como una profundidad de operación útil $d = 10\text{ cm}$ la misma se corresponde con una *RPV* = 2 MPa (ver Figura 3).

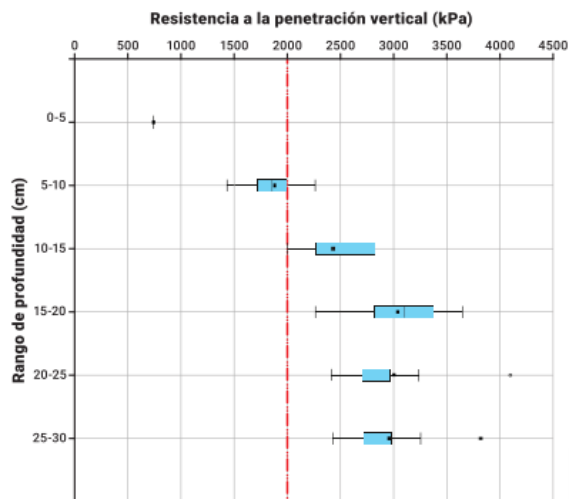


Figura 3: *RPV* bajo secuencia de cultivos intensa.
Imagen extraída de [Elisei, 2024]

Determinada la resistencia a vencer, se considera el cuerpo de tornillo como

cuerpo a compresión por lo que se presta especial cuidado a la inestabilidad elástica del cuerpo.

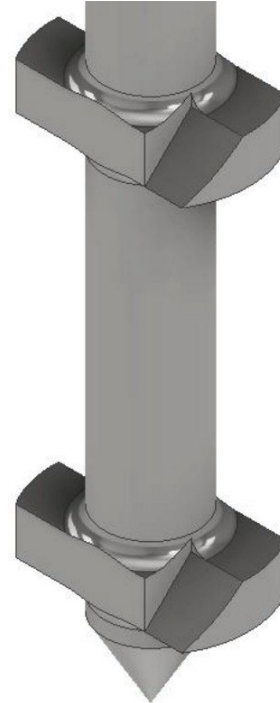


Figura 4: Vista de la punta de cono de penetración del actuador.

4.2 Diseño del sistema de posicionamiento tridimensional

Para un control efectivo de malezas, la herramienta debe operar de forma perpendicular al suelo y ubicarse con precisión sobre la maleza objetivo. Esto requiere un sistema de posicionamiento que garantice la correcta alineación antes de iniciar la penetración en el suelo. El desplazamiento en los ejes X e Y se resuelve mediante un sistema tipo T-Bot, que permite un movimiento horizontal preciso, mientras que el descenso vertical de la herramienta se realiza mediante un actuador lineal accionado por un tornillo de potencia.

4.2.1 Tbot

El sistema Tbot está compuesto por dos ejes perpendiculares con rodamientos lineales, cada uno acoplado a una platina que puede deslizarse libremente en la dirección correspondiente. Al fijar uno de los ejes, la platina es libre de desplazarse sobre este eje fijo, mientras que el eje restante es capaz de deslizarse sobre la platina. De este modo, es posible posicionar la punta del eje móvil en cualquier punto de un plano X-Y paralelo a la platina. En la Figura 5 puede verse un esquema del sistema. En dicho esquema los ejes verticales se mantienen fijos mientras que los ejes horizontales son capaces de traslación, el cabezal de la derecha es quien contiene al actuador por lo que este es el cabezal que se extiende por fuera de la base y hacia la maleza.

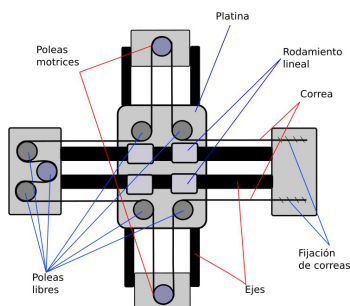


Figura 5: Esquema de elementos del Tbot.

El sistema se acciona mediante dos motores ubicados a ambos lados del eje fijo. La acción conjunta de los motores se transmite a la platina y al eje móvil a través de correas dentadas (cuyas puntas están fijadas a una de las puntas del eje

móvil), junto con poleas de redireccionamiento. Si los motores giran en el mismo sentido, se produce el desplazamiento de la platina Figura 6; mientras que si giran en sentidos opuestos, se genera el movimiento del eje móvil Figura 7.

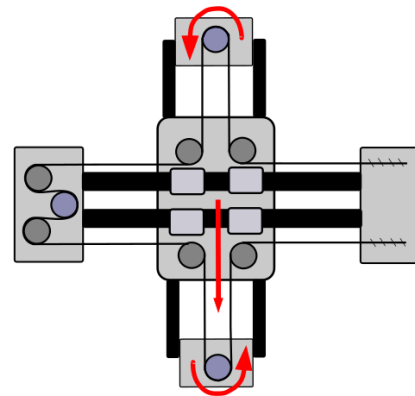


Figura 6: Esquema de movimiento de la platina.

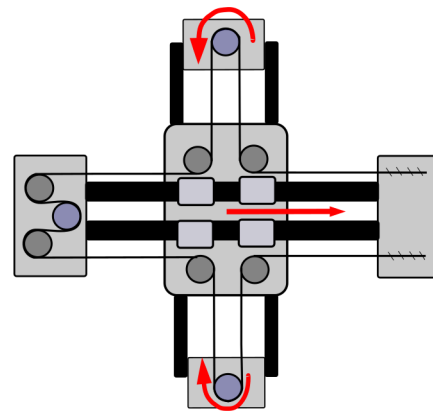


Figura 7: Esquema de movimiento de los ejes.

La coordinación de movimientos se logra mediante 2 motores NEMA 17 modelo 17HS19-2224S1. Para este prototipo se seleccionaron ejes de $l = 300\text{mm}$ y diámetro $d = 20\text{mm}$.

En la Figura 8 se presenta una vista general del sistema de posicionamiento del actuador. Entre los componentes

destacados se encuentran el cobertor del tornillo de potencia, el sistema de fijación del motor a los ejes en la sección frontal y el mecanismo de ajuste de la polea en la parte posterior.

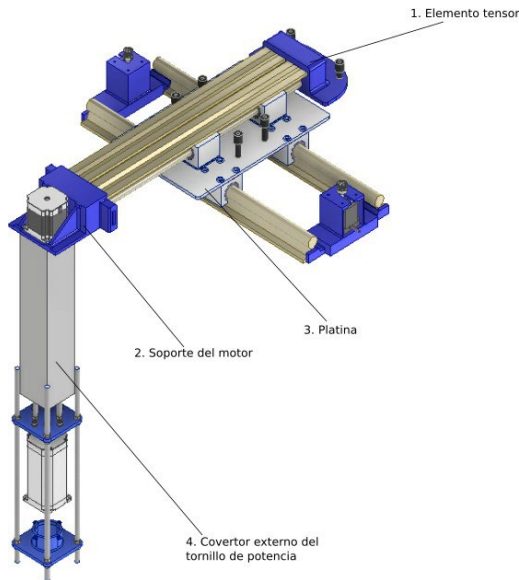


Figura 8: Ensamble del sistema de posicionamiento.

El sistema de ajuste de la correa se materializa en el componente 1 mostrado en la Figura 8. Este se ubica en el extremo libre de los ejes móviles, opuesto al actuador. El diseño incorpora una ranura que permite el desplazamiento de una polea dentada montada sobre un tornillo que actúa como eje de rotación. Esta configuración posibilita un ajuste fino de la tensión de las correas mediante el posicionamiento controlado del tornillo antes de su fijación definitiva mediante tuercas.

4.2.2 Sistema de descenso

Como se mencionó anteriormente, el descenso del sistema se realizará mediante un tornillo de potencia. El mismo será accionado por un motor

NEMA 23 modelo 23HS22-2804S el cual es solidario al eje móvil del T-Bot. La fuerza de penetración es transmitida desde la tuerca de bronce a través de 4 varillas de aluminio hacia una platina inferior lo que permite el descenso del actuador según se ve en Figura 9.

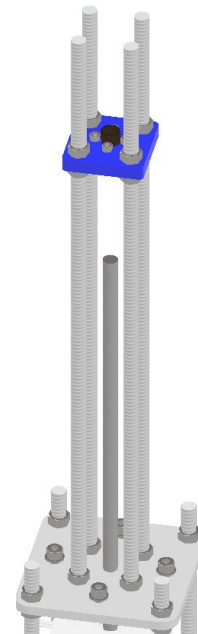


Figura 9: Sistema de transmisión de carga del tornillo a la platina del motor.

La inclusión del cobertor del tornillo de potencia resulta fundamental, dado que el sistema operará en condiciones ambientales con elevada presencia de suciedad y polvo. Estas partículas pueden comprometer el funcionamiento del tornillo, cuya transmisión de movimiento se basa en la fricción entre la tuerca y la rosca, afectando tanto su eficiencia como su vida útil. En consecuencia, se diseña un sistema telescópico para lograr cubrir al tornillo durante toda la extensión de su

recorrido.

El tornillo de potencia es dimensionado para soportar una carga de $F = 220\text{ N}$ a una velocidad de descenso de $v_d = 30\text{ mm/s}$ con un factor de diseño de $FD = 1,5$. Los criterios de dimensionamiento del tornillo se realizan mediante estabilidad elástica y aplastamiento. Según esto se determinó que un tornillo M8 de 2 entradas con rosca cuadrada sería óptimo como solución para el problema.

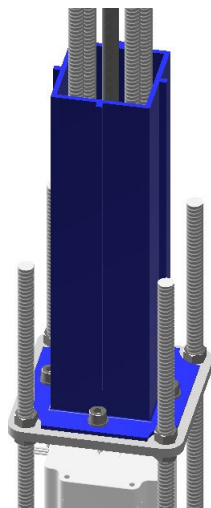


Figura 10: Cobertor inferior y platina solidaria al motor de actuación.

5 Conclusión

El trabajo presentado forma parte de un proyecto de desarrollo llevado adelante por docentes de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de la República (UdelaR), con financiamiento del Instituto Nacional de Innovación Agropecuaria (INIA). En este contexto, el presente estudio se enfocó específicamente en el diseño de un actuador mecánico para el control de

malezas.

Se desarrolló un actuador que logre llevar el suelo a un estado de falla absoluto con un diámetro de $d = 10\text{ mm}$, ángulo de corte de instalación $\alpha = 45^\circ$ un espesor de diente de $w = 25,4\text{ mm}$ y una altura de $l = 220\text{ mm}$.

Los resultados obtenidos en las pruebas iniciales muestran un desempeño prometedor del actuador para lograr la extracción y eliminación de malezas en el espacio intra-hileras de la plantación logrando la extracción completa de las malezas.

El sistema mecánico desarrollado ofrece una alternativa concreta al uso de herbicidas, contribuyendo a prácticas agrícolas más sostenibles.

El sistema de posicionamiento desarrollado permite posicionar al actuador encima de la maleza a tratar sin la necesidad de que el robot se posicione por encima de la misma. Esto permite la utilización de una base móvil que se mueva únicamente inter-hileras donde el terreno es mucho más homogéneo y no es necesario esquivar a la plantación.

Dentro del marco del proyecto, el siguiente paso es la incorporación del actuador y sistema de posicionamiento en una base móvil a diseñar y la implementación de un modelo de reconocimiento de imágenes que permita al robot accionar de forma completamente autónoma y sin intervención humana sobre las malezas.

Financiación: Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria (INIA) dentro del marco del proyecto INIA FPT410 *Monitoreo y control de malezas con robots autónomos móviles en plantaciones frutales*.

Referencias

[far, 2025].Farmdroid fd20.

<https://farmdroid.com/products/farmdroid-fd20/>.

Accedido el 31 de julio de 2025.

[Elisei, 2024] Elisei, J. (2024). elisei2024suelosargentina. *Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA)*.

[Gao and Su, 2024] Gao, W. T. and Su, W. H. (2024). Weed management methods for herbaceous field crops: A review.

[Hu et al., 2013] Hu, J., Zhang, Z., Guo, Y., and Li, L. (2013). Research on cutting resistance torque of soil in auger drilling. In *Proceedings - 2013 4th International Conference on Digital Manufacturing and Automation, ICDMA 2013*, pages 1047–1050.

[Langsenkamp et al., 2014] Langsenkamp, F., Kohlbrecher, M., and Strothmann, W. (2014). Tube stamp for mechanical intra-row individual plant weed control and kielhorn kielhorn farm. Technical report.

[Mia et al., 2020] Mia, M. J., Massetani,

F., Murri, G., Facchi, J., Monaci, E., Amadio, L., and Neri, D. (2020). Integrated weed management in high density fruit orchards. *Agronomy*, 10.

[Mohler et al., 2021] Mohler, C. L., Teasdale, J. R., and DiTommaso, A. (2021). Mechanical and other physical weed management. In *Manage Weeds On Your Farm*. SARE Outreach. Accessed: October 5, 2025.

[Odd.Bot B.V., 2025] Odd.Bot B.V. (2025). Odd.bot– mechanical weeding robots. <https://www.odd.bot/>. Accessed: 28 July 2025.

[Reece, 1964] Reece, A. R. (1964). The fundamental equation of earthmoving mechanics.

27. Ciencia, tecnología e innovación

Entre la Imagen y la Realidad: Un Análisis Crítico de la Ciencia y la Tecnología y su Comunicación pública en Redes Sociales

Autor: Riquelme, Mathias; mathias.riquelme@estudiantes.uv.cl

Profesor guía: Arancibia, Marcelo; marcelo.arancibia@uv.cl

Universidad de Valparaíso/ Facultad de Humanidades y Educación

Resumen:

Hablar de ciencia y tecnología hoy en día nos genera distintas imágenes. Hay una cierta noción que el común de las personas relaciona con la tecnología, lo confiable y lo verdadero. Sin embargo, si es que tomamos por caso la forma en que las redes sociales transmiten diariamente los últimos avances y descubrimientos científicos y tecnológicos ¿hay en estas un fiel reflejo de lo que es la actividad científica y tecnológica? Para responder aquello, los objetivos de esta investigación fueron los siguientes: analizar las representaciones de la ciencia y la tecnología en las redes sociales, examinando su pretendida fidelidad a la realidad científica y tecnológica. Igualmente, aplicar un enfoque filosófico crítico, evaluando las concepciones transmitidas. Por último, estudiar cómo es que la comunicación mediática de las redes sociales afecta la comprensión pública de la ciencia y la tecnología.

La metodología adoptada consistió en el análisis crítico de distintos textos, los cuales nos permitieron contextualizar ideas esenciales acerca de la ciencia, la tecnología y su impacto en la cultura científica y tecnológica. A partir de ello, dimos cuenta de este fenómeno desde el análisis de las redes sociales, en donde se atendió a registros audiovisuales de YouTube y TikTok. Para seleccionar esto último se empleó la técnica de semana construida, con la finalidad de garantizar la objetividad en el proceso de selección.

Finalmente, el principal resultado del que pudimos dar cuenta fue que, por más que las redes sociales representan un espacio de libre discusión y debate, se advirtió que, a la hora de comunicar sobre ciencia y tecnología, no se hace más que hablar de sus “grandes éxitos”, dejando de lado la reflexión crítica necesaria para nuestros tiempos.

Palabras claves: Ciencia, Tecnología, Redes Sociales.

1. Introducción:

En un mundo en el que las respuestas parecen estar dadas de facto, y en el que los apresurados avances hacen que veamos resultas nuestras necesidades rápidamente, la filosofía se abre como un espacio de reflexión de libre movimiento. Aristóteles lo decía en su Metafísica, “todos los hombres por naturaleza desean saber” (Aristóteles, Metafísica, I, 980a), y por el propio deseo del conocimiento perseguía a esta ciencia cuyo fin era ella misma y no otro. Entre medio de las certezas que nos han traído el avance de las distintas disciplinas, la filosofía recorre y pone en duda lo evidente a primera vista, y da cuenta de lo necesaria que es su labor de segundo orden. Puede que esta no nos construya puentes como un arquitecto, ni salve vidas como un médico, pero le da un sentido al preguntar para qué ese puente, o por qué la vida y no mejor la muerte. De la misma forma, no responde para qué son los implementos que se usan día a día en el laboratorio de un científico, tampoco acerca del funcionamiento de un artefacto técnico, pero si pregunta *¿qué es la ciencia? ¿qué es la tecnología?*

Es esta cualidad de la filosofía la que permite pensar el trabajo de los demás saberes desde una perspectiva distinta,

una meta reflexión a partir de lo que el conocimiento de disciplinas como la matemática, física, biología y demás proporcionan. Es así como áreas de la filosofía han tenido un recorrido histórico tan extenso como para generar obras que han cambiado nuestra forma de ver el mundo, y dentro de ellas la filosofía de la ciencia y la tecnología se erigió como una de las más relevantes. Sin embargo, el paso del tiempo ha hecho que esta misma haya visto muchísimos cambios sobre sí, y con ello discrepancias en su forma de entender estos dos fenómenos. Hemos pasado desde comprenderlas como compartimentos aislados de la sociedad, hasta entender que funcionan en su plenitud en ella, y que, por tanto, no podemos aislarlas de eso.

El rol de la filosofía a la hora de cuestionar los fundamentos, métodos, límites, alcances e impacto social de la ciencia y la tecnología es sumamente relevante para nuestro desarrollo como comunidad, y por lo mismo tiene una tarea predominante en lugares como los estudios acerca de Ciencia, Tecnología y Sociedad. Repensar esto es repensar acerca del lugar e impacto que ocupa la ciencia en la sociedad, y por ello es necesario entenderla desde las distintas

perspectivas en que la filosofía y su historia la han comprendido.

1.1. La Concepción Heredada y la filosofía de la ciencia

Atendiendo a la historia de la filosofía de la ciencia, es evidente que su definición y principios se vio afectada a partir del trabajo de autores que, repensando sus cimientos, desencadenaron un proceso que haría de ella algo completamente nuevo. Sin embargo, antes de ello, la manera de comprender a la ciencia distaba de la que sostenemos hoy. Esta “ciencia” es resultado de una visión clásica y normativa que predominó durante gran parte del siglo XX, y fue la conceptualización que permitió desde la defensa de una ciencia libre de valores extra epistémicos, hasta la creación del Proyecto Manhattan. La conocida como Concepción Heredada de la ciencia (CH), o Imagen heredada y Concepción estándar, fue la manera en que se entendió el fenómeno científico durante un largo tiempo, y que cuyo desarme nos da el campo en que situamos nuestra investigación (Suppe, 1974, p. 4).

Las principales características de la Concepción Heredada fueron establecidas a partir del grupo de científicos y filósofos que se reunían en los años veinte bajo el

nombre del “Círculo de Viena”, integrando a autores de la talla de Rudolf Carnap, Friedrich Schlick y Carl Hempel. Estos defendían una serie de supuestos en donde, para partir, se definía la ciencia y su trabajo siempre desde un método riguroso, el cual, compuesto de una serie de pasos, permitía la correcta aproximación hacia los fenómenos naturales. El llamado “método científico experimental” fue definido como la reconstrucción racional de todo el proceso de investigación, siendo considerado durante mucho tiempo como el pináculo desde donde comprendíamos el mundo, y que, a pesar de sus variaciones, era transversal a disciplinas como la física, química, biología, etc. Igualmente, este iba de la mano con la defensa de criterios de demarcación entre lo que correspondía precisamente a ciencia y lo que no. Criterios como la falsabilidad, confirmación, y verificabilidad buscaban ser aplicados irrestrictamente a la hora de investigar, razón por la que se les confiere tanta importancia para la misma ciencia. Como señala Hempel, “una explicación científica de un fenómeno consiste en subsumirlo bajo leyes generales y especificar condiciones iniciales” (Hempel, 1966, p. 49). Esto nos muestra cómo, ante todo, la CH veía al método y a los criterios como el arsenal de herramientas básico

para aproximarse a conocer los fenómenos, ejemplificando su esencia estructurada.

1.2. La transición hacia los estudios CTS

Ahora bien, tomó un tiempo para que esta concepción de la ciencia y de la tecnología dejara, al menos, de tener una vigencia tan preponderante. Fue precisamente durante los años sesenta que comenzamos a denotar una transición entre esta perspectiva hacia una en que la ciencia ya no era aislada de los cambios sociales y consensos de la comunidad de expertos. Podemos identificar dos principales promotores de este proceso, ambas reacciones de carácter público, que González, López y Luján (2000) denominan la reacción académica y la reacción social. Sobre la primera, esta consiste en el advertimiento de falencias en los principios de la CH, los cuales fueron hechos ver gracias al trabajo de autores como Thomas Kuhn, Paul Feyerabend, Imre Lakatos, Carl Hempel, Ludwig Fleck, Karl Popper, etc., quienes comienzan a reparar en vacíos que durante mucho tiempo se sostuvieron en este proyecto. Falencias como los problemas de la inducción venían a poner en duda los cimientos del conocimiento científico, dando cuenta de que este no

tendría aquel estado conclusivo, y que por ello “[...] no podemos por tanto aspirar a garantías concluyentes, y así el conocimiento científico parece obligado a resignarse con la mera confianza «razonable» [...]” (González, López y Luján, 2000, p. 36). El mundo académico comenzaba a criticar ideas como el progreso lineal de la ciencia y su concepción metodológica, recalcando la necesidad de repensar los principios en que se ceñía la filosofía de la ciencia.

Por otro lado, los autores sostienen que el contexto social llevó a una reacción igualmente fuerte, en donde casos como el Proyecto Manhattan y su aplicación en Hiroshima y Nagasaki representaron un punto de inflexión en la mirada optimista de la ciencia y la tecnología. A raíz de esto, el activismo social comenzó a ser cada vez más popular, y por lo mismo aumentaron la creación de asociaciones como el grupo Science for the People y la British Society for the Social Responsibility in Science, las cuales, ambas de un carácter marxista, buscaban protestar acerca de los abusos de la ciencia y la militarización de la tecnología. Este tipo de críticas ponían en jaque aspectos como la racionalidad lógica defendida por la imagen hereditaria, que apelando a sostener valores netamente epistémicos

como la objetividad, terminaba por promover discriminaciones en los supuestos “hechos científicos”. En conjunto al aumento de la percepción pública negativa del desarrollo científico, el proyecto de la CH comenzó a perder sus últimos bastiones al incorporar el aspecto social a la formulación científica, algo totalmente esperable si atendemos a que esta es una parte constituyente de la vida actual. De tal forma, la conjunción entre la reacción académica y la social llevaron a denunciar como “progresivamente la ciencia se fue centrando en áreas cada vez más alejadas de la vida de los ciudadanos” (González, López y Luján, 2000, p. 56).

Con estos dos antecedentes, la ciencia y la tecnología comenzaron a convertirse en objeto de análisis político y social en distintos lugares del mundo, realizando la transición hacia un nuevo tipo de estudios que buscaba incorporar estos elementos. Así, el paso desde la CH hacia el movimiento de Ciencia, Tecnología y Sociedad fue resultado de la apropiación tanto crítica como valorativa del desarrollo científico, consolidándose de manera definitiva desde el año 1969 hasta el presente. Lo que distinguió a este movimiento fue el cambio desde una perspectiva científicista a una que tenía

como eje central la interdisciplinariedad, estableciéndose como un espacio en el que la ciencia podía ahora entrar en diálogo con áreas como la filosofía, sociología e historia. Este campo daba paso a abrir la discusión a la variedad de autores que reflexionaban en conjunto acerca de la ciencia y la tecnología como fenómenos sociales, destacando la necesidad de incorporar distintas visiones.

Con todo esto, podemos señalar las principales características de los estudios CTS. En primer lugar, en estos la ciencia y la tecnología serán concebidos como expresión de la práctica humana, insertas en un entramado complejo de valores e intereses. Esto nos lleva a el aspecto democrático de ambas, el cual es incorporado en esta visión como uno de sus pilares. En segundo lugar, reconocemos la importancia del enfoque multidisciplinar que los caracteriza, dándose como un espacio de encuentro y diálogo acerca de la ciencia y la tecnología. Igualmente, esto nos llevará a que las comprendamos como procesos sociales que no dejan de estar modelados por la constelación de datos en que se ciñen sus culturas, por lo que destacarán los procesos de experiencia e interpretación a la hora de su estudio. Por último, estos estudios abrirán la puerta a

valores más allá de lo epistémico o técnico, reconociendo el aspecto político y ético que hace sentido a nivel social.

En síntesis, el paso desde la Concepción Heredada hacia los estudios CTS marcó un cambio fundamental en la forma de entender la ciencia y la tecnología: de una visión lógica y neutral a una concepción situada, atravesada por lo social. Este giro abre el espacio en el que se inscribe nuestra investigación.

2. Objetivos

Los objetivos que guían esta investigación consisten, en primer lugar, en analizar las representaciones de la ciencia y la tecnología en redes sociales, particularmente en plataformas como YouTube y TikTok, examinando la pretendida fidelidad con que estos espacios transmiten los avances, descubrimientos y narrativas científicas y tecnológicas. A través de este análisis, se busca evidenciar cómo dichas plataformas no solo difunden información, sino que moldean imaginarios culturales sobre lo que significa la ciencia y la tecnología en la vida contemporánea. De manera complementaria, se plantea como propósito aplicar un enfoque filosófico crítico, recurriendo a categorías y discusiones provenientes de la filosofía de

la ciencia y la tecnología, con el fin de evaluar las concepciones implícitas en los discursos mediáticos y problematizar sus alcances y limitaciones. Asimismo, se pretende estudiar de qué forma la comunicación mediática digital repercute en la comprensión pública de la ciencia y la tecnología, considerando tanto los factores representacionales como los prácticos y valorativos que median en la recepción de los contenidos, y que terminan configurando modos específicos de cultura científica y tecnológica. Para ello, la investigación se apoya en el modelo propuesto por el filósofo español Miguel Ángel Quintanilla, cuyo marco permite distinguir entre dimensiones representacionales, prácticas y valorativas de la cultura, posibilitando un análisis integral de los contenidos y de la forma en que son apropiados socialmente. La investigación también persigue comparar los registros presentes en distintas plataformas, atendiendo a las diferencias que emergen entre YouTube y TikTok, y observando cómo en cada una se expresan elementos intrínsecos y extrínsecos de la cultura científica y tecnológica, desde conocimientos y prácticas hasta valores e imaginarios colectivos. En este marco, el propósito no se limita a describir los contenidos que circulan en dichas redes, sino a

comprender en qué medida estos modos de comunicación digital contribuyen a consolidar una cultura científica y una cultura tecnológica que, más allá de resaltar únicamente grandes éxitos, pueda abrir espacios para la reflexión crítica, el cuestionamiento ciudadano y la inclusión de la dimensión social, ética y política que atraviesa de manera inevitable a la ciencia y la tecnología en la sociedad contemporánea.

3. Materiales y métodos

Con el propósito de evitar sesgos en nuestra investigación y resguardar la objetividad del análisis, hemos decidido emplear una estrategia que permita obtener una muestra representativa del contenido publicado a lo largo del tiempo. Se trata del muestreo por semana construida, técnica que garantiza una cobertura equilibrada de los contenidos sobre ciencia y tecnología difundidos en redes sociales dentro de un período determinado.

Esta estrategia consiste en la construcción de una semana artificial, seleccionando aleatoriamente un lunes, un martes, y así sucesivamente, de entre las 52 semanas del año. Esto permite capturar la variabilidad típica del contenido según el día de la semana, sin necesidad de

analizar semanas completas de forma continua, lo que resultaría inviable. Como señalan Hester y Dougall, “se ha demostrado que es más eficiente que el muestreo por días consecutivos cuando se analiza contenido noticioso” (Hester & Dougall, 2007, p. 813), motivo por el cual consideramos provechosa su aplicación.

En nuestro caso, aplicado a un período anual correspondiente a 52 semanas, se realizará una selección aleatoria de contenidos informativos vinculados a ciencia y tecnología publicados en redes sociales, siguiendo los lineamientos de esta técnica.

4. Resultados y discusión

A partir del uso de la técnica antes mencionada, nos fue posible recoger tanto en la red social de YouTube como en TikTok un total de 60 archivos audiovisuales, los cuales, cumpliendo con la temática de sus creadores, tenían a la ciencia y la tecnología como sus ejes centrales. Al emplear la semana construida en lo referido al año 2024, nos fue posible evidenciar cuáles eran los temas y novedades con mayor predominio en aquel momento, pudiendo destacar – en el ámbito tecnológico – todo lo concerniente al desarrollo de la inteligencia artificial en conjunto con sus

diversas aplicaciones en la vida diaria. Por el lado de lo científico, el contenido solía variar entre las divulgaciones de conocimientos aleatorios, tales como leyes físicas o efectos del cambio climático, a las que se sumaban las predicciones por el avance científico para el transcurso del año.

Sin embargo, estos resultados nos han permitido reflexionar a partir de una serie de elementos que, en un sentido filosófico, se está dando cuenta de una cierta imagen, práctica y valoración acerca de la ciencia y la tecnología. Pasaremos a analizar aquellas principales ideas que han surgido a partir de nuestra investigación.

Nuestra primera reflexión a partir de los resultados obtenidos arrastra un canon filosófico que, académicamente, parecía estar en desuso, pero que en el contexto de la comunicación digital de ciencia y tecnología se evidencia rápido. Se trata de uno de los principales cambios de paradigma ejercidos durante el paso de la CH hacia los Estudios CTS, los cuales nutriéndose del trabajo de autores como Feyerabend, Lakatos y Kuhn permitieron reflexionar acerca de la forma en que comprendemos la ciencia y la tecnología (Feyerabend, 1972; Lakatos, 1976; Kuhn, 1962).

Este último en particular, en su obra *La estructura de las revoluciones científicas* (1962), nos plantea un cambio de visión sobre cómo es que debemos considerar, a un nivel histórico, el transcurso y desarrollo de esta gran empresa llamada ciencia. Para el autor, ya no se trataría de aproximarnos a ella netamente a partir de lo que algún gran éxito significó, sino que, en realidad, reconocer su prevalencia es también ser capaz de dar cuenta de la evolución por la que tuvo que transitar hasta su establecimiento actual. En otras palabras, la historia de la ciencia no sería únicamente la historia de sus grandes éxitos, sino que también la de sus fracasos, conflictos, evoluciones y revoluciones. Kuhn adopta esta perspectiva desde el proyecto historicista de la ciencia, en donde la evolución de la teoría científica no proviene de la mera acumulación de hechos, sino de un grupo de circunstancias y posibilidades intelectuales sujetas al cambio (Kuhn, 2004, p. 92). Esto último implicaría destruir un mito clásico compartido acerca del progreso de las ciencias, el cual ya no sería ni lineal ni acumulativo, sino que, por el contrario, se mueve sin seguir una línea ya trazada de solo mejoras. Aquí, ante periodos de “ciencia normal”, las crisis serán necesarias para la transformación de los conocimientos científicos que

manejamos, afirmando el autor que ellas, llevando a las roturas de paradigmas a través de las revoluciones, darán cuenta de la nueva prevalencia de un determinado conocimiento.

Así, el fracaso, los errores y los dilemas serán pieza clave para el avance científico. Sin embargo, aquí es donde nos topamos con una realidad distinta. Dentro del total de archivos analizados, podemos dar cuenta que el 71.9% del contenido en YouTube y TikTok, considerando tanto la cultura científica como la tecnológica, presenta la ciencia y la tecnología como una historia de éxitos, omitiendo fracasos, conflictos y el contexto histórico de crisis y revoluciones descrito por Kuhn y los Estudios CTS. Este porcentaje se suma al 63,3% obtenido a partir de las valoraciones positivas tanto de la cultura científica extrínseca como de la cultura tecnológica extrínseca, en donde, separándolas según red social, hallamos un 90% de estas tan solo en YouTube, frente a un 30.33% en TikTok.

Ambos resultados no hacen más que confirmarnos un punto esencial, que, según el contenido que se comunica en redes sociales, pareciera primar una narrativa triunfalista alineada con la Concepción Heredada de la ciencia, que destaca logros sin matices críticos, en

contraste con la perspectiva de Kuhn y los Estudios CTS. Esto último es lo que nos parece lo más problemático, puesto que da cuenta de una falta de reflexión crítica a la hora de evaluar y analizar los distintos avances que la ciencia y la tecnología tienen en nuestro presente. Tomando como ejemplo lo recogido en YouTube, gran parte de los videos que trataban acerca de la ciencia lo hacían meramente difundiendo descubrimientos, innovaciones y, en gran medida, sucesos que no hacían más que exacerbar la esperanza en los trabajos de los científicos. Por el lado tecnológico, el enfoque iba en los artefactos cuyo uso prometía ser revolucionario, destacando las millonarias inversiones y posibles cambios en áreas como la robótica y la inteligencia artificial. A esto, es clara la perspectiva transmitida: un excesivo optimismo que, quizás conscientemente, decide evadir los aspectos más polémicos acerca del uso y desarrollo de la ciencia y la tecnología.

Finalmente, las implicancias de esto son claras: la formación de imágenes científicas y tecnológicas meramente caracterizadas por el logro, la utilidad y el progreso lineal. Mantener una comunicación pública de la ciencia y la tecnología dentro de estos marcos tendrá

efectos claros en la posterior reproducción cotidiana de lo visto en redes sociales, quedándose el público con que estas son empresas con un desarrollo acumulativo, lejos de pasar por procesos de error y discordancia. Si es que se busca una difusión científica y tecnológica apropiada, que desee que los no expertos se familiaricen tanto con lo bueno como lo mejorable de lo científico y lo tecnológico, es necesario que el enfoque cambie por uno crítico. Un enfoque que de paso a la reflexión y permita integrar las controversias como punto necesario para un correcto avance.

Ahora bien, afirmar que las redes sociales no han significado un espacio de mayor apertura y difusión sería caer en una mentira que, lejos de poder ser sostenida, da cuenta de un desconocimiento profundo de la forma en que estas han operado durante el último tiempo a nivel global. Los espacios en que las personas podían hablar de ciertos temas particulares, y con posibilidad de alcance masivo, en algún punto fueron altamente requisados, y por la misma razón escasos.

Con el desarrollo del internet, los creadores de contenido dejaron de ver a los medios tradicionales como la única fuente para divulgar sus ideas, pasando a ser este un espacio con posibilidades de

incluso aún mayor alcance. Ello no fue excepción a la hora de comunicar acerca de ciencia y tecnología, la cual, en algún punto de la historia, veía relegada su oportunidad de comunicación masiva a programas de escaso alcance televisivo, al igual que segmentos radiales y de prensa que cautivaban únicamente a los más entendidos. Esta tendencia comenzó a cambiar con la creación de espacios como los blogs y, más concretamente, la llegada de YouTube en el 2006, la cual poco a poco comenzó a posicionarse como el lugar por antonomasia de creación y publicación de videos. Si bien en sus inicios tuvo un arranque lento, ya para el 2012 era de las principales representantes del nuevo mundo digital, con varios virales a su haber y fieles creadores de contenido que publicaban constantemente sus videos. Ya con la proliferación de los smartphones, estos medios comenzaron a presentarse en formatos de aplicación, viniendo YouTube como incluida en todos aquellos con operador Google (dueños desde el 2006). De tal forma, y una vez afiatada la idea del teléfono con aplicaciones, el contenido vertical comenzó a ser cada vez más popular, lanzándose inicialmente en el 2016 TikTok, la cual transportaba la creación de contenidos al terreno de lo inmediato, con videos que, a diferencia de

YouTube, solían oscilar entre los 30-60 segundos de duración.

Con aquel panorama, la ciencia y la tecnología encontraron un lugar en las redes sociales para poder ser divulgadas, apoyándose en la forma en que estas funcionaban para transmitir sus conocimientos de una manera amigable, entretenida, y que, por sobre todo, lograra ser accesible a todo público. La visibilidad ya no era un problema, puesto que aquel que deseara consumir aquellos contenidos podía hacerlo sin la necesidad de especializarse, y los “expertos” (científicos, estudiantes o aficionados a la ciencia y la tecnología) cumplían con aquel rol de comunicar abiertamente. Este nuevo escenario, aparentemente más democrático en términos de acceso y circulación de contenidos, puso a la ciencia y la tecnología en una vitrina antes inalcanzable para muchos sectores de la población.

Sin embargo, y como pudimos dar cuenta en nuestra investigación, se ha advertido un panorama paradójico. Y es que si bien se cumplen con todas estas bases de difusión, las cuales reflejan el tipo de visibilidad distinto que ahora pueden llegar a poseer la ciencia y la tecnología en las redes sociales, ello no ha significado una mayor profundización en los contenidos

que se comunican. En términos cuantitativos, hemos hallado que, en lo particular de la cultura tecnológica compartida en TikTok, se observa una clara prevalencia de lo que Quintanilla denomina cultura tecnológica extrínseca, presente en un 56,7% de los videos analizados, frente a un escaso 13,3% de contenidos donde se abordó tecnología desde una perspectiva intrínseca, es decir, mostrando o explicando los conocimientos técnicos o teóricos asociados.

Esto último nos permite dar cuenta de un fenómeno en que la tecnología, si bien está visiblemente presente en los distintos contenidos, ella es mostrada a partir de un marco estético y funcional, es decir, con el fin de mostrarla únicamente a partir de su rol de “novedad”. Los videos de TikTok en que, por ejemplo, se hablaba de nuevos artefactos presentes en ferias tecnológicas, lo hacían a partir de resaltar su carácter de nuevo y “revolucionario”, idealizando su llegada y posibles efectos en nuestra cotidianidad. No obstante, las propiedades internas de aquellos artefactos parecían no ser relevantes, dando pocas veces paso a una reseña que destacara por presentar sistemas operativos o conocimientos tecnológicos intrínsecos. De tal forma, lo extrínseco, las imágenes culturalmente compartidas

acerca de qué es la tecnología, solían primar en TikTok por sobre el detalle de profundidad en cómo funcionaban aquellas tecnologías o cuál era la información tecnológica necesaria para comprender su origen. Lo tecnológico está más presente como accesorio, decoración o efecto práctico que como contenido en sí.

Por otro lado, si comparamos estas cifras con lo recogido en YouTube, aquí encontramos una mayor proporcionalidad en torno a las formas de representación de la tecnología, habiendo un 40% de cultura tecnológica extrínseca, frente a un 36,7% de la cultura tecnológica intrínseca. Esto nos muestra una relación mucho más equilibrada acerca de la forma en que se comparte la tecnología, primando de la misma forma el explicar las representaciones y operaciones prácticas que se llevan a cabo en el ámbito tecnológico intrínseco. Si bien encontramos una leve superioridad de lo extrínseco, creemos que ello responde a la forma en que funcionan los medios digitales, los cuales no están del todo exentos de la necesidad de cautivar al espectador a partir de elementos mayormente extrínsecos antes que de profundidad intrínseca. Esto último corresponde al fenómeno de las “culturas

algorítmicas” (Sued, 2022), la cual da cuenta de la prevalencia que tienen estos a la hora de determinar los contenidos con mayor visibilidad en las redes sociales, compartiéndose con mayor frecuencia bajo el mismo algoritmo interno manejado.

A pesar de ello, podemos dar cuenta de una posible consecuencia en todo esto, a saber, que por más que el contenido cumpla con su labor de difundirse y, con ello, familiarizar al público con conocimientos – más bien, imágenes de la tecnología, esto no desembocará en la necesaria comprensión interna de lo tecnológico. En otras palabras, da cuenta de una ilusión de cercanía con el fenómeno científico y, en este caso particular, tecnológico, ya que permitirá que el común de las personas maneje conceptos como la inteligencia artificial, algoritmos o artefactos, pero no por ello sabrán cómo funcionan. Esto produce una relación paradójica: nos volvemos usuarios activos, valoramos el rol de la tecnología en nuestras vidas, pero no tenemos un lenguaje para comprenderlas ni una voluntad de interrogar su lógica interna. Así, según se vio en TikTok, la cultura tecnológica adquirida en redes sociales rozará únicamente con lo extrínseco, pero pocas veces llevará a manejar los conocimientos tecnológicos

relacionados con lo interno, lo práctico operacional y los valores epistémicos de dicho fenómeno.

5. Conclusiones

A lo largo de esta investigación, hemos buscado desentrañar las formas en que la ciencia y la tecnología son representadas en las redes sociales, particularmente en plataformas como YouTube y TikTok, y cómo estas representaciones moldean la comprensión pública de ambos fenómenos. A través de un análisis crítico, apoyado en la filosofía de la ciencia y los estudios de Ciencia, Tecnología y Sociedad (CTS), hemos constatado que las redes sociales, si bien han democratizado el acceso a contenidos científicos y tecnológicos, tienden a perpetuar una narrativa triunfalista que recuerda los postulados de la Concepción Heredada. Esta narrativa, centrada en destacar “grandes éxitos” y omitir los fracasos, conflictos y controversias, limita la profundidad de la reflexión crítica que resulta indispensable para comprender la ciencia y la tecnología como procesos sociales complejos, atravesados por valores, intereses y dilemas éticos.

Los resultados obtenidos, mediante la técnica de la semana construida, revelan que en YouTube y TikTok predomina una

visión de la ciencia y la tecnología enfocada en lo extrínseco: logros espectaculares, innovaciones revolucionarias y promesas de un futuro optimista. En TikTok, especialmente, la cultura tecnológica extrínseca se impone con un 56,7% de los contenidos analizados, frente a un escaso 13,3% que aborda aspectos intrínsecos, como los conocimientos técnicos o teóricos. YouTube, por su parte, muestra una representación más equilibrada, con un 40% de cultura tecnológica extrínseca y un 36,7% de intrínseca, lo que sugiere una mayor disposición a explicar procesos y fundamentos técnicos, aunque aún subordinada a la necesidad de captar la atención del público mediante elementos visuales y narrativas atractivas. Esta dinámica responde, en gran medida, a las lógicas de las “culturas algorítmicas”, que priorizan contenidos de alto impacto visual y emocional por sobre la profundidad reflexiva.

Esta tendencia tiene implicancias significativas. La comunicación pública de la ciencia y la tecnología en redes sociales, al centrarse en lo espectacular y omitir las crisis, los errores y las controversias, contribuye a formar una imagen idealizada que refuerza la percepción de un progreso lineal y

acumulativo. Esto no solo simplifica la complejidad de ambos fenómenos, sino que también genera una ilusión de familiaridad: el público se siente cercano a conceptos como la inteligencia artificial o los avances científicos, pero carece de herramientas para comprender su lógica interna o cuestionar sus implicaciones. En este sentido, las redes sociales, a pesar de su potencial democratizador, no logran consolidar una cultura científica y tecnológica que fomente el pensamiento crítico, la reflexión ética o la participación ciudadana informada.

Desde la perspectiva de los estudios CTS, esta situación pone de manifiesto la necesidad de repensar la comunicación de la ciencia y la tecnología en el ámbito digital. Si bien estas plataformas han ampliado el alcance de los contenidos, su enfoque debe trascender la mera difusión de logros para incorporar una mirada crítica que dé cuenta de los fracasos, las controversias y los contextos históricos y sociales que configuran ambos campos. Solo así será posible construir una cultura científica y tecnológica que no se limite a celebrar los avances, sino que invite a la ciudadanía a interrogarlos, a comprender sus límites y a participar activamente en los debates éticos y políticos que los atraviesan.

En última instancia, esta investigación nos lleva a una reflexión filosófica más amplia, en línea con lo planteado por Aristóteles sobre el deseo innato de saber. La ciencia y la tecnología, como expresiones de la práctica humana, no pueden ser reducidas a una sucesión de éxitos ni a una narrativa de progreso ininterrumpido. Por el contrario, su estudio y comunicación deben abrazar su carácter dinámico, conflictivo y profundamente humano, reconociendo que los errores, las crisis y las revoluciones son tan esenciales como los logros para su desarrollo. Las redes sociales, como espacios de encuentro entre la ciencia, la tecnología y la sociedad, tienen el potencial de ser un vehículo para esta reflexión, pero ello requiere un cambio en la forma en que se construyen y comparten sus contenidos, priorizando la profundidad crítica por sobre el espectáculo. Solo así podremos avanzar hacia una comprensión pública más rica, matizada y responsable de la ciencia y la tecnología en el mundo contemporáneo.

6. Bibliografía

- Feyerabend, P. (1989). Adiós a la razón. Madrid: Tecnos.
- González García, M., López Cerezo, J. A., & Luján López, J. L.

-
- (1996). Ciencia, tecnología y sociedad. Madrid: Tecnos.
- Hempel, C. G. (1966). Filosofía de las ciencias naturales. Barcelona: Ariel.
 - Hester, J. B., & Dougall, E. (2007). The efficiency of constructed week sampling for content analysis of online news. *Journalism & Mass Communication Quarterly*, 84(4), 811-824.
 - Kuhn, T. S. (1962). La estructura de las revoluciones científicas. México, D.F.: Fondo de Cultura Económica.
 - Kuhn, T. S. (2004). La estructura de las revoluciones científicas. México, D.F.: Fondo de Cultura Económica.
 - Lakatos, I. (1976). Proofs and refutations: The logic of mathematical discovery. Cambridge: Cambridge University Press.
 - Sued, G. E. (2022). Culturas algorítmicas: Conceptos y métodos para su estudio social. Buenos Aires: Editorial Teseo.
 - Suppe, F. (1974). La estructura de las teorías científicas. Barcelona: Ariel.
-

29_Matemática Aplicada

Otimização de Forma Aplicada à Stokes via Arcabouço Lagrangiano Abstrato

Autor: Gomes, Beatriz D.; beatrizdg@ime.usp.br

Orientador/a: Laurain, Antoine; antoine.laurain@uni-due.de

**Universidad de São Paulo / Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da
Computação - IME**

Resumo

Esta pesquisa investiga a formulação variacional e a análise matemática da derivada de forma associada ao problema de Stokes com fronteira livre. O problema é tratado sob a ótica da formulação de Kohn-Vogelius, possibilitando a definição de um funcional de custo cuja minimização conduz à identificação de soluções consistentes. Utiliza-se o arcabouço lagrangiano abstrato proposto por Laurain, Lopes e Nakasato, que fornece condições gerais para a existência da derivada de forma, da derivada material dos estados e do problema adjunto. A abordagem baseia-se em conceitos de análise funcional, teoria de Sobolev e cálculo de variações em domínios deformados, garantindo rigor matemático e aplicabilidade em problemas de otimização de forma. O caráter abstrato da formulação lagrangiana torna esta pesquisa particularmente relevante em um cenário atual em que problemas de fronteiras livres aparecem não apenas em mecânica dos fluidos, mas também em modelagem climática, dinâmica de epidemias e processos industriais, destacando o potencial de generalização desta abordagem matemática frente aos desafios contemporâneos.

Palavras-chave: Otimização de Forma; Estrutura Lagrangiana Abstrata; Equação de Stokes.

Introducción

O estudo de problemas de fronteira livre em domínios deformáveis é central para o desenvolvimento de técnicas em otimização de forma, permitindo quantificar a sensibilidade de funcionais de custo frente a alterações do domínio. Neste contexto, derivadas de forma desempenham papel essencial, e a formulação lagrangiana abstrata fornece um procedimento claro e replicável para obtê-las, sem necessidade de cálculos específicos para cada problema. Esta abordagem aplica-se a uma ampla classe de equações diferenciais parciais e fornece condições gerais para a existência das derivadas materiais dos estados e do problema adjunto. Como exemplo, este trabalho aplica a técnica ao problema de Stokes com fronteira parcialmente livre, enfatizando a formulação variacional e a obtenção precisa da derivada de forma. O caráter abstrato da abordagem torna esta pesquisa particularmente relevante, pois a metodologia desenvolvida pode ser aplicada a diferentes funcionais de custo, condições de contorno e modelos físicos, oferecendo uma ferramenta confiável de otimização de forma em problemas contemporâneos, como modelagem em engenharia, ciência de materiais e nanotecnologia, tratamentos e implantes na medicina e biomedicina, além de modelagem climática e dinâmica de epidemias.

Objetivos

O objetivo desta pesquisa é desenvolver uma formulação lagrangiana abstrata para o cálculo de derivadas de forma, utilizando como estudo de caso o problema de Stokes com fronteira livre, conforme a abordagem de Bouchon et al. [1]. A pesquisa busca caracterizar rigorosamente os gradientes de forma de funcionais definidos sobre domínios variáveis, estabelecendo uma base matemática sólida para a otimização de forma. Os objetivos específicos são:

- i) Resolver o problema de Stokes com fronteira livre: formular o problema primal, definir adequadamente os espaços funcionais e provar existência e unicidade da solução (u, p) com regularidade suficiente para o cálculo de derivadas de forma.
- ii) Construir a Lagrangiana abstrata associada ao funcional de custo $J(\Omega)$, incorporando o operador de Stokes e definindo de forma rigorosa os espaços funcionais E e F para o estado e o adjunto.
- iii) Calcular a derivada de forma via método do pullback e formulação adjunta, obtendo uma expressão explícita para o gradiente de forma $dJ(\Omega)(\theta)$ em função do campo de deformação θ .
- iv) Estabelecer propriedades matemáticas rigorosas da derivada de forma, incluindo continuidade, diferenciabilidade e condições de co-

ercividade da Lagrangiana.

v) Generalizar a abordagem para contextos abstratos, unificando o cálculo de derivadas de forma para uma classe mais ampla de problemas governados por equações diferenciais parciais lineares.

Materiales y métodos

Este estudio utiliza una metodología mixta que combina análisis cuantitativo y cualitativo. La muestra incluye datos de 15 universidades de la región, entrevistas con stakeholders y análisis documental. Los instrumentos de recolección de datos incluyen:

- Cuestionarios estandarizados
- Entrevistas semi-estructuradas
- Grupos focales
- Análisis de contenido documental

Resultados y discusión

Seja $A \subset R^2$ um domínio $C^{2,1}$ limitado com fronteira Γ_f . Além disso, assuma um segundo domínio $B \subset R^n$ com fronteira Γ que contém o primeiro domínio, $\bar{A} \subset B$. O domínio anular resultante é denotado por $\Omega := B \setminus \bar{A}$. Considere o seguinte problema

$$\begin{aligned} -2\nabla \cdot \sigma(u) + \nabla p &= f & \text{em } \Omega, \\ \nabla \cdot u &= 0 & \text{em } \Omega, \\ u &= g & \text{em } \Gamma_f, \\ u \cdot \nu &= 0 & \text{em } \Gamma, \\ \nu^T \sigma(u) \tau &= 0 & \text{em } \Gamma, \end{aligned} \quad (1.1)$$

$$2\nu^T \sigma(u) \nu - p = \lambda \quad \text{em } \Gamma,$$

adotando a formulação de Kohn-Vogelius introduzindo as funções auxiliares u_D, p_D e u_N, p_N , e temos assim os problemas de Dirichlet

$$\begin{aligned} -2\nabla \cdot \sigma(u_D) + \nabla p_D &= f & \text{em } \Omega, \\ \nabla \cdot u_D &= 0 & \text{em } \Omega, \\ u_D &= g & \text{em } \Gamma_f, \\ \nu^T \sigma(u_D) \tau &= 0 & \text{em } \Gamma, \\ u_D \cdot \nu &= 0 & \text{em } \Gamma. \end{aligned} \quad (1.2)$$

e Neumann

$$\begin{aligned} -2\nabla \cdot \sigma(u_N) + \nabla p_N &= f & \text{em } \Omega, \\ \nabla \cdot u_N &= 0 & \text{em } \Omega, \\ u_N &= g & \text{em } \Gamma_f, \\ \nu^T \sigma(u_N) \tau &= 0 & \text{em } \Gamma, \\ 2\nu^T \sigma(u_N) \nu - p_N &= \lambda & \text{em } \Gamma. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Sejam $L^2(\Omega)$ o espaço de Lebesgue, $H^k(\Omega)$ o espaço de Sobolev e $\mathbf{H}^k(\Omega)$ o espaço das funções de valor vetorial $H^k(\Omega)^2$. Defina os espaços de Hilbert

$$\begin{aligned} V &= \{v \in \mathbf{H}^1(\Omega) : v|_{\Gamma_f} = 0\} \\ V_0 &= \{v \in V : v \cdot \nu = 0 \text{ em } \Gamma\} \\ V_{0,\Gamma} &= \{v \in \mathbf{H}^1(\Omega) : v \cdot \nu = 0 \text{ em } \Gamma\} \\ Q &= L^2(\Omega) \\ Q_0 &= \{q \in Q : \int_{\Omega} q = 0\} \end{aligned}$$

e as formas bilineares

$$\begin{aligned} a : V \times V &\rightarrow R \text{ dada por} \\ a(u, v) &= 2 \int_{\Omega} \sigma(u) : \sigma(v), \\ b : V \times Q &\rightarrow R \text{ dada por} \\ b(u, q) &= - \int_{\Omega} q \operatorname{div} u. \end{aligned}$$

Reescrevendo os problemas na formulação variacional, temos

Encontrar $(u_D, p_D) \in V_{0,\Gamma} \times Q_0$ tal que

$$a(u_D, v) + b(v, p_D) = \int_{\Omega} f \cdot v,$$

$$b(u_D, q) = 0,$$

$$u_D = g$$

e

Encontrar $(u_N, p_N) \in \mathbf{H}^1(\Omega) \times Q$ tal que

$$a(u_N, v) + b(v, p_N) = \int_{\Omega} f \cdot v + \lambda \int_{\Gamma} v \cdot \nu \quad \forall v \in V,$$

$$b(u_N, q) = 0$$

$$u_N = g$$

com a pressão p_D decorrendo de p a menos de uma constante.

Temos as seguintes afirmações das formas bilineares, cujas provas podem ser encontradas em [3] e [5]:

i) A forma bilinear a é coersiva, isto é,

$$\exists C > 0; a(v, v) \geq C \|v\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)}^2, \quad \forall v \in V.$$

ii) A forma bilinear b satisfaz a condição de inf-sup, isto é,

$$\exists \beta > 0; \inf_{q \in Q, q \neq 0} \sup_{v \in V, v \neq 0} \frac{b(v, q)}{\|v\|_{\mathbf{H}^1(\Omega)} \|q\|_{L^2(\Omega)}}.$$

Dessas afirmações garantimos a existência e unicidade das soluções dos problemas variacionais mistos. Note, que nestes novos problemas não foram consideradas as condições de fronteira:

$$2\nu^T \sigma(u) \tau = 0 \text{ e } 2\nu^T \sigma(u) \nu - p = \lambda \quad \text{em } \Gamma,$$

pois para que estas sejam satisfeitas precisamos que $(u_N, p_N) \in \mathbf{H}^2(\Omega) \times H^1(\omega)$, e mais adiante quando derivarmos a derivada de forma precisaremos que $(u_N, p_N) \in \mathbf{H}^3(\Omega) \times H^2(\Omega)$, o mesmo acontecerá para (u_D, p_D) . Logo, utilizando o teorema 6.2 da referência [4] e assumiremos que $\Gamma_f \in C^3, \Gamma \in C^4, f \in \mathbf{H}^1(\Omega)$,

$g \in \mathbf{H}^{\frac{5}{2}}(\Omega_f)$ e $(u_N, p_N), (u_D, p_D) \in \mathbf{H}^3(\Omega) \times$

$$H^2(\Omega).$$

$$\forall q \in Q_0,$$

$$\text{em } \Gamma_f,$$

Derivada de Forma de J

Para calcular a derivada de forma do funcional

$J(\Omega)$ utilizamos o **método da perturbação de**

identidade (ou método do mapeamento). Este

método consiste em perturbar o domínio de

referência Ω mediante uma transformação suave da forma $T_s = \text{Id} + s\theta$, onde $s \in \mathbb{R}$ é um pa-

râmetro de perturbação e θ é um campo de ve-

locidades suficientemente regular. O domínio

perturbado é então definido como $\Omega_s = T_s(\Omega)$.

O objetivo central é embutir os problemas (1.2)

e (1.3) em uma família de problemas pertur-

bados, definidos em Ω_s , de modo a estudar a

variação do funcional $J(\Omega_s)$ em relação ao pa-

râmetro s e, conseqüentemente, obter a deri-

vada de forma $J'(\Omega; \theta)$ na direção θ .

Seja $\mathcal{P}(D)$ o conjunto de abertos compac-

tamente contidos em D , onde $D \subset \mathbb{R}^d$ é assu-

mido aberto e limitado. Definimos, para $k \geq 0$

e $0 \leq \alpha \leq 1$, $C_c^{k,\alpha}(D, \mathbb{R}^d) := \{\theta \in C^{k,\alpha}(D, \mathbb{R}^d) \mid$

θ tem suporte compacto em $D\}$, e $C_c^k(D, \mathbb{R}^d)$,

$C_c^\infty(D, \mathbb{R}^d)$ de maneira similar. Esta escolha

de campos de deformação viáveis antecipa a

forma do gradiente de forma de J de acordo

com o teorema da estrutura de Hadamard–Zolésio

[6][7]. Considere um campo vetorial $\theta \in C_c^{0,1}(D, \mathbb{R}^d)$

e o fluxo associado $T_s^\theta : D \rightarrow D, \quad s \in [0, s_1]$.

Note que para cada $x_0 \in D$ definimos $T_s^\theta(x_0) :=$

$x(s)$, onde $x : [0, s_1] \rightarrow R^d$ resolve $\dot{x}(s) =$ em Ω .

$\theta(x(s))$ para $s \in [0, s_1]$, $x(0) = x_0$.

Vamos chamar T_s^θ de T_s para simplificar.

Além disso, pelo Teorema de Nagumo [8], para $s \in [0, s_1]$ intervalo arbitrário suficientemente pequeno, T_s define uma família de classe C^2 de difeomorfismos de D em D que mapeia fronteira em fronteira e interior em interior, definidas por $\Omega_s := T_s(\Omega) \in \mathcal{P}(D)$ e $\Gamma_s := T_s(\Gamma)$.

Portanto, $\Omega_0 = T_0(\Omega) = \Omega$, $\Gamma_0 = T_0(\Gamma) = \Gamma$, com $T_0 = Id$.

Ainda para s suficientemente pequeno, considere os problemas definidos com $(\Omega, \Gamma_f, \Gamma)$ pelos mesmos problemas definidos agora com $(\Omega_s, \Gamma_f, \Gamma_s)$. Seguindo a mesma ideia das demonstrações para os problemas anteriores, os novos problemas possuem uma única solução fraca dada por $(u_{D,s}, p_{D,s}) \in V_{0,\Gamma_s} \times Q_{0,s}$ e $(u_{N,s}, p_{N,s}) \in \mathbf{H}^1(\Omega_s) \times Q_s$ com $Q_s = L^2(\Omega_s)$ e $Q_{0,s} = \{q_s \in Q_s : \int_{\Omega_s} q_s = 0\}$.

Seja $J : P(D) \rightarrow R$ um funcional de forma dado por $J(\Omega) = 2 \int_{\Omega} |\sigma(u_D - u_N)|^2$

i) A semiderivada Euliriana de J em Ω na direção $h \in S$ é definida por

$dJ(\Omega)(\theta) := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{J(\Omega_s) - J(\Omega)}{s}$ se o limite existir.

ii) J é chamado forma diferenciável em Ω se existir uma semiderivada euliriana em Ω para todo $\theta \in S$ e o mapeamento $dJ(\Omega) : C^\infty(U, R^2) \rightarrow R$ com $\theta \mapsto dJ(\Omega)(\theta)$ é linear e contínuo, nesse caso $dJ(\Omega)(\theta)$ é chamado de derivada de forma euliriana ou simplesmente derivada de forma

Para nossos novos problemas temos

$$J(\Omega_s) = 2 \int_{\Omega_s} |\sigma(u_{D,s} - u_{N,s})|^2$$

e a derivada euliriana de J em Ω na direção θ é dada por

$$dJ(\Omega; \theta) = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{J(\Omega_s) - J(\Omega)}{s}.$$

Para calcular $J(\Omega_s) - J(\Omega)$ vamos transformar $J(\Omega_s)$ numa integral definida no domínio Ω . Para isso, nos referimos a qualquer função $\varphi_s : \Omega_s \rightarrow R^k$, $k = 1, 2, 3, \dots$ para o domínio de referência a transformação

$$\varphi^s = \varphi_s \circ T_s : \Omega \rightarrow R^k.$$

Portanto, consideramos o funcional

$$J(s) = \int_{\Omega_s} \varphi_s(s, y) dy \text{ como } J(s) = \int_{\Omega} \varphi^s(s, y) dy$$

ao realizar essa mudança estamos escrevendo o funcional J expresso por uma integral definida no domínio fixo Ω . Uma vez que os funcionais podem ser escritos num domínio independente de s temos que calcular as derivadas.

A estratégia geral para derivar derivadas de forma é primeiro transferir o problema de volta para o limite original antes de calcular o limite, o que resulta na necessidade de calcular a derivada material. Portanto, vejamos a definição de derivada material: seja $u(\Omega)$ uma função definida e dependendo do domínio Ω . A derivada material de u em relação à θ em Ω é, quando existe, o limite

$$\dot{u}(\theta) := \lim_{s \rightarrow 0} \frac{u(\Omega_s) \circ T_s - u(\Omega)}{s}.$$

E a relação entre as duas derivadas se da pela seguinte identidade proveniente da regra

da cadeia $\dot{u}(h) = du(h) + \nabla u \cdot h$.

Assim, se u não depende da geometria, tem-se $du(h) = 0$ e $\dot{u}(h) = \nabla u \cdot h$.

Diferenciabilidade dos Estados

Para cada $s \in I$ defini-se as formas bilineares a^s e b^s dadas por $\dot{a} : V \times V \rightarrow R$ e $\dot{b} : V \times Q \rightarrow R$ tais que

$$\begin{aligned} a^s(u, v) &= \int_{\Omega} \delta_s M_s^T (M_s \nabla u + (M_s \nabla u)^T) : \nabla v \\ \dot{a}(u, v) &= 2 \int_{\Omega} (\operatorname{div} \theta) \sigma(u) : \nabla v - 2 \int_{\Omega} \sigma(u) : \nabla \theta \nabla u - 2 \int_{\Omega} \nabla \theta \nabla u : \sigma(v) \\ b^s(u, q) &= - \int_{\Omega} \delta_t q (M_s^T : \nabla u) \\ \dot{b}(u, q) &= - \int_{\Omega} q \operatorname{div} \theta \operatorname{div} u + \int_{\Omega} q \nabla \theta^T : \nabla u. \end{aligned}$$

Diferenciabilidade de $s \rightarrow (u_N^s, p_N^s)$

Foi mostrado anteriormente que, para s suficientemente pequeno numa vizinhança de 0, a família de problemas de Neumann perturbados $(1.3)_s$ está bem posto em $H^1(\Omega_s) \times Q_s$. Percebeu-se que as soluções transportadas (u_N^s, p_N^s) pertencem a $V \times Q$. Pode-se verificar que (u_N^s, p_N^s) satisfaz o seguinte sistema.

Teorema 01: Para cada $s \in I$ o par $(u_N^s, p_N^s) \in H^1(\Omega) \times Q$ é solução única do problema

$$\begin{aligned} a^s(u_N^s, \varphi) + b^s(\varphi, p_N^s) &= \int_{\Omega} \delta_s f^s \cdot \varphi + \lambda \int_{\Gamma} \delta_s \varphi \cdot M_s \nu, \quad \forall \varphi \in V, \\ b^t(u_N^s, X) &= 0 \quad \forall X \in Q, \\ u_N^s &= g \quad \text{em } \Gamma_f. \end{aligned}$$

Com isso, conseguimos nosso principal resultado desta sessão:

Teorema 02: o mapeamento $s \rightarrow (u_N^s, p_N^s)$ é

continuamente fortemente diferenciável numa vizinhança de zero. Além disso,

$$(\dot{u}_N, \dot{p}_N) := \frac{\partial}{\partial t} (u_N^s, p_N^s) |_{t=0}$$

é a solução única do problema variacional seguinte

Encontre $(\dot{u}_N, \dot{p}_N) \in V \times Q$ tal que :

$$\begin{aligned} a(\dot{u}_N, \varphi) + b(\varphi, \dot{p}_N) &= L_N(\varphi) \quad \forall \varphi \in V \\ \dot{b}(\dot{u}_N, X) &= -\dot{b}(u_N, X) \quad \forall X \in Q \end{aligned}$$

onde $L_N(\varphi)$ é dado por

$$L_N(\phi) := -\dot{a}(u_N, \varphi) - \dot{b}(\varphi, p_N) + l_N(\varphi),$$

e

$$l_N(\varphi) = \int_{\Omega} (\operatorname{div} \theta f \cdot \varphi + \nabla f^T \theta \cdot \varphi) + \lambda \int_{\Gamma} (\operatorname{div} \theta \varphi \cdot \nu - \varphi \cdot (\nabla \theta) \nu).$$

Para $\varphi \in V \cap H^2(\Omega)$ podemos representar

l_N por

$$l_N(\varphi) = \int_{\Omega} (\operatorname{div} \theta f \cdot \varphi + \nabla f^T \theta \cdot \varphi) + \lambda \int_{\Gamma} (\nabla \varphi \tau \cdot \tau) \theta \cdot \nu.$$

Diferenciabilidade de $s \rightarrow (u_D^s, p_D^s)$

A análise dessa diferenciabilidade é mais difícil, uma vez que a família de problemas perturbados está bem posta no problema

Encontrar $(u_D^s, p_D^s) \in V_{0,\Gamma} \times Q_0$ tal que

$$\begin{aligned} a(u_D^s, v) + b(v, p_D^s) &= \int_{\Omega} f \cdot v \quad \forall v \in V_{0,\Gamma_s} \\ b(u_D^s, q) &= 0 \quad \forall q \in Q_{0,t} \\ u_D^s &= g \quad \text{em } \Gamma_f \end{aligned}$$

é bem posta apenas no espaço $V_{0,\Gamma_t} \times Q_{0,s}$.

Todavia, as soluções transportadas (u_D^s, p_D^s) não pertence ao subspaço $V_{0,\Gamma} \times Q_0$, o que a difere da discussão anterior.

Primeiro, notamos que a condição $\int_{\Omega} p_{D,s} = 0$ conduz a $\int_{\Omega} \delta_t p_D^s = 0$.

Segundo, notamos que de $\nu^s = \frac{M_s \nu}{|M_s \nu|}$ a $\int_{\Omega} \delta_t f^t \cdot M_s^{-\top} \varphi \quad \forall \varphi \in V_0, \quad (4.2)$
condição $u_{D,s} \cdot \nu_s = 0$ em Γ_s é equivalente em $b^s(M_s^{-\top} w^s + u_D^*, \frac{X}{\sigma_s}) = 0,$
 Γ a Q_0 .

$$(u_{D,s} \cdot \nu_s) \circ F_s = u_D^s \cdot \nu^t = u_D^s \cdot \frac{M_s \nu}{|M_s \nu|} = 0.$$

Agora, podemos dizer que u_D^t satisfaz em Γ a condição de contorno $M_s^{\top} u_D^s \cdot \nu = 0$ e portanto, não pertence a $V_{0,\Gamma}$.

Transformando o problema (1.2)_s para o domínio de referência obtem-se o lema seguinte.

Lema 07: Para cada $s \in I$ o par (u_D^s, p_D^s) é a única solução do seguinte problema

Encontrar $(u_D^s, p_D^s) \in H^s(\Omega) \times Q_0^s$ tal que :

$$a^s(u_D^s, \varphi^s) + b(\varphi^s, p_D^s) = \int_{\Omega} \delta_s f^s \cdot \varphi^s \quad \forall \varphi^s \in V_0^s$$

$$b^s(u_D^s, X^s) = 0 \quad \forall X^s \in Q_0^s \quad (1.3)$$

$$u_D^s = g \quad \text{em } \Gamma_f$$

$$u_D^s \cdot M_s \nu = 0 \quad \text{em } \Gamma$$

onde

$$V_0^s = \{ \varphi \in V : M_s^{\top} \varphi \cdot \nu = 0 \text{ em } \Gamma \},$$

$$Q_0^s = \{ X \in Q : \int_{\Omega} \delta_s X = 0 \}.$$

A condição de fronteira em V_0^s sugere a considerar $w^s = M_s^{\top}(u_D^s - u_D^*)$, onde (u_D^*, p_D^*) é a solução do seguinte problema

$$-div \sigma(u_D^*) + \nabla p_D^* = 0 \quad \text{em } \Omega$$

$$div u_D^* = 0 \quad \text{em } \Omega$$

$$u_D^* = g \quad \text{em } \Gamma_f$$

$$u_D^* = 0 \quad \text{em } \Gamma.$$

Observe que $w^s \in V_0$ é válido para todo $s \in I$. Isto motiva a definição da seguinte família de problemas auxiliares em $V_0 \times Q_0$: Para cada $s \in I$

Encontre $(w^s, \hat{p}_D^s) \in V_0 \times Q_0$ tal que:

$$a^s(M^{-\top} w^s + u_D^*, M_s^{-\top} \varphi) + b^s(M_s^{-\top} \varphi, \hat{p}_D^s) =$$

Os problemas (1.3) e (1.4) se relacionam da seguinte forma:

Lema 08: Seja $(w^s, \hat{p}_D^s) \in V_0 \times Q_0$ a solução de (4.2) e defina $(u_D^s, p_D^s) = (M^{-\top} w^s +$

$u_D^*, \hat{p}_D^s + c(t))$ com $c(s) = -\frac{\int_{\Omega} \sigma_s \hat{p}_D^s}{\int_{\Omega} \sigma_s}$ onde $(u_D^s, p_D^s) \in H^1(\Omega) \times Q_0^s$ é a solução de (1.3). Por outro

lado, se $(u_D^s, p_D^s) \in H^1(\Omega) \times Q_0^s$ é a única solução de (1.3) então a solução de (1.4) é dada por $(w^s, \hat{p}_D^s) = (M_s^{\top}(u_D^s - u_D^*), p_D^s - \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} p_D^s).$

Como consequência, concluímos que (1.4) admite uma única solução para todo $s \in I$.

Lema 09: O mapeamento $s \rightarrow (w^s, \hat{p}_D^s)$ é continuamente diferenciável numa vizinhança de 0 e tem-se $(\dot{w}, \dot{\hat{p}}_D) = \frac{\partial}{\partial s}(w^s, \hat{p}_D^s)|_{s=0} \in V_0 \times Q_0$ é solução do seguinte problema variacional:

Encontre $(\dot{w}, \dot{\hat{p}}_D) \in V_0 \times Q_0$ tal que:

$$a(\dot{w}, \varphi) + b(\varphi, \dot{\hat{p}}_D) = \hat{L}_D(\varphi), \forall \varphi \in V_0$$

$$b(\dot{w}, X) = -b(\nabla \theta^{\top}(u_D, u_D^*), X) - \dot{b}(u_D, X), \forall X \in Q_0 \text{ onde}$$

$$\begin{aligned} \hat{L}_D(\varphi) = & -a(\nabla \theta^{\top}(u_D - u_D^*), \varphi) - a(u_D, \nabla \theta^{\top} \phi) - \\ & \dot{a}(u_D, \varphi) - b(\nabla \theta^{\top} \varphi, p_D) - \dot{b}(\varphi, p_D) + \int_{\Omega} div \theta f \cdot \varphi \\ & + \int_{\Omega} \nabla f^{\top} \theta \cdot \varphi + \int_{\Omega} f \cdot \nabla h^{\top} \varphi. \end{aligned}$$

A diferenciabilidade de $s \rightarrow (w^s, \hat{p}_D^s)$ então implica na diferenciabilidade de $s \rightarrow (u_D^s, p_D^s)$ e $c \rightarrow c(s)$.

Teorema 3: O mapeamento $s \rightarrow (u_D^s, p_D^s)$ é continuamente diferenciável numa vizinhança de 0 com a respectiva topologia de $V \times Q$. Em $s = 0$ a derivada $(\dot{u}_D, \dot{p}_D) \in V \times Q$ é solução

do seguinte problema variacional:

Encontre $(\dot{u}_D, \dot{p}_D) \in V \times Q$ tal que:

$$a(\dot{u}_D, \varphi) + b(\varphi, \dot{p}_D) = L_D \quad \forall \varphi \in V_0,$$

$$b(\dot{u}_D, X) = -\dot{b}(u_D, X) \quad X \in Q_0,$$

$$\dot{U}_D \cdot = (\nabla \theta^\top) u_D \cdot \quad \text{em } \Gamma.$$

onde $L_D := -\dot{a}(u_D, \varphi) + \dot{b}(\varphi, p_D) + \int_\Omega \text{div } h f \cdot \varphi + \int_\Omega \nabla f^\top \theta \cdot \phi - \int_\Gamma (2\nu^\top \sigma(u_D) \nu - p_D)(\nabla \theta^\top \tau \cdot \nu)(\varphi \cdot \tau)$.

Diferenciabilidade de $s \rightarrow J(\Omega_s)$

Esta sessão visa analisar a derivada Euleriana J em Ω numa direção $\theta \in D$. Para tal, dois lemas serão importantes.

Lema 10: As seguintes igualdades são válidas para Γ

$$\sigma(u_D) : \sigma(u_D) = 2(\nu^\top \sigma(u_D) \nu)^2,$$

$$\sigma(u_N) : \sigma(u_N) = \frac{1}{2}(p_N + \lambda)^2.$$

Lema 11: Para $A = A^\top \in H^1(\Omega, R^{2 \times 2})$, $\theta \in D$ e $\varphi \in H^2(\Omega)$ tem-se

$$\int_\Omega A : \nabla h \nabla \varphi = \int_\Gamma \nabla \varphi^\top h \cdot A \nu - \int_\Omega \text{div } A \cdot \nabla \varphi^\top h - \int_\Omega ((h \cdot \nabla) \sigma(\varphi)) : A.$$

Teorema 4: O funcional

$$J(\Omega_s) = 2 \int_\Gamma (f \cdot (u_N - u_D) + (\nabla(p_D - 2\nu^\top \sigma(u_D) \nu)) \cdot u_D + (|\sigma(u_D)|^2 + |\sigma(u_N)|^2)) \theta \cdot \nu$$

Alternativamente, $J'(\Omega; h)$ pode ser representado como

$$J'(\Omega; \theta) = 2 \int_\Gamma (f \cdot u_N + (\nabla u_D - 2\nabla(\nu^\top \sigma(u_D) \nu)) \cdot u_D + 2(\nu^\top \sigma(u_D) \nu)^2 - \frac{1}{2}(\lambda + p_N)^2) \theta \cdot \nu.$$

Estrutura Abstrata Lagrangiana para Otimização de Forma

Quadro Lagrangiano Abstrato para Otimização de Forma

Seja $\Omega \in P(D)$, $E = E(\Omega)$, $F = F(\Omega)$ dois espaços de Banach com F reflexivo. Este problema de otimização de forma consiste na minimização de um funcional de forma $J; P(U) \rightarrow R$ dependendo de um estado $u_s \in E(\Omega_s)$ definido como solução da equação de Stokes, que é vista como um problema de minimização com uma restrição de igualdade. Portanto, vamos reformular o problema de otimização restrito como um problema não restrito com uma penalização linear na forma de funcional Lagrangiano L satisfazendo $J(\Omega_s) = L(\Omega_s, u_s, \hat{\psi})$, onde $\hat{\psi} \in F(\Omega_s)$. O Lagrangiano L é composto pelo funcional custo e pela formulação variacional da EDP.

A particularidade dos problemas de otimização de forma é que um pullback Ψ_s é utilizado para trabalhar no conjunto fixo Ω ao invés de Ω_s . O pullback $\Psi_s : E(\Omega_s) \rightarrow E(\Omega)$ ou $\Psi_s : F(\Omega_s) \rightarrow F(\Omega)$ frequentemente corresponde à pré-composição $\Psi_s v(x) := v \circ T_s$, onde $T_s : \Omega \rightarrow \Omega_s$ é um difeomorfismo. Aplicando esses pullbacks ao Lagrangiano, define-se o chamado Lagrangiano de forma como:

$$G(s, \varphi, \psi) := L(\Omega_s, \Psi_s^{-1}(\varphi), \Psi_s^{-1}(\psi)),$$

$$\forall (s, \varphi, \psi) \in [0, s_1] \times E(\Omega) \times F(\Omega).$$

Isto fornece em particular:

$$J(\Omega_s) = G(s, u_s, \psi) \quad \forall \psi \in F(\Omega), \text{ com } u_s := \Psi_s(u_s) \in E(\Omega) \quad (1.5).$$

Considera-se apropriada para este problema, e problemas de otimização de forma com restrição de igualdade em geral, a seguinte forma específica para $G : [0, s_1] \times E \times F \rightarrow R$ para algum $s_1 > 0$:

$$G(s, \varphi, \psi) := \langle A(s, \varphi), \psi \rangle_{F^*, F} + B(s, \varphi), \quad (1.6)$$

onde

- $A : [0, s_1] \times E \rightarrow F^*$;
- $B : [0, s_1] \times E \rightarrow R$.

Vale notar que B surge do funcional de forma J a ser minimizado, enquanto A é derivado da formulação variacional da EDP via o pullback Ψ_s .

Enuncia-se o Teorema cuja relevância é fornecer as fórmulas práticas para a derivada de forma do funcional de custo, para derivada material do estado e para o estado adjunto, com algumas condições naturais sobre as derivadas de A e B a serem verificadas; e mostrar a dualidade entre a derivada material de e o adjunto p , no sentido que $\dot{u} \in E$ sempre existe sob estas condições naturais se o espaço E é suficientemente grande.

Teorema 6. Seja $G : [0, s_1] \times E \times F \rightarrow R$ definido como (1.6), com $A \in C^1([0, s_1] \times E, F^*)$, $u \in E$ tal que $A(0, u) = 0$, e $B : [0, s_1] \times E \rightarrow R$ diferenciável em $(0, u)$. Denotemos por

$$A(u) := \partial_\varphi A(0, u) \in \mathcal{L}(E, F^*), \quad L(u) := \partial_s A(0, u) \in$$

$$F^*, \quad B(u) := \partial_\varphi B(0, u) \in E^*.$$

Suponha que o operador linear $A(u) : E \rightarrow F^*$ seja um isomorfismo. Então, existe $s_0 \in$

$[0, s_1]$ e uma função única de classe C^1 , $s \in [0, s_0] \mapsto u_s \in E$, tal que $u_0 = u$ e $A(s, u_s) = 0$ para todo $s \in [0, s_0]$. Além disso, a derivada $\dot{u} \in E$ de $s \mapsto u_s$ em $s = 0$ existe, e $\dot{u} \in E$ é a única solução de $A(u)\dot{u} = -L(u) \in F^*$.

Agora, seja $\theta \in C_c^{0,1}(D, R^d)$, com Ω_s definida por $\Omega_s := T_s(\Omega) \in \mathcal{P}(D)$, e suponha que $J(\Omega_s)$ possa ser escrita como em (1.6). Então, sob as hipóteses acima, a derivada de forma de $J(\Omega)$ na direção θ é dada por

$$dJ(\Omega)(\theta) = \partial_s G(0, u, p) = \langle L(u), p \rangle_{F^*, F} + \partial_s B(0, u),$$

onde o estado adjunto $p \in F$ é a única solução de $A(u)^* p = -B(u) \in E^*$, e $A(u)^* : F \rightarrow E^*$ é o adjunto de $A(u) : E \rightarrow F^*$.

A prova desse teorema pode ser encontrada em [2].

Queremos aplicar este teorema ao problema de Stokes e para isso vamos seguir os seguintes passos:

- Formular o problema em domínio deformado;
- Fazer o pullback para o domínio fixo Ω ;
- Definir o operador abstrato $A(s, \phi) \in F^*$;
- Verificar as hipóteses do teorema 6;
- Aplicar o teorema 6 para obter a derivada material, o adjunto e a derivada de forma do custo.

Análise do Problema de Stokes

Perceba que para a função u_s satisfazer a equação de Stokes na forma clássica é necessário que ∇u_s e p_s sejam deriváveis, portanto exige $u_s \in H^2$ ou C^1 e $p_s \in H^1$ e o domínio Ω_s seja suficientemente regular, mas em casos como o de fronteira livre o domínio é irregular, f, λ e g podem ter regularidade limitada e a solução natural está em H^1 . Além disso, o teorema assume que a equação seja da forma $A(s, u_s)(v) = 0, \forall v \in F$ (e não definida diretamente para u_s) que é uma forma bilinear (ou linear em v) calculada com u_s e v , isto é, u_s satisfaz a equação quando testada com todas as funções $v \in F$ operador atuando em u_s e testado contra v), o que geralmente ocorre quando a função u_s não é regular o suficiente. Diante disso, percebe-se que o problema é formulado para que o operador A tenha sentido mesmo para soluções "menos regulares", por meio da forma fraca. E assim inicia-se este capítulo: determinando a forma fraca do problema de Stokes.

Formulação Variacional no Domínio Deformado

Esta sessão reescreve o problema de Stokes sobre uma fronteira livre como um problema variacional em um domínio fixo próprio para a aplicação do teorema 6 da lagrangiana abstrata.

Seja um campo de deformação admissível $\theta \in C_c^1(R^d, R^d)$, para $s \geq 0$ suficientemente pequeno, definimos o fluxo $T_s : R^d \rightarrow R^d$ gerado por θ com $T_0 = Id$, tal que

$$\begin{cases} \frac{d}{ds} T_s(x) = \theta(T_s(x)), \\ T_0(x) = x, \end{cases} \quad \text{para } x \in R^d, s \in [0, s_0].$$

Esse fluxo induz uma família de domínios deformados

$$\Omega_s := T_s(\Omega), \quad \Gamma_s := T_s(\Gamma), \quad \Gamma_{f,s} := T_s(\Gamma_f).$$

Denotamos a solução do domínio deformado por $u_s : \Omega_s \rightarrow R^d$, a pressão $p_s : \Omega \rightarrow R$ com o problema de Stokes em Ω_s consiste em encontrar (u_s, p_s) satisfazendo:

$$\begin{cases} -2 \operatorname{div}(\sigma(u_s)) + \nabla p_s = f & \text{em } \Omega_s, \\ \operatorname{div}(u_s) = 0 & \text{em } \Omega_s, \\ u_s = g & \text{em } \Gamma_{f,s}, \\ \nu^T \sigma(u_s) = \lambda u_s & \text{em } \Gamma_s, \end{cases}$$

onde:

- $\sigma(u_s) := \frac{1}{2}(\nabla u_s + \nabla u_s^T)$ é o tensor de deformação simétrico,
- ν é o vetor normal exterior a Ω_s ,
- $f \in L^2(R^d)^d, \quad \lambda \in L^\infty(R^d), \quad g \in H^{1/2}(\Gamma_{f,s})^d$.

Seja $v \in F \subset H^1(\Omega_s)^d$ com $\operatorname{div}(v) = 0, v = 0$ em Γ_f e $v \cdot \nu = 0$ em Γ . Logo, a forma variacional (forma fraca) no domínio deformado é

Encontrar $u_s \in E_s$, tal que :

$$a_s(u_s, v_s) = l_s(v_s) \quad \forall v_s \in F_s.$$

onde E e F serão expostos mais adiante.

A forma bilinear $a(u, v)$ e a forma linear $l(v)$ pode ser determinada da seguinte forma: considere a equação vetorial

$$-2\operatorname{div}(\sigma(u)) + \nabla p_s = f \text{ em } \Omega$$

multiplique pela função teste v

$$-2\operatorname{div}(\sigma(u)) \cdot v + \nabla p \cdot v = f \cdot v$$

agora vamos integrar por partes:

$$\int_{\Omega} -2\operatorname{div}(\sigma(u)) \cdot v + \nabla p \cdot v = \int_{\Omega} f \cdot v$$

sabemos que

$$\int_{\Omega} (-\operatorname{div}(T)) \cdot v = \int_{\Omega} T : \nabla v - \int_{\partial\Omega} (T \cdot \nu) \cdot v,$$

com $T = 2\sigma(u)$

$$\text{e } \int_{\Omega} \nabla p \cdot v = - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(v) + \int_{\partial\Omega} p(v \cdot \nu)$$

portanto,

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(2\sigma(u)) \cdot v = \int_{\Omega} 2\sigma(u) : \nabla v - \int_{\partial\Omega} (2\sigma(u) \cdot \nu) \cdot v$$

$$\text{e, como } \operatorname{div}(v) = 0, \int_{\Omega} \nabla p \cdot v = \int_{\partial\Omega} p(v \cdot \nu).$$

Então,

$$\int_{\Omega} 2\sigma(u) : \nabla v \, dx - \int_{\partial\Omega} (2\sigma(u) \cdot \nu) \cdot v \, ds + \int_{\partial\Omega} p(v \cdot \nu) \, ds = \int_{\Omega} f \cdot v \, dx$$

agrupando os termos de contorno

$$\int_{\Omega} 2\sigma(u) : \nabla v = \int_{\partial\Omega} (2\sigma(u) \cdot \nu - p\nu) \cdot v.$$

Para a continuação da formulação da forma fraca adota-se como parte do modelo a seguinte condição vetorial imposta na fronteira livre $-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu = \lambda(u - g)$ em $\partial\Omega$ com $\lambda \in L^\infty(\partial\Omega)$ e $g \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)^d$. Essa escolha é motivada pela estrutura variacional geral do artigo que requer que o problema seja expresso como:

$$A(s, u)(v) = a_s(u, v) - \ell_s(v) = 0,$$

definidos sobre espaços funcionais E e F transportados de Ω_s para um domínio fixo Ω via pullback, que requer a presença de formas bilineares e funcionais lineares com suporte na fronteira.

Logo, ficamos com o contorno geral da forma

$$\int_{\partial\Omega} (-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu) \cdot v \, ds = \int_{\Gamma} (-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu) \cdot v \, ds + \int_{\Gamma_f} (-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu) \cdot v \, ds.$$

Contudo, mantendo a condição de fronteira,

considera-se $v = 0$ em Γ_f , para

$$(-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu) \cdot v = 0 \quad \text{em } \Gamma_f,$$

e, portanto, $\int_{\Gamma_f} (-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu) \cdot v \, ds = 0$.

Ou seja, a integral de contorno sobre Γ_f desaparece. A única contribuição de contorno remanescente na formulação fraca provém de Γ , onde as funções de teste v não são necessariamente nulas.

Em Γ substitui-se a tração $-2\sigma(u) \cdot \nu + p\nu$ pela condição vetorial e obtem-se $\int_{\Gamma} \lambda(u - g) \cdot v \, ds$ reorganizando $\int_{\Gamma} \lambda u \cdot v \, ds - \int_{\Gamma} \lambda g \cdot v \, ds$.

O primeiro termo permanece no lado esquerdo da formulação fraca, compondo a forma bilinear e o segundo termo é deslocado para o lado direito, compondo o funcional linear.

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_s} 2\sigma(u_s) : \nabla v \, dx + \int_{\Gamma_s} \lambda u_s \cdot v_s \, ds &= \\ &= \int_{\Omega_s} f \cdot v \, dx + \int_{\Gamma_s} g \cdot v_s \, ds. \end{aligned}$$

Note que podemos reescrever

$$\begin{aligned} \sigma(u) : \nabla v &= \frac{1}{2} \nabla u + \nabla u^\top : \nabla u = \\ &= \frac{1}{2} (\nabla u : \nabla u + \nabla u^\top : \nabla u) \end{aligned}$$

como o produto duplo (ou contração) de dois tensores. Como o produto duplo de dois tensores $A, B \in R^{d \times d}$ é definido pelo produto ve-

torial

$$A : B = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d A_{ij} B_{ij}$$

tem-se

$$\nabla u^\top : \nabla v = \sum_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} = \nabla u : \nabla v^\top$$

então

$$\begin{aligned} \sigma(u) &= \frac{1}{2}(\nabla u : \nabla v + \nabla u : \nabla v^\top) = \\ &= \frac{1}{4}(2\nabla u : \nabla v + 2\nabla u : \nabla v^\top) \\ &= \frac{1}{4}(\nabla u : \nabla v + \nabla u : \nabla v + \nabla u : \nabla v^\top + \\ &+ \nabla u : \nabla v^\top) \end{aligned}$$

agora, usando que

$$\nabla u^\top : \nabla v = \nabla u : \nabla v^\top$$

$$\nabla u^\top : \nabla v^\top = \nabla u : \nabla v$$

daí,

$$\begin{aligned} \sigma(u) &= \frac{1}{4}(\nabla u : \nabla v + \nabla u : \nabla v^\top + \\ &+ \nabla u^\top : \nabla v + \nabla u^\top : \nabla v^\top) \\ &= \frac{1}{2}(\nabla u : \nabla v) + \frac{1}{2}(\nabla v : \nabla v^\top) = \sigma(u) : \sigma(v). \end{aligned}$$

Portanto, a forma bilinear e a forma linear são dadas por

$$a_s(u_s, v_s) := \int_{\Omega_s} 2\sigma(u_s) : \sigma(v_s) dx + \int_{\Gamma_s} \lambda u_s \cdot v_s ds$$

$$\text{e } l_s(v_s) := \int_{\Omega_s} f \cdot v dx + \int_{\Gamma_s} g \cdot v_s ds$$

$$\text{com } \sigma(u_s) = \frac{1}{2}(\nabla u_s + \nabla u_s^\top).$$

Com isso, formulamos a equação variacional no domínio deformado, e agora, vamos entender quem são os espaços E e F.

Espaços Funcionais no Domínio Deformado

A formulação fraca do problema de Stokes requer a escolha de espaços funcionais adequados que assegurem a boa definição das integrais que compõe a forma variacional, a incor-

poração correta das condições de contorno do problema físico, e a existência e unicidade da solução fraca.

Tendo isso em vista, definimos o espaço de estados admissíveis como

$$E := \{u \in H^1(\Omega; R^d); \operatorname{div}(u) = 0, u = g \text{ em } \Gamma_f, u \cdot \nu = 0 \text{ em } \Gamma\}$$

e o espaço das funções teste como

$$F := \{v \in H^1(\Omega; R^d); \operatorname{div}(v) = 0 \text{ em } \Omega_s, v = 0 \text{ em } \Gamma_{f,s}\}.$$

Reformulação no Domínio Fixo via Pull-back

Para trabalhar com variáveis no espaço fixo $H^1(\Omega; R^d)$ transportamos o problema variacional para um domínio fixo Ω por meio do pull-back geométrico induzido por T_s .

Pullback das funções de estado e teste

Através do fluxo T_s , definimos as funções pull-back $u, v : \Omega \rightarrow R^d$ por:

$$u(x) := u_s(T_s(x)), \quad v(x) := v_s(T_s(x)).$$

Essa transformação permite reescrever o problema em Ω_s como um problema equivalente no domínio fixo Ω , com dependência paramétrica em s .

Forma bilinear e linear no domínio fixo

A forma bilinear referente ao domínio deformado é dada por:

$$a_s(u_s, v_s) := \int_{\Omega_s} 2\sigma(u_s) : \sigma(v_s) ds + \int_{\Gamma_s} \lambda u_s \cdot v_s ds \text{ onde } \sigma(v_s) := \frac{1}{2}(\nabla v_s + \nabla v_s^\top).$$

Assim, a forma bilinear pullback, agora definida no domínio fixo Ω é:

$$\tilde{a}_s(u, v) := \int_{\Omega} 2\tilde{\sigma}_s(u)(x) : \tilde{\sigma}_s(v)(x) \xi(s, x) dx + \int_{\Gamma} \lambda^s(x) u(x) \cdot v(x) \xi_{\Gamma}(s, x) ds,$$

onde $\lambda^s := \lambda(T_s(x))$ que é o pullback do coeficiente da fronteira.

Fazendo o pullback de forma semelhante ao item anterior, obtemos o funcional linear transformado como segue:

$$\tilde{l}_s(v) := \int_{\Omega} f^s(x) \cdot v(x) \xi(s, x) dx + \int_{\Gamma} \lambda^s(x) g^s(x) \cdot v(x) \xi_{\Gamma}(s, x) ds, \\ \text{com } f^s := f(T_s(x)), g^s := g(T_s(x)).$$

Formulação do problema variacional no domínio fixo

Com as definições anteriores, o problema no domínio fixo Ω consiste em:

Encontrar $u \in E$ tal que

$$\tilde{a}_s(u, v) = \tilde{l}_s(v), \quad \forall v \in F.$$

Definição do operador abstrato de restrições

Tendo fixado o domínio de referência Ω por meio do pullback das variáveis do problema original em Ω_s , essa sessão tem por objetivo reformular a equação variacional como um operador

abstrato definido em espaços funcionais fixos. Nesse contexto introduziremos o operador $A : [0, s_1] \times E \rightarrow F^*$ que representa a formulação variacional do problema de estado, e o funcional de $B : [0, s_1] \times E \rightarrow R$. A partir desses dois objetos, define-se o funcional *la-grangiano*, $\mathcal{L}(s, u, p) = B(s, u) + \langle A(s, u), p \rangle$ o qual possibilitará a caracterização das equações adjuntas e a obtenção da derivada de forma.

Observe que o espaço de Sobolev $H^1(\Omega)$ é Hilbertiano, isto é, um espaço vetorial completo com produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$, que induz a norma $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$. Dito isso, o teorema de representação de Riesz afirma que para todo funcional linear contínuo $f \in H^*$, existe um único $y \in H$ tal que $f(x) = \langle x, y \rangle \quad \forall x \in H$. Esse teorema nos dá um isomorfismo isométrico entre H e seu dual H^* : $H \cong H^*$. Como consequência, o duplo dual H^{**} é naturalmente isomorfo a H , o que define a reflexividade do espaço de Hilbert, trazendo $H \cong H^{**}$. O que torna o espaço de Sobolev $H^1(\Omega)$ também reflexivo, o que significa que possui um dual contínuo e bem definido $(H^1(\Omega))^* = H^{-1}(\Omega)$ com o dual desse dual satisfazendo, por reflexividade $H^{-1}(\Omega)^* = H^1(\Omega)$. O mesmo vale vetorialmente $(H^{-1}(\Omega)^d)^* = H^1(\Omega)^d$, portanto, $H^1(\Omega)^d \cong (H^{-1}(\Omega)^d)^*$.

Logo, $F = \{v \in H^1(\Omega)^d; \text{div}(v) = 0 \text{ em } \Omega, v = 0 \text{ em } \Gamma_f\}$ é um subespaço fechado de $H^1(\Omega)^d$, o dual F^* é identificado então como o conjunto de funci-

onais lineares contínuos em H^1 que anulam-se no complementar ortogonal $F^\perp$.

Ou seja,

$$F^* \cong \{L \in (H^1(\Omega)^d)^*; L(w) = 0, \forall w \in F^\perp\}.$$

Com base na formulação variacional trans-formada, definimos o operador abstrato

$$A(s, \varphi) \in F^*,$$

$$\langle A(s, \varphi), \psi \rangle := \tilde{a}_s(\varphi, \psi) - \tilde{l}_s(\psi), \forall \psi \in F,$$

onde $\tilde{a}_s(u, v)$ e $\tilde{l}_s(v)$ denotam, respectivamente, a forma bilinear e o funcional linear obtidos no domínio fixo a partir do pullback das expressões originais.

Assim, para cada estado $\varphi \in E$, o operador $A(s, \varphi)$ associa um funcional linear contínuo em F . No dual F^* , o elemento nulo é o funcional que atribui valor zero a todo $\psi \in F$. Portanto, $A(s, \varphi) = 0 \in F^* \iff \langle A(s, \varphi), \psi \rangle = 0, \forall \psi \in F$, isto é, $\tilde{a}_s(\varphi, \psi) = \tilde{l}_s(\psi), \forall \psi \in F$.

A nulidade do operador A significa, portanto, que o funcional linear associado se anula sobre todo o espaço de testes F , isto é, em todas as direções admissíveis. No formalismo lagrangiano, essa condição equivale a exigir que o gradiente funcional da Lagrangiana

$$\mathcal{L}(s, u, p) = B(s, u) + \langle A(s, u), p \rangle$$

se anule em relação às variações de p , de modo que a solução $u = \varphi$ seja precisamente um ponto estacionário do problema variacional. Em particular, a solução do problema de Stokes em forma fraca no domínio fixo é caracterizada pela condição abstrata $A(s, u) = 0 \in F^*$.

Definição do funcional de custo

Pelo enquadramento abstrato do Teorema 6, identificamos diretamente o funcional de custo B como o funcional J introduzido, isto é, $B \equiv J$. Assim, $B(s, u_D, u_N) := J(\Omega_s)$.

Validação das Hipóteses do Teorema

Para aplicar-se o teorema, algumas hipóteses precisam ser satisfeitas, definidas aqui como proposições.

Proposição 1: O operador abstrato A , definido após o pullback no domínio de referência Ω_0 , satisfaz $A \in C^1([0, s_1] \times E, F^*)$.

Prova: O operador abstrato é definido por

$$\langle A(s, u), v \rangle := \tilde{a}_s(u, v) - \tilde{l}_s(v), \quad \forall u \in E, v \in F.$$

1. Dependência em s . As funções $s \mapsto T_s$, $s \mapsto \xi(s, \cdot)$, $s \mapsto \xi_\Gamma(s, \cdot)$, $s \mapsto f^s$ e $s \mapsto g^s$ são todas de classe C^1 em s por hipótese sobre a regularidade da família de deformações. Como as integrais que definem $\tilde{a}_s$ e $\tilde{l}_s$ envolvem apenas combinações polinomiais dessas funções com u e v , conclui-se que a aplicação $s \mapsto \langle A(s, u), v \rangle$ é de classe C^1 para cada $u \in E$ e $v \in F$.

2. Dependência em u . A forma bilinear $\tilde{a}_s(u, v)$ é linear e contínua em u para cada v fixo, e portanto define um elemento de F^* . Mais ainda, o mapeamento $u \mapsto \tilde{a}_s(u, \cdot)$ é linear contínuo de E em F^* , logo é Fréchet-diferenciável em todo ponto. O funcional linear $\tilde{l}_s(v)$, por sua

vez, não depende de u , de modo que sua derivada em relação a u é nula. Portanto, $u \mapsto A(s, u)$ é C^1 para cada $s \in [0, s_1]$.

Dito isso, pode-se observar que a aplicação $(s, u) \mapsto A(s, u)$ é continuamente diferenciável em ambos os argumentos, mostrando que $A \in C^1([0, s_1] \times E, F^*)$.

Proposição 2: O operador linearizado $\partial_u A(0, u) : E \rightarrow F^*$ é um isomorfismo.

Prova: A derivada de A em relação a u no ponto $s = 0$ é dada por

$\partial_u A(0, u)w := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{A(0, u+\epsilon w) - A(0, u)}{\epsilon}$, $w \in E$, isto é, pela forma bilinear associada:

$\langle \partial_u A(0, u)w, v \rangle = \int_{\Omega} 2\nu \varepsilon(w) : \varepsilon(v) dx + \int_{\Gamma} \lambda w \cdot v ds$, $\forall v \in F$, onde $\varepsilon(w) = \frac{1}{2}(\nabla w + \nabla w^T)$ é o tensor de deformação simétrica.

1. Continuidade. Defina a forma bilinear $a_0 : E \times F \rightarrow R$ por $a_0(w, v) = \int_{\Omega} 2\nu \varepsilon(w) : \varepsilon(v) dx + \int_{\Gamma} \lambda w \cdot v ds$. Pela desigualdade de Cauchy–Schwarz e pela continuidade dos funcionais de traço, existe $C > 0$ tal que $|a_0(w, v)| \leq C \|w\|_E \|v\|_F$, $E, v \in F$. Logo, a_0 é bilinear contínua.

2. Coercividade. Aplicando a desigualdade de Korn e o termo de fronteira de Robin, obtém-se que existe $c_0 > 0$ tal que $a_0(w, w) \geq c_0 \|w\|_E^2$, E . Portanto, a_0 é coerciva em E .

3. Aplicação do Teorema de Lax–Milgram. Como $a_0(\cdot, \cdot)$ é bilinear contínua e coerciva, o Teorema de Lax–Milgram garante que, para todo funcional $f \in F^*$, existe único $w \in E$ tal que $a_0(w, v) = \langle f, v \rangle$, $\forall v \in F$. Isto mostra

que o operador $\partial_u A(0, u) : E \rightarrow F^*$, $w \mapsto a_0(w, \cdot)$, é linear, contínuo, injetivo e sobrejetivo.

Dito isso, o operador $\partial_u A(0, u) : E \rightarrow F^*$ é um isomorfismo de Banach, o que prova a segunda hipótese do Teorema 1. Em particular, a linearização do problema em $s = 0$ é bem-postada.

Proposição 3: Suponha que, para um dado $s \in [0, s_1]$, o mapeamento de deformação T_s satisfaça $T_s, DT_s, DT_s^{-1} \in L^\infty(\Omega)$ e que o jacobiano volumétrico $\xi(s, x) = |\det DT_s(x)|$ satisfaça $0 < \underline{\xi}_s \leq \xi(s, x) \leq \bar{\xi}_s$ em $\bar{\Omega}$. Suponha ainda que o coeficiente de contorno pull-backado satisfaça $\lambda^s(x) \geq 0$ quase em toda Γ . Então existe $c_s > 0$ tal que $\tilde{a}_s(w, w) \geq c_s \|w\|_E^2$, $\forall w \in E$, ou seja, $\tilde{a}_s$ é coerciva em E .

Prova: Recorde-se que $\tilde{a}_s(w, w) = \int_{\Omega} 2\nu \tilde{\sigma}_s(w) : \tilde{\sigma}_s(w) \xi(s, x) dx + \int_{\Gamma} \lambda^s(x) |w|^2 \xi_{\Gamma}(s, x) ds$, onde $\tilde{\sigma}_s(w)(x) = \frac{1}{2}(\nabla w(x) DT_s^{-1}(x) + (\nabla w(x) DT_s^{-1}(x))^T)$, $\forall w \in E$.

Pela hipótese $DT_s^{-1} \in L^\infty(\Omega)$ existe constante $M_s > 0$ tal que $\|DT_s^{-1}\|_{L^\infty} \leq M_s$. Logo, usando desigualdade de Cauchy–Schwarz e normas subordinadas de tensores, existe constante $\alpha_s > 0$ (que depende de M_s) tal que, ponto a ponto, $|\tilde{\sigma}_s(w)(x)| \geq \alpha_s |\varepsilon(w)(x)|$, com $\varepsilon(w) = \frac{1}{2}(\nabla w + \nabla w^T)$ o tensor de deformação usual. (De fato, $\tilde{\sigma}_s(w)$ é resultante da aplicação de um operador linear contínuo sobre ∇w cujas normas dependem de DT_s^{-1} ; a existência de $\alpha_s > 0$ decorre da equivalência de nor-

mas induzida por um operador linear limitado $E, \cdot)$.

e invertível em cada x , obtida pelas hipóteses sobre DT_s^{-1} .)

Pela hipótese inferior sobre ξ tem-se, portanto,

$$\int_{\Omega} 2\nu \tilde{\sigma}_s(w) : \tilde{\sigma}_s(w) \xi(s, x) dx \geq 2\nu \underline{\xi}_s \int_{\Omega} |\tilde{\sigma}_s(w)|^2 dx \geq 2\nu \underline{\xi}_s \alpha_s^2 \int_{\Omega} |\varepsilon(w)|^2 dx.$$

Agora aplique a desigualdade de Korn (válida no espaço E com as condições de contorno consideradas): existe $C_K > 0$ tal que $\int_{\Omega} |\varepsilon(w)|^2 dx \geq C_K \|w\|_{H^1(\Omega)}^2 = C_K \|w\|_E^2$, para todo $w \in E$. Combinando as desigualdades anteriores obtemos $\int_{\Omega} 2\nu \tilde{\sigma}_s(w) : \tilde{\sigma}_s(w) \xi(s, x) dx \geq 2\nu \underline{\xi}_s \alpha_s^2 C_K \|w\|_E^2$.

Quanto ao termo de fronteira,

$\int_{\Gamma} \lambda^s(x) |w|^2 \xi_{\Gamma}(s, x) ds \geq 0$ pois $\lambda^s \geq 0$ e $\xi_{\Gamma}(s, x) \geq 0$ por construção. Assim este termo apenas reforça a coercividade.

Definindo $c_s := 2\nu \underline{\xi}_s \alpha_s^2 C_K > 0$, obtemos, para todo $w \in E$, $\tilde{a}_s(w, w) \geq c_s \|w\|_E^2$.

Isto conclui a prova da coercividade da forma $\tilde{a}_s$.

Proposição 4: Sejam E e Ω como anteriormente definidos e assuma que, para todo $s \in [0, s_1]$, o mapeamento de deformação T_s satisfaz $T_s, DT_s, DT_s^{-1} \in L^{\infty}(\Omega)$ e que o jacobiano volumétrico $\xi(s, \cdot) = |\det DT_s(\cdot)|$ é C^1 em s com $0 < \underline{\xi}_s \leq \xi(s, x) \leq \bar{\xi}_s < \infty$ em $\bar{\Omega}$. Considere o funcional pullbackado $\tilde{B}(s, u) = 2 \int_{\Omega} |\tilde{\sigma}_s(u_D - u_N)(x)|^2 \xi(s, x) dx$, onde, para $w \in E$, $\tilde{\sigma}_s(w)(x) = \frac{1}{2} (\nabla w(x) DT_s^{-1}(x) + (\nabla w(x) DT_s^{-1}(x))^{\top})$. Então $\tilde{B} \in C^1([0, s_1] \times$

Prova: Escrevemos $u = (u_D, u_N) \in E \times E$ mas, para compactação de notação, interpretamos $u \mapsto u_D - u_N$ como aplicação linear contínua $E \times E \rightarrow E$. Denotemos $w := u_D -$

1. Continuidade e linearidade do operador

$\tilde{\sigma}_s$. Para cada s fixo, a aplicação $w \mapsto \tilde{\sigma}_s(w)$ é linear e contínua de $E = H^1(\Omega)^d$ em $L^2(\Omega)^{d \times d}$.

De fato,

$$\|\tilde{\sigma}_s(w)\|_{L^2} \leq C_s \|\nabla w\|_{L^2} \leq C'_s \|w\|_{H^1},$$

onde as constantes C_s, C'_s dependem de $\|DT_s^{-1}\|_{L^{\infty}}$.

Pela hipótese $DT_s^{-1} \in L^{\infty}$ temos $C_s < \infty$.

2. Derivada de Fréchet em u .

Considere variação $(\delta u_D, \delta u_N) \in E \times E$ e escreva $\delta w = \delta u_D - \delta u_N$. Pela linearidade de $\tilde{\sigma}_s$, $\tilde{\sigma}_s(w + \delta w) = \tilde{\sigma}_s(w) + \tilde{\sigma}_s(\delta w)$. Logo, desenvolvendo $\tilde{B}$ em u (mantendo s fixo),

$$\begin{aligned} \tilde{B}(s, u + \delta u) - \tilde{B}(s, u) &= 2 \int_{\Omega} (|\tilde{\sigma}_s(w + \delta w)|^2 - |\tilde{\sigma}_s(w)|^2) \xi dx \\ &= 2 \int_{\Omega} (2 \tilde{\sigma}_s(w) : \tilde{\sigma}_s(\delta w) + |\tilde{\sigma}_s(\delta w)|^2) \xi dx. \end{aligned}$$

Pelo desigualdade anterior e pela continuidade do produto em L^2 , o termo quadrático $\int |\tilde{\sigma}_s(\delta w)|^2 \xi dx$ é $o(\|\delta u\|_E)$. Portanto a derivada de Fréchet em u é o funcional linear

$$\partial_u \tilde{B}(s, u)[\delta u] = 4 \int_{\Omega} \tilde{\sigma}_s(w) : \tilde{\sigma}_s(\delta w) \xi dx,$$

o qual é linear e contínuo em δu . Assim $\tilde{B}$ é Fréchet-diferenciável em u (e a derivada depende contínua e linearmente de δu).

3. Derivada em s (mantendo u fixo). Fixe

u (logo $w = u_D - u_N$ fixo). Considere a aplicação $s \mapsto \tilde{B}(s, u)$. Por definição, $\tilde{B}(s, u) =$

$$2 \int_{\Omega} F(s, x) dx, \quad F(s, x) := |\tilde{\sigma}_s(w)(x)|^2 \xi(s, x).$$

Assumimos sobre T_s sua dependência C^1 em s , as funções $s \mapsto DT_s^{-1}(x)$ e $s \mapsto \xi(s, x)$ são C^1 puntualmente em x , e $\tilde{\sigma}_s(w)(x)$ é C^1 em s para quase todo x . Além disso, pelo item (i) e pelas hipóteses de regularidade, existe

uma função $M(x) \in L^1(\Omega)$ que domina $|\partial_s F(s, x)|$

em um intervalo compacto de s (constante de dominância obtida a partir de normas L^∞ de DT_s^{-1} , $\partial_s DT_s^{-1}$ e da norma H^1 de w). Portanto pela regra da cadeia e pelo teorema da convergência dominada podemos trocar a derivada e a integral, obtendo, para cada s ,

$$\partial_s \tilde{B}(s, u) = 2 \int_{\Omega} \partial_s (|\tilde{\sigma}_s(w)|^2) \xi dx + 2 \int_{\Omega} |\tilde{\sigma}_s(w)|^2 \partial_s \xi dx.$$

Explicitando um termo representativo,

$$\partial_s (|\tilde{\sigma}_s(w)|^2) = 2 (\partial_s \tilde{\sigma}_s(w)) : \tilde{\sigma}_s(w), \text{ onde}$$

$\partial_s \tilde{\sigma}_s(w)$ é composto por derivadas de DT_s^{-1} (em L^∞) atuando sobre $\nabla w \in L^2$, logo $\partial_s \tilde{\sigma}_s(w) \in L^2$ e o produto com $\tilde{\sigma}_s(w) \in L^2$ é integrável.

Assim $\partial_s \tilde{B}(s, u)$ existe e é finito para cada s .

4. Continuidade de $\partial_s \tilde{B}$ e $\partial_u \tilde{B}$. Os argumentos anteriores permitem também verificar a continuidade conjunta: as expressões de

$\partial_u \tilde{B}(s, u)$ e $\partial_s \tilde{B}(s, u)$ são construídas a partir de aplicações contínuas em s e u compostas com operações bilineares em L^2 (produto interno, multiplicação por ξ), todas contínuas. Pela continuidade de $s \mapsto DT_s^{-1}$ em L^∞ e pela continuidade de $u \mapsto \tilde{\sigma}_s(u)$ em $E \rightarrow L^2$, segue

que $(s, u) \mapsto \partial_u \tilde{B}(s, u)$ e $(s, u) \mapsto \partial_s \tilde{B}(s, u)$ são contínuas nas normas apropriadas.

Reunindo os pontos anteriores conclui-se que $\tilde{B} \in C^1([0, s_1] \times E, \mathbb{R})$, isto é, o funcional de custo pullbackado é continuamente diferenciável em s e Fréchet-diferenciável em u , com derivadas contínuas em ambos os argumentos.

Aplicação do Teorema 6

Com a formulação variacional do problema de Stokes no domínio deformado e sua reformulação abstrata no domínio fixo via pullback, identificamos o operador $A(s, u) \in F^*$ e o funcional de custo $B(s, u)$. As Proposições 1–4 garantem que todas as hipóteses do Teorema 6 estão satisfeitas: $A \in C^1$, o operador linearizado $\partial_u A(0, u)$ é um isomorfismo, e o funcional de custo B é continuamente diferenciável.

Assim, pelo Teorema 6, conclui-se que a família de estados $s \mapsto u_s$ é continuamente diferenciável em $s = 0$, a derivada material u existe e é única, o estado adjunto p está bem definido e a derivada de forma do funcional é dada por

$$dJ(\Omega)(\theta) = \langle L(u), p \rangle_{F^*, F} + \partial_s B(0, u),$$

o que fornece uma expressão abstrata, geral e consistente para o gradiente de forma associado ao problema de Stokes.

Conclusiones

A aplicação do Teorema 6 mostra que a estrutura lagrangiana abstrata é adequada para o problema de Stokes com fronteira livre, garantindo existência e unicidade da derivada material, do adjunto e da derivada de forma do funcional de custo. Este resultado evidencia a utilidade do arcabouço abstrato para tratar problemas de otimização de forma governados por EDPs lineares, destacando sua generalidade e potencial de aplicação em diferentes contextos matemáticos e aplicados.

Agradecimientos

A autora expressa sua gratidão ao CNPq, pelo apoio financeiro por meio da bolsa de mestrado, que tornou esta pesquisa possível. Agradece ainda ao orientador Professor Antoine Laurain, pela orientação dedicada, e aos colaboradores do Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação da USP, cuja colaboração e sugestões foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho. Estende também seus agradecimentos a familiares, companheiro e amigos pelo apoio contínuo, incentivo e compreensão ao longo de toda a realização desta pesquisa.

Referências

- [1] Bouchon, F., Peichl, G. H., Sayeh, M., Touzani, R. A Free Boundary Problem for the Stokes Equations. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 23 (2017), 195–215.
- [2] Laurain, A., Lopes, P. T. P., Nakasato, J. C. *An Abstract Lagrangian Framework for Computing Shape Derivatives*, 2020.
- [3] M.C. Delfour and J.-P. Zolésio, *Shapes and Geometries*. SIAM (2001).
- [4] N. Saito, On the Stokes Equation with the Leak and Slip Boundary Conditions of Friction Type: Regularity of Solutions. *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* 40 (2004) 345–383.
- [5] S.C. Brenner and L.R. Scott, *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*. Springer, New York (1996).
- [6] M.C. Delfour and J.-P. Zolésio, Structure of Shape Derivatives for Nonsmooth Domains. *J. Funct. Anal.* 104 (1992) 1–33.
- [7] J. Lamboley and M. Pierre, Structure of shape derivatives around irregular domains and applications. *J. Convex Analysis* 14 (2007) 807–822.
- [8] M. Nagumo. Über die Lage der Integralkurven gewöhnlicher Differentialgleichungen. *Proc. Phys.-Math. Soc. Japan* (3), 24:551–559, 1942.

26.- Ciencias e ingeniería de materiales

Caracterización de la respuesta fotoconductora y de transporte eléctrico de heteroestructuras de $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3$

Autor: Pérez Albert, Ana Sofía; anasofiapa989@gmail.com

Orientadores: Bridoux, Germán; gbridoux@herrera.unt.edu.ar; Tolosa, Martín Rodrigo; mrtolosa@herrera.unt.edu.ar; Villafuerte, Manuel, mvillafuerte@herrera.unt.edu.ar

Universidad Nacional de Tucumán (UNT), Facultad de Ciencias Exactas y Tecnología

Resumen

Debido a su gran variedad de propiedades electrónicas, magnéticas, estructurales y ópticas, los óxidos complejos con estructura tipo perovskita representan un gran interés en la física del estado sólido. La posibilidad de crecer películas delgadas epitaxiales con esta estructura ha permitido el desarrollo de heteroestructuras, sistemas multicapa donde las interfaces entre materiales distintos pueden dar lugar a fenómenos emergentes no presentes en los componentes individuales.

En este trabajo se estudiarán heteroestructuras formadas por películas ultradelgadas (3nm de espesor) de $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$, crecidas epitaxialmente mediante deposición de láser pulsado sobre un sustrato monocristalino de SrTiO_3 (001). La interfaz resultante combina un conductor ferromagnético con un sustrato aislante y transparente de amplio gap, siendo esta combinación de gran interés, ya que la discontinuidad polar en la interfaz y el desajuste de red inducen fenómenos de reconstrucción de carga y espín.

El propósito del trabajo es caracterizar el transporte eléctrico de estas heteroestructuras en un rango de temperaturas entre 30 y 300 K, evaluando su comportamiento bajo distintas condiciones: con o sin iluminación ultravioleta, y en presencia o ausencia de campo magnético. Entre los resultados obtenidos, se destaca que el campo magnético produce un desplazamiento de la temperatura de transición metal-aislante hacia temperaturas más altas junto a una disminución de la resistencia asociada. Además, la fotoconductividad positiva aumenta por debajo de la temperatura correspondiente al cambio estructural cúbico-tetragonal del SrTiO_3 .

Palabras clave: heteroestructuras de LSMO/STO, deposición de láser pulsado, cambio estructural cúbico-tetragonal del SrTiO_3

Introducción

Los óxidos complejos con estructura perovskita han despertado gran interés en la física del estado sólido debido a la amplia gama de propiedades electrónicas, magnéticas, estructurales y ópticas que presentan. La posibilidad de crecer películas delgadas epitaxialmente con un control casi atómico ha permitido el surgimiento de las heteroestructuras, donde las interfaces entre diferentes materiales pueden dar lugar a fenómenos emergentes que están ausentes en sus componentes individuales (Mannhart & Schlom, 2010; Hwang *et al.*, 2012). Una heteroestructura consiste en la deposición controlada de dos o más materiales, capa por capa, sobre un sustrato cristalino. En estos sistemas, las interfaces pueden modificar la distribución de carga, alterar la estructura electrónica o generar acoplamientos entre diferentes grados de libertad (espín, carga, orbitales, red), (Kim *et al.*, 2012; Soleimanpour & Kanjouri, 2014) lo que permite diseñar materiales funcionales a escala nanométrica. Por otro lado, el desajuste de red entre capas y el control de la orientación cristalográfica introducen tensiones (también conocido como 'strain') que pueden modificar la respuesta física de los materiales (Dagotto *et al.*, 2001).

El diseño de dispositivos a nivel de interfaz en óxidos complejos está motivado principalmente por la aparición de

fenómenos electrónicos novedosos que no se encuentran en los materiales masivos, lo que ofrece un gran potencial para la electrónica del futuro. Estas interfaces pueden albergar sistemas electrónicos extraordinarios con propiedades notables, como superconductividad interfacial, acoplamiento magneto-eléctrico y el efecto Hall cuántico. A pesar de los avances significativos, el principal desafío radica en la inmensa dificultad de comprender, predecir y ajustar con precisión las propiedades físicas de estas interfaces a nivel atómico. Factores como la transferencia de carga, las reconstrucciones de espín y orbital y la tensión epitaxial están muy localizados y son complejos, lo que requiere técnicas de fabricación sofisticadas y modelos teóricos. El camino hacia la aplicación práctica de estos materiales aún enfrenta obstáculos considerables, como el logro de movilidades a temperatura ambiente y la capacidad de separar y estudiar los diversos efectos que se producen en la interfaz.

Entre los sustratos más utilizados para la creación de numerosas películas delgadas de óxidos funcionales se encuentra el SrTiO_3 (STO), muy valorado por su excelente compatibilidad estructural y su capacidad para promover crecimiento epitaxial de alta calidad (Salomon & Jaime, 2001). Es un aislante con banda prohibida indirecta de 3,20–3,30 eV (Cardona *et al.*,

1965; Capizzi & Frova, 1970), aunque también presenta transiciones directas, como la $X_5' \rightarrow X_3$ en 3,46 eV, observada en experimentos de absorción óptica (Capizzi & Frova, 1970). Una de sus propiedades más notables es la capacidad de experimentar una transición metal-aislante (MIT, por sus siglas en inglés) inducida por luz a temperaturas inferiores a los 85 K (Bridoux *et al.*, 2015).

El $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ (LSMO), por su parte, es un óxido ferromagnético con fuerte acoplamiento entre propiedades electrónicas y magnéticas. Por debajo de su temperatura de Curie (~ 350 K) presenta ferromagnetismo y conductividad metálica (Wu, 2023). Esta conductividad mejora notablemente en presencia de un campo magnético debido a la magnetorresistencia colosal (CMR, por sus siglas en inglés), fenómeno en el cual la alineación de espines favorece el transporte de carga (Singh *et al.*, 2023). Estas características hacen del LSMO un electrodo activo y sensible a estímulos magnéticos y térmicos, ideal para explorar acoplamientos funcionales con otras capas.

Cuando el LSMO se fabrica en forma de película ultradelgada, su comportamiento se ve modificado por fenómenos de interfaz que se vuelven dominantes. En una película de LSMO de pocos nanómetros ($\sim 7\text{--}8$ celdas unitarias) crecida sobre STO, las propiedades estructurales,

electrónicas y magnéticas son gobernadas por la tensión interfacial, la estequiometría de oxígeno, el acoplamiento octaédrico y los efectos de discontinuidad polar. Esta discontinuidad polar en la interfaz LSMO/STO es particularmente crítica, ya que puede causar una redistribución de carga y el debilitamiento del ferromagnetismo interfacial, dando lugar a una "capa magnéticamente muerta" que reduce la polarización de espín en la superficie (Majumdar & Dijken, 2013).

Objetivos

Este trabajo propone estudiar heteroestructuras compuestas por películas ultradelgadas de LSMO, crecidas con espesores de 3 nanómetros. Estas películas se depositaron epitaxialmente sobre sustratos de STO orientados en la dirección (001) mediante la técnica de deposición de láser pulsado (PLD). La investigación busca caracterizar las propiedades de transporte eléctrico de estos sistemas midiendo su resistencia en función de la temperatura, evaluando su respuesta frente a la aplicación de un campo magnético externo. A su vez, se estudiará el comportamiento fotoconductor del material bajo iluminación ultravioleta (UV), observando también su reacción tanto en ausencia como en presencia de un campo magnético. El objetivo final es comprender la física subyacente de estos fenómenos para evaluar el potencial de

estas heteroestructuras en futuras aplicaciones tecnológicas.

Materiales y métodos

En este trabajo se fabricaron dos muestras (A1 y A2) en las cuales se realizaron depósitos de películas ultradelgadas de LSMO crecidas sobre sustratos monocristalinos de STO orientados en dirección (001), con dimensiones $0,5 \times 2,5 \times 5 \text{ mm}^3$. La capa de LSMO fue depositada mediante PLD, utilizando un láser Nd:YAG operando a una longitud de onda de 266 nm y una frecuencia de 200 Hz.

La deposición se realizó sobre las dos muestras a una temperatura del sustrato de 700°C , bajo una presión de oxígeno de 150 mTorr, con una fluencia láser de $1,79 \text{ J/cm}^2$ y un total de 2500 pulsos. Finalizada la deposición, las muestras fueron enfriadas en una atmósfera de oxígeno a 95 Torr. Finalmente, la muestra A2 fue sometida a un segundo tratamiento térmico, manteniendo la misma temperatura del sustrato (700°C) y una presión de oxígeno de 1 mTorr durante una hora. El enfriamiento posterior se realizó bajo una presión de 2 Torr de O_2 .

Para la caracterización de las muestras, se realizaron contactos eléctricos utilizando cables de oro, los cuales fueron adheridos a la superficie mediante presión utilizando indio como material de unión. En la Figura 1 se ilustra la configuración experimental.

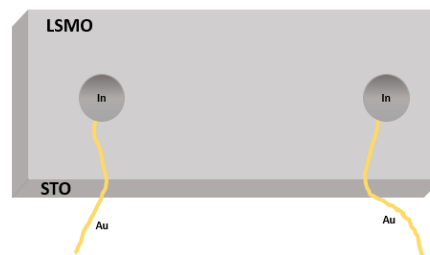


Figura 1: Representación gráfica de los contactos realizados en la muestra. Los círculos plateados representan el indio utilizado para adherir los cables de oro (representados en amarillo) a la superficie de la muestra.

Se realizaron mediciones de resistencia eléctrica de las muestras bajo distintas condiciones experimentales. En primer lugar, se midió la resistencia en oscuridad, tanto en ausencia como en presencia de campo magnético. Posteriormente, se repitieron las mediciones bajo iluminación en el rango del UV, también con y sin aplicación de campo magnético.

Las mediciones se realizaron utilizando un criostato estándar equipado con una ventana óptica, una lámpara de Xe de 1000 W, un monocromador y un electroimán operando con corrientes de 35A. La longitud de onda de la luz incidente se puede variar entre 200 y 800 nm, con una densidad de flujo de aproximadamente $10 \mu\text{W cm}^{-2}$ en el rango UV. La velocidad de barrido espectral fue de $0,5 \text{ nm/s}$.

Para evaluar la calidad del depósito de LSMO, se empleó la técnica de difracción de rayos X (DRX), utilizando un equipo Epyrean (Malvern Panalytical). Los difractogramas se obtuvieron con radiación $\text{CuK}\alpha$ ($\lambda = 0,15418 \text{ nm}$), suprimiéndose la

componente $\text{CuK}\beta$ mediante un filtro de níquel. A modo de ejemplo se muestra el difractograma correspondiente a la muestra A1 donde se indican las reflexiones correspondientes al $\text{STO}(002)$ y $\text{LSMO}(002)$ (Fig. 2).

Resultados y Discusiones

Resultados de fotorresistencia

La película de LSMO se creció con un espesor de 3 nm en ambas muestras.

En la Fig. 3 se presentan curvas de resistencia en función de la temperatura, medidas tanto en oscuro como bajo iluminación con luz UV. Se puede observar

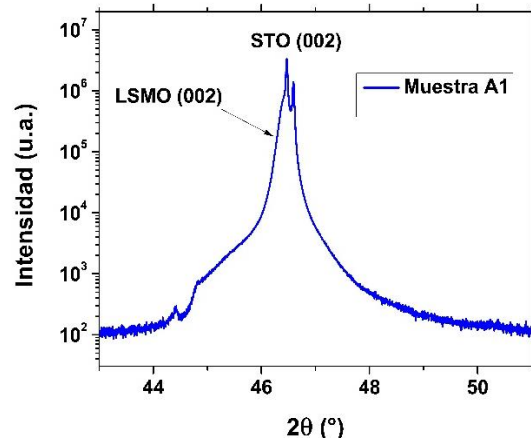


Figura 2: Difractograma de la muestra A1. Se observan las reflexiones correspondientes al $\text{STO}(002)$ ($K\alpha_1$ y $K\alpha_2$) y al $\text{LSMO}(002)$.

que la temperatura donde se da la transición metal-aislante (T_{MI}) no se ve afectada significativamente por la

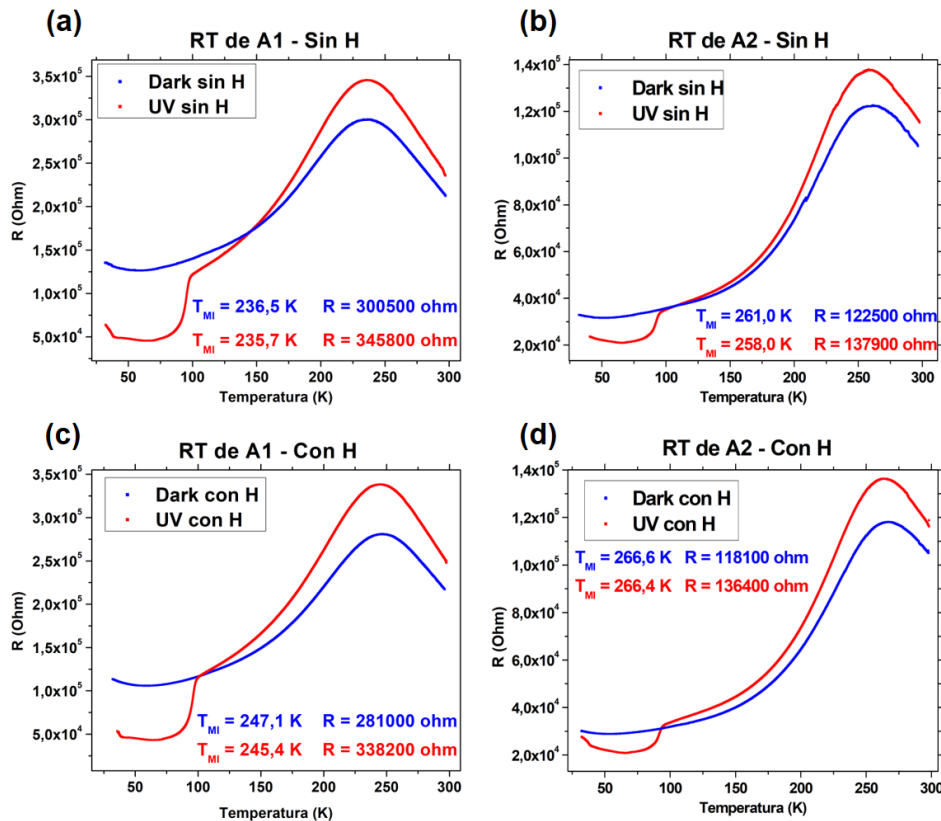


Figura 3: mediciones de resistencia en función de temperatura sin campo magnético (arriba) y con campo magnético (abajo) para las muestras (a) y (c) A1, y (b) y (d) A2. En azul se muestran los datos obtenidos sin iluminar las muestras y en rojo los datos obtenidos al aplicar iluminación, indicando en cada caso su T_{MI} con su correspondiente valor de resistencia.

iluminación. Sin embargo, el valor de resistencia asociado a dicha T_{MI} muestra un aumento: en la Fig. 3(b) el aumento es del 12%, en la Fig. 3(c) del 17% y en las Fig. 3(a) y 3(d) del 15%. Además, se destaca la aparición de una transición en la resistencia eléctrica en torno a los 90-100K en las curvas medidas bajo luz UV, cercana a la transición estructural cúbica-tetragonal que presenta el STO en $T \sim 105K$ (Fleury, Scott & Worlock, 1968; Courtens, 1972; Kisiel *et al.*, 2015).

También se observa que las curvas medidas en oscuro y bajo iluminación se cruzan en un punto específico, lo que indica un cambio en la fotoconductividad de negativa a positiva.

La temperatura en la que ocurre este cruce varía según la presencia o ausencia de campo magnético: en la Fig. 3(a) se da a $T = 145K$, en la Fig. 3(b) se da a $T = 107K$, en la Fig. 3(c) se da a $T = 102K$ y en la Fig. 3(d) a $T = 93K$.

En la Fig. 4 se presentan resultados de fotorresistencia (PR, por sus siglas en inglés, definida como $PR = \frac{R_{UV} - R_{Dark}}{R_{Dark}}$). Particularmente, en la Fig. 4(a) se observa que la curva sin campo magnético intersecta el eje de temperatura (X) a un valor mayor que la curva medida con campo aplicado. Además, se puede apreciar que la disminución de fotorresistencia es menor al aplicar campo magnético: en el caso de la curva roja, la caída es de un 1,64%, mientras que en la curva azul es de un 1,45%. En la Fig. 4(b) se mantiene la misma tendencia respecto de la intersección con el eje de temperatura, donde la curva sin campo lo hace a una temperatura más alta que la curva con campo. En cuanto a la disminución de fotorresistencia, se observa una reducción con respecto de la Fig. 4(a): en este caso, la caída es de 0,52% en la curva roja y de 0,44% en la curva azul.

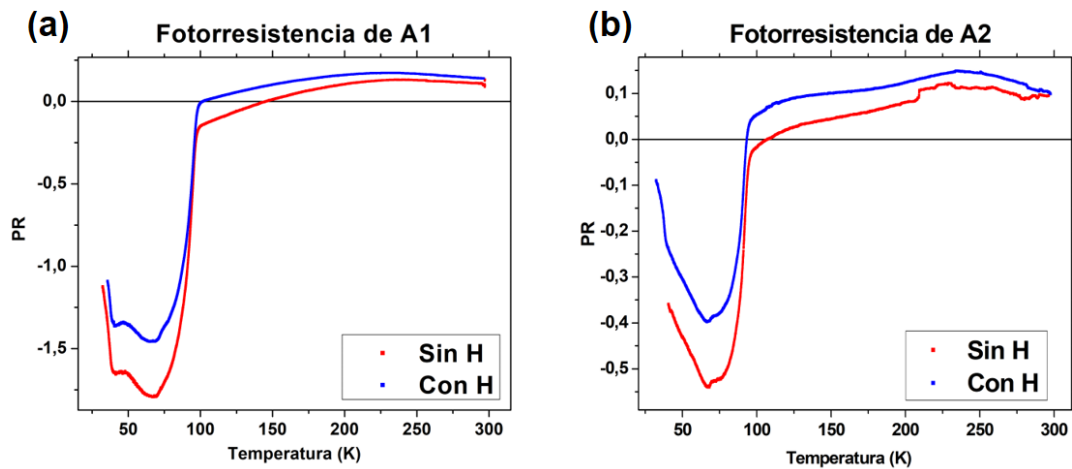


Figura 4: comparación de fotorresistencias obtenidas sin campo (en rojo) y con campo (en azul) para las muestras (a) A1 y (b) A2.

Resultados de magnetotransporte

En la Fig. 5 se muestran curvas de resistencia en función de la temperatura, obtenidas en ausencia de campo magnético y posteriormente bajo la aplicación de un campo magnético externo. La presencia del campo magnético induce un desplazamiento de la T_{MI} hacia valores más altos, acompañado por una

disminución en la resistencia correspondiente a T_{MI} . Los porcentajes de disminución observados son los siguientes: en la Fig. 5(a), 2,2%; en la Fig. 5(b), 1,1%; en la Fig. 5(c), 6,5%; y en la Fig. 5(d), 3,5%. Estos resultados son consistentes con lo reportado previamente por Kawasaki *et al.* (1999) en muestras similares ($\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$).

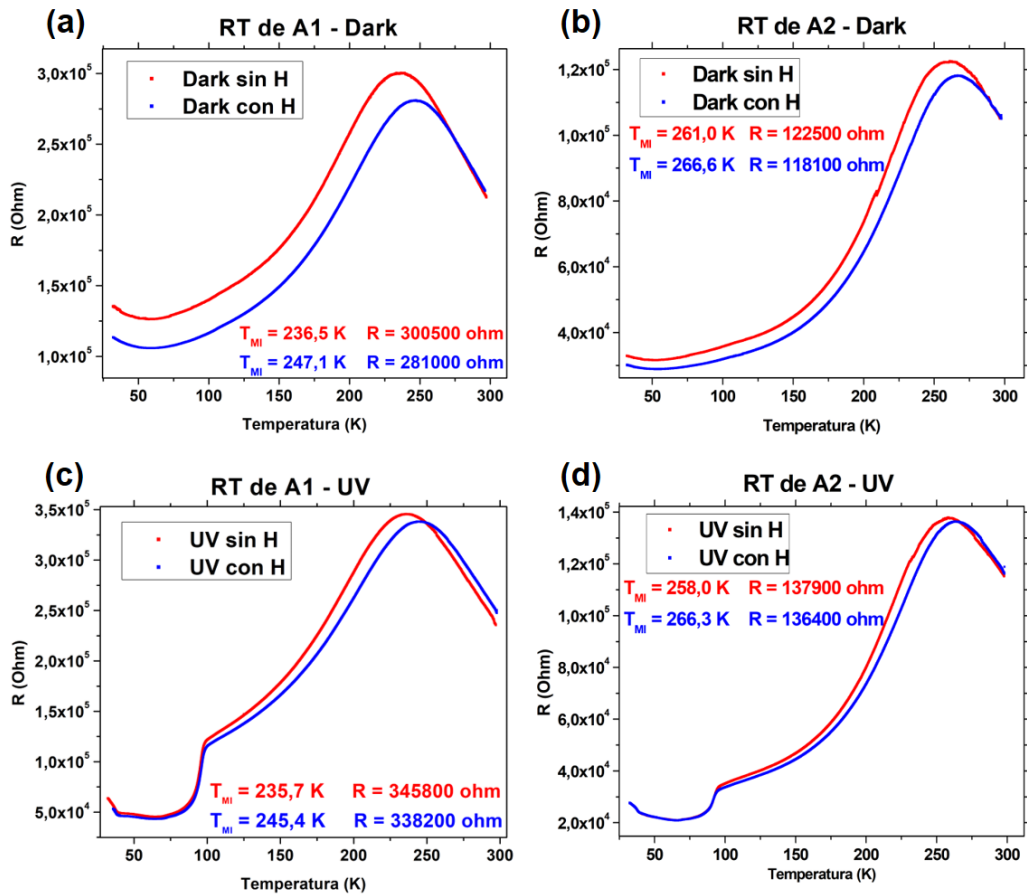


Figura 5: mediciones de resistencia en función de temperatura en oscuro (arriba) y con luz (abajo) para las muestras (a) y (c) A1, y (b) y (d) A2. En rojo se muestran los datos obtenidos sin aplicar campo en las muestras y en azul los datos obtenidos al aplicar un campo, indicando en cada caso su T_{MI} y su correspondiente valor de resistencia.

Resultados de fotoconductividad

La figura 6 muestra el espectro de fotoconductividad obtenido para ambas muestras en $T = 52\text{K}$. La fotoconductividad

(PC) se puede definir como $PC = \frac{\frac{1}{R} - \frac{1}{R_{Dark}}}{\frac{1}{R_{Dark}}}$.

Si se asume que la misma es proporcional al coeficiente de absorción óptico, es

posible obtener la energía de la banda prohibida para cada muestra estudiada. El mejor ajuste por encima del 'onset' de energía se obtiene utilizando una relación lineal entre PC^2 y la energía: $PC^2 \propto E - E_g$, donde E_g será el gap efectivo de energía, y que se puede observar en la Fig. 6. Esto implica, además, que se obtuvieron gaps de energía directos (Figuroa *et al.*, 2023). En este caso, se determinó un valor de $E_g = (3,3 \pm 0,2) \text{ eV}$ para la muestra A1 y de $E_g = (3,2 \pm 0,2) \text{ eV}$ para la muestra A2, ambos coincidentes con el valor de gap directo del STO reportado anteriormente en Bridoux *et al.* (2015).

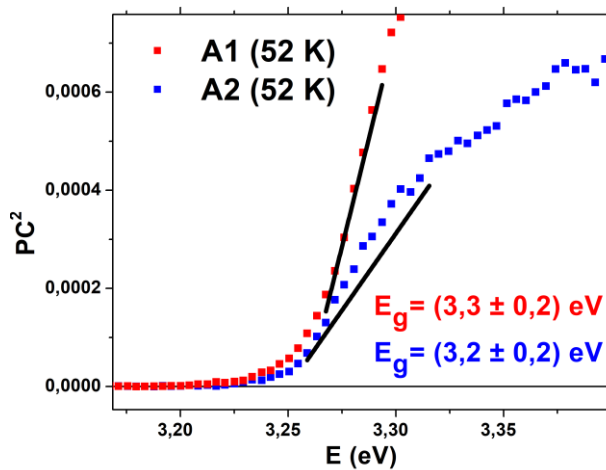


Figura 6: espectro de PC^2 para cada configuración. En azul se muestra el espectro correspondiente a la muestra A2, mientras que en rojo se presenta el espectro de la muestra A1. Se indica además la energía de banda asociada. El ajuste lineal correspondiente se incluye en el inset.

Se propone que ambas muestras estudiadas conducen tanto por el film (LSMO) como por la interfaz (LSMO/STO), como si fuera un circuito de dos resistencias conectadas en paralelo. La

corriente se distribuye en ambos caminos, favoreciendo la conducción por aquel donde la resistencia sea menor. Esta respuesta presenta una dependencia con la temperatura.

A temperaturas altas, al iluminar con luz UV, los electrones del STO son excitados desde la banda de valencia hacia la banda de conducción del mismo, y son transferidos hacia el LSMO, donde se recombinan con huecos, provocando un aumento de resistencia, como puede observarse en la figura 3. Aun así, la interfaz presenta una resistencia mucho mayor en estas temperaturas, por lo cual la conducción se da principalmente a través del LSMO.

A medida que la temperatura disminuye y los huecos en el LSMO comienzan a llenarse, la resistencia de la interfaz disminuye debido a la inyección de portadores desde el STO. De esta manera, la conducción se da simultáneamente entre los dos canales hasta que los huecos del LSMO se llenan completamente, lo que resulta en una resistencia muy grande asociada al LSMO, y desencadenando en una conducción mayoritaria por la interfaz.

Este cambio es favorecido por la transición estructural cúbica-tetragonal del STO, que tiene lugar en torno a 105K. Por debajo de esta temperatura, la respuesta fotoinducida puede verse intensificada por la existencia de dos mecanismos: el primer mecanismo sugiere que la transición

indirecta de la banda prohibida del STO puede volverse más eficiente gracias a la presencia de un fonón que ayuda a los electrones a saltar a la banda de conducción, proporcionándoles la energía y el momento necesarios para ello (Bridoux *et al.*, 2015); el segundo mecanismo propone un doblamiento de la zona de Brillouin donde, debido a la transición cúbica-tetragonal, la banda que realiza la transición indirecta se 'dobla' y se convierte en directa, lo que facilita la excitación de electrones.

Conclusiones

En este trabajo, se estudió el transporte eléctrico y la respuesta fotoconductora de heteroestructuras de LSMO crecidas epitaxialmente sobre STO. Al iluminar con luz UV, se observó un aumento en la resistencia asociada a la temperatura de transición metal-aislante en comparación con su valor medido en oscuro. Además, aparece una transición en la resistencia eléctrica no reportada previamente en la literatura en el rango de 90-100K, próxima a la transición estructural cúbico-tetragonal del STO, acompañada de un aumento en la fotoconductividad por debajo de dicha temperatura. Por otro lado, al aplicar un campo magnético externo, la T_{MI} se desplazó hacia temperaturas más altas, y la resistencia correspondiente a cada T_{MI} disminuyó.

Se detectó, además, una fotoconductividad negativa para

temperaturas altas y positiva para temperaturas bajas. Este cambio de comportamiento se explica como el resultado de dos mecanismos de conducción: a altas temperaturas la conducción se da mayoritariamente por el LSMO, mientras que al descender la temperatura y aumentar su resistencia, la conducción ocurre principalmente a través de la interfaz LSMO/STO. La teoría sugiere que esto último se ve intensificado por el plegamiento de la zona de Brillouin o por la asistencia de fonones que facilitan que los electrones alcancen la banda de conducción.

La relevancia de este trabajo radica en haber caracterizado materiales ampliamente estudiados, es decir, el LSMO y el STO, bajo condiciones poco exploradas, en particular con espesores ultradelgados de 3 nm, abriendo nuevas posibilidades para estudios futuros en estructuras de LSMO/STO sometidas a diferentes tratamientos térmicos y a posibles aplicaciones tanto en nuevas tecnologías como en la industria.

Referencias Bibliográficas

- Bridoux, G., Villafuerte, M. J., Ferreyra, J. M., Bachi, N., Figueroa, C. A., Heluani, S. P. (2015). *Study of the light-induced metal-insulator transition in $SrTiO_3$ by photoresistance spectroscopy*. Physical Review B, 92(15), 155202. doi:10.1103/PhysRevB.92.155202

- Capizzi, M. & Frova, A. (1970). *Optical Gap of Strontium Titanate (Deviation from Urbach Tail Behavior)*. Physical Review Letters, 25(18), 1298-1302.
doi:10.1103/PhysRevLett.25.1298.
- Cardona, M. (1965). *Optical Properties and Band Structure of SrTiO₃ and BaTiO₃*. Physical Review, 140, A651.
doi:10.1103/PhysRev.140.A651.
- Courtens, E. (1972). *Birefringence of SrTiO₃ produced by the 105°K structural phase transition*. Physical Review Letters, 29(20), 1380.
doi:10.1103/PhysRevLett.29.1380
- Dagotto, E., Hotta, T., & Moreo, A. (2001). *Colossal magnetoresistant materials: The key role of phase separation*. Physics Reports, 344(1–3), 1–153.
doi:10.1016/S0370-1573(00)00121-6
- Figueroa, C., Villafuerte, M., Straube, B., Ferreyra, J., Navarro, C., Runco Leal, V., & Bridoux, G. (2023). *The role of defects in the persistent photoconductivity of BaSnO₃ thin films*. Journal of Physics: Condensed Matter, 35(16), 165703.
doi:10.1088/1361-648X/acbcb7
- Fleury, P. A., Scott, J. F., & Worlock, J. M. (1968). *Soft phonon modes and the 110°K phase transition in SrTiO₃*. Physical Review Letters, 21(1), 16.
doi:10.1103/PhysRevLett.21.16
- Hwang, H. Y., Iwasa, Y., Kawasaki, M., Keimer, B., Nagaosa, N., & Tokura, Y. (2012). *Emergent phenomena at oxide interfaces*. Nature Materials, 11(2), 103–113.
doi:10.1038/nmat3223
- Kawasaki, M., Izumi, M., Konishi, Y., Manako, T., & Tokura, Y. (1999). *Perfect epitaxy of perovskite manganite for oxide spin-electronics*. Materials Science and Engineering: B, 63(1–2), 49–57.
doi:10.1016/S0921-5107(99)00051-3
- Kim, H. J., Kim, U., Kim, T. H., Mun, H. S., Jeon, B., Hong, K. T., Lee, W., Ju, C., Kim, K. H., Char, K. (2012). *High mobility in a stable transparent perovskite oxide: BaSnO₃*. Nature Materials, 11(11), 1030–1035.
doi:10.1143/APEX.5.061102
- Kisiel, M., Pellegrini, F., Santoro, G. E., Samadashvili, M., Pawlak, R., Benassi, A., Gysin, U., Buzio, R., Gerbi, A., Meyer, E., & Tosatti, E. (2015). *Noncontact atomic force microscope dissipation reveals a central peak of SrTiO₃ structural phase transition*. Physical Review Letters, 115(4), 046101.
doi:10.1103/PhysRevLett.115.046101

- Majumdar, S., & Dijken, S. (2013). *Pulsed laser deposition of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$: Thin-film properties and spintronic applications*. Journal of Physics D: Applied Physics, 47(3), 034010. doi:10.1088/0022-3727/47/3/034010
- Mannhart, J., & Schlom, D. G. (2010). *Oxide interfaces—An opportunity for electronics*. Science, 327(5973), 1607–1611. doi:10.1126/science.1181862
- Salamon, M. B., & Jaime, M. (2001). *The physics of manganites: Structure and transport*. Reviews of Modern Physics, 73(3), 583–628. doi:10.1103/RevModPhys.73.583
- Singh, P., Swartz, A., Lu, D., Hong, S. S., Lee, K., Marshall, A. F., Nishio, K., Hikita, Y., Hwang, H. Y. (2019). *Large-Area Crystalline BaSnO_3 Membranes with High Electron Mobilities*. ACS Applied Electronic Materials, 1(7), 1269–1274. doi:10.1021/ACSAELM.9B00215
- Soleimanpour, A. M., & Kanjouri, F. (2014). *Structural, electronic and optical properties of cubic BaSnO_3 : First-principles calculations*. Physica B: Condensed Matter, 432, 16–20. doi:10.1016/j.physb.2013.09.004
- Wu, Z. (2023). *Atomic and electronic structures of the interfaces between perovskite $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{MnO}_3$ and brownmillerite $\text{SrCoO}_{2.5}$* . Physica Status Solidi (b), 260(3), 2200399. doi:10.1002/pssb.202200399

27. Ciencia, tecnología e innovación

MODELO DE SIMULACIÓN DE UNA PLANTA DE ALIMENTO BALANCEADO DE ANIMALES DOMÉSTICOS

Autor: Federico Castiglioni¹; Email: federico.castiglioni@uns.edu.ar

Coautor: Diego Rossit^{1,2}; Email: - diego.rossit@uns.edu.ar

Orientador: Adrián Toncovich¹; Email: atoncovi@uns.edu.ar

¹ Departamento de Ingeniería, Universidad Nacional del Sur, Argentina

² INMABB Universidad Nacional del Sur (UNS)-CONICET, Argentina

Resumen

La Industria 4.0 ha revolucionado la forma en que se diseñan y optimizan los procesos industriales, y la simulación juega un papel clave en este contexto, ofreciendo enormes beneficios ya sea, por nombrar algunos: identificar cuellos de botella y oportunidades de mejora en la producción, reducir riesgos y costos, mejorar la calidad de producción, integrar datos y simular escenarios de manufactura. En esta línea, en este trabajo se propone un primer modelo de simulación para abordar los problemas productivos de una planta de alimento balanceado ubicada en la ciudad de Coronel Pringles, Argentina. Una vez confeccionado este modelo, se realiza un análisis de los cambios necesarios para triplicar la capacidad de la planta, una estrategia que es perseguida por la gerencia de la empresa en el futuro próximo. Los resultados permiten entrever que las inversiones de ampliación que planea realizar la gerencia no serían suficientes para triplicar la producción. Por ende, debieran realizarse modificaciones adicionales para lograr el objetivo propuesto.

Palabras clave: Simulación; industria 4.0; capacidad de planta; ingeniería industrial

1. Introducción

En el ámbito empresarial y productivo, la toma de decisiones se enfrenta a un entorno cada vez más complejo y dinámico. La experiencia acumulada y el análisis retrospectivo de datos, aunque valiosos, resultan insuficientes para anticipar escenarios futuros con la precisión requerida. En este contexto, la simulación computacional constituye una herramienta clave para predecir el comportamiento de sistemas, procesos o componentes bajo diferentes condiciones, contribuyendo significativamente al apoyo de la toma de decisiones (De Paula Ferreira et al., 2020).

La simulación consiste en la construcción de un modelo digital que representa un sistema (por ejemplo, una cadena de suministro), un proceso (como la gestión de inventarios) o un elemento físico (como un componente mecánico). Este modelo permite emular el comportamiento del objeto de estudio a lo largo del tiempo, considerando escenarios sujetos a variabilidad y cambios. El valor de la simulación radica precisamente en su capacidad para reproducir situaciones potenciales y anticipar resultados que no son evidentes a priori (Soori et al., 2024).

En el marco de la denominada Cuarta Revolución Industrial (Industria 4.0), la simulación se integra con tecnologías de sensorización, conectividad e inteligencia artificial, fortaleciendo su capacidad

predictiva y prescriptiva. En particular, la vinculación con el concepto de gemelos digitales (digital twins) permite no solo reflejar el estado actual de un sistema físico en tiempo real, sino también evaluar escenarios hipotéticos sin riesgo, retroalimentando la toma de decisiones en el entorno productivo (Javaid et al., 2023b). En este trabajo se presenta un modelo de simulación desarrollado para la empresa Agronegocios del Plata S.R.L., cuyo objetivo es evaluar el impacto de la incorporación de nuevos equipos en su planta de producción de alimento balanceado para mascotas.

2. Trabajos relacionados

La simulación ha sido ampliamente utilizada como herramienta para modelar, analizar y optimizar procesos en la industria alimentaria y manufacturera. Por ejemplo, Javadi et al. (2023) demostraron cómo la simulación puede identificar y mitigar cuellos de botella en líneas de producción, optimizando el flujo de materiales y mejorando la eficiencia operativa, al tiempo que permite evaluar distintos escenarios sin incurrir en riesgos o costos adicionales. De manera similar, Grenzfurtnner et al. (2025) aplicaron DES en la producción de galletas, logrando equilibrar y reconfigurar líneas de producción, lo que resultó en mejoras significativas en la planificación de la

producción y en la reducción de tiempos de inactividad.

La simulación no solo permite evaluar la eficiencia de procesos existentes, sino que también se ha aplicado en la planificación de la expansión de capacidad y en la integración de nuevos equipos. En este sentido, Hauder et al. (2020) abordaron problemas de programación multi-proyecto con restricciones de recursos y flexibilidad de actividades, destacando cómo la combinación de modelos matemáticos y simulación puede apoyar la toma de decisiones estratégicas en entornos industriales complejos.

Por otro lado, la incorporación de gemelos digitales (digital twins) ha revolucionado la gestión de mantenimiento y el control predictivo en entornos industriales. Zhong et al. (2023) presentaron un enfoque basado en gemelos digitales para el mantenimiento predictivo, destacando su capacidad para reflejar el estado real de los activos y anticipar fallas antes de que ocurran. Mrzyk et al. (2023) exploraron la reutilización de arquitecturas de TI flexibles para la implementación de gemelos digitales, permitiendo su adopción eficiente en diferentes procesos industriales.

Estos modelos digitales, al integrarse con herramientas de simulación, permiten experimentar escenarios hipotéticos, optimizar estrategias operativas y reducir riesgos asociados a la producción.

Recientemente, estudios como los de Loacker et al. (2024) han utilizado DES para analizar el impacto de la reducción de cantidades mínimas de pedido en la industria alimentaria, proponiendo contratos de ahorro compartido para equilibrar los costos de producción y los beneficios para los minoristas. Además, investigaciones de Abdurrahman (2025) han revisado aplicaciones de gemelos digitales en la industria alimentaria, destacando su utilidad en el mantenimiento predictivo y la mejora de la eficiencia operativa.

En conjunto, estos estudios muestran que la combinación de simulación y gemelos digitales contribuye a mejorar la eficiencia operativa, optimizar la planificación de recursos y apoyar la toma de decisiones a distintos niveles dentro de la industria alimentaria. El presente trabajo se apoya en estas metodologías para modelar y analizar la producción en Agronegocios del Plata S.R.L., evaluando el impacto de la incorporación de nuevo equipamiento sobre la capacidad productiva y la eficiencia del proceso.

3. Caso de estudio: Agronegocios del Plata S.R.L.

El presente estudio se desarrolla en Agronegocios del Plata S.R.L., una empresa localizada en el parque industrial de la ciudad de Coronel Pringles, Provincia de Buenos Aires, Argentina, dedicada a la

producción de alimento balanceado para mascotas. La ubicación de la planta resulta estratégica, ya que se encuentra equidistante entre la Ciudad Autónoma de Buenos Aires y Bahía Blanca, lo que optimiza las operaciones logísticas. Además, el parque industrial se ubica sobre la Ruta Provincial N.º 51, vía que conecta ambas ciudades y permite un acceso directo a las instalaciones sin desvíos adicionales.

La operación productiva se basa en un esquema por lotes (batch) de 1.000 kg, en régimen continuo de 24 horas diarias, distribuidas en tres turnos rotativos de 8 horas cada uno. La estructura operativa de cada turno incluye:

- Extrusorista: máxima autoridad del turno, encargado de supervisar el proceso productivo y asegurar el cumplimiento de los estándares de calidad.
- Operario de dosificación: responsable de pesar y mezclar las materias primas de acuerdo con la formulación establecida para cada lote.
- Equipo de envasado y logística interna: integrado por tres operarios encargados del embolsado, paletizado, traslado interno del producto terminado y tareas de limpieza del área de trabajo.

El área de mantenimiento cuenta con cinco técnicos que cumplen un horario fijo de

lunes a sábado, complementado con un sistema de guardias para resolver incidencias críticas fuera del horario habitual. El personal administrativo y el encargado de producción realizan el mismo régimen horario que el equipo de mantenimiento.

Esta caracterización permite contextualizar el desarrollo del modelo de simulación, así como los objetivos de mejora planteados por la empresa en relación con la incorporación de nuevo equipamiento productivo.

4. Modelo de simulación

En esta Sección se presenta el modelo de simulación que se propone, incluyendo una descripción del sistema a estudiar y la implementación de la simulación en el software de aplicación Stella (ISEE systems, 2025).

La empresa se encuentra en proceso de incorporación de nuevos equipos con el objetivo de triplicar su capacidad de producción. El modelo desarrollado tiene por finalidad simular el rendimiento actual y compararlo con los resultados proyectados tras la implementación de la nueva infraestructura.

La simulación fue implementada en el software Stella, contemplando el flujo de procesos de la planta (Figura 1) y su disposición física mediante un layout representativo de las instalaciones (Figura 2).

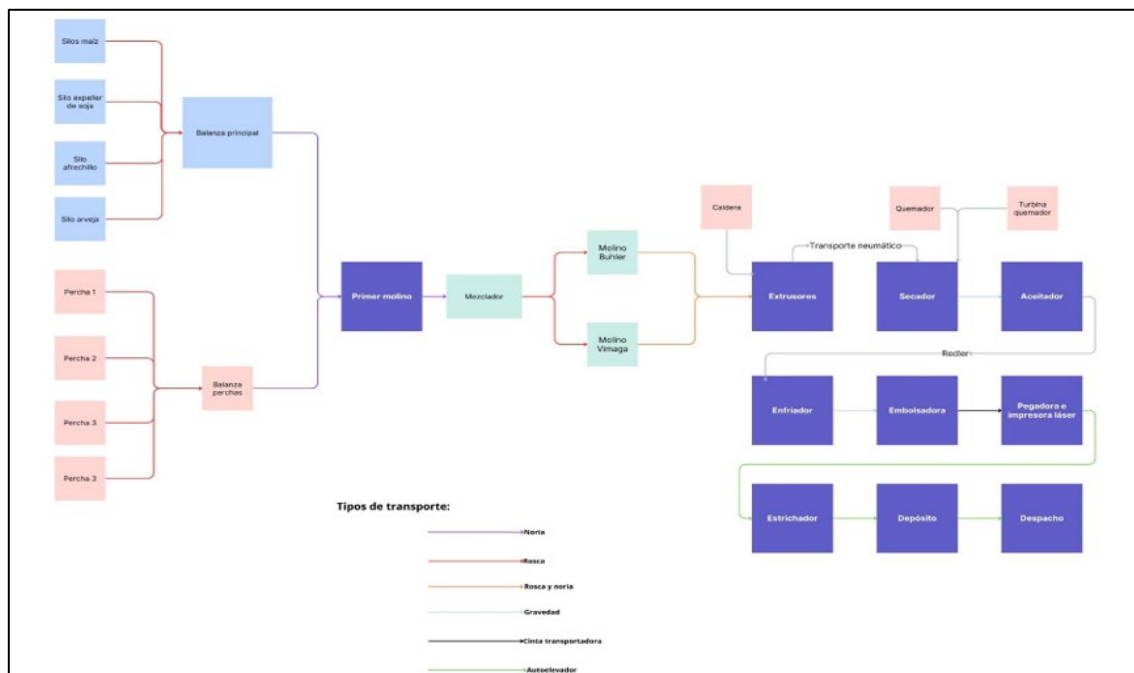


Figura 1: Flujo de procesos de la planta

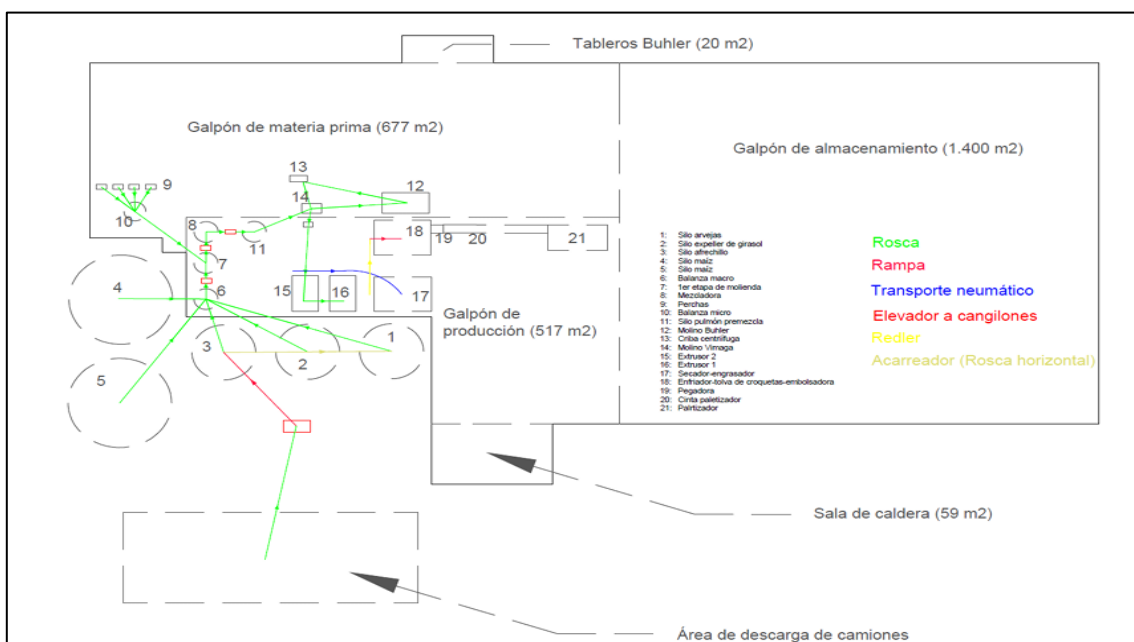


Figura 2: Layout

5. Resultados y discusión

Al ejecutar el modelo actual de la planta podemos observar que el resultado obtenido en el Stock 8 (Embolsadora) es de

32000 Kg, siendo la producción real 35000 Kg (información brindada por la empresa). Al ejecutar el modelo con la incorporación del nuevo equipamiento obtenemos un

resultado de 80000 Kg, lo que significa un incremento del 250 %, no llegando a la meta establecida por la dirección de la empresa del 300 %. (Ver figuras 3a, 3b, 3c y 3d).

La principal diferencia entre los dos estados la encontramos en la extrusora, donde actualmente su capacidad es de 4000 Kg/h (Figura 3e), lo que genera la producción de 32000 Kg.

Con su posterior reemplazo por una extrusora de capacidad de 10000 Kg/h (Figura 3f) obtendremos los 80000 Kg de alimento, que muestra el modelo.

Cabe destacar que los datos utilizados son aproximados y no contemplan variables que podrían afectar el rendimiento real, tales como interrupciones por mantenimiento correctivo, paradas para limpieza o fluctuaciones en la eficiencia operativa.

Se recomienda realizar en el futuro simulaciones con información más precisa, incorporar factores de variabilidad operativa y evaluar ajustes en el plan de inversión para alcanzar el objetivo productivo propuesto.

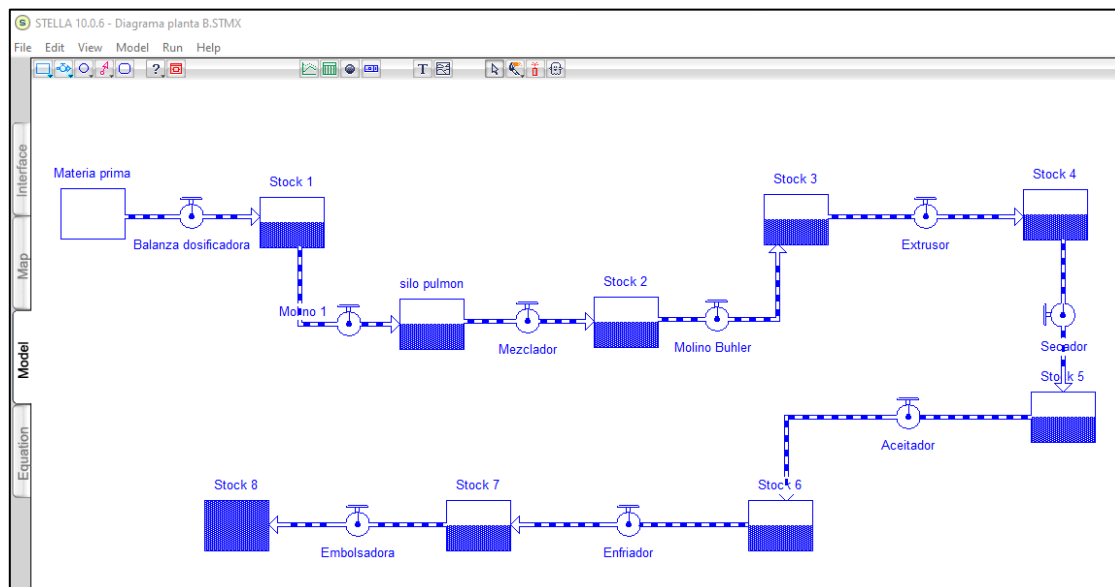


Figura 3: Ejecución del modelo de simulación

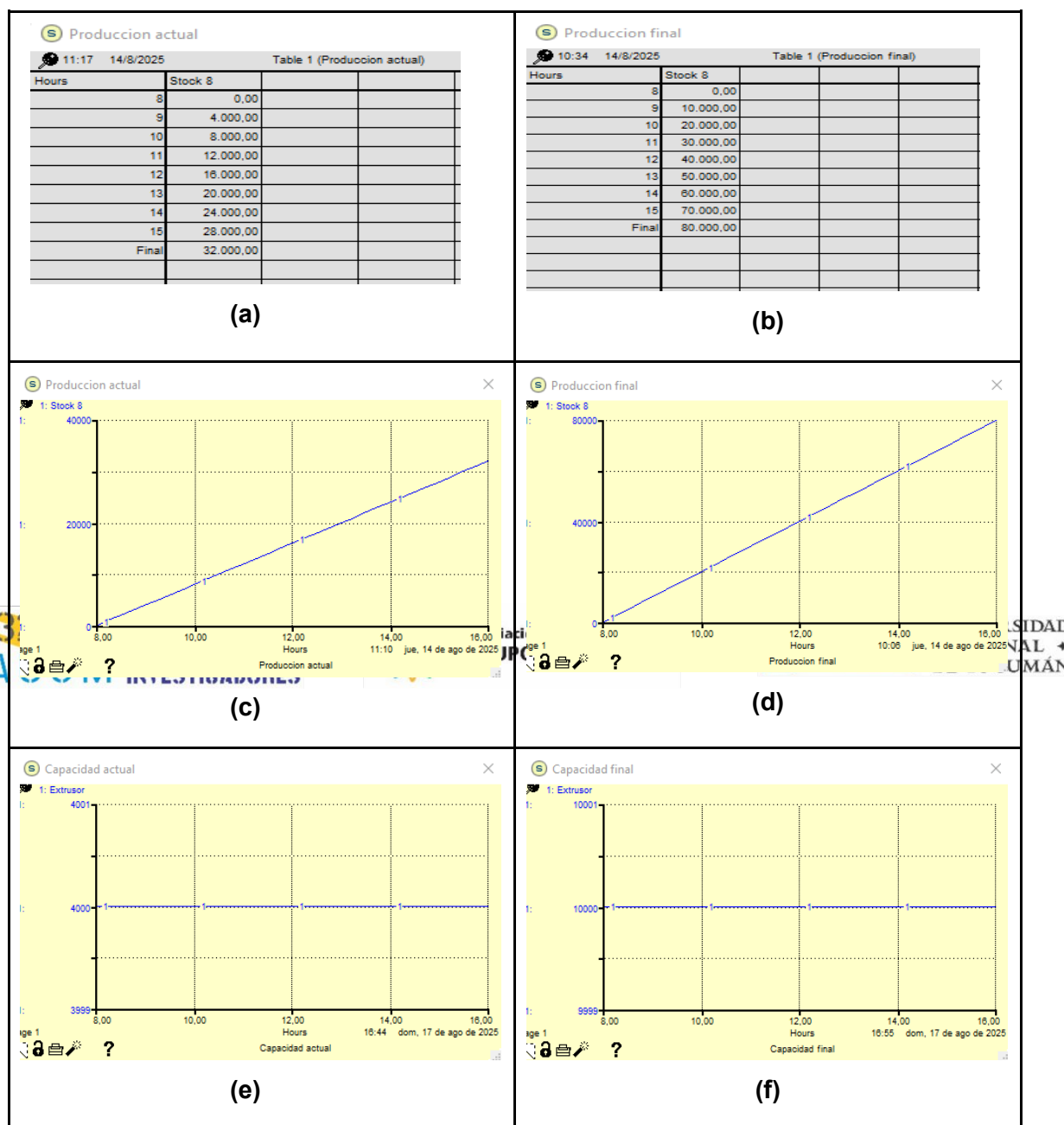


Figura 3: Tablas y gráficos comparativos de resultados

5. Conclusiones y trabajo a futuro

Este estudio presentó un modelo de simulación para analizar la producción en la planta de Agronegocios del Plata S.R.L., evaluando el impacto de la incorporación de nuevos equipos sobre la capacidad productiva. Los resultados obtenidos indican que, bajo las condiciones actuales

y con la inversión prevista, la planta no alcanzaría el objetivo de triplicar su producción, evidenciando limitaciones en la configuración de procesos y en la asignación de recursos.

Los hallazgos destacan la utilidad de la simulación como herramienta para la toma de decisiones estratégicas en entornos

industriales, permitiendo anticipar resultados, evaluar distintos escenarios y reducir riesgos asociados a inversiones y cambios operativos. Además, se refuerza la relevancia de integrar metodologías avanzadas, como gemelos digitales, para fortalecer la capacidad predictiva y prescriptiva en la gestión de plantas industriales.

Como línea de trabajo futura, se sugiere incorporar datos más detallados sobre rendimientos, tiempos de parada y mantenimiento, con el fin de mejorar la precisión del modelo. Asimismo, resulta relevante evaluar la reorganización de turnos, la optimización de secuencias de producción y la redistribución de recursos humanos para maximizar la capacidad. De manera complementaria, la integración de análisis de simulación con técnicas de optimización multiobjetivo permitiría definir estrategias de expansión más eficientes y sostenibles. Finalmente, avanzar hacia un enfoque de gemelo digital completo posibilitaría actualizar el modelo en tiempo real y soportar decisiones operativas dinámicas, constituyendo un área de investigación prometedora en el marco de la Industria 4.0.

5. Agradecimientos

El primer autor desea agradecer a la empresa Agronegocios del Plata S.R.L. por haber proporcionado los datos, Alejandro Eguiluz y Silvio Arana, dueños de la

empresa, y a Giuliano Maradeo, Ingeniero de planta.

7. Financiamiento

Este trabajo fue financiado parcialmente por el proyecto de investigación PGI UNS 27/ZJ50 de la Universidad Nacional del Sur.

8. Referencias

- Abdurrahman, E. E. M., & Ferrari, G. (2025). Digital Twin applications in the food industry: a review. *Frontiers in Sustainable Food Systems*, 9, 1538375.
- Agrawal, A., Fischer, M., & Singh, V. (2022). Digital twin: From concept to practice. *Journal of Management in Engineering*, 38(3), 06022001.
- De Paula Ferreira, W., Armellini, F., & De Santa-Eulalia, L. A. (2020). Simulation in industry 4.0: A state-of-the-art review. *Computers & Industrial Engineering*, 149, 106868.
- Grenzfurthner, W., Tizghadam, P., & Gruchmann, T. (2025). Production line balancing and reconfiguration in the food industry. *Procedia CIRP*, 100, 123-128.
- ISEE systems. . Stella Simulator. <https://www.iseesystems.com/store/products/stella-simulator.aspx> (Acceso: 16-08-2025)
- Javadi, S., Sadjadi, S., & Makui, A. (2023a).

Identification and fixing bottlenecks of a food manufacturing line using discrete-event simulation. *Scientific Reports*, 13(1), 1234.

Javaid, M., Haleem, A., & Suman, R. (2023b). Digital twin applications toward industry 4.0: A review. *Cognitive Robotics*, 3, 71-92.

Loacker, P., Pöchtrager, S., & Fikar, C. (2025). Discrete-event simulation to analyse the impacts of a reduced minimum order quantity in the food industry: proposing a shared-savings contract. *Journal of Simulation*, 19(4), 367-380.

Mrzyk, P., Kubacki, J., Luttmer, J., Pluhnau, R., & Nagarajah, A. (2023). Digital Twins for predictive maintenance: A case study for a flexible IT-architecture. *Procedia CIRP*, 119, 152-157.

Soori, M., Arezoo, B., & Dastres, R. (2024). Virtual manufacturing in industry 4.0: A review. *Data Science and Management*, 7(1), 47-63.

Zhong, D., Xia, Z., Zhu, Y., & Duan, J. (2023). Overview of predictive maintenance based on digital twin technology. *Heliyon*, 9(4).

Trabajo completo

32.- Química de los materiales

Catalizadores ácidos soportados para reacciones pentacomponente: Evaluación estructural, actividad catalítica y aplicaciones potenciales en pinturas antiincrustantes.

Autor: Vazquez Camila. E-mail: camilavazquez965@gmail.com

Orientador: Palermo, Valeria. E-mail: vpalermo@quimica.unlp.edu.ar

Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, CINDECA.

Resumen

Se sintetizaron catalizadores sólidos ácidos basados en ácidos fosfomolibdico y silicomolibdico incluidos en distintas concentraciones (5, 10, 25 y 40% p/p) mediante inclusión. Los materiales fueron caracterizados por difracción de rayos X, titulación potenciométrica y microscopía electrónica de barrido para determinar estructura cristalina, acidez superficial y morfología, respectivamente. La actividad catalítica se evaluó en una reacción multicomponente utilizando benzaldehído, *p*-toluidina y acetoacetato de etilo en metanol a reflujo, identificándose como mejor catalizador el que contenía 5%p/p de ácido fosfomolibdico. Posteriormente, este catalizador fue aplicado en la reacción multicomponente con variación del aldehído, amina y/o β -cetoéster. Los productos se caracterizaron mediante NMR, observándose una influencia significativa por las características electrónicas y estéricas de los sustituyentes en la conversión. Los compuestos obtenidos se evaluarán como posibles principios activos en formulaciones *antifouling* para pinturas marinas.

Palabras clave:

Heteropoliácidos, catalizadores heterogéneos, tetrahidropiridinas sustituidas.

Introducción

Los heteropoliácidos (HPA) en forma soportada se han consolidado como catalizadores sólidos de gran interés en química orgánica, debido a su elevada acidez de Brønsted, suficiente estabilidad y posibilidad de recuperación y reutilización (1). Por ejemplo, $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ inmovilizado en nanopartículas de Fe_3O_4 recubiertas con ZrO_2 ha demostrado ser altamente activo en reacciones multicomponentes tipo Biginelli y Hantzsch, con excelente estabilidad y reutilización sin pérdida significativa de actividad (2). Asimismo, se ha informado el éxito de $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ (PMo) y sus derivados soportados en la síntesis de heterociclos, alcanzando altos rendimientos y resistencia al lavado (3,4).

La capacidad de modificar la actividad catalítica mediante la carga de HPA soportada ha sido objeto de estudio en múltiples trabajos. Un análisis reciente muestra que la impregnación de $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ sobre sílice o sílice mesoporosa permite ajustar la acidez superficial según el peso de carga, y mantener la estructura de Keggin a bajos porcentajes de carga (5). De forma análoga, $\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$ (SiMo) encapsulado en esferas huecas de sílice ha demostrado una alta superficie específica y destacada

actividad catalítica en reacciones de oxidación, como la desulfuración de compuestos aromáticos, lo cual se atribuye a su estructura tipo *core-shell* bien definida y a su elevada área superficial (6).

Las técnicas de caracterización como difracción de rayos X (XRD), titulación potenciométrica y microscopía electrónica de barrido (SEM) constituyen herramientas esenciales para correlacionar estructura, acidez superficial y morfología con el desempeño catalítico de los HPA incluidos (7, 8).

Sin embargo, existe una brecha en la evaluación sistemática de catalizadores basados en PMo y SiMo en reacciones multicomponentes en condiciones homogéneas. En este trabajo se sintetizaron catalizadores conteniendo PMo y SiMo incluido en sílice (PMo-Si y SiMo-S, respectivamente) por inclusión, siguiendo el método sol gel con cargas variables (5–40%). Los materiales fueron caracterizados por XRD, titulación potenciométrica y SEM para evaluar estructura cristalina, acidez superficial y morfología, respectivamente. La actividad catalítica se analizó inicialmente en una reacción modelo empleando benzaldehído, *p*-toluidina y acetoacetato de etilo en metanol a reflujo, identificándose

como óptimo el catalizador con 5%PMo-S. Posteriormente, se aplicó este sistema a quince reacciones multicomponentes con variación de aldehídos, anilinas y β - cetoésteres. La cuantificación de los productos permitió evaluar el efecto electrónico y estérico de los sustituyentes en la conversión.

Se explorarán posibles aplicaciones prácticas de los productos obtenidos en estas reacciones multicomponente, ya que compuestos heterocíclicos aromáticos con grupos funcionales activos (como derivados de tiol porfirinas y anilinas halogenadas) han sido investigados como agentes *antifouling* en recubrimientos marinos para evitar la

incrustación biológica (9) y como parte de pinturas *antifouling* no tóxicas, promovidas por su alta estabilidad y bajo impacto ambiental (10). De este modo, los compuestos obtenidos se evaluarán como potenciales principios activos en formulaciones de pinturas marinas destinadas al control de incrustaciones.

Este enfoque sistemático aporta un análisis detallado del impacto de la carga de HPA y de la composición del sustrato en la reactividad y selectividad de reacciones multicomponentes, ofreciendo así una base sólida para estudios de optimización y aplicación catalítica futura.

Objetivo

Desarrollar, caracterizar y evaluar catalizadores sólidos basados en heteropoliácidos ($\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ y

$\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$) incluidos en sílice mediante inclusión, con el fin de estudiar su actividad catalítica heterogenea en reacciones multicomponente de tetrahidropiridinas sustituidas.

Materiales y métodos

1. Síntesis de soporte- sílice SiO_2

A temperatura ambiente, se disolvieron 16 mmol (3,63 ml) de ortosilicato de tetraetilo (TEOS) en 80 mmol (4,65 ml) de etanol absoluto. Con agitación constante, se agregaron 0,059 mmol (1,07 ml) de ácido acético y, por último, se adicionaron 59 mmol (1,07 ml) de agua destilada. La mezcla se agitó magnéticamente durante 2 h y luego se dejó gelificar y envejecer a temperatura ambiente y presión atmosférica hasta peso constante del sólido seco obteniéndose un sólido vítreo transparente, el cual fue molido en mortero obteniéndose un sólido blanco.

2. Síntesis de heteropoliácidos incluidos en sílice mediante inclusión

A temperatura ambiente se disolvieron 16 mmol (3,63 ml) de TEOS en 80 mmol (3,20 ml) de etanol absoluto en una capsula de teflón. Con agitación constante se agregaron 0,37 mmol (0,75 g) de HPA disueltos en una capsula de teflón en 24,8 mmol (1,44 ml) de etanol absoluto y, por último, se adicionaron 59 mmol (1,07 ml) de agua destilada. La mezcla se agitó magnéticamente durante 2 h y luego se dejó gelificar y envejecer a temperatura ambiente y presión atmosférica hasta peso constante del sólido seco. Se obtuvo un sólido vítreo de color amarillo

verdoso, el cual fue molido utilizando un mortero y luego se lavó varias veces con pequeñas porciones de etanol para eliminar la fase activa que no se hubiera incluido satisfactoriamente en el soporte. Finalmente, se dejó secar el catalizador a temperatura ambiente y presión atmosférica hasta peso constante del sólido seco.

Los HPA utilizados fueron adquiridos comercialmente y la cantidad de HPA incorporado en cada síntesis fue ajustada para obtener catalizadores con diferentes contenidos máxicos de fase activa (5, 10, 25 y 40% p/p). De esta manera, se sintetizaron series de catalizadores con distintas cargas de $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ o $\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$ incluidos sobre sílice. Los sólidos obtenidos se llamaron: X% PMo-S y X% SiMo-S, donde X indica el contenido de fase activa.

3. Caracterización de los catalizadores sintetizados

3.1 Microscopía electrónica de barrido (SEM-EDAX)

La morfología superficial y el análisis elemental de los catalizadores se realizaron mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) acoplada a espectroscopía de dispersión de energía de rayos X

(EDAX), utilizando un equipo Philips 505 operando con un voltaje de aceleración de 25 eV. Los sólidos fueron previamente recubiertos con una fina capa de carbono mediante metalización, a fin de evitar efectos de carga durante el análisis.

3.2 Difracción de rayos X (XRD)

Los difractogramas de rayos X se realizaron en un equipo PANalytical modelo X'Pert Pro 3373/00 con lámpara de Cu ($k\alpha=1,5403 \text{ \AA}$), midiendo entre 5 y 60° , paso de $0,1^\circ$ y velocidad $2^\circ/\text{min}$. Esta técnica se empleó para identificar la morfología y cristalinidad del soporte y de la fase activa, así como la posible presencia de estructuras del tipo Keggin.

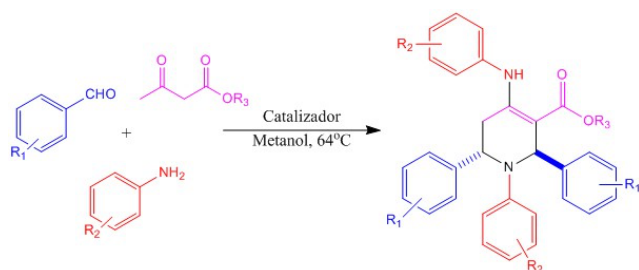
3.3 Titulación potenciométrica

La acidez superficial de los catalizadores fue determinada mediante titulación potenciométrica. Se preparó una suspensión de 25 mg del sólido en 45 ml de acetonitrilo y se tituló con una solución 0,025 N de *n*-butilamina en acetonitrilo, utilizando un titulador automático

Metrohm 794 Basic Titrino con electrodo de doble junta. El potencial fue registrado en función del volumen agregado, permitiendo así estimar la densidad y fuerza relativa de los sitios ácidos presentes en el sólido.

4. Procedimiento experimental para la síntesis de compuestos heterocíclicos mediante una reacción pentacomponente

El mecanismo de la reacción inicial se observa en el Esquema 1. Las mismas se llevaron a cabo utilizando como sustratos 2 mmol de benzaldehído, 2 mmol de *p*-toluidina, y 1 mmol de acetoacetato de etilo. Posteriormente se reemplazaron los reactivos; los aldehídos empleados incluyeron benzaldehído, *p*-tolilaldehído y 4-metiltio benzaldehído; las aminas utilizadas fueron anilina, 4-cloro anilina, 4-metil-anilina y 4-bromo anilina; mientras que los β -cetoésteres empleados fueron acetoacetato de etilo, acetoacetato de metilo y acetoacetato de tert-butilo.



Esquema 1. Síntesis pentacomponentes de tetrahidropiridinas sustituidas

Cada reacción se desarrolló en un tubo de reacción equipado con un sistema de reflujo. Como medio de reacción se utilizaron 5 ml de metanol y 0,1 g del catalizador sólido seleccionado (5% PMo-S). La mezcla de reacción se calentó a 64 °C con agitación magnética constante, y se monitoreó el progreso mediante cromatografía en capa fina (CCF), observando la desaparición completa de los reactivos y la aparición de una única mancha correspondiente al producto deseado.

Finalizada la reacción, la mezcla se llevó a un evaporador rotatorio para eliminar el metanol. El sólido obtenido se suspendió en diclorometano con el fin de extraer el producto orgánico y separar el catalizador heterogéneo por filtración. La fase orgánica se concentró nuevamente por rotavapor y el producto se secó a temperatura ambiente y

presión atmosférica hasta alcanzar peso constante. No se emplearon etapas adicionales de purificación, dado que el método permitió obtener los compuestos en forma sólida y con una única fase detectable por CCF.

5. Caracterización de los productos obtenidos

Los compuestos obtenidos en las reacciones pentacomponente fueron caracterizados mediante espectroscopia magnética nuclear (NMR) utilizando un Espectrómetro de resonancia magnética nuclear de hidrógeno (^1H NMR) y Carbono 13 (^{13}C NMR): Varian Mercury Plus 200, operándose a una frecuencia de 200 MHz (^1H NMR) y 50 MHz (^{13}C NMR) y Bruker Advance DPX 400, a una frecuencia de 400 MHz (^1H NMR) y 100 MHz (^{13}C NMR). Empleando cloroformo o dimetil sulfóxido deuterados (CDCl_3 y $\text{d}_6\text{-DMSO}$ Aldrich) para disolver las muestras y como patrón de referencia tetrametilsilano (TMS). Además fueron caracterizados mediante la determinación de sus puntos de fusión en un equipo Biomerican y por comparación de sus factores de retención (R_f) en CCF con los de productos reportados previamente.

Resultados y discusión

1- Selección del catalizador óptimo

Con el objetivo de identificar el sistema catalítico más eficiente para la reacción modelo entre benzaldehído, *p*-tolilánilina y acetoacetato de etilo en metanol bajo reflujo, se evaluó una serie de catalizadores sólidos basados en $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ (PMo) y $\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$ (SiMo) incluidos en sílice, obtenidos por inclusión. En cada caso se ensayaron diferentes proporciones de fase activa de X% PMo-S y X% SiMo-S, donde X= 5, 10, 25 y 40.

En la Tabla 1 se observa una clara correlación entre la carga de heteropoliácido, la fuerza ácida, el tiempo de reacción y el rendimiento de reacción. En particular, los catalizadores con carga creciente de PMo-S exhibieron un aumento progresivo en la fuerza ácida, alcanzando un valor máximo de 745,5 mV para el PMo puro. Sin embargo, este aumento en la acidez no se tradujo en una mejora del rendimiento; por el contrario, se observó una disminución notable en los porcentajes de recristalización, que pasaron de 88,9% en el caso del catalizador con 5% PMo-S, a solo 48,0% con 100% PMo. En paralelo, el tiempo necesario para completar la reacción disminuyó significativamente, de 9 horas a 2 horas. Estos resultados sugieren

que una acidez excesiva, si bien puede acelerar la reacción, también favorece rutas paralelas o degradativas, disminuyendo la selectividad del proceso.

Un comportamiento similar se observó con los catalizadores basados en SiMo. A medida que se incrementó la cantidad de HPA, también lo hizo la acidez (hasta 746,2 mV en el 100% SiMo), pero los rendimientos tendieron a disminuir, como en los casos del 40% SiMo-S (42,2%) y el 100% SiMo (65,6%). Resulta destacable que los catalizadores con 5% de carga activa, tanto en la serie PMo como SiMo, presentaron una tendencia más favorable entre acidez moderada (109,3 mV y 78,0 mV respectivamente), tiempos de reacción razonables (9 y 4 horas), y rendimientos elevados (88,9% y 80,6%).

En conjunto, los resultados permiten concluir que existe un rango óptimo de acidez superficial, aproximadamente entre 80 y 110 mV. Dentro de este intervalo, el catalizador con 5% PMo-S se destaca como mejor opción, justificando su elección para las reacciones pentacomponentes posteriores.

A partir de esta evidencia, se seleccionó el catalizador 5% PMo-S como el sistema más

adecuado para estudiar la reactividad de una serie de combinaciones de aldehídos, aminas y β -cetoésteres en reacciones pentacomponentes bajo las mismas condiciones de temperatura, disolvente y agitación.

Tabla 1. Rendimiento de reacción obtenido en la reacción modelo utilizando los distintos catalizadores sintetizados bajo el método de inclusión.

Catalizador	Tiempo de reacción (h)	Rendimiento de reacción (%)	Fuerza ácida (mV)
-	10	40,7	-
5% PMo-S	9	88,9	109,3
10% PMo-S	8	88,2	80,9
25% PMo-S	10	70,3	9,8
40% PMo-S	3	55,3	349,0
100% PMo	2	48,0	745,5
5% SiMo-S	4	80,6	78,0
10% SiMo-S	4	83,1	57,2
25% SiMo-S	5	82,9	425,6
40% SiMo-S	5	42,2	514,0
100% SiMo	10	65,6	746,2

2- Caracterización del catalizador seleccionado

En la Figura 1 se muestra los difractogramas de los catalizadores preparados con diferentes proporciones de PMo, junto con el

patrón del HPA puro y el soporte de sílice. El sólido con 5% de PMo-S exhibe un patrón típicamente amorfo, sin señales de cristalinidad asociadas al heteropoliácido, lo cual indica una adecuada dispersión de la fase activa. A medida que aumenta el contenido de PMo, comienzan a observarse picos tenues que sugieren la aparición de dominios parcialmente cristalinos, especialmente en el sólido con 40% de carga. Esta observación refuerza la elección del catalizador 5% PMo-S como el más adecuado para las reacciones posteriores.

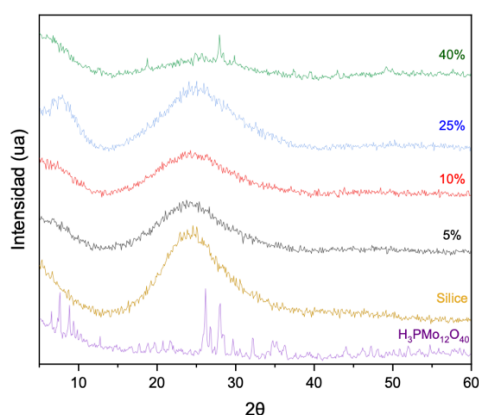


Figura 1. Difractogramas de los catalizadores sólidos con diferentes porcentajes de $H_3PMo_{12}O_{40}$ (PMo) incluidos sobre sílice (5, 10, 25 y 40%), junto con el patrón del HPA puro y del soporte de SiO_2 .

La Figura 2 muestra los perfiles de titulación potenciométrica obtenidos para los catalizadores con diferentes proporciones de PMo, así como para el HPA puro y el soporte

de sílice. Se observa que la acidez de la sílice inicialmente es baja pero que aumenta gradualmente con el contenido de HPA, puesto que este es un ácido fuerte y es quien presenta la curva de acidez característica y una elevada fuerza ácida.

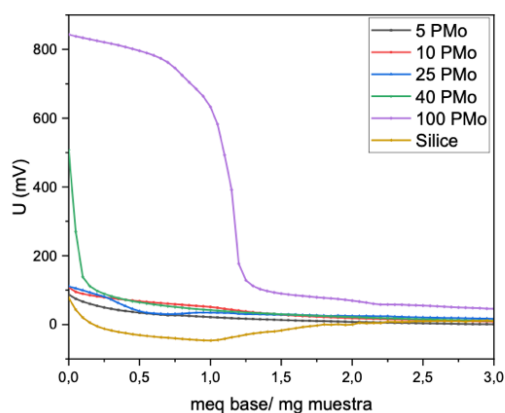


Figura 2. Curvas de titulación potenciométrica con *n*-butilamina en acetonitrilo de los catalizadores con distintas cargas de PMo sobre sílice, comparados con el heteropoliácido puro (100% PMo) y la sílice sin modificar.

El análisis morfológico de los catalizadores se realizó mediante SEM y espectroscopía de dispersión de energía (EDAX). En este trabajo se muestran las micrográficas del catalizador 5% PMo-S. La imagen SEM (Figura 3) muestra una superficie amorfa, de apariencia homogénea y sin formación de dominios cristalinos definidos, lo que concuerda con la naturaleza amorfa observada en el patrón de XRD. Por su parte,

el espectro EDAX (Figura 4) confirma la presencia de Mo y Si, elementos correspondientes a la fase activa y al soporte, lo que demuestra una correcta incorporación del HPA a la matriz de sílice. La baja intensidad del pico de Mo es consistente con una carga del 5% y con una dispersión adecuada en el sólido.

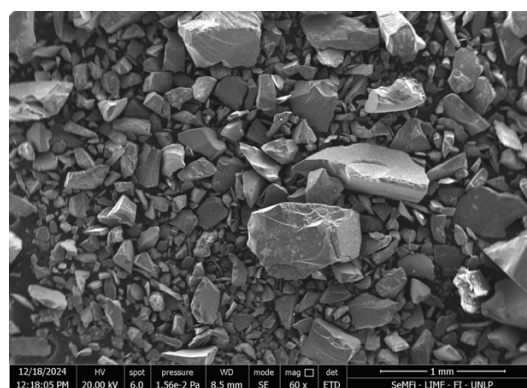


Figura 3. Micrografía obtenida por microscopía electrónica de barrido (SEM) del catalizador 5% PMo-S.

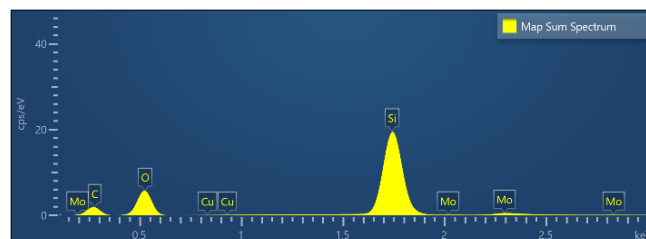
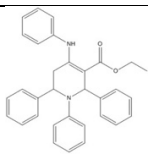
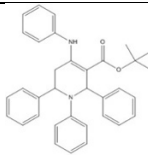
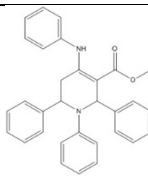
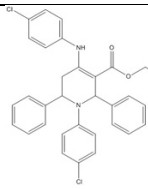
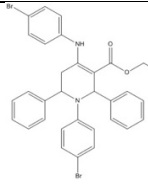


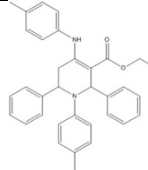
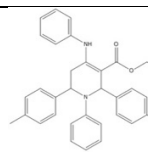
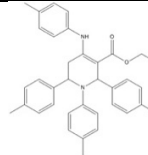
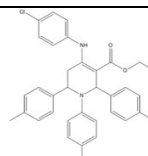
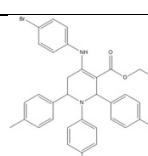
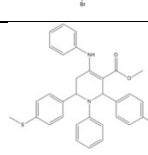
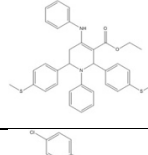
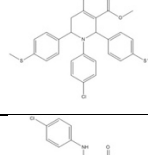
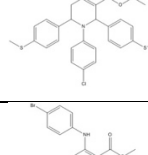
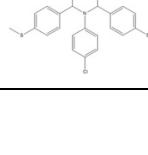
Figura 4. Espectro de dispersión de energía de rayos X (EDAX) correspondiente al mismo sólido.

3- Evaluación catalítica del sistema seleccionado en reacciones pentacomponente

El catalizador seleccionado, 5% PMo-S, fue evaluado en quince reacciones pentacomponente empleando combinaciones variadas de aldehídos aromáticos, aminas sustituidas y β -cetoésteres. Se determinaron los puntos de fusión y los rendimientos gravimétricos. Los resultados se resumen en la Tabla 2.

Tabla 2. Reactivos utilizados, punto de fusión y rendimiento (%) de cada producto obtenido en reacciones catalizadas por 5% PMo-S.

Entrada	Compuesto	Punto de fusión (°C)	Rendimiento (%)
1		200-202	26,3
2		370-371	35,6
3		203-204	26,4
4		180-181	44,3
5		205-206	40,3

6		168-171	37,3
7		207-210	16,0
8		162-164	38,1
9		155-156	87,3
10		188-190	84,0
11		176-177	10,5
12		162-164	81,8
13		168-170	72,9
14		152-153	34,3
15		192-193	51,0

En general, los rendimientos obtenidos en la síntesis de los quince compuestos mediante reacciones pentacomponente resultaron moderados, atribuyéndose los valores bajos a pérdidas de masa operativas en la etapa de aislamiento.

Los resultados permiten establecer que la estructura de los sustratos —en especial, la naturaleza de los sustituyentes en el aldehído, la anilina y el β -cetoéster— influye sobre la eficiencia del proceso.

i. Efecto del sustituyente en el aldehído

Para evaluar el impacto del grupo sustituyente en el aldehído sobre el rendimiento de la reacción, se compararon las entradas 1, 7 y 12, en las que se mantuvieron constantes tanto la anilina como el β -cetoéster (acetoacetato de etilo), variando únicamente el aldehído entre benzaldehído (entrada 1, 26,3%), *p*-tolilaldehído (entrada 7, 16,0%) y 4-metiltiobenzaldehído (entrada 12, 81,8%).

Los resultados muestran un incremento notable en el rendimiento al emplear el aldehído con grupo metiltio ($-\text{SCH}_3$), lo cual se atribuye a un efecto electrón-donador por resonancia que favorece la activación del

carbono carbonílico, acelerando la formación del intermedio imínico inicial. En contraste, el *p*-tolilaldehído, con un grupo metilo ($-\text{CH}_3$) de efecto inductivo más débil, reduce el rendimiento, posiblemente por menor polarización del grupo carbonilo. Estos resultados confirman que la naturaleza electrónica del grupo sustituyente en el anillo aromático del aldehído tiene un rol determinante en la eficiencia de la primera etapa del mecanismo de reacción.

ii. Efecto del sustituyente en la anilina

El uso de anilinas sustituidas en posición para (4-cloro, 4-bromo, 4-metilo) mostró un impacto notable en el rendimiento de las reacciones pentacomponente. En general, los derivados halogenados condujeron a conversiones elevadas, como en el caso de la 4-bromoanilina (entrada 10, 84,0%) y la 4-cloroanilina (entrada 13, 72,9%). Este comportamiento puede atribuirse a la capacidad de los halógenos para causar un efecto inductivo moderadamente desactivante sobre el anillo aromático, lo que reduce levemente la nucleofilia del grupo amino sin comprometer su capacidad de formar el intermedio imínico. Esta moderación electrónica podría contribuir a una mayor selectividad y estabilidad del sistema. En contraste, la anilina sustituida con un grupo metilo (4-metilanilina, entrada

6) produjo un rendimiento de 37,3%, considerablemente inferior, a pesar de tratarse de un grupo electrón-donador. Esto muestra que la mayor electronegatividad del sustituyente en la anilina, favorece la formación de los intermediarios y al producto final.

iii. Efecto del β -cetoéster

Las entradas 1, 2 y 3 permiten analizar el efecto del β -cetoéster al mantener constantes el aldehído (benzaldehído) y la anilina. Se compararon acetoacetato de etilo (entrada 1, 26,3%), acetoacetato de tert-butilo (entrada 2, 35,6%) y acetoacetato de metilo (entrada 3, 26,4%).

Si bien las diferencias no son drásticas, se observa una leve mejora del rendimiento al emplear el derivado más voluminoso, posiblemente debido a efectos estéricos que estabilizan los intermediarios, favoreciendo la interacción catalítica. Sin embargo, las diferencias son menores comparadas con las producidas por las variaciones

electrónicas en los otros dos sustratos, lo que indica que el tipo de β -cetoéster tiene un impacto moderado en la eficiencia global de la reacción.

iv. Relación estructura- actividad

Del análisis integral de las quince reacciones, puede concluirse que la combinación estructural óptima para lograr mejores rendimientos consiste en un aldehído con sustituyente fuertemente donador por resonancia (como $-\text{SCH}_3$), una anilina con grupo halógeno en posición para y un β -cetoéster lineal o ramificado. Las entradas 9, 10, 12 y 13 —que reúnen estas características— exhibieron los rendimientos más altos, entre 72,9% y 87,3%.

Esto respalda la hipótesis de que la eficiencia del sistema catalítico con 5% de PMo no sólo depende de la naturaleza del ácido incluido, sino también de la sinergia electrónica entre los reactivos, especialmente en lo que respecta a la formación y reactividad de los intermediarios.

Conclusiones

En este trabajo se sintetizaron catalizadores sólidos basados en heteropoliácidos ($\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40}$ y $\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}$) incluidos sobre sílice mediante el método de inclusión, con distintas cargas de fase activa (5–40%). La caracterización estructural, morfológica y ácido-base de los materiales confirmó que la inclusión del HPA afecta significativamente la acidez superficial y la cristalinidad del sistema, siendo el catalizador 5% PMo el que presentó un equilibrio óptimo entre accesibilidad de sitios activos, acidez moderada y estabilidad estructural. Este material fue seleccionado para su aplicación en reacciones multicomponentes, con variación sistemática de aldehídos, anilinas y β -cetoésteres.

Los rendimientos en crudo obtenidos tras la síntesis de quince compuestos pentacomponentes evidenciaron una fuerte dependencia respecto de la naturaleza electrónica y estérica de los reactivos. Se observaron mayores conversiones al

emplear aldehídos con grupos donadores por resonancia, como el 4-metiltio-benzaldehído, y anilinas halogenadas, en particular la 4-bromoanilina, lo que sugiere un efecto favorable sobre la formación de los intermediarios clave. En cambio, el tipo de β -cetoéster mostró una influencia secundaria sobre el rendimiento, sin variaciones drásticas entre derivados etilo, metilo o tert-butilo.

En conjunto, los resultados demuestran que la eficiencia del proceso está fuertemente determinada por la combinación estructural de los reactivos y por la acidez controlada del catalizador, lo que permite optimizar reacciones multicomponentes sin necesidad de condiciones severas. Los productos obtenidos representan una plataforma versátil para el desarrollo de nuevas moléculas funcionalizadas, que serán evaluadas próximamente en aplicaciones potenciales como componentes de recubrimientos *antifouling*.

Referencias

1. Kozhevnikov, I. V., Kloetstra, K. R., Sinnema, A., Zandbergen, H. W., & van Bekkum, H. (1996). Study of catalysts comprising heteropoly acid $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ supported on MCM-41 molecular sieve and amorphous silica. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, 114(1–3), 287–298.
[https://doi.org/10.1016/S1381-1169\(96\)00328-7](https://doi.org/10.1016/S1381-1169(96)00328-7)
2. Zolfagharinia, S., Kolvari, E., & Koukabi, N. (2017). A new type of magnetically-recoverable heteropolyacid nanocatalyst supported on zirconia-encapsulated Fe_3O_4 nanoparticles as a stable and strong solid acid for multicomponent reactions. *Catalysis Letters*, 147(6), 1551–1566.
<https://doi.org/10.1007/s10562-017-2015-7>
3. Liu, Y.-F., Hu, C.-W., & Yang, G.-P. (2023). Recent advances in polyoxometalates acid-catalyzed organic reactions. *Chinese Chemical Letters*, 34(5), 108097.
<https://doi.org/10.1016/j.cclet.2022.108097>
4. Liu, X., & Williams, C. T. (2022). Recent advances in the applications of mesoporous silica in heterogeneous catalysis. *Catalysis Science & Technology*, 12(15), 4680–4702.
<https://doi.org/10.1039/D2CY00001F>
5. Sánchez-Velandia, J. E., Baldoví, H. G., Sidorenko, A. Y., Becerra, J. A., & Martínez O, F. (2022). Synthesis of heterocycles compounds from condensation of limonene with aldehydes using heteropolyacids supported on metal oxides. *Molecular Catalysis*, 528, 112511.
<https://doi.org/10.1016/j.mcat.2022.112511>
6. Zhang, X., Luo, G., Zhu, M., Kang, L., Yu, F., & Dai, B. (2015). Application of a $\text{H}_4\text{SiMo}_{12}\text{O}_{40}@\text{SiO}_2$ catalyst with a hollow core–shell structure to oxidative desulfurization. *RSC Advances*, 5(93), 76182–76189.
<https://doi.org/10.1039/C5RA14307A>
7. Zhang, Q., Shi, L., & Meng, X. (2016). Removal of sulfur compounds from LPG by heteropoly acid-modified Al–MCM-41 mesoporous molecular sieves. *RSC Advances*, 6(113), 112328–112337.
<https://doi.org/10.1039/C6RA22320H>

-
8. Zhu, Q., Yue, Y., Wang, X., Wang, B., Zhu, J., & Ma, J. (2024). SiO₂-supported DMDAAC-modified heteropoly acid as highly active and stable catalysts for methacrolein oxidation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 63(31), 13503–13513.
<https://doi.org/10.1021/acs.iecr.4c01463>
 9. M. Andersson Trojer, A. Movahedi, H. Blanck and M. Nydén, Imidazole and triazole coordination chemistry for antifouling coatings, *J. Chem.*, 2013, 2013,1–23.
<https://doi.org/10.1155/2013/946739>
 10. Liu, M. Y., Li, S. N., Wang, H., Jiang, R. J., & Zhou, X. (2021). Research progress of environmentally friendly marine antifouling coatings. *Polymer Chemistry*, 12(24), 3702–3720.
<https://doi.org/10.1039/D1PY00512J>

30.- Productos naturales bioactivos y sus aplicaciones

Efectos neuroprotectores de los bioactivos del café fermentado frente a neurotoxinas asociadas al Parkinson en un modelo celular neuroendocrino

Autor: Amorim Neto, Dionisio Pedro; d166621@dac.unicamp.br

Co-autor(es): Virgilio-da-Silva, João V.; Menezes, Jhonathan V.; Láscaris, Matheus P. S.; Correia, Jaqueline S.; Barbosa, Carla A.; Mariutti, Lilian R. B.; Moraes-Vieira, Pedro M.; Sforca, Mauricio Luis; Rocco, Silvana Aparecida; da Silva, Gustavo Henrique Rodrigues

Orientador/a: Sant'ana, Anderson S.; and@unicamp.br

Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) / Faculdade de Engenharia de Alimentos (FEA), Departamento de Ciência de Alimentos, Campinas-SP, Brasil

Resumen

La enfermedad de Parkinson (EP) es un trastorno neurodegenerativo progresivo e incurable, aunque el consumo habitual de café se asocia con menor riesgo. Sin embargo, todavía no se conocen con certeza las moléculas responsables de este efecto protector ni el papel de los distintos métodos de fermentación del café en el contexto de la etiología de la enfermedad. En este estudio se evaluaron extractos de café Arábica tostado ("Catuaí Amarelo", "Catuaí Vermelho") obtenidos por fermentación natural y por fermentación húmeda, así como una mezcla fermentada en húmedo, obtenidos por extracción acuosa en caliente o etanólica y luego liofilizados. Los extractos etanólicos de la mezcla fermentada en húmedo y del "Catuaí Vermelho" mostraron mayor capacidad antioxidante y reductora, mientras que los de "Catuaí Amarelo" exhibieron una fuerte actividad antimicrobiana contra patógenos asociados a la EP, como *P. mirabilis* y *S. aureus*. En ensayos *in vitro*, los extractos etanólicos de la mezcla húmeda y del "Catuaí Vermelho" protegieron células STC-1 frente a la rotenona, y los extractos acuosos de "Catuaí Amarelo" fueron efectivos contra rotenona y 6-OHDA. El análisis VIP destacó cafeína, fumarato y ácido quínico como compuestos clave con propiedades citoprotectoras, mientras que metabolitos como 2,3-butanodiol, acetato, lactato y 1-metilnicotinamida, sin evidencia previa, aparecieron en extractos activos, sugiriendo posibles funciones no exploradas. En conjunto, los hallazgos validan el potencial neuroprotector del café fermentado y señalan moléculas prometedoras y nuevas rutas para prevenir la EP y comprender la modulación del eje intestino-cerebro en el contexto de las células neuroendocrinas, el principal puente de este eje.

Palabras clave: café, enfermedad de Parkinson, metabolómica

Introducción

La enfermedad de Parkinson (EP) es un trastorno neurodegenerativo crónico, multifactorial y progresivamente debilitante (Przedborski, 2017). Se estima que actualmente hay unos 10 millones de personas diagnosticadas en el mundo (Parkinson's Foundation, 2022).

Aproximadamente el 10% de los casos tiene origen genético, mientras que el 90% corresponde a formas esporádicas, de causa aún no definida, pero vinculadas a factores ambientales como la exposición a toxinas, pesticidas y hábitos alimentarios (Kouli et al., 2018; Ramsden et al., 2001; Thomas & Beal, 2007).

En este escenario, el café, una de las bebidas más consumidas globalmente, adquiere relevancia, ya que su ingesta regular se asocia a diversos beneficios, entre ellos una menor predisposición al desarrollo la enfermedad de Parkinson y efectos neuroprotectores en modelos experimentales de inducción farmacológica de esta enfermedad (Socała et al., 2020; Wasim et al., 2020).

Brasil, que es el principal productor y exportador mundial (International Coffee Organization, 2022), tiene en este cultivo una actividad económica clave.

El procesamiento del café se realiza de diferentes formas, siendo la fermentación natural y la fermentación húmeda las más comunes. En la primera, las cerezas

enteras se secan al sol mediante un proceso mayormente aeróbico, prolongado y de bajo costo, aunque con menos control y mayor variabilidad en la calidad (Ferreira et al., 2023).

En la segunda, los granos despulpados se sumergen en agua, lo que genera un ambiente más anaeróbico y controlado, con tiempos más cortos y una microbiota particular que aporta perfiles de sabor diferenciados (Ferreira et al., 2023). Sin embargo, los efectos de cafés obtenidos a partir de distintos métodos de fermentación sobre la fisiopatología de la EP aún no se conocen.

Estudios previos muestran que síntomas gastrointestinales como el estreñimiento y la disfunción defecatoria pueden preceder las manifestaciones motoras en la EP (Cersosimo et al., 2013).

Desde esta perspectiva intestinal, cobran especial interés las células neuroendocrinas, ya que constituyen un canal bidireccional que conecta directamente el eje intestino-cerebro. Estas células forman parte del epitelio intestinal y presentan propiedades semejantes a las de las neuronas, pues expresan neuromoduladores pre y pos-sinápticos y establecen sinapsis con neuronas entéricas (Bohórquez et al., 2014; Chandra et al., 2017). Al estar parcialmente orientadas hacia la luz intestinal, están expuestas a toxinas y metabolitos de la microbiota, transmitiendo estas señales al

sistema nervioso entérico y al central (Amorim Neto et al., 2022; Rodrigues et al., 2022), lo que constituye una posible vía de patogénesis en la EP esporádica. No obstante, los efectos específicos del café sobre estas células todavía se desconocen.

Objetivos

Este estudio buscó investigar, *in vitro*, los efectos de extractos de café tostado fermentado de manera natural y por fermentación húmeda sobre una línea celular neuroendocrina, utilizada como modelo de la enfermedad de Parkinson esporádica, con especial atención en la conexión intestino-cerebro.

Materiales y métodos

Extractos de café: Se trabajó con cinco muestras de *Coffea arabica* tostadas: *Catuai Amarelo* (A) y *Catuai Vermelho* (V), cada una obtenida tanto por fermentación natural como por fermentación húmeda (F), además de un blend (B, mexcla) exclusivamente fermentado en húmedo. Todas las muestras fueron cultivadas en Minas Gerais (MG, Brasil) a más de 1.000 m de altitud. Los extractos se prepararon mediante dos métodos: acuoso caliente y etanólico, siguiendo la adaptación de Angeloni et al. (2021).

Concentración bactericida mínima (MBC): La MBC se determinó en microplacas de 96 pocillos, con diluciones

seriadas de los extractos (500-15,62 mg/mL), en presencia de inóculo bacteriano (*S. aureus*, *P. mirabilis*, *E. coli*) y caldo TSB. Tras la incubación, se transfirieron al TSA para evaluar la inhibición total del crecimiento (Almeida et al., 2006; Rawangkan et al., 2022; Tasew et al., 2020).

Contenido fenólico total: La capacidad reductora se midió con el método colorimétrico de Folin-Ciocalteu, usando ácido gálico como estándar. Los resultados se expresaron en mg equivalentes de ácido gálico por gramo de muestra (Singleton et al., 1999).

Actividad antioxidante ABTS^{•+}: El potencial antioxidante se evaluó mediante la decoloración del radical ABTS^{•+}, con lecturas a 734 nm y curva de calibración con Trolox. Los resultados se expresaron en capacidad antioxidante equivalente a Trolox (Re et al., 1999).

Protección frente a neurotoxinas asociadas a la enfermedad de Parkinson: Células neuroendocrinas intestinales STC-1 se expusieron a extractos de café (4 h) y luego a las neurotoxinas rotenona o 6-OHDA (20 h). La viabilidad celular se evaluó con el ensayo MTT, comparando células tratadas y controles (Angeloni et al., 2021).

Perfil metabolómico (1H NMR): Los metabolitos se extrajeron con metanol-cloroformo y se analizaron por espectroscopía 1H NMR y técnicas 2D

(TOCSY, HSQC). Se identificaron y cuantificaron compuestos mediante software especializado, generando perfiles metabolómicos normalizados (Pedro Amorim Neto et al., 2023).

Estadística: Los análisis se realizaron en R: t-test para comparaciones de dos grupos y ANOVA con Tukey para múltiples grupos. Solo se consideraron significativos valores de $p \leq 0.005$, con al menos tres réplicas por experimento.

Resultados y discusión

Las infecciones son una de las principales causas de hospitalización y muerte en pacientes con enfermedad de Parkinson, con casos reportados que involucran patógenos como *Escherichia coli*, *Proteus mirabilis* y *Staphylococcus aureus* (Choi et al., 2018; Su et al., 2018). Por este motivo, evaluamos los efectos bactericidas de los extractos de café sobre estas especies bacterianas (Figura 1). Los datos mostraron una mayor susceptibilidad de *P. mirabilis* en comparación con los demás patógenos analizados. De hecho, la concentración bactericida mínima para los extractos acuosos fue de 500 mg/mL frente a *S. aureus*, *E. coli* y *P. mirabilis*. En cambio, los extractos etanólicos requirieron más de 500 mg/mL para *S. aureus* y menos de 250 mg/mL para los otros microorganismos. Nuestros datos son parcialmente superiores a los descritos por Nzekoue et al. (2020) para extractos de

coffee silverskin, cuya concentración mínima inhibitoria frente a las bacterias analizadas fue superior a 500 mg/mL.

A continuación, se evaluó el potencial antioxidante, que varió aproximadamente entre 32 y 40 $\mu\text{mol/g}$ para HA y EB, respectivamente. La capacidad reductora osciló entre 5 y 20 mg EAG/g para EB y EV, respectivamente (Figura 1). De hecho, las propiedades bioactivas del café se deben en parte a su capacidad antioxidante, ya demostrada previamente en líneas celulares de colon humano y neuronales *in vitro* (Angeloni et al., 2021; Bakuradze et al., 2010), lo que posteriormente fue confirmado mediante la identificación de metabolitos con propiedades antioxidantes diferencialmente expresados (Figura 3).

Variedad de café	Proceso	Extracción	<i>S. aureus</i> ATCC 19095	<i>E. coli</i> ATCC 11229	<i>P. mirabilis</i> ATCC 33583	Capacidad reductora (mg EAG/g muestra)	Capacidad antioxidante equivalente a Trolox ($\mu\text{mol/g}$ muestra)
A	N	H				15.56 $\pm$ 2.70 ^{ab}	32.14 $\pm$ 5.85 ^c
A	WF	H				15.27 $\pm$ 1.47 ^b	34.51 $\pm$ 4.25 ^c
B	WF	H				15.27 $\pm$ 1.37 ^b	36.89 $\pm$ 4.13 ^{bc}
V	N	H				11.74 $\pm$ 0.65 ^b	35.79 $\pm$ 4.33 ^{bc}
V	WF	H				14.37 $\pm$ 1.66 ^a	35.13 $\pm$ 0.69 ^{ab}
A	N	E				16.03 $\pm$ 1.52 ^{ab}	40.83 $\pm$ 1.44 ^a
A	WF	E				15.80 $\pm$ 1.64 ^{ab}	39.59 $\pm$ 1.71 ^{ab}
B	WF	E				5.65 $\pm$ 0.45 ^c	40.45 $\pm$ 1.54 ^a
V	N	E				19.66 $\pm$ 1.66 ^a	38.12 $\pm$ 0.69 ^{ab}
V	WF	E				14.81 $\pm$ 1.55 ^b	38.42 $\pm$ 2.49 ^{ab}

A: Catuaí Amarelo. B: mezcla (*blend*). N: natural. WF: fermentación húmeda. H: caliente (*hot*). E: etanólica.
500 | 250 | 125 | 62.5 mg/mL
^a Letras minúsculas diferentes indican diferencias significativas según el test de Tukey, $p \leq 0.05$

Figura 1. Actividad antimicrobiana y

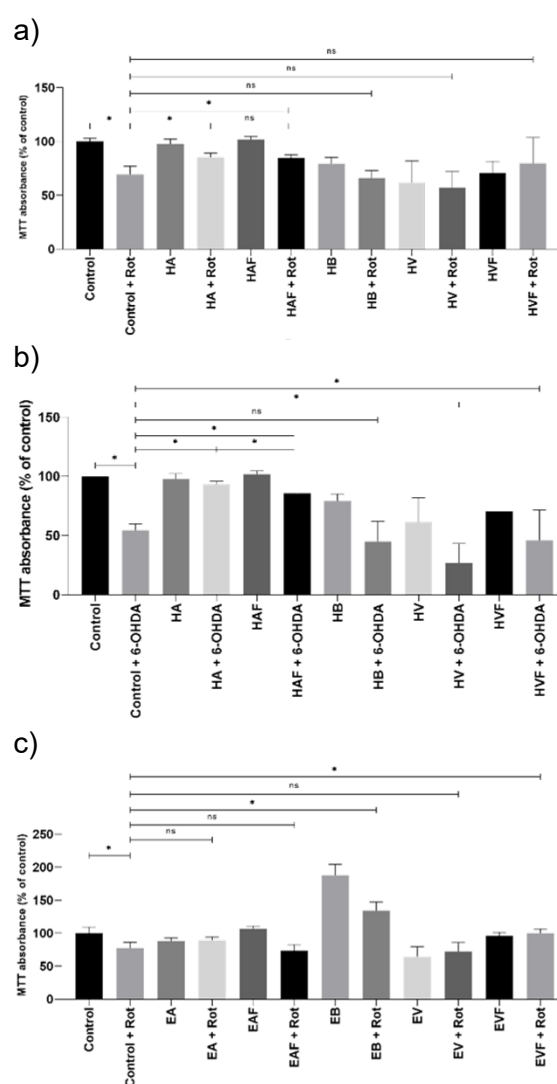
capacidad antioxidante de diferentes extractos de café.

Finalmente, las células neuroendocrinas STC-1 fueron expuestas a las neurotoxinas modelo de la enfermedad de Parkinson (6-OHDA y rotenona), observándose una pérdida de viabilidad celular (Figura 2). Este es el primer reporte de dicho fenómeno en esta línea celular. En realidad, los efectos de estas toxinas como inductores de la enfermedad de Parkinson idiopática fueron descubiertos y ampliamente descriptos en la línea celular de neuroblastoma SH-SY5Y (Xicoy et al., 2017).

Tanto la rotenona como la 6-OHDA inducen neurotoxicidad en células SH-SY5Y a través del estrés oxidativo y la apoptosis; sin embargo, la rotenona actúa principalmente mediante la inhibición del complejo mitocondrial I y la falla bioenergética, mientras que la toxicidad de la 6-OHDA está más relacionada con el daño oxidativo directo y en menor medida con la disfunción mitocondrial (loghen et al., 2023).

Posteriormente, en el intento de revertir este escenario patológico, se trató en primer lugar a las células neuroendocrinas STC-1 con concentraciones de hasta 1 mg/mL de todos los extractos, con el fin de evaluar su posible citotoxicidad. Los datos refutaron esta hipótesis, mostrando una viabilidad igual o superior al control no tratado, excepto en HA y HAF, que

redujeron la viabilidad en un 50% a la mayor concentración (Figura 2). Por último, las células neuroendocrinas fueron pretratadas con los extractos de café y luego desafiadas con las neurotoxinas, observándose que la pérdida de viabilidad celular fue revertida mediante el tratamiento con 1 mg/mL de EB y EVF frente a rotenona, con EB frente a 6-OHDA, o con 0.5mg/mL de HA y HAF frente a ambas neurotoxinas (Figura 2).



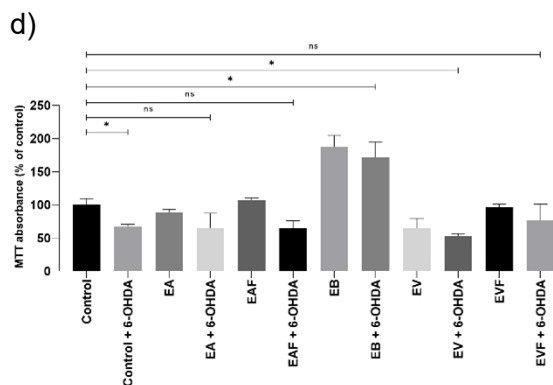


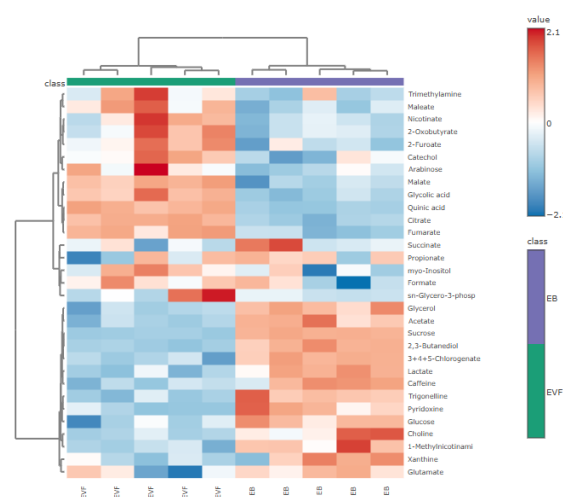
Figura 2. (a-b) Los extractos de café extraídos con agua caliente y (c-d) en etanol reducen la muerte celular inducida por (b-d) 6-hidroxidopamina y (a-c) rotenona en células neuroendocrinas STC-1. Se realizaron comparaciones múltiples mediante el test de Tukey y comparaciones por pares con el test T de Student, ambas con un nivel de significancia de $p \leq 0,05$.

Cabe destacar que, si bien se han reportado efectos citoprotectores de otros tipos de extractos a base de café en células SH-SY5Y frente al peróxido de hidrógeno (una de las principales vías de muerte celular en la EP) (Nzekoue et al., 2020), esta es la primera vez que extractos de café fermentado y no fermentado se asocian a efectos protectores contra neurotoxinas en células neuroendocrinas *in vitro*.

En la siguiente etapa, se utilizó la técnica de resonancia magnética nuclear (RMN) *untargeted* para obtener una visión global de la composición metabólica de los extractos acuosos y etanólicos de las variedades de café que mostraron mejor desempeño en el ensayo previo de

citotoxicidad y neuroprotección *in vitro* (EB, EVF, HA y HAF). Como se observa en la Figura 3, se identificaron alrededor de 31 metabolitos en las muestras, que presentaron concentraciones relativas variables tanto entre las variedades de café y el proceso fermentativo, como según el tipo de extracción al que habían sido sometidas previamente, lo que contribuyó a la clasificación de las muestras.

a)



b)

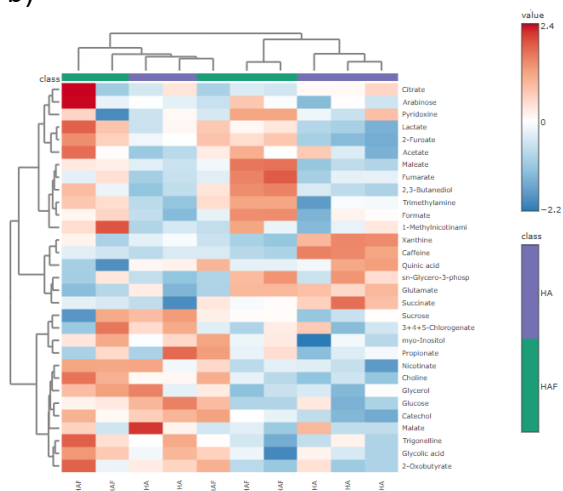
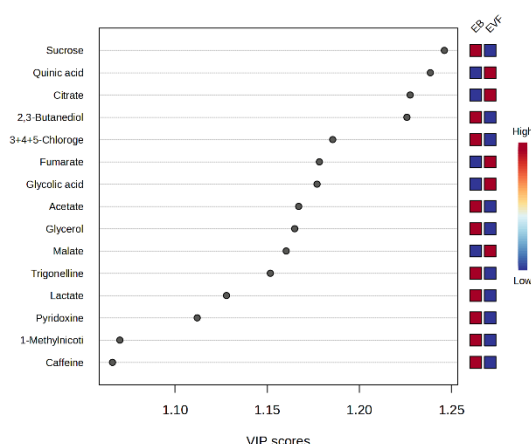


Figura 3. Mapas de calor de agrupamiento jerárquico que muestran las concentraciones relativas de los

metabolitos identificados en las muestras de extracto acuoso (a) y etanólico (b) de café que tuvieron el mejor desempeño en los ensayos celulares *in vitro*.

Para comprender cuáles eran los metabolitos más relevantes en la distinción entre los grupos, se empleó un análisis de *Variable Importance in Projection (VIP)*, y los metabolitos VIP de cada uno de los extractos con mejor desempeño se presentan en la Figura 4. El análisis VIP destacó a la cafeína, el fumarato y el ácido quínico como compuestos clave con propiedades neuroprotectoras previamente descriptas (Campolo et al., 2017; Liu et al., 2020; Yan et al., 2018), mientras que metabolitos como 2,3-butanodiol, acetato, lactato y 1-metilnicotinamida, sin evidencia previa de citoprotección, aparecieron en extractos activos, lo que sugiere posibles funciones aún no exploradas, pero potencialmente beneficiosas.

a)



b)

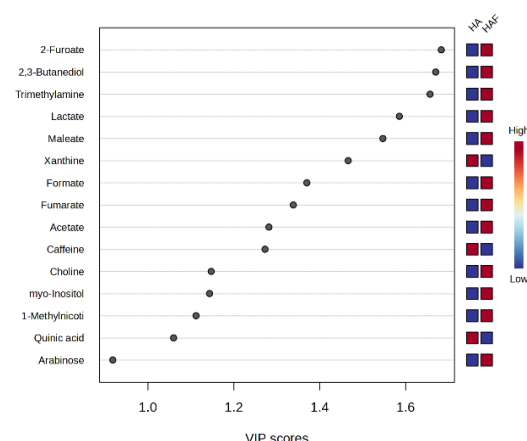


Figura 4. Gráfico de puntuación VIP (*Variable Importance in Projection*) del metaboloma de los extractos de café: (a) etanólico y (b) acuoso caliente, con efecto neuroprotector.

Conclusiones

En conclusión, los extractos de café tostado, procesados por fermentación húmeda y natural, obtenidos mediante extracción acuosa caliente y etanólica mostraron potentes efectos antioxidantes, reductores y bactericidas, revirtiendo de manera efectiva la pérdida de viabilidad celular en células neuroendocrinas expuestas a neurotoxinas asociadas con la enfermedad de Parkinson.

Bibliografía

Almeida, A. A. P., Farah, A., Silva, D. A. M., Nunan, E. A., & Glória, M. B. A. (2006). Antibacterial Activity of Coffee Extracts and Selected Coffee Chemical Compounds against Enterobacteria.

- Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 54(23), 8738–8743.
<https://doi.org/10.1021/JF0617317>
- Amorim Neto, D. P., Bosque, B. P., Pereira de Godoy, J. V., Rodrigues, P. V., Meneses, D. D., Tostes, K., Costa Tonoli, C. C., Faustino de Carvalho, H., González-Billault, C., & de Castro Fonseca, M. (2022). Akkermansia muciniphila induces mitochondrial calcium overload and α -synuclein aggregation in an enteroendocrine cell line. *IScience*, 25(3), 103908.
<https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.isci.2022.103908>
- Angeloni, S., Freschi, M., Marrazzo, P., Hrelia, S., Beghelli, D., Juan-García, A., Juan, C., Caprioli, G., Sagratini, G., & Angeloni, C. (2021). Antioxidant and Anti-Inflammatory Profiles of Spent Coffee Ground Extracts for the Treatment of Neurodegeneration. *Oxidative Medicine and Cellular Longevity*, 2021, 1–19.
<https://doi.org/10.1155/2021/6620913>
- Bakuradze, T., Lang, R., Hofmann, T., Stiebitz, H., Bytof, G., Lantz, I., Baum, M., Eisenbrand, G., & Janzowski, C. (2010). Antioxidant effectiveness of coffee extracts and selected constituents in cell-free systems and human colon cell lines. *Molecular Nutrition and Food Research*, 54(12), 1734–1743.
<https://doi.org/10.1002/MNFR.201000147>
- Bohórquez, D. V., Samsa, L. A., Roholt, A., Medicetty, S., Chandra, R., & Liddle, R. A. (2014). An Enteroendocrine Cell – Enteric Glia Connection Revealed by 3D Electron Microscopy. *PLoS ONE*, 9(2), e89881.
<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0089881>
- Campolo, M., Casili, G., Biundo, F., Crupi, R., Cordaro, M., Cuzzocrea, S., & Esposito, E. (2017). The Neuroprotective Effect of Dimethyl Fumarate in an MPTP-Mouse Model of Parkinson's Disease: Involvement of Reactive Oxygen Species/Nuclear Factor- κ B/Nuclear Transcription Factor Related to NF-E2. *Antioxidants & Redox Signaling*, 27(8), 453–471.
<https://doi.org/10.1089/ars.2016.6800>
- Cersosimo, M. G., Raina, G. B., Pecci, C., Pellene, A., Calandra, C. R., Gutiérrez, C., Micheli, F. E., & Benarroch, E. E. (2013). Gastrointestinal manifestations in Parkinson's disease: prevalence and occurrence before motor symptoms. *Journal of Neurology*, 260(5), 1332–1338.
<https://doi.org/10.1007/s00415-012-6801-2>
- Chandra, R., Hiniker, A., Kuo, Y. M., Nussbaum, R. L., & Liddle, R. A. (2017). α -Synuclein in gut endocrine cells and its implications for Parkinson's disease. *JCI Insight*, 2(12).
<https://doi.org/10.1172/JCI.INSIGHT.92295>

- Choi, J. G., Kim, N., Ju, I. G., Eo, H., Lim, S. M., Jang, S. E., Kim, D. H., & Oh, M. S. (2018). Oral administration of *Proteus mirabilis* damages dopaminergic neurons and motor functions in mice. *Scientific Reports* 2018 8:1, 8(1), 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-018-19646-x>
- International Coffee Organization. (2022). *Historical Data on the Global Coffee Trade*. https://www.ico.org/new_historical.asp?section=Statistics
- Ioghen, O. C., Ceafalan, L. C., & Popescu, B. O. (2023). SH-SY5Y Cell Line In Vitro Models for Parkinson Disease Research-Old Practice for New Trends. *Journal of Integrative Neuroscience*, 22(1), 20. <https://doi.org/10.31083/j.jin2201020>
- Ferreira, L. J. C., de Souza Gomes, M., Maciel de Oliveira, L., & Diniz Santos, L. (2023). Coffee fermentation process: A review. *Food Research International*, 169, 112793. <https://doi.org/10.1016/j.FOODRES.2023.112793>
- Kouli, A., Torsney, K. M., & Kuan, W.-L. (2018). Parkinson's Disease: Etiology, Neuropathology, and Pathogenesis. In *Parkinson's Disease: Pathogenesis and Clinical Aspects* (pp. 3–26). Codon Publications. <https://doi.org/10.15586/codonpublications.parkinsonsdisease.2018.ch1>
- Liu, L., Liu, Y., Zhao, J., Xing, X., Zhang, C., & Meng, H. (2020). Neuroprotective Effects of D-(-)-Quinic Acid on Aluminum Chloride-Induced Dementia in Rats. *Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine*, 2020(1), 5602597. <https://doi.org/10.1155/2020/5602597>
- Nzekoue, F. K., Angeloni, S., Navarini, L., Angeloni, C., Freschi, M., Hrelia, S., Vitali, L. A., Sagratini, G., Vittori, S., & Caprioli, G. (2020). Coffee silverskin extracts: Quantification of 30 bioactive compounds by a new HPLC-MS/MS method and evaluation of their antioxidant and antibacterial activities. *Food Research International*, 133, 109128. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2020.109128>
- Parkinson's Foundation. (2022). *Statistics*. <https://www.parkinson.org/Understanding-Parkinsons/Statistics>
- Pedro Amorim Neto, D., Vitor Pereira de Godoy, J., Tostes, K., Pelegrini Bosque, B., Vieira Rodrigues, P., Aparecida Rocco, S., Luis Sforça, M., & de Castro Fonseca, M. (2023). Metabolic Disturbances in the Gut-brain Axis of a Mouse Model of MPTP-induced Parkinsonism Evaluated by Nuclear Magnetic Resonance. *Neuroscience*, 526, 21–34.

- <https://doi.org/10.1016/J.NEUROSCIENC>
E.2023.06.010
- Przedborski, S. (2017). The two-century journey of Parkinson disease research. *Nature Reviews Neuroscience*, 18(4), 251–259.
<https://doi.org/10.1038/nrn.2017.25>
- Ramsden, D. B., Parsons, R. B., Ho, S. L., & Waring, R. H. (2001). The aetiology of idiopathic Parkinson's disease. *Molecular Pathology*, 54(6), 369.
[/pmc/articles/PMC1187126/](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/1187126/)
- Rawangkan, A., Siriphap, A., Yosboonruang, A., Kiddee, A., Pook-In, G., Saokaew, S., Sutheinkul, O., & Duangjai, A. (2022). Potential Antimicrobial Properties of Coffee Beans and Coffee By-Products Against Drug-Resistant *Vibrio cholerae*. *Frontiers in Nutrition*, 9, 865684.
<https://doi.org/10.3389/fnut.2022.865684>
- Re, R., Pellegrini, N., Proteggente, A., Pannala, A., Yang, M., & Rice-Evans, C. (1999). Antioxidant activity applying an improved ABTS radical cation decolorization assay. *Free Radical Biology and Medicine*, 26(9–10), 1231–1237.
[https://doi.org/10.1016/S0891-5849\(98\)00315-3](https://doi.org/10.1016/S0891-5849(98)00315-3)
- Rodrigues, P. V., de Godoy, J. V. P., Bosque, B. P., Amorim Neto, D. P., Tostes, K., Palameta, S., Garcia-Rosa, S., Tonoli, C. C. C., de Carvalho, H. F., & de Castro Fonseca, M. (2022). Transcellular propagation of fibrillar α -synuclein from enteroendocrine to neuronal cells requires cell-to-cell contact and is Rab35-dependent. *Scientific Reports* 2022 12:1, 12(1), 1–19.
<https://doi.org/10.1038/s41598-022-08076-5>
- Singleton, V. L., Orthofer, R., & Lamuela-Raventós, R. M. (1999). Methods in Enzymology - Oxidants and Antioxidants Part A. *Methods in Enzymology*, 299, 152–178. [https://doi.org/10.1016/S0076-6879\(99\)99017-1](https://doi.org/10.1016/S0076-6879(99)99017-1)
- Socała, K., Szopa, A., Serefko, A., Poleszak, E., & Wlaź, P. (2020). Neuroprotective Effects of Coffee Bioactive Compounds: A Review. *International Journal of Molecular Sciences* 2021, Vol. 22, Page 107, 22(1), 107.
<https://doi.org/10.3390/IJMS22010107>
- Su, C. M., Kung, C. Te, Chen, F. C., Cheng, H. H., Hsiao, S. Y., Lai, Y. R., Huang, C. C., Tsai, N. W., & Lu, C. H. (2018). Manifestations and outcomes of patients with Parkinson's disease and serious infection in the emergency department. *BioMed Research International*, 2018.
<https://doi.org/10.1155/2018/6014896>
- Tasew, T., Mekonnen, Y., Gelana, T., Redi-Abshiro, M., Chandravanshi, B. S., Ele, E., Mohammed, A. M., & Mamo, H. (2020). In vitro antibacterial and antioxidant

activities of roasted and green coffee beans originating from different regions of Ethiopia. *International Journal of Food Science*, 2020.

<https://doi.org/10.1155/2020/8490492>

Thomas, B., & Beal, M. F. (2007). Parkinson's disease. *Human Molecular Genetics*, 16(R2), R183–R194.

<https://doi.org/10.1093/hmg/ddm159>

Wasim, S., Kukkar, V., Awad, V. M., Sakhamuru, S., & Malik, B. H. (2020). Neuroprotective and Neurodegenerative Aspects of Coffee and Its Active Ingredients in View of Scientific Literature. *Cureus*, 22(1), 107.

<https://doi.org/10.7759/cureus.9578>

Xicoy, H., Wieringa, B., & Martens, G. J. M. (2017). The SH-SY5Y cell line in Parkinson's disease research: a systematic review. *Molecular Neurodegeneration*, 12(1), 1–11.

<https://doi.org/https://doi.org/10.1186/s13024-017-0149-0>

Yan, R., Zhang, J., Park, H. J., Park, E. S., Oh, S., Zheng, H., Junn, E., Voronkov, M., Stock, J. B., & Mouradian, M. M. (2018). Synergistic neuroprotection by coffee components eicosanoyl-5-hydroxytryptamide and caffeine in models of Parkinson's disease and DLB. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(51), E12053–E12062.

<https://doi.org/10.1073/PNAS.1813365115>

Financiamiento

Este trabajo contó con el apoyo de la “Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo” (FAPESP, #2021/15224-8) y de la “Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior” (CAPES; #001).

35.- Meio ambiente e contaminação ambiental

**Variação da abundância e do tamanho de *Hepatus pudibundus* (Herbst 1785)
(Crustacea, Decapoda, Brachyura) em um intervalo de 30 anos, na região de Ubatuba,
São Paulo, Brasil**

Autor: Dioro, Gabriel Matos Fortes; gabriel.dioro@unesp.br

Co-autor(es): Perroca, Julia Fernandes; Costa, Rogerio Caetano

Orientador/a: Costa, Rogério Caetano; rogerio.c.costa@unesp.br

Universidade Estadual Paulista (UNESP), Bauru, SP / Faculdade de Ciências, Departamento
de Ciências Biológicas

Resumo

A espécie *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785), uma das mais abundantes no bycatch da pesca de arrasto no Sul e Sudeste brasileiro, foi analisada ao longo de 30 anos (1995-2025) na Baía de Ubatuba (SP), com foco na variação da abundância e do tamanho médio da largura da carapaça (LC). A partir desse objetivo, tem-se a expectativa de averiguar os possíveis efeitos da pressão pesqueira sobre a abundância e tamanho médio total e por categoria demográfica da espécie em uma escala temporal. Foram divididos os dados em períodos de amostragens mensais durante 12 meses, sendo: 1ºP (1995-1996), 2ºP (1998), 3ºP (1999), 4º (2013-2014), 5ºP (2016-2017), 6ºP (2021-2022) e 7ºP (2024-2025). No total, 8.092 indivíduos foram coletados em profundidades entre 5 e 15 m, sendo 2.219 machos e 5.873 fêmeas. Os machos variaram de 14,4 a 77,2 mm ($45,63 \pm 12,72$ mm) e as fêmeas de 7,0 a 75,4 mm ($46,84 \pm 8,93$ mm). Segundo o teste de Mann-Whitney ($p < 0,05$), houve diferença significativa, com fêmeas apresentando tamanho médio superior. A classe de tamanho com maior frequência dos machos e fêmeas foi 47[-52. Por categoria demográfica, as fêmeas adultas não ovígeras (FA) apresentaram maior abundância e distribuição entre classes, enquanto machos adultos (MA) foram menos abundantes, porém com ampla distribuição entre classes. Fêmeas ovígeras (FO) ocorreram até 72[-77, com pico em 47[-52 e juvenis (IM) entre as primeiras classes. A estrutura populacional permaneceu estável, com presença contínua de adultos e juvenis, sendo a variação influenciada, possivelmente, por pressão da pesca e fatores climáticos.

Palavras-chave: variação temporal, abundância, tamanho médio

Introdução

A infraordem Brachyura compreende mais de 7.600 espécies distribuídas em 98 famílias (Wolfe *et al.*, 2024), destacando-se pela elevada riqueza e abundância em relação a outros invertebrados marinhos (Bertini *et al.*, 2004). Esses crustáceos possuem morfologia peculiar, com cefalotórax geralmente achatado e quelas desenvolvidas nos primeiros pares de apêndices, utilizadas para defesa e reprodução (Ng *et al.*, 2008). Ocupam diversos habitats marinhos e de água doce, incluindo manguezais, estuários, praias arenosas e costas rochosas (Ng *et al.*, 2008; Wolfe *et al.*, 2024), e exercem papéis ecológicos relevantes, como aeração do solo, reciclagem de nutrientes (Amaral *et al.*, 2010) e bioindicadores ambiental (Reis Neto *et al.*, 2012).

Dentre os Brachyura, destaca-se *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) (Figura 1), conhecido como “caranguejo-baú”, pertencente à família Aethridae. Essa espécie ocorre em sedimentos arenosos ou lamacentos de águas rasas a profundidades de até 160 m, tem sua abundância relacionada a temperaturas entre 19 e 22°C e salinidade entre 38 e 40 PSU (Bernardes *et al.*, 2019), com ampla distribuição no Atlântico Ocidental e Oriental (Melo, 1996; GBIF, 2023). Além de seu papel como bioturbador (Melo, 1996), *H. pudibundus* é uma das espécies mais frequentes na fauna acompanhante (bycatch) da pesca de arrasto de

camarões, no Sul e Sudeste do Brasil, representando cerca de 70% dos Brachyura capturados (Severino-Rodrigues *et al.*, 2002; Costa *et al.*, 2016; Bochini *et al.*, 2019; Jaconis *et al.*, 2022).



Figura 1. *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785). Fotografia de © A. Fransozo.

Adaptado de Bernardes *et al.* (2009).

Usado com permissão.

A pesca por arrasto no Brasil é voltada à captura de camarões de alto valor comercial, como *Xiphopenaeus kroyeri* (Heller, 1862), *Farfantepenaeus brasiliensis* (Latreille, 1817), *F. paulensis* (Pérez Farfante, 1967) e *Litopenaeus schmitti* (Burkenroad, 1936) no Sul e Sudeste (Castilho *et al.*, 2008; Fransozo *et al.*, 2016). No entanto, a prática é marcada pela elevada captura de espécies não alvo, com uma relação entre bycatch e espécie-alvo que pode variar de 11:1 a 20:1 (Conolly, 1986; Eayrs, 2007), o que representa um impacto direto sobre o equilíbrio ecológico (Pereira-Barros, 1981; Branco e Fracasso, 2004; Costa *et al.*, 2016).

Além da pressão pesqueira, fatores ambientais como temperatura, salinidade, granulometria e matéria orgânica influenciam a dinâmica de populações

bentônicas (Masunari, 2006; Hippólito, 2014). Somado a isso, a entrada de massas d'água como a ACAS (Água Central do Atlântico Sul) podem transportar nutrientes para a costa (Odebrecht & Castello, 2001; Lima *et al.*, 2014a).

Nesse contexto, a variação no tamanho médio de indivíduos pode refletir diretamente os efeitos de pressões antrópicas sobre a estrutura populacional. Teles *et al.* (2021) estudou a variação temporal da mesma espécie, e com isso identificou um aumento expressivo na abundância de *H. pudibundus* entre os períodos de 1995/1996 e 2016/2017 na Baía de Ubatuba, contudo, tal trabalho pode nos levar a um resultado “falso positivo”. Ao usar de apenas dois anos amostrais e com 20 anos de intervalo entre si, acaba sendo aberto um grande viés de dúvida quanto a real flutuação da abundância da espécie ao longo dos anos

Assim, torna-se necessário ampliar a escala temporal de análise para compreender melhor as tendências populacionais dessa espécie. Embora aspectos como estrutura populacional e abundância já tenham sido abordados anteriormente (Mantelatto *et al.*, 1995a; Fracasso & Branco, 2005), estudos de longa duração são fundamentais para detectar possíveis impactos da variabilidade ambiental e da pesca sobre o crescimento e o recrutamento. A investigação da abundância e do tamanho médio de *H. pudibundus* ao longo de 30 anos oferece um material ecológico

necessário para avaliar alterações estruturais e potenciais declínios populacionais associados a esses fatores.

Além disso, o presente trabalho, por meio dos valores levantados, se enquadra na ODS (Objetivos de Desenvolvimento Sustentável) da ONU (Organização das Nações Unidas), onde através do objetivo 14 (vida debaixo d'água), busca conservar e instigar melhores maneiras do uso sustentável dos oceanos, interagindo com os objetivos 2 (fome zero) e 8 (emprego digno e crescimento econômico), para que, a partir de inovações científicas no meio pesqueiro as comunidades possam usufruir de sua cultura local.

Objetivos

Este trabalho tem como objetivo principal analisar a variação da abundância e do tamanho médio total e por categoria demográfica de *H. pudibundus* ao longo de 30 anos (1995 a 2025) na Baía de Ubatuba (SP), a fim de compreender os possíveis efeitos da pressão pesqueira e fatores climáticos.

Materiais e Métodos

Caracterização da área de estudo

As coletas foram realizadas na Baía de Ubatuba, localizada no município de Ubatuba, no litoral norte do Estado de São Paulo (23°26'S, 45°01'W), entre os meses de março a junho de 2025. Os pontos de amostragem foram selecionados com base na granulometria do sedimento e na

temperatura da água, levando em consideração dados de coletas realizadas em estudos anteriores que ocorreram no período de 1995 a 2024. A escolha dos locais de amostragem também considera a influência dos rios que desembocam na região, como o Rio Indaiá, o Rio Grande, o Rio Lagoa e o Rio Acaraú, além das três principais massas de água que afetam a área: a Água Tropical (AT), a Água Costeira (AC) e a Água Central do Atlântico Sul (ACAS) (Castro-Filho *et al.*, 1987). Para melhor interpretação dos dados e plotagem dos gráficos, os dados foram separados nos seguintes períodos: 1ºP 1995-1996, 2ºP 1998, 3ºP 1999, 4ºP 2013-2014, 5ºP 2016-2017, 6ºP 2021-2022 e 7ºP 2024-2025.

Amostragem do material biológico

As amostras foram obtidas através de coletas mensais em 4 transectos distribuídos nas profundidades de 5 a 20 metros, onde ocorrem a pesca do camarão sete barbas na Baía de Ubatuba (Figura 2): (1) 15m, (2) 10,4m, (3) 5m e (4) 9,2m em determinados anos entre 1995 e 2025 (Tabela 1) (Perroca *et al.*, 2022).

Tabela 1. Anos de amostragem na Baía de Ubatuba, São Paulo, Brasil.

Year	Month											
	Jan	Feb	Mar	Apr	May	Jun	Jul	Aug	Sep	Oct	Nov	Dez
1995												
1996												
1998												
1999												
2013												
2014												
2016												
2017												
2021												
2022												
2024												
2025												

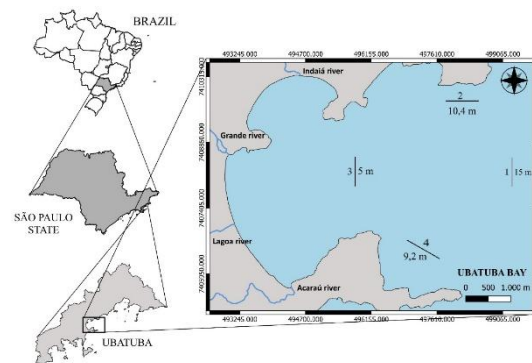


Figura 2. Mapa da Baía de Ubatuba, São Paulo, Brasil, com os transectos 1, 2, 3 e 4.

Destaca-se que o transecto 3 é restrito ao decreto nº 73.632 (SUDEPE, 1974), que proíbe o arrasto dentro da área de 1,5 milhas náuticas (2,7 km) da costa. As amostragens foram feitas de 1995 e serão concluídas em 2025.

A captura foi realizada utilizando uma embarcação camaroeira, equipada com redes de arrasto do tipo "double-rig", com malhas de abertura de 20 mm e 18 mm no saco final. O esforço amostral total foi de 30 minutos por arrasto em cada ponto, totalizando uma área de coleta de 18.000 m² por ponto, com uma velocidade média de 1,7 nós.

O material coletado na rede foi previamente triado na própria embarcação e separados por táxon para assim serem ensacados com gelo picado e enviados para posterior análise no laboratório do Instituto de Oceanografia da USP (IOUSP – Base Ubatuba). Todos os indivíduos coletados foram identificados de acordo com Melo (1996), mensurados quanto a largura da carapaça (CC mm), separados por sexo e por fim classificados quanto seu

grupo demográfico, sendo eles: imaturo (IM), fêmeas adultas não ovígeras (FA), machos adultos (MA) e fêmeas ovígeras (FO).

Amostragem das variáveis ambientais

Os parâmetros ambientais, tais como temperatura e salinidade foram monitorados mensalmente, como proposto por Jaconis (2023).

Análises estatísticas

As análises da estrutura populacional foram realizadas para cada período, separados para macho e fêmea. A frequência de tamanho (LC) foi agrupada em classe determinadas a partir da formula de Sturges (1926) $K = 1 + 3,32 \cdot \log(N)$; $R = X_{\text{maior}} - X_{\text{menor}}$; $W = R/K$; onde: K indica o número de classes, N o número total de indivíduos, R é a variação do tamanho, X aponta o menor e maior individuo da amostra e W mostra a amplitude das classes.

Todos os indivíduos coletados foram separados em classes de tamanho de 5 mm e em gráficos histograma para análise quanto a variação ao longo dos anos.

Os testes de homocedasticidade (Levene) e normalidade (Kolmogorov-Smirnov) foram aplicados. A partir da heterogeneidade encontrada pelo teste de Levene e normalidade rejeitada pelos testes de Kolmogorov-Smirnov, foi aplicado o teste de Mann-Whitney para comparar o

tamanho médio entre machos e fêmeas, a uma probabilidade de 5% (Zar, 1999).

Para a elaboração dos gráficos de temperatura e salinidade foi utilizado o software Surfer com modelos de heatmap.

Todos os testes e gráficos histograma foram feitos e plotados por meio do software R (R Core Team 2022).

Resultados e discussão

Ao todo foram coletados 8.092 caranguejos, sendo 2.219 machos e 5.873 fêmeas. A maior abundância ocorreu durante o 5ºP (2016-2017) (Figura 3), enquanto a menor ocorreu no 3º (1999).

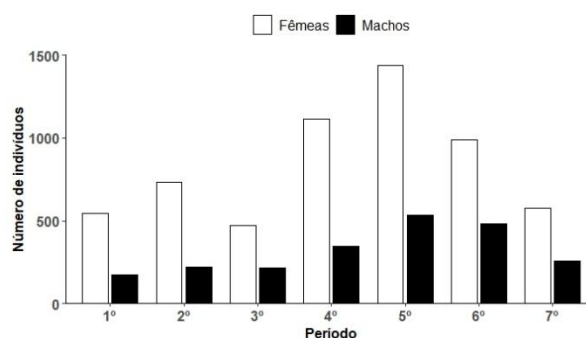


Figura 3. Abundância de machos e fêmeas entre os períodos, na Baía de Ubatuba, São Paulo, Brasil.

Em relação ao tamanho, a variação do tamanho da carapaça dos machos variou entre 14,4 e 77,2 mm ($45,63 \pm 12,72$ mm) e nas fêmeas entre 7,0 e 75,4 mm ($46,84 \pm 8,93$ mm). Segundo o teste Mann-Whitney ($p < 0,05$) o tamanho médio de ambos os sexos apresentou diferença estatística significativa, com o LC (largura da carapaça) das fêmeas sendo maior que a dos machos.

A partir dos resultados da fórmula

de Sturges, foram definidas 16 classes de tamanho com intervalo de 5mm entre elas.

Os machos foram mais frequentes na classe 27[-32, enquanto fêmeas foram mais frequentes entre as classes 47[-52 a 52[-57, com as fêmeas sendo aproximadamente 4 vezes mais abundantes que os machos (Figura 4).

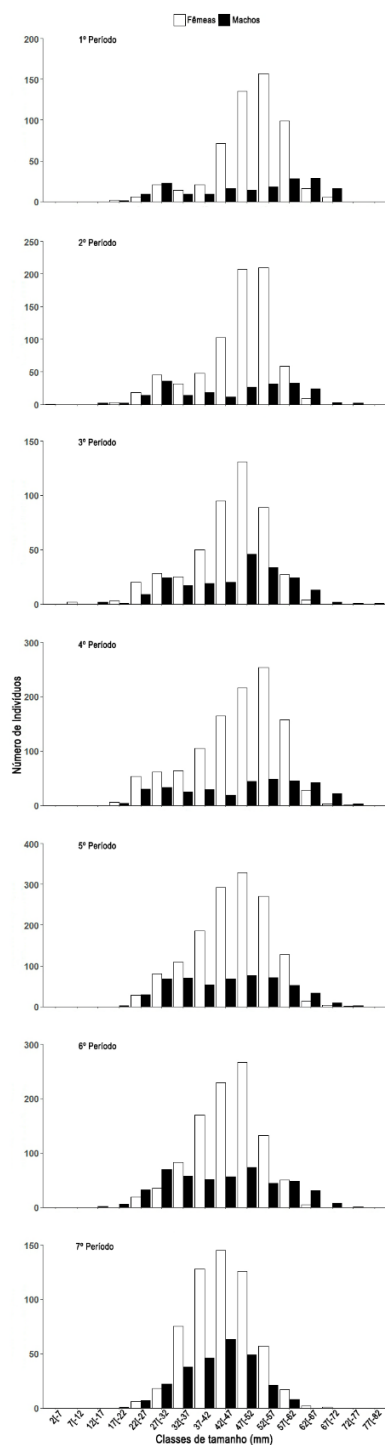


Figura 4. Número de indivíduos por classes de tamanho (mm) de machos e fêmeas coletados na Baía de Ubatuba, São Paulo, Brasil.

A partir da separação por grupos demográficos, observou-se que as maiores frequências de juvenis (IM) capturados estiveram em classes de tamanhos até 42[-47 com maior frequência nas classes entre 27 e 32mm. Fêmeas adultas não ovígeras (FA) distribuíram-se entre classes de tamanho de 17[-22 até 72[-77, com pico na classe 47[-52. Machos adultos (MA) variaram entre 12[-17 até 77[-82, com seu ápice também em 47[-52, já as fêmeas ovígeras (FO) ocorreram de 22[-27 até 72[-77 e com ápice em 47[-52, se alinhando a maior incidência de fêmeas e machos adultos (Figura 5).

Os juvenis apresentaram variação de tamanho entre 7 e 46,7mm ($29,66 \pm 4,78\text{mm}$), as fêmeas adultas não ovígeras entre 20 e 75,4mm ($48,40 \pm 7,11\text{mm}$), machos adultos entre 16,1 e 77,2 ($50,65 \pm 10,06\text{mm}$) e fêmeas ovígeras entre 22,6 e 74,6mm ($50,58 \pm 6,61\text{mm}$) (Tabela 2).

Tabela 2. Abundância (N), média e desvio padrão (DP), valor mínimo (Mín.) e máximo (Máx.) por categoria demográfica.

Grupo demográfico	N	LC (mm)		
		Média $\pm$ DP	Mín.	Máx.
IM	1.105	$29,66 \pm 4,78\text{mm}$	7	46,7
FA	4.551	$48,40 \pm 7,11\text{mm}$	20	75,4
MA	1.681	$50,65 \pm 10,06\text{mm}$	16,1	77,2

FO 755 50,58 ± 6,61mm 22,5 74,6

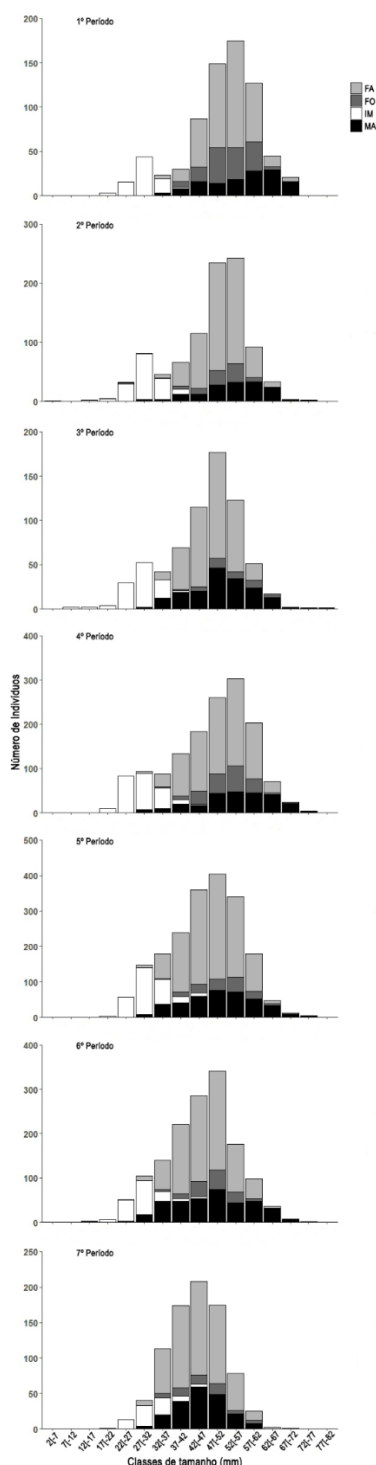


Figura 5. Número de indivíduos de juvenis (IM), fêmeas adultas não ovígeras (FA), machos adultos (MA) e fêmeas ovígeras (FO) por classes de tamanho (mm).

Os resultados em escala temporal, ao longo de 30 anos, da abundância de *H. pudibundus* nos mostra uma leve variação, o que pode nos levar a crer que certos fatores climáticos, tais como temperatura (Figura 6) e salinidade (Figura 7), condizentes com os ideais para a permanência da espécie (temperaturas entre 19 e 22°C e salinidade entre 38 e 40 PSU (Bernardes *et al.*, 2019)), ajudaram na permanência e reprodução da espécie (Masunari, 2006; Hippólito, 2014).

Ao analisarmos o peso total anual do alvo da pesca (*Xiphopenaeus kroyeri*) (Tabela 3) podemos ver que os anos de maior abundância do caranguejo-baú coincide com os de maior captura do camarão. Ambos os crustáceos ocupam fundos arenosos ou lamosos em águas rasas com temperatura e salinidade semelhantes (Costa *et al.*, 2000; Frédou *et al.*, 2006), isso faz com que quando há maior busca pelo sete-barbas nas redes de arrasto, inevitavelmente haja mais captura do caranguejo.

Tabela 3. Peso anual de *Xiphopenaeus kroyeri*, capturados por arrasto na região de Ubatuba, São Paulo, Brasil.

Período	Peso (Kg)
1º	-
2º	303.991,00
3º	207.133,00
4º	169,017.70
5º	314,425.80
6º	315,529.00
7º	158,521.80

Fonte: Instituto da Pesca.

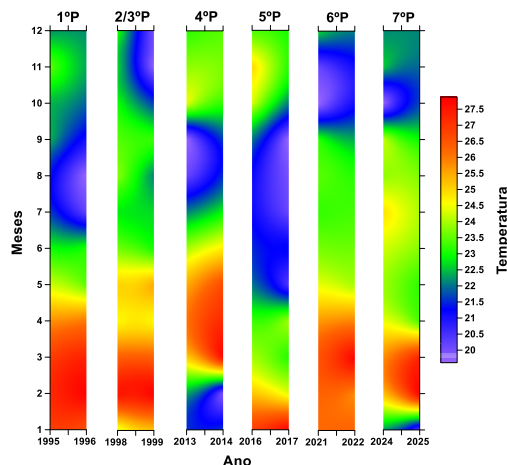


Figura 6. Média da temperatura mensal da Baía de Ubatuba durante os períodos amostrados.

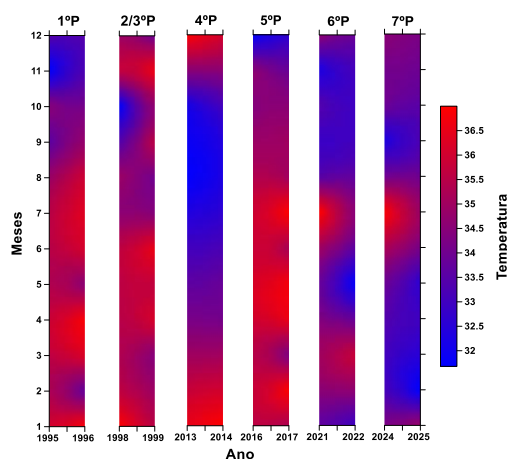


Figura 7. Média da salinidade mensal da Baía de Ubatuba durante os períodos amostrados.

Além disso, a penetração da massa Água Central do Atlântico Sul (ACAS = temperatura < 18°C; salinidade < 36 PSU) promove maior disponibilidade de matéria orgânica e sedimentos finos, condições ideais para a alimentação e abrigo destes animais (Bernardes *et al.*, 2019). Por outro lado, a pesca de arrasto é um fator de mortalidade crescente na espécie, o que somado a sua baixa longevidade e composição do comprimento pode estar

levando a uma sobrepesca (Keunecke *et al.*, 2007).

Em relação aos parâmetros de tamanho, o maior indivíduo encontrado foi um macho, corroborando o que já havia sido encontrados em outras regiões, como no norte do Rio de Janeiro (Klôh & Di Benedito, 2010) e Armação do Itapocoroy (Fracasso & Branco, 2005), e em 1995 na região de Ubatuba (Mantelatto *et al.*, 1995b).

Coletas anteriores, realizadas em 1988/1989 na região de Ubatuba, registraram 53,27 e 46,70 como tamanhos médios para machos e fêmeas, respectivamente (Mantelatto *et al.*, 1995b), tal característica pode indicar uma incidência de captura de indivíduos maiores, através da baixa seletividade das redes, e aumento das frotas pesqueiras desde então.

Apesar disso, a média geral amostrada neste trabalho aponta para um maior comprimento das fêmeas, o que não foi observado em outros estudos da espécie, já que segundo diversos autores (Mantelatto & Fransozo, 1996; Sardá *et al.*, 2013; Miazaki *et al.*, 2018) o tamanho médio dos machos é maior, sendo este relacionado ao dimorfismo sexual (Keunecke *et al.*, 2007a) e direcionamento dos gastos energéticos para crescimento somático, enquanto as fêmeas investem em incubação de ovos (Mantelatto & Fransozo, 1994; Mantelatto *et al.*, 1995b; Mantelatto & Fransozo, 1996).

Tal ocorrência pode estar atrelado a maior abundância das fêmeas ($N = 4.873$) em relação aos machos ($N = 2.219$), além da maior distribuição delas às classes de tamanho, o que nos leva a crer que uma baixa amostragem de machos maiores pode ter desviado a média. Além disso, Mantelatto *et al.* (1995b) sugerem que as fêmeas podem preferir áreas específicas, relacionadas à sedimentologia ou salinidade. Em contrapartida Sardá *et al.* (2013) em estudo na costa de Santa Catarina, sul do Brasil, atribuiu as variações do *H. pudibundus* a salinidade e temperatura, com uma maior ocorrência em águas rasas, quentes e pouco salinas.

A partir da divisão por grupos demográficos (IM, FA, MA e FO), os resultados nos mostram uma maior abundância e distribuição entre às classes de tamanho das fêmeas adultas não ovígeras, o que pode estar relacionado ao habitat propenso a reprodução e menor mobilidade durante o ciclo reprodutivo (Lima *et al.*, 2014b).

A baixa proporção de machos adultos, pode indicar uma maior mortalidade seletiva, onde espécies como *Callinectes sapidus* (Rathbun, 1896), apesar de apresentarem uma dominância competitiva, ainda possuem riscos físicos e desgastes graves, o que pode reduzir a sobrevivência e o sucesso reprodutivo (Jivoff *et al.*, 1997).

Os indivíduos considerados juvenis (IM) encontraram-se nas primeiras classes de tamanho, até 37[-42. Contudo, a partir

do 5º Período, período esse de maior abundância, os juvenis apareceram em classes até 42[-47 o que pode estar atrelado a padrões sazonais e fatores ambientais.

Estudos com *Arenaeus cribrarius* (Lamarck, 1818) nos mostram que juvenis podem atingir maiores classes de tamanho a depender de variáveis ambientais como temperatura e profundidade (Ribeiro da Silva *et al.*, 2017;). Já Miyazaki *et al.* (2018) mostram em *H. pudibundus* da costa paulista que grupos juvenis apresentam variação de tamanho, crescimento e mortalidade compatíveis com padrões sazonais.

A presença de fêmeas ovígeras até a classe 72[-77 pode representar uma estratégia de maximização do rendimento reprodutivo, visto que fêmeas maiores podem carregar um número maior de ovos (Hines, 1982).

A coincidência do pico de fêmeas ovígeras bater com a presença de machos adultos e fêmeas adultas não ovígeras sugere um acúmulo reprodutivo sazonal, onde classes específicas de tamanho podem bater com picos de reproduções da espécie, já que esta possui reprodução continua com picos sazonais (Reigada & Fransozo, 2000).

Conclusão

Com bases nos resultados obtidos, análises estatísticas e literatura levantada, é possível pressupor que a estrutura populacional de *H. pudibundus* se manteve

estável ao longo de 30 anos, com uma flutuabilidade na abundância, porém sempre apresentando indivíduos adultos e juvenis de ambos os sexos na maioria dos meses e transectos avaliados entre os períodos.

Referências Bibliográficas

Amaral, A. C. Z., *et al.* (2010). Araçá: biodiversidade, impactos e ameaças. *Biota Neotropica*, 10(1), 219–264.

Barton, K. (2009). *Mu-MIn: Multi-model inference* (R Package Version 0.12.2/r18).

Bernardes, V. P., *et al.* (2019). Influence of environmental factors on the bathymetric distribution of the flecked box crab *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) (Crustacea: Aethroidea) in the Southeastern Brazilian coast. *Biota Neotropica*, 19(1), e20180549.

Bertini, G., & Fransozo, A. (2004). Bathymetric distribution of brachyuran crab (Crustacea, Decapoda) communities on coastal soft bottoms off southeastern Brazil. *Marine Ecology Progress Series*, 279, 193–200.

Bochini, G. L., *et al.* (2019). The crustacean bycatch of seabob shrimp *Xiphopenaeus kroyeri* (Heller, 1862) fisheries in the Cananéia region, southern coast of São Paulo, Brazil. *Regional Studies in Marine Science*, 31, 100799.

Branco, J. O., & Fracasso, H. A. A. (2004). Ocorrência e abundância da carcinofauna acompanhante na pesca do camarão sete-barbas, *Xiphopenaeus kroyeri* Heller (Crustacea, Decapoda), na Armação do Itapocoroy, Penha, Santa Catarina, Brasil.

Revista Brasileira de Zoologia, 21(2), 295–301.

Castilho, A. L., *et al.* (2008). Abundance and temporal-spatial distribution of the rock shrimp *Sicyonia dorsalis* Kingsley, 1878 (Decapoda, Penaeoidea) from the northern coast of São Paulo state, Brazil. *Senckenbergiana Maritima*, 38, 75–82.

Castro Filho, B. M., *et al.* (1987). Condições hidrográficas na plataforma continental ao largo de Ubatuba: variações sazonais e em média escala. *Boletim do Instituto Oceanográfico*, 35(2), 135–151.

Conolly, P. C. (1986). Status of the Brazilian shrimp fishing operations and results of related research. *FAO General Contribution*, (3), 1–28.

Costa, R. C., Fransozo, A., Castilho, A. L., & Freire, F. A. M. (2000). Abundance and distribution of the shrimp *Xiphopenaeus kroyeri* (Heller, 1862) (Decapoda, Penaeoidea) in the southwestern Atlantic. *Brazilian Archives of Biology and Technology*, 43(4), 373–381.

Costa, R. C., *et al.* (2016). Carcino-bycatch of the seabob shrimp fishery (*Xiphopenaeus kroyeri*) in Macaé, Rio de Janeiro, Brazilian Southeast. *Boletim do Instituto de Pesca*, 42(3), 611–624.

Eayrs, S. (2007). *Guía para reducir la captura de fauna incidental (bycatch) en las pesquerías por arrastre del camarón tropical*. FAO.

Fracasso, H. A. A., & Branco, J. O. (2005). Estrutura populacional de *Hepatus pudibundus* (Herbst) (Crustacea, Decapoda) na Armação do Itapocoroy,

Penha, Santa Catarina, Brasil. *Revista Brasileira de Zoologia*, 22, 343–348.

Fransozo, A., et al. (2016). Crustáceos decápodes capturados na pesca do camarão-sete-barbas no sublitoral não consolidado do litoral norte do Estado de São Paulo, Brasil. *Boletim do Instituto de Pesca*, 42, 369–386.

Frédou, T., Ferreira, B. P., & Letourneur, Y. (2006). A univariate and multivariate study of reef fish assemblages off northeastern Brazil. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 66(1–2), 315–328.

GBIF. (2023). *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785). Global Biodiversity Information Facility. Acesso em 15 de fevereiro de 2025, de <https://www.gbif.org>

Hines, A. H. (1982). Allometric constraints and variables of reproductive effort in brachyuran crabs. *Marine Biology*, 69, 309–320.

Hippólito, M. F. (2014). *Diversidade e distribuição de siris (Decapoda: Brachyura: Portunidae) e dinâmica populacional de Callinectes ornatus no litoral norte de São Paulo* (Tese de Doutorado). Universidade Estadual Paulista. Acesso em 13 de maio de 2025, de <https://repositorio.unesp.br/entities/publication/bdbddb37-0ee1-4a94-ba52-a3d3dec2bf6f>

Jaconis, S. M. (2023). Primeiros traços da história de vida de *Xiphopenaeus dincao* Carvalho-Batista, Terossi, Zara, Mantelatto, Costa, 2020 e *X. kroyeri* (Heller, 1862) após a identificação do complexo de espécies (Dissertação de

Mestrado). Universidade Estadual Paulista. Acesso em 10 de fevereiro de 2025, de <https://repositorio.unesp.br/entities/publication/be733334-6536-4fd8-91ea-682985cb0a7f>

Jaconis, M. S., et al. (2023). Relative growth and morphological sexual maturity of the crab *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) (Decapoda: Aethridae) in southeast Brazil. *Invertebrate Reproduction and Development*, 67(1–2).

Jivoff, P. (1997). Sexual competition among male blue crab, *Callinectes sapidus*. *Biological Bulletin*, 193(3), 368–380.

Keunecke, K. A. (2007). Growth and mortality of *Hepatus pudibundus* (Crustacea: Calappidae) in south-western Brazil. *Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom*, 87, 885–891.

Klôh, A. dos S., & Di Benedetto, A. P. M. (2010). Estrutura populacional do siri-baú, *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) no Norte do Estado do Rio de Janeiro, Sudeste do Brasil. *Biota Neotropica*, 10(3).

Lima, P. A. O., et al. (2014a). Distribution and population structure of the flecked box crab *Hepatus pudibundus* in the western South Atlantic. *Marine Biology Research*, 10, 589–600.

Lima, P. A. O., et al. (2014b). Reproductive biology of *Hepatus pudibundus* (Crustacea: Brachyura), the most abundant crab on the southeastern Brazilian coast. *Biologia*, 69(2), 219–227.

Mantelatto, F. L. M., & Fransozo, A. (1994). Crescimento relativo e dimorfismo sexual

- em *Hepatus pudibundus* (Decapoda, Brachyura) no litoral norte paulista. *Papéis Avulsos de Zoologia*, 39, 33–48.
- Mantelatto, F. L. M., & Fransozo, A. (1996). Size at sexual maturity in *Callinectes ornatus* (Brachyura, Portunidae) from the Ubatuba region (SP), Brazil. *Nauplius*, 4, 29–38.
- Mantelatto, F. L. M., Fransozo, A., & Negreiros-Fransozo, M. L. (1995a). Distribuição do caranguejo *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) na Enseada da Fortaleza, Ubatuba (SP), Brasil. *Boletim do Instituto Oceanográfico*, 43(1), 51–61.
- Mantelatto, F. L. M., Fransozo, A., & Negreiros-Fransozo, M. L. (1995b). Population structure of *Hepatus pudibundus* (Decapoda: Calappidae) in Fortaleza Bay, Brazil. *Revista de Biologia Tropical*, 43(1–3), 265–270.
- Masunari, S. (2006). Distribuição e abundância dos caranguejos *Uca* Leach (Crustacea, Decapoda, Ocypodidae) na Baía de Guaratuba, Paraná, Brasil. *Revista Brasileira de Zoologia*, 23(4), 901–914.
- Melo, G. A. S. (1996). *Manual de identificação dos Brachyura do litoral brasileiro*. Plêiade.
- Miazaki, L. F. (2018). Population dynamics of the crab *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) on the southern coast of São Paulo state, Brazil. *Journal of the Marine Biological Association of the United Kingdom*, 1–12.
- Ng, P. K. L., et al. (2008). Systema Brachyurorum: Part I. An annotated checklist of extant brachyuran crabs of the world. *Raffles Bulletin of Zoology*, 17, 1–286.
- Pereira-Barros, J. B. (1981). Sobre a ocorrência de siris do gênero *Callinectes* em Alagoas. *Boletim do Núcleo de Estudos de Ciências do Mar*, 5, 14–17.
- Perroca, J. F., et al. (2022). Variations in pink-shrimps *Farfantepenaeus brasiliensis* and *F. paulensis* juvenile abundance: clarifying ecological patterns and providing subsidies to management in shallow marine ecosystems. *Fisheries Research*, 256, 106482.
- Reigada, A. L. D., & Negreiros-Fransozo, M. L. (2000). Reproductive cycle of *Hepatus pudibundus* (Herbst, 1785) (Crustacea, Decapoda, Calappidae) in Ubatuba, SP, Brazil. *Revista Brasileira de Biologia*, 60(3), 483–491.
- Ribeiro da Silva, A., et al. (2017). Temporal and bathymetric distribution of juveniles and adults of the speckled swimming crab *Arenaeus cribrarius* from coastal waters of southern Brazil. *Biologia*, 72, 325–332.
- Sardá, F. O., et al. (2013). Population biology of the box crab *Hepatus pudibundus* (Crustacea: Aethridae) off the coast of Santa Catarina State Southern Brazil. *Pan-American Journal of Aquatic Sciences*, 8(2), 126–138.
- Reis Neto, R. V., Pinheiro, M. A. A., & Silva, M. H. L. (2012). Accumulation of six metals in the mangrove crab *Ucides cordatus* (Crustacea: Decapoda: Ocypodidae) and in the red mangrove *Rhizophora mangle* (Angiospermae: Rhizophoraceae) from Cubatão, southeastern Brazil.

Ecotoxicology and Environmental Safety, 79, 134–141.

Severino-Rodrigues, E., *et al.* (2002). Crustaceans bycatch of the fishery directed to sea-bob-shrimp (*Xiphopenaeus kroyeri*) landing in the Perequê beach, São Paulo State, Brazil. *Boletim do Instituto de Pesca*, 28(1), 33–48.

Teles, J. N., *et al.* (2021). A 20-year gap evaluation of the population biology of the crab *Hepatus pudibundus* in an area overexploited by fisheries. *Biologia*, 76(1).

Wolfe, J. M., *et al.* (2024). Convergent adaptation of true crabs (Decapoda: Brachyura) to a gradient of terrestrial environments. *Systematic Biology*, 73(2), 000–000.

Zar, J. H. (1999). *Biostatistical Analysis* (4th ed.). Prentice Hall.



Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO



UNIVERSIDAD
NACIONAL ✦
DE TUCUMÁN



