

Inria



Modélisation multiphysique des échanges d'ions et d'eau dans les cellules de plante

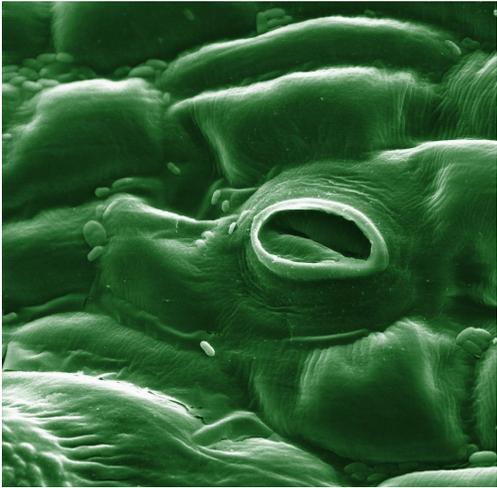
Alexis De Angeli, Christophe Godin, Guillaume Mestdagh



Reproduction et développement des plantes
ENS de Lyon
46 allée d'Italie
69007 Lyon FRANCE

Courriel: guillaume.mestdagh@inria.fr

Motivation initiale : les stomates



Stomate
(image : Photohound)

Les stomates

- Petits trous sur les feuilles des plantes
- Contrôlent les échanges de CO_2 et d'eau avec l'atmosphère



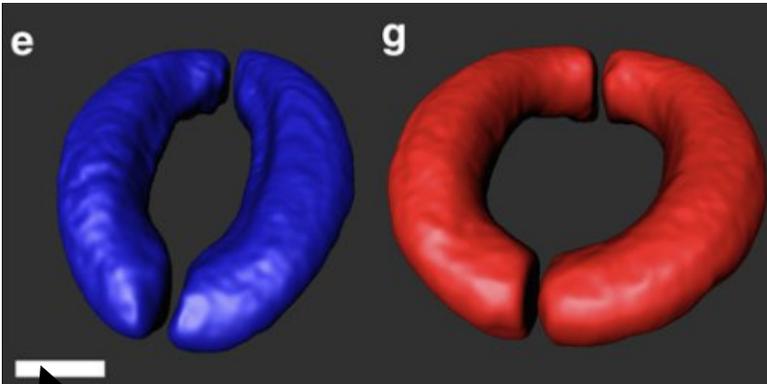
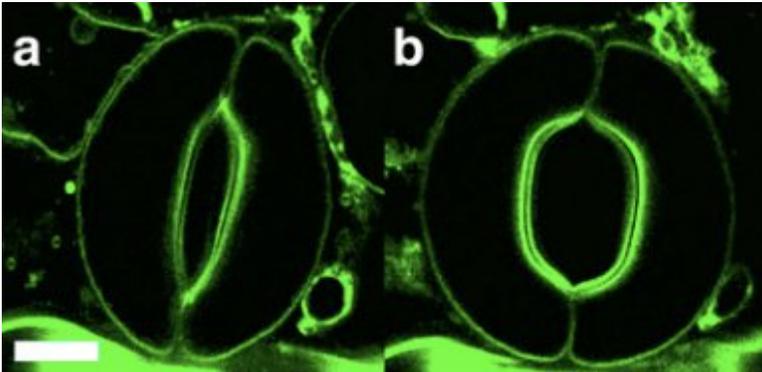
Cellules de garde
(image : Alex Costa)

Pourquoi s'y intéresser ?

- Agriculture : variétés résistantes à la sécheresse
- Villes : humidification de l'air par les plantes

Mécanisme d'ouverture du stomate

Stomate fermé, stomate ouvert
(Meckel et al, 2007)



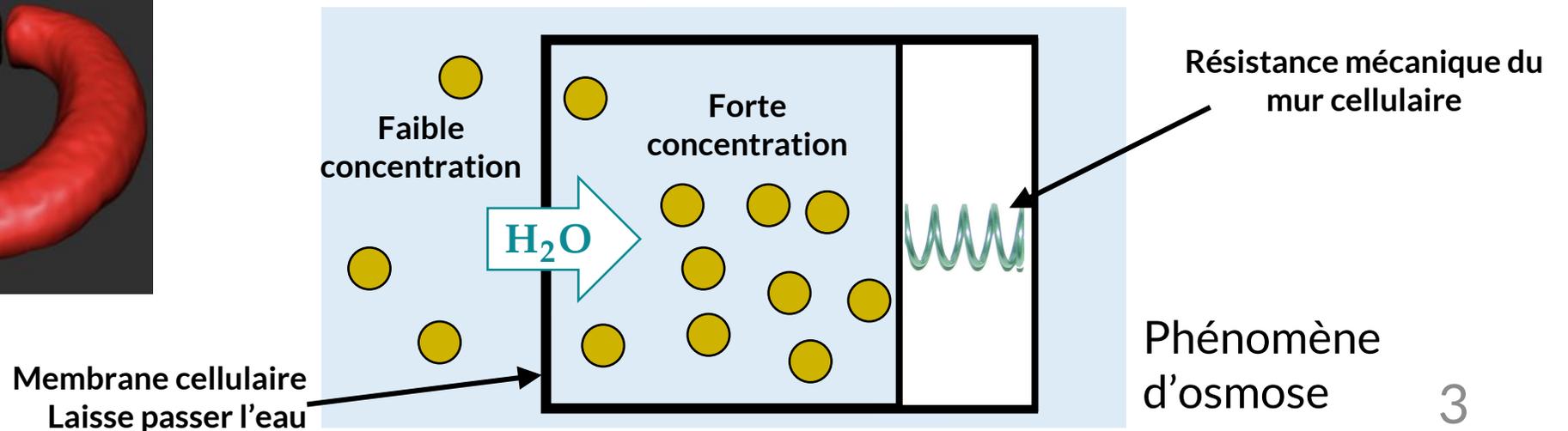
10 μm

Ouverture contrôlée par deux cellules de garde

- Cellules de garde **gonflées** = stomate **ouvert**
- Cellules de garde **dégonflées** = stomate **fermé**

Phénomène d'osmose

- Forces chimiques vs forces mécaniques



Introduction

Modèles existants

Modèles cherchant à approcher des données

- Dépendant du temps (équations différentielles ordinaires)
- Tous les ions, tous les transporteurs : beaucoup de paramètres
- Couplage électrochimie/mécanique négligé

Notre approche : Modèle minimal qui relie les différents effets physiques

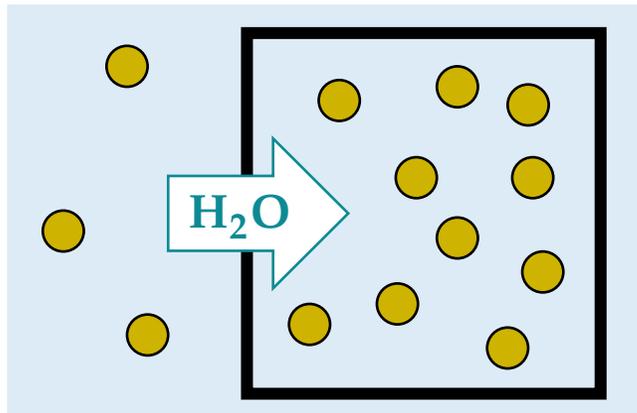
Introduction
Sommaire

- 1. Osmose et fonction d'énergie**
- 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie**
- 3. Analyse de sensibilité**

Un système multiphysique

Forces chimiques

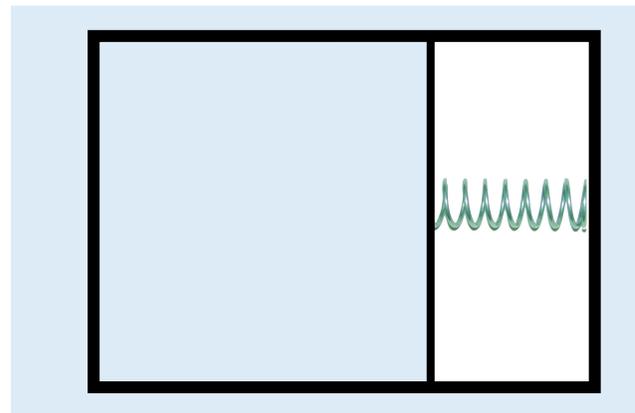
- Visent à équilibrer les concentrations en ions



Phénomène d'osmose

Forces élastiques

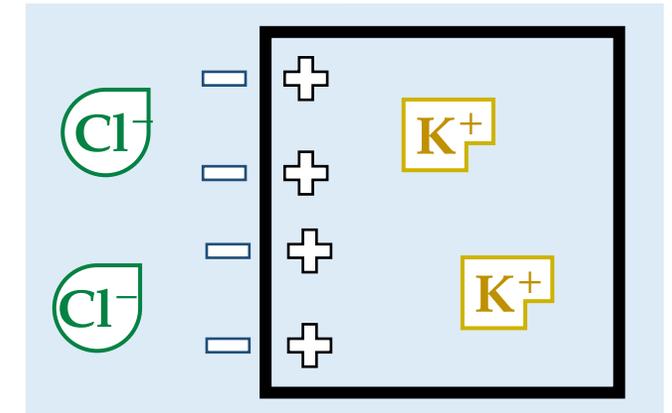
- S'opposent à l'accroissement du volume



Raideur des murs cellulaires

Forces électrostatiques

- Visent à équilibrer les charges



Membrane = condensateur

1. Osmose et fonction d'énergie

Approche basée sur l'énergie

Énergie totale à minimiser

\mathbf{n} : état du système

$$G(\mathbf{n}) = \text{Énergie chimique} + \text{Énergie élastique} + \text{Énergie électrostatique}$$

$$\sum_R n_R \underbrace{\mu_R(\mathbf{n})}_{\text{Potentiels chimiques}}$$

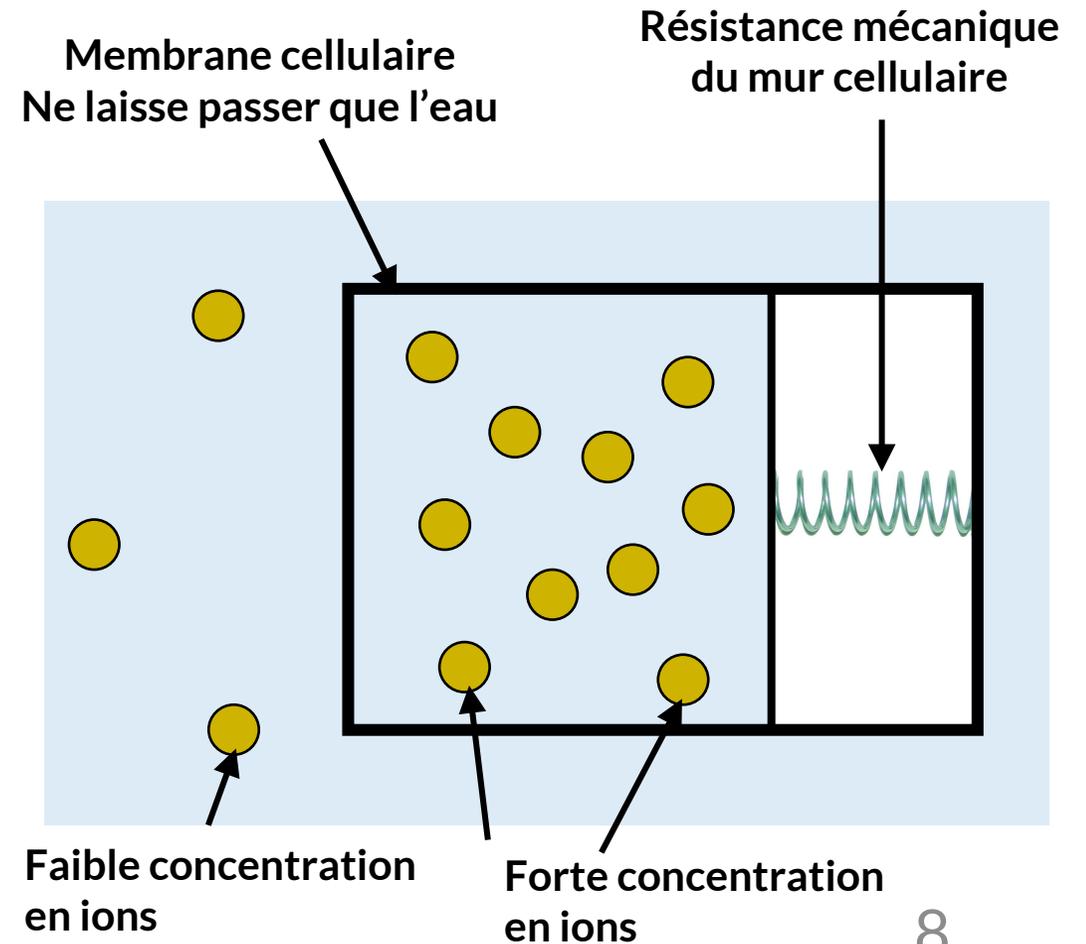
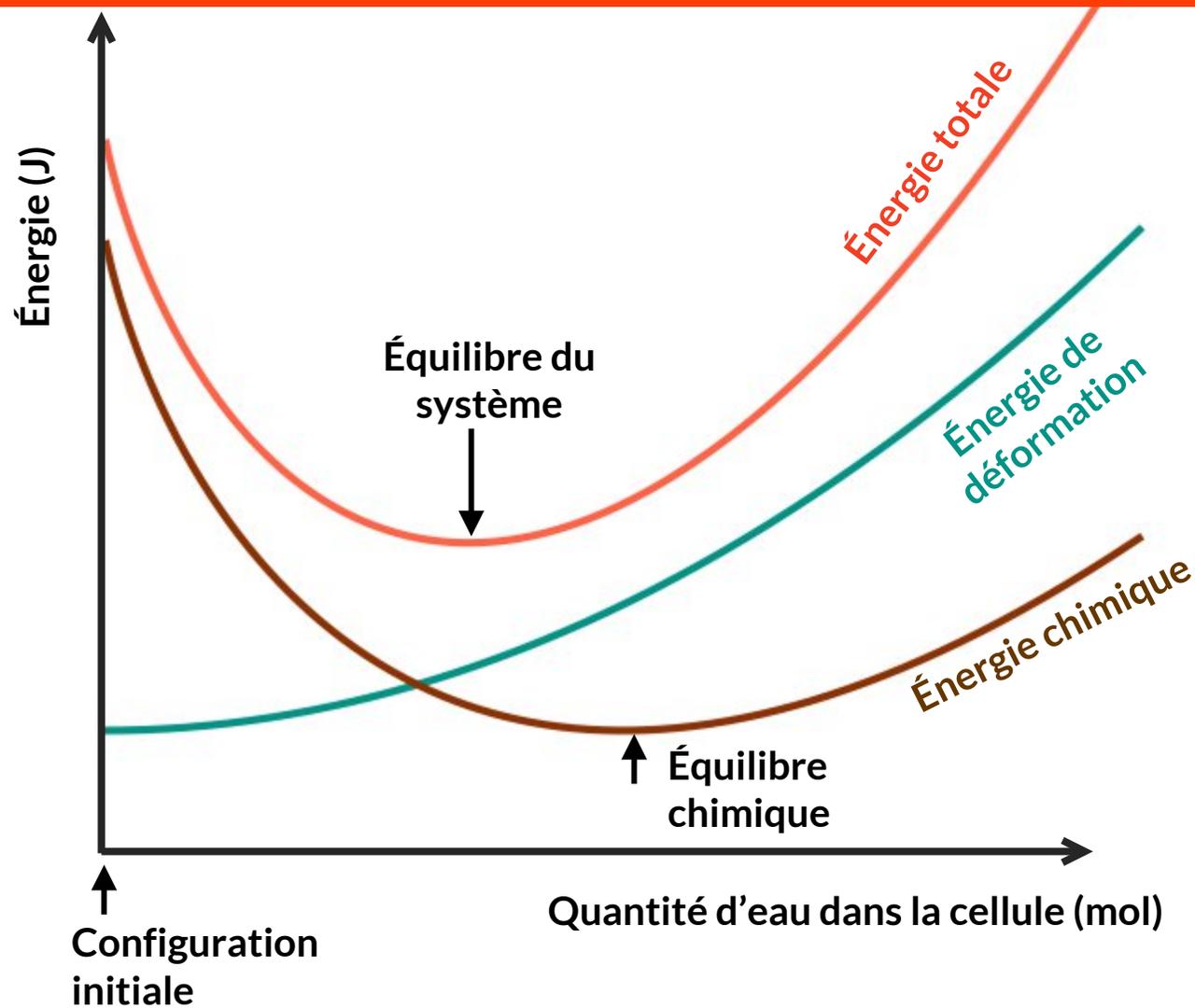
$$W(\underbrace{n_{\text{H}_2\text{O}}}_{\text{Quantité d'eau dans la cellule}})$$

$$\frac{1}{2} \underbrace{\frac{Q(\mathbf{n})^2}{C(\mathbf{n})}}_{\text{Énergie stockée dans un condensateur}}$$

- Monnaie commune entre toutes les forces

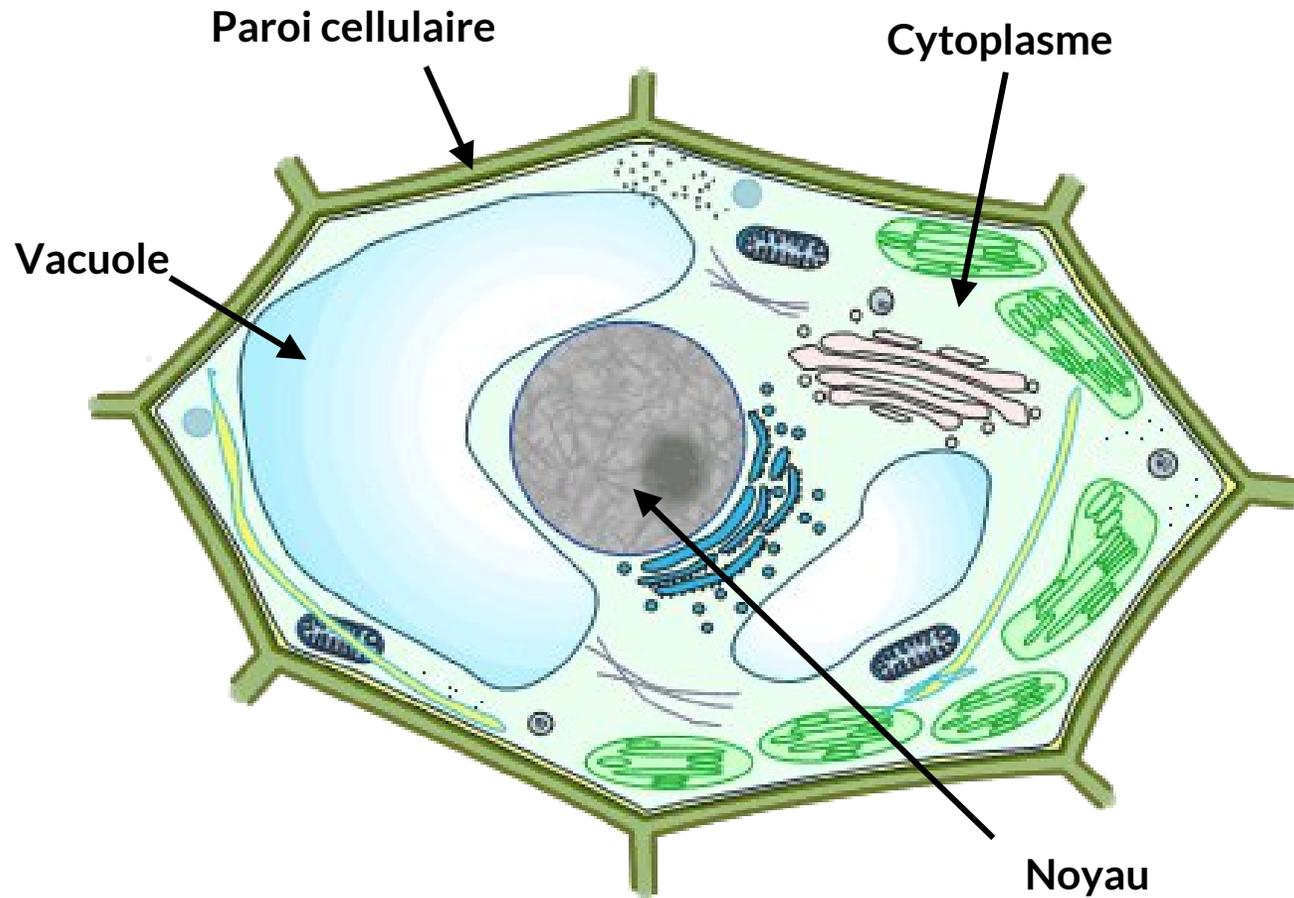
1. Osmose et fonction d'énergie

Approche basée sur l'énergie



2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Modèle simplifié de cellule

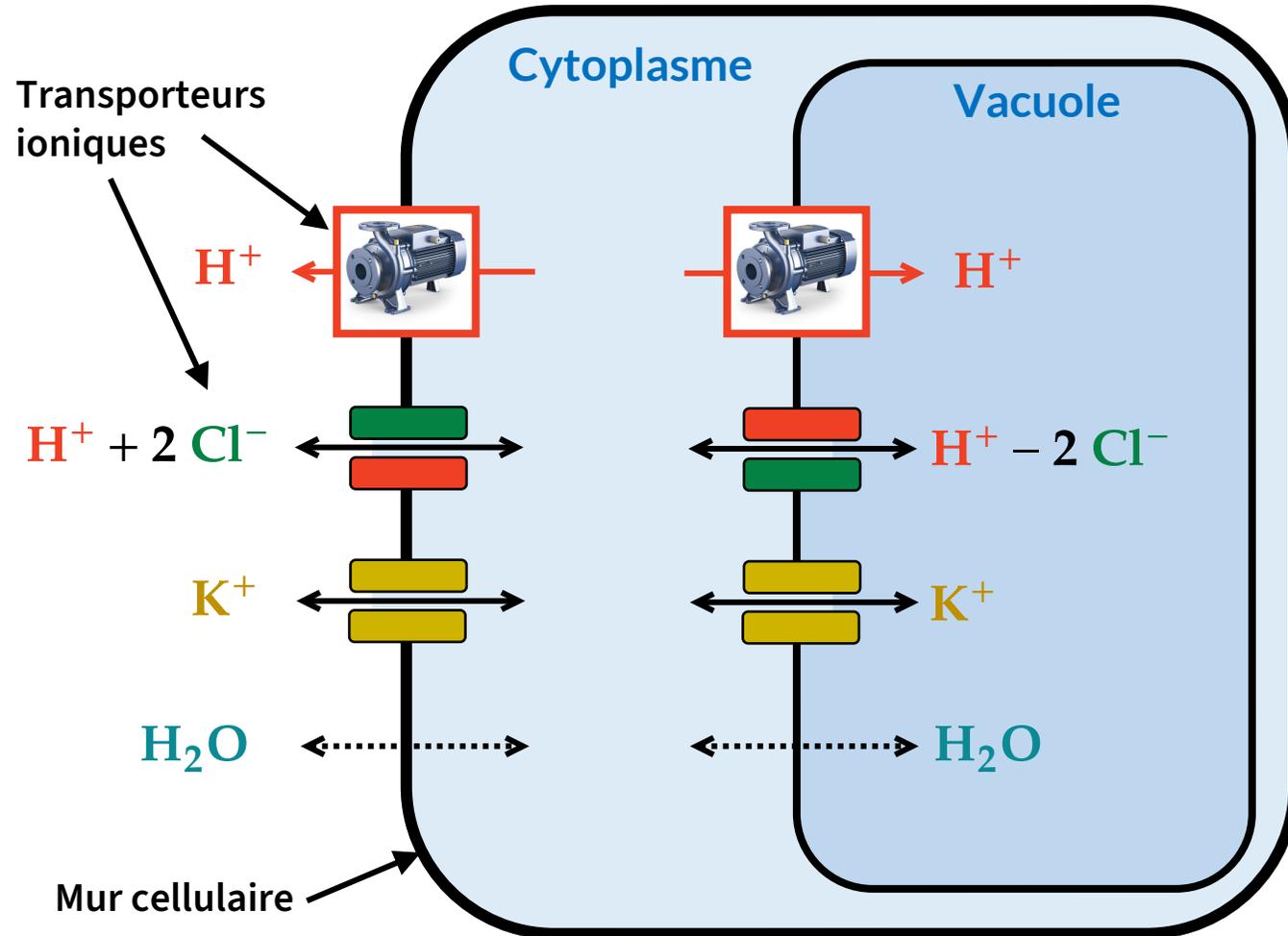


Une cellule de plante (image : unamur.be)

- Compartiments emboîtés
- Entourés d'un mur cellulaire
- Contiennent des ions et de l'eau

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Modèle à deux compartiments



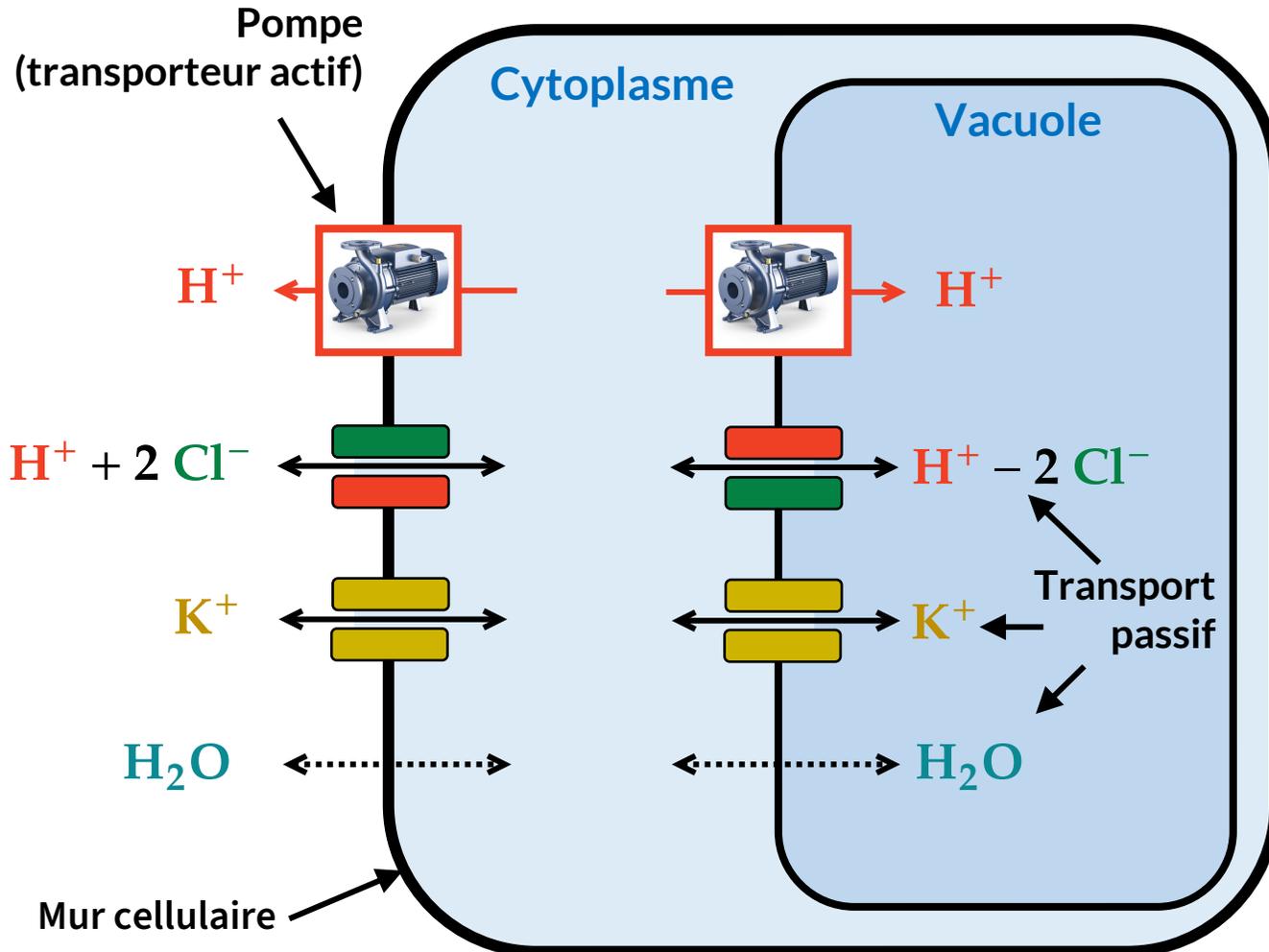
- Compartiments emboîtés
- Entourés d'un mur cellulaire
- Contiennent des ions et de l'eau

Espace d'états du système

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_{c,H^+} & n_{c,Cl^-} & n_{c,K^+} & n_{c,H_2O} \\ n_{v,H^+} & n_{v,Cl^-} & n_{v,K^+} & n_{v,H_2O} \end{pmatrix}$$

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Modèle à deux compartiments



Espace d'états du système

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_{c,H^+} & n_{c,Cl^-} & n_{c,K^+} & n_{c,H_2O} \\ n_{v,H^+} & n_{v,Cl^-} & n_{v,K^+} & n_{v,H_2O} \end{pmatrix}$$

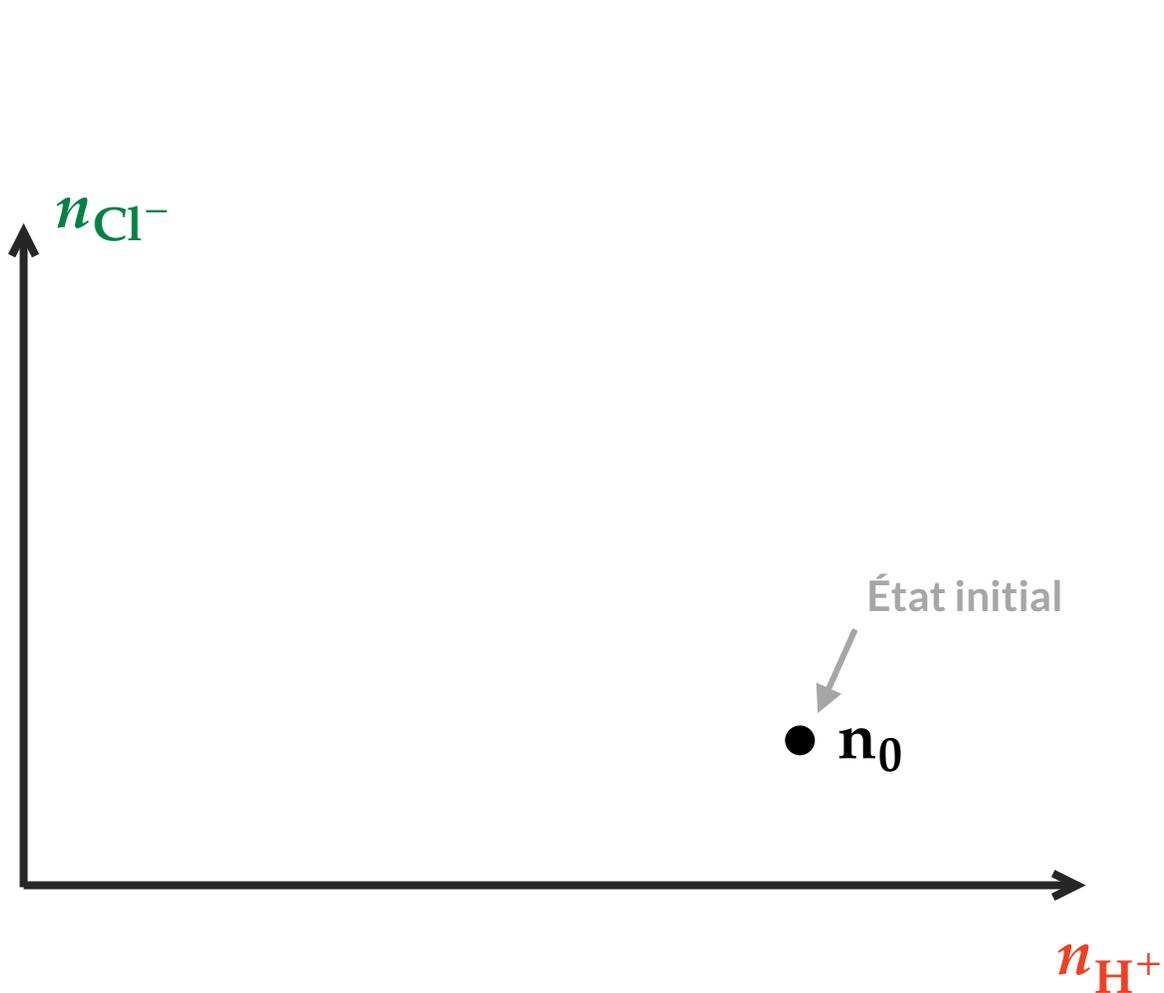
Transporteurs

Permettent la circulation des réactifs

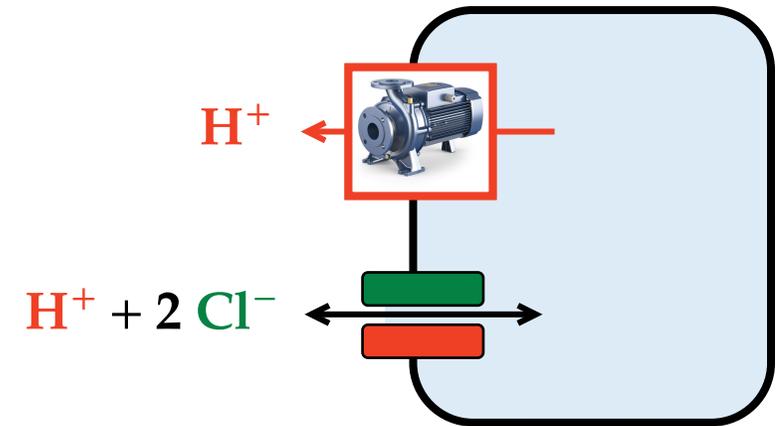
- Actifs (controlés)
- Passifs (laissent passer les réactifs)

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Membranes et transporteurs



Vue de l'espace d'états



Modèle-jouet

- Deux transporteurs
- Deux espèces chimiques

Espace d'états du système

$$\mathbf{n} = (n_{\text{H}^+}, n_{\text{Cl}^-})$$

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

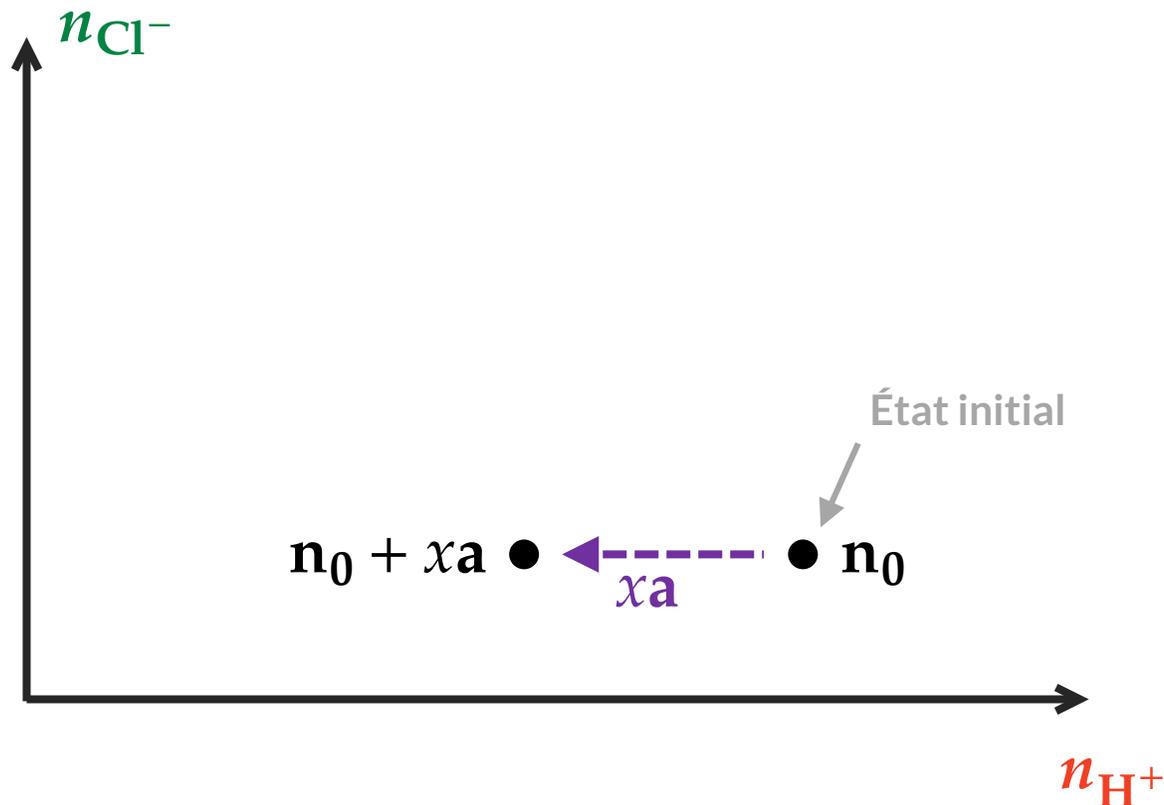
Membranes et transporteurs

Transporteur actif (la pompe)

- Pousse le système dans une direction donnée



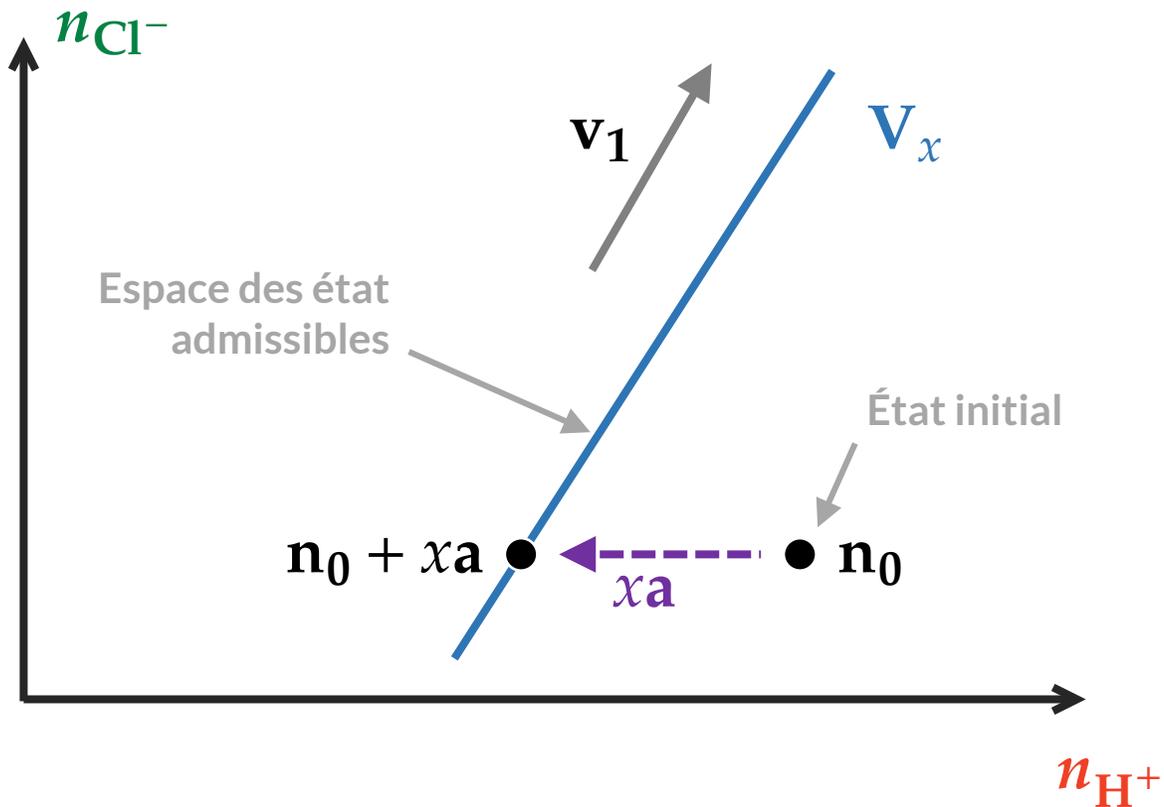
- **Contrôlé**
Avancement de la pompe: x



Vue de l'espace d'états

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Membranes et transporteurs



Vue de l'espace d'états

Transporteurs passifs (membrane, canaux)

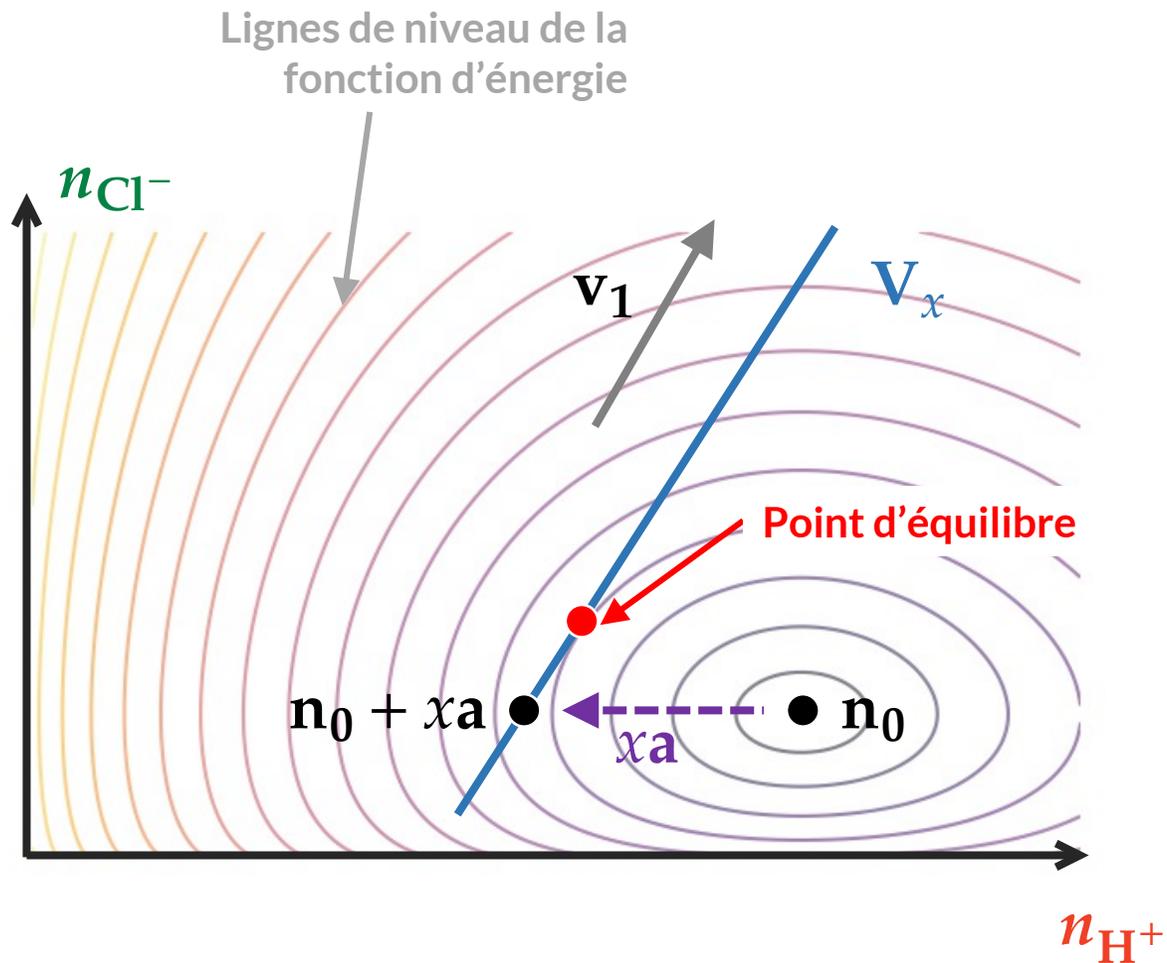
- Laissent le système se déplacer dans certaines directions



- Non contrôlé
Le système trouve un état d'équilibre

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Minimisation de l'énergie



Vue de l'espace d'états

Fonction d'énergie G

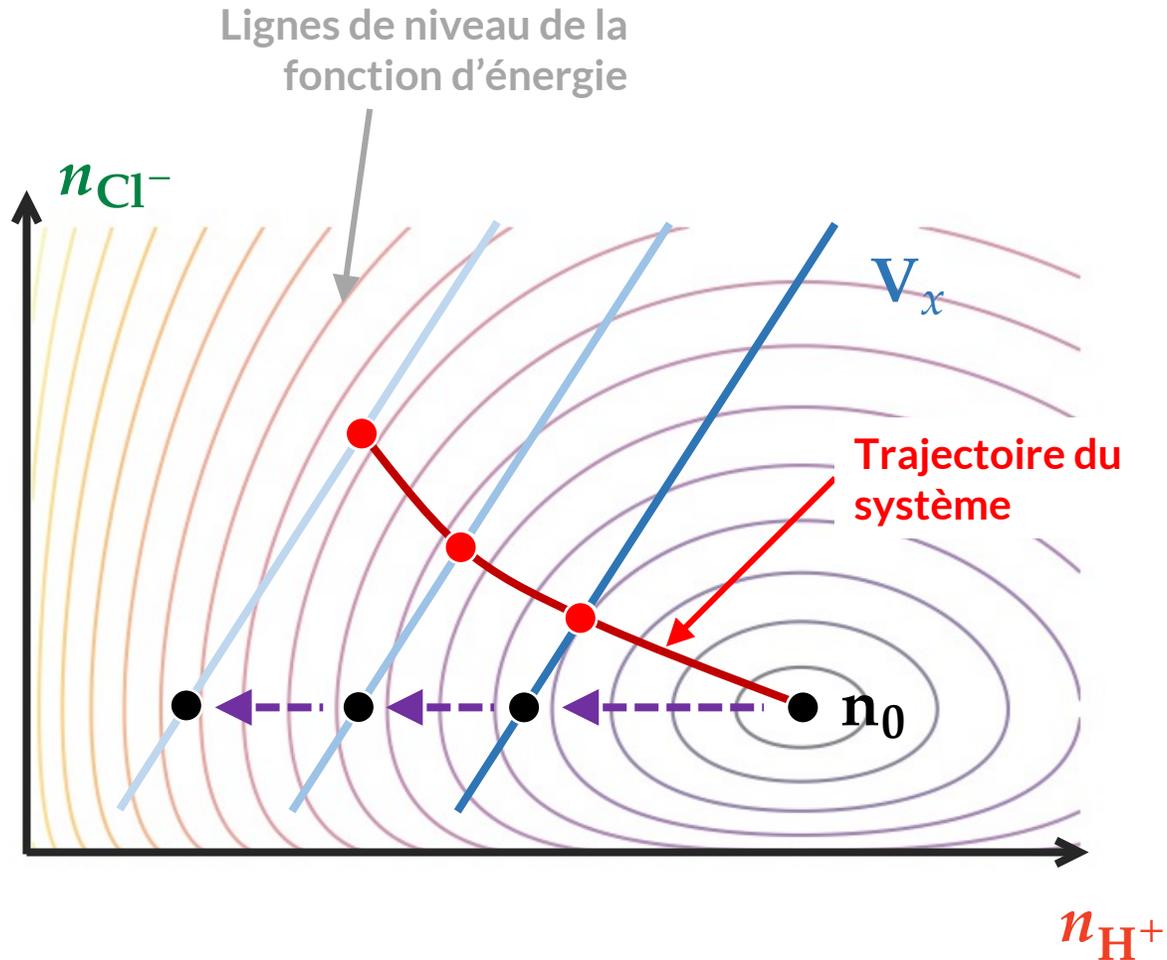
- Détermine l'équilibre du système

Problème de minimisation

Minimiser $G(\mathbf{n})$
sous la contrainte $\mathbf{n} \in V_x$

2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Minimisation de l'énergie



Vue de l'espace d'états

Fonction d'énergie G

- Détermine l'état d'équilibre

Problème de minimisation

Minimiser $G(\mathbf{n})$

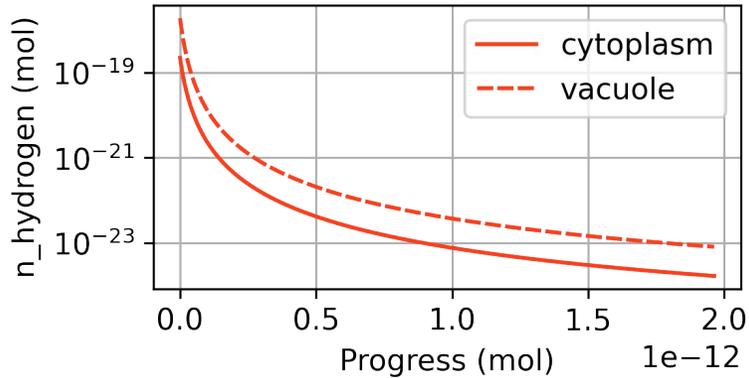
sous la contrainte $\mathbf{n} \in \mathbf{V}_x$

- Évolution quasi-statique pilotée par les transporteurs actifs

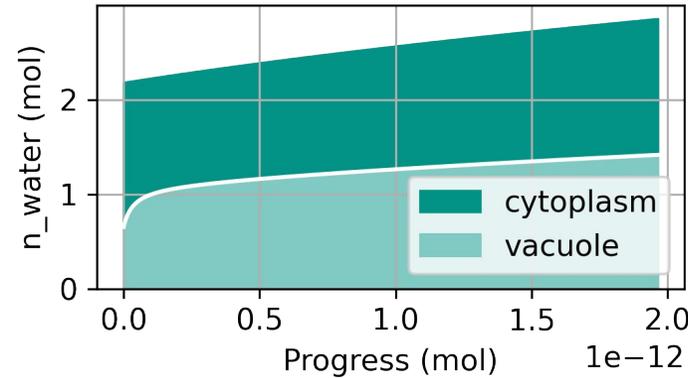
2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

Exemple de simulation

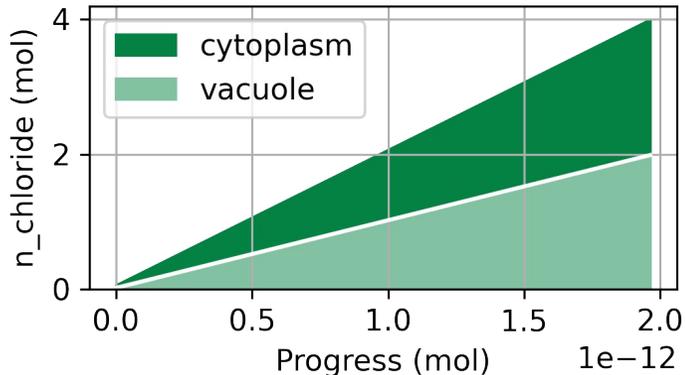
(a) Amount of hydrogen



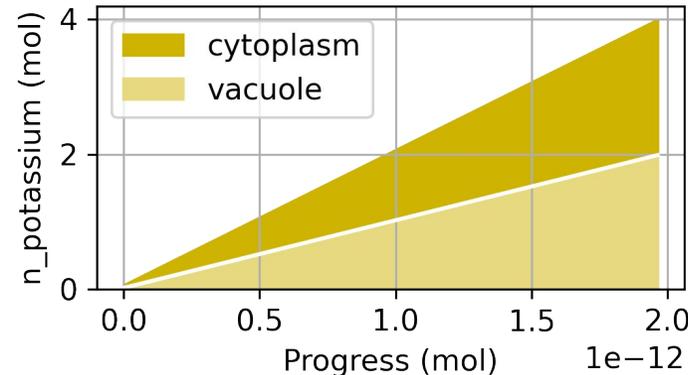
(b) Cumulated amounts of water
 $1e-10$



(c) Cumulated amounts of chloride
 $1e-12$



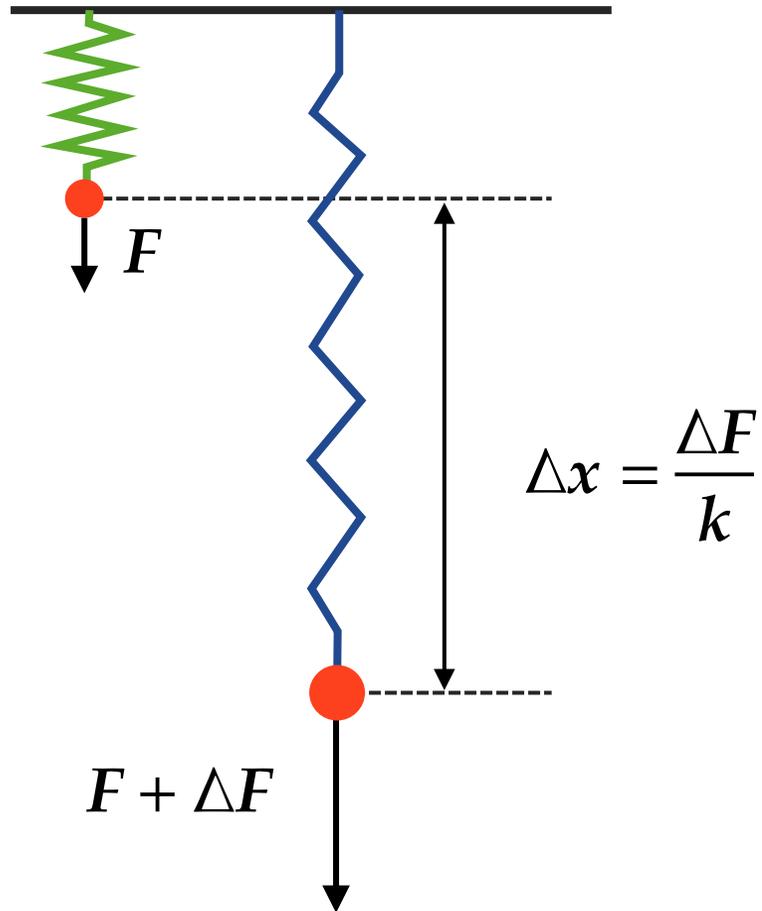
(d) Cumulated amounts of potassium
 $1e-12$



- **Débits des pompes constants**
Membrane externe : 100%
Membrane interne : 50%
- La cellule se remplit d'ions, puis d'eau
- Amplitudes de variation différentes selon les quantités

3. Analyse de sensibilité

Dérivées secondes de l'énergie



Comment expliquer l'amplitude de chaque variable ?

- **Information de sensibilité**

Hessienne de la fonction d'énergie

- **Pour un ressort** $E(x) = \frac{1}{2}kx^2$

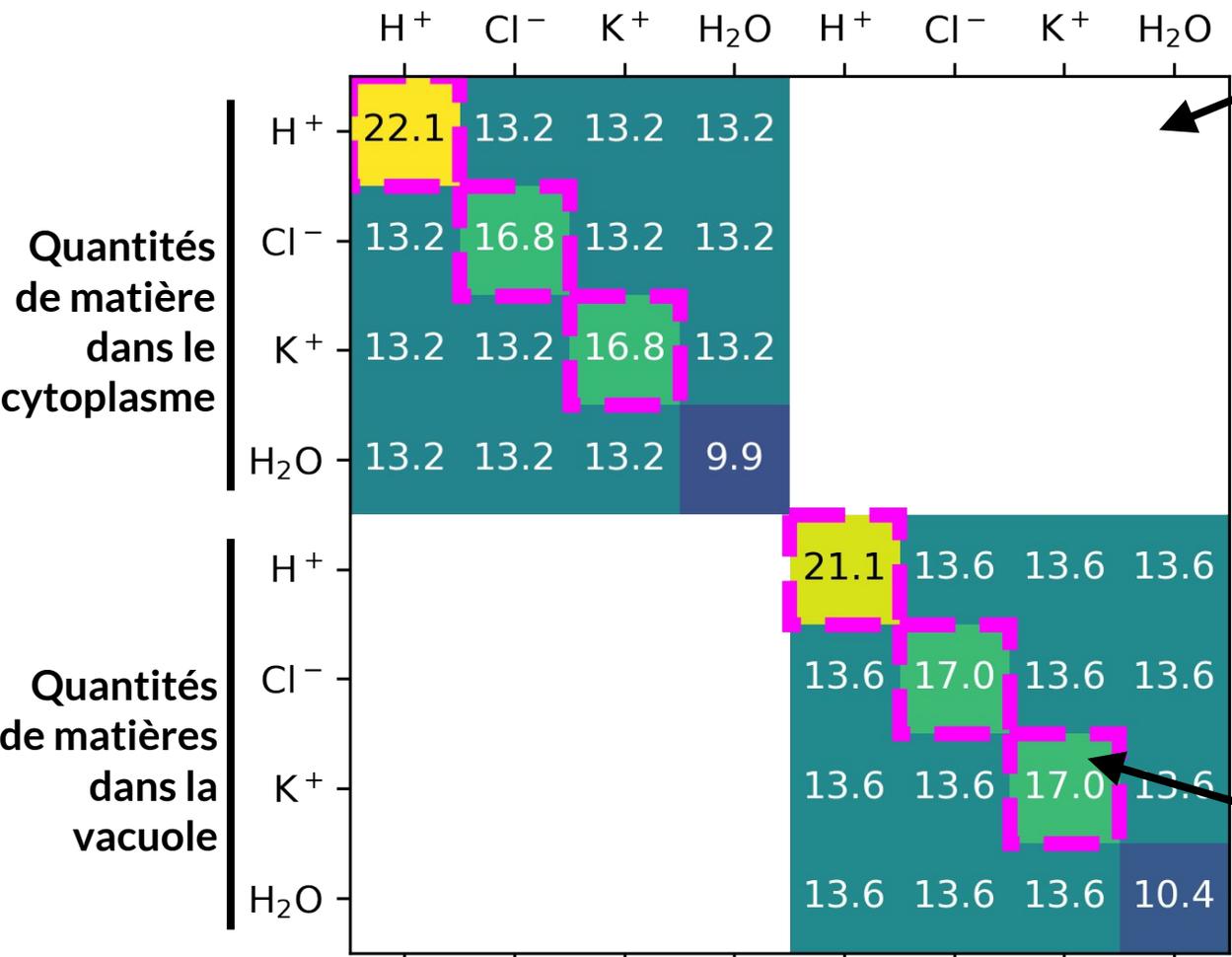
Dérivée seconde de l'énergie = raideur

Quelle force influence quelle variable ?

3. Analyse de sensibilité

"Raideurs" pour l'énergie chimique

(a) Chemical Hessian matrix



Coefficients nuls

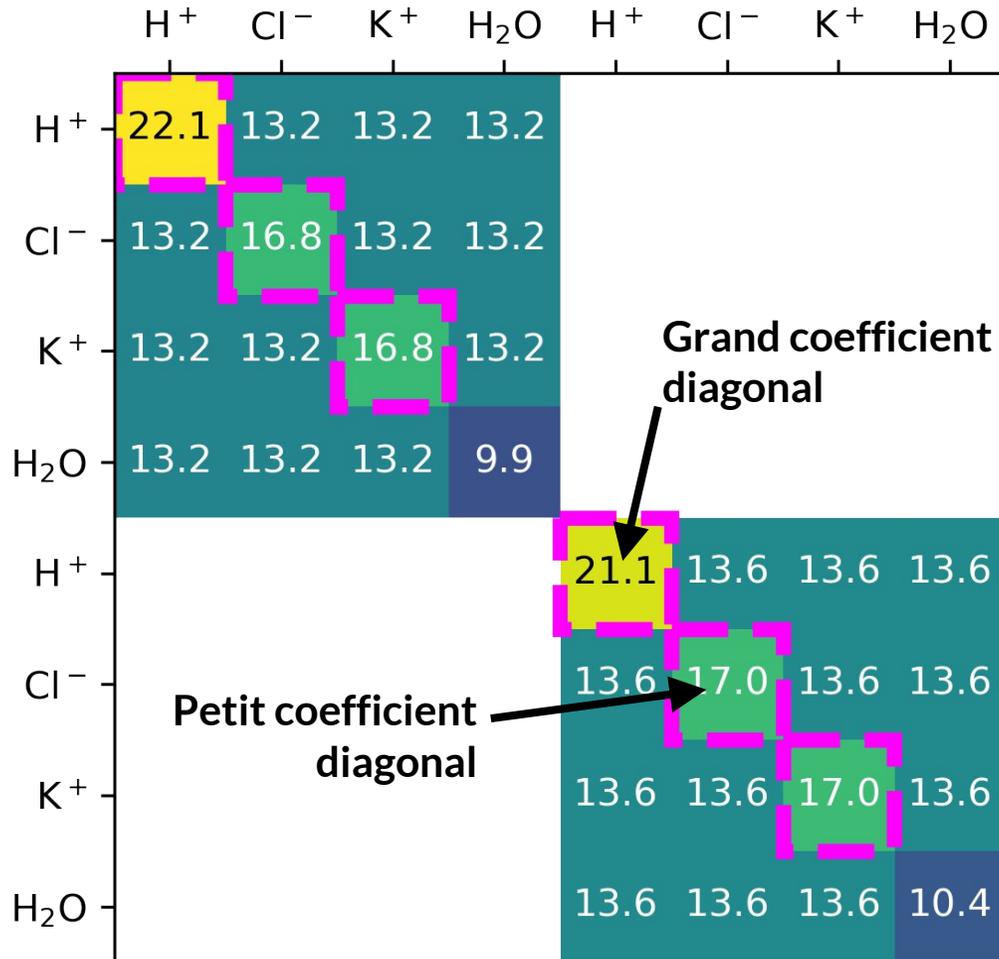
- Matrice hessienne de l'énergie chimique
- Coefficients diagonaux forts pour les espèces ioniques
- "Raideur" inversement proportionnelles aux quantités de matière

Coefficients en échelle logarithmique
17 représente 10^{17}

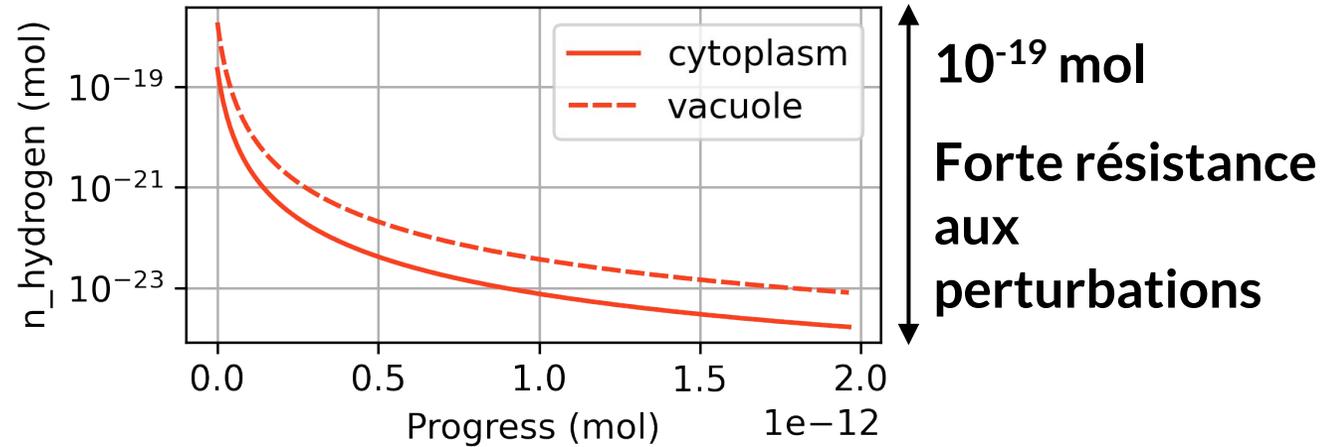
3. Analyse de sensibilité

"Raideurs" pour l'énergie chimique

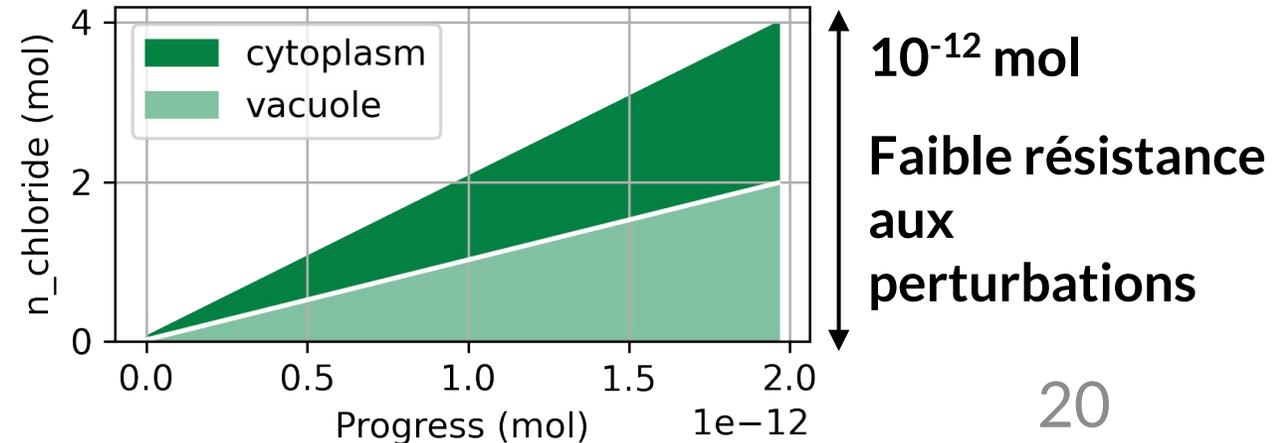
(a) Chemical Hessian matrix



(a) Amount of hydrogen



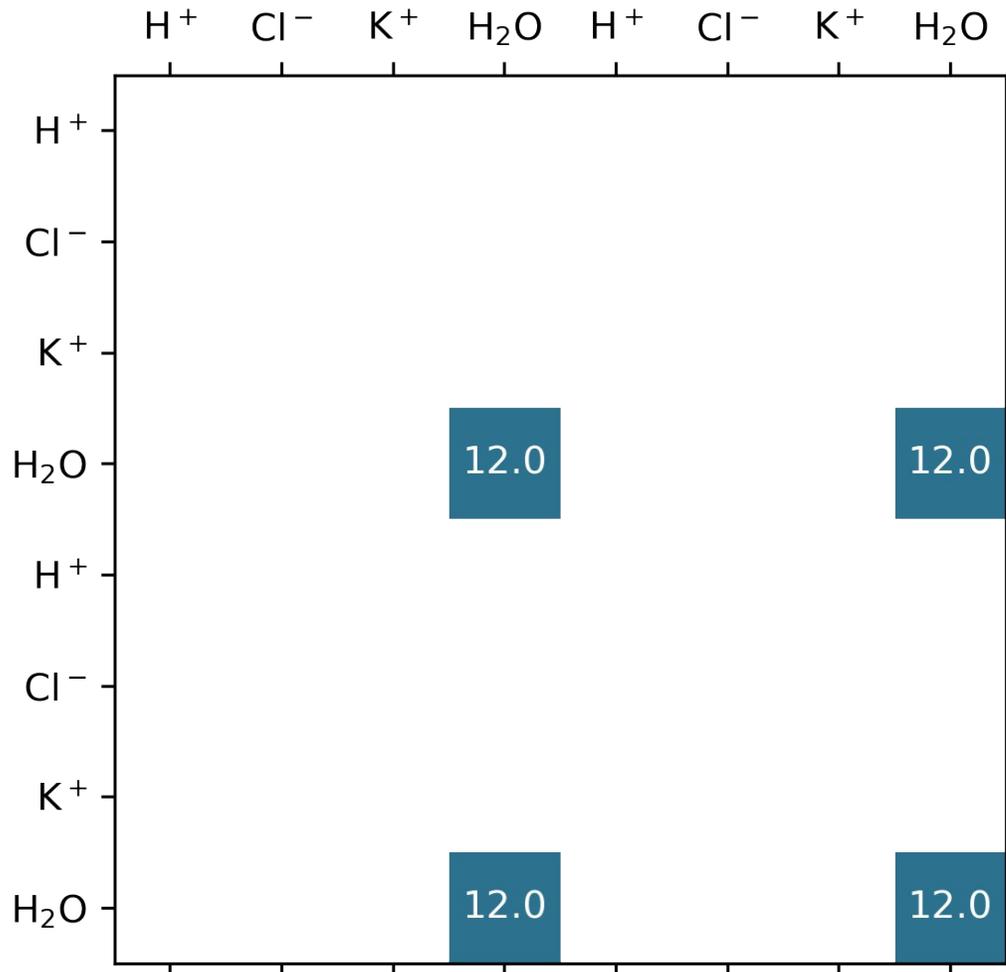
(c) Cumulated amounts of chloride



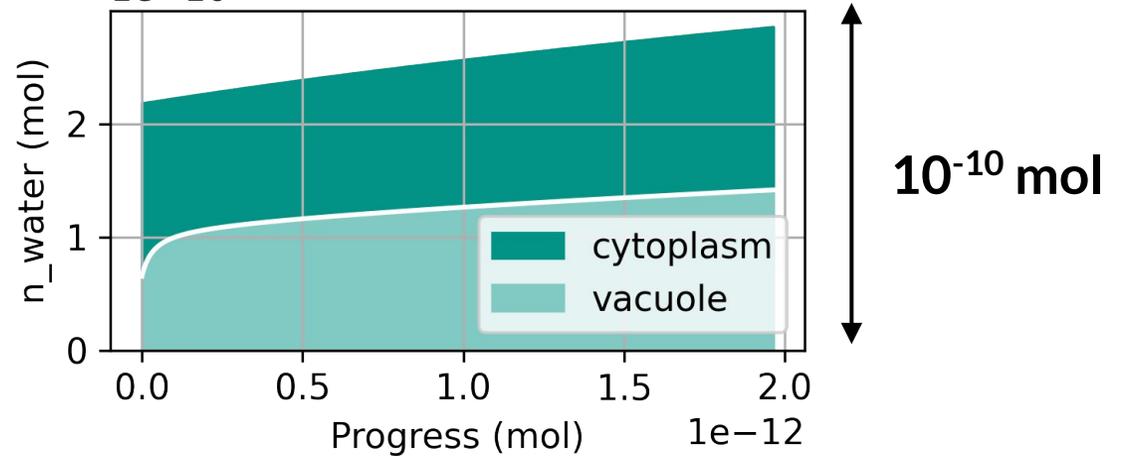
3. Analyse de sensibilité

"Raideurs" pour l'énergie mécanique

(c) Elastic Hessian matrix



(b) Cumulated amounts of water
1e-10



- Forces mécaniques: principale source de résistance à l'entrée d'eau
- Changement de volume entièrement déterminé par le coefficient élastique

3. Analyse de sensibilité

Énergie électrostatique et excès de charges

(b) Electrostatic Hessian matrix

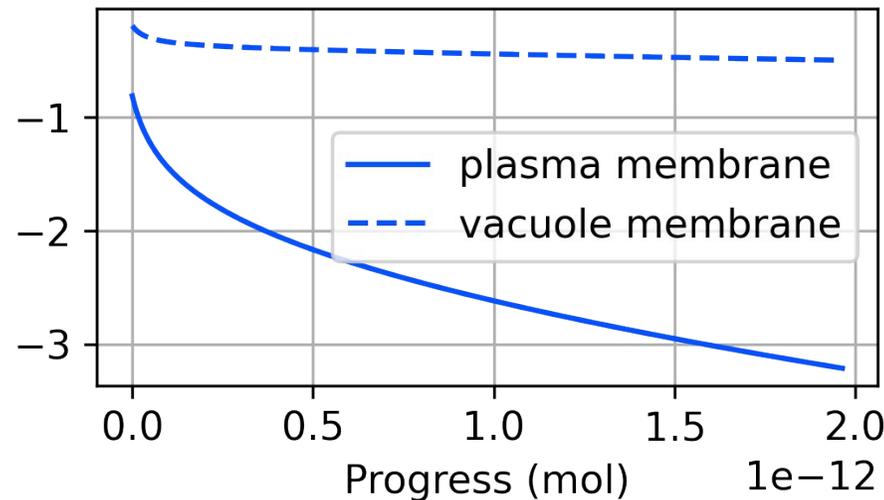
| | H ⁺ | Cl ⁻ | K ⁺ | H ₂ O | H ⁺ | Cl ⁻ | K ⁺ | H ₂ O |
|------------------|----------------|-----------------|----------------|------------------|----------------|-----------------|----------------|------------------|
| H ⁺ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 |
| Cl ⁻ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 |
| K ⁺ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 |
| H ₂ O | 13.3 | 13.3 | 13.3 | 5.9 | 13.3 | 13.3 | 13.3 | 5.9 |
| H ⁺ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 21.4 | 21.4 | 21.4 | 13.6 |
| Cl ⁻ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 21.4 | 21.4 | 21.4 | 13.6 |
| K ⁺ | 20.8 | 20.8 | 20.8 | 13.3 | 21.4 | 21.4 | 21.4 | 13.6 |
| H ₂ O | 13.3 | 13.3 | 13.3 | 5.9 | 13.6 | 13.6 | 13.6 | 6.4 |

Coefficients de la matrice hessienne

Niveau intermédiaire entre l'hydrogène (22) et le chlore (17)

Amount of charges (mol)

1e⁻¹⁷(h) Charge imbalance



10⁻¹⁷ mol

Résistance intermédiaire aux perturbations

- **Excès/déficit de charges (in mol)**
Quantité de charges stockées dans le condensateur

3. Analyse de sensibilité

Hiérarchie entre les énergies

- Résistance aux perturbations variable selon les espèces

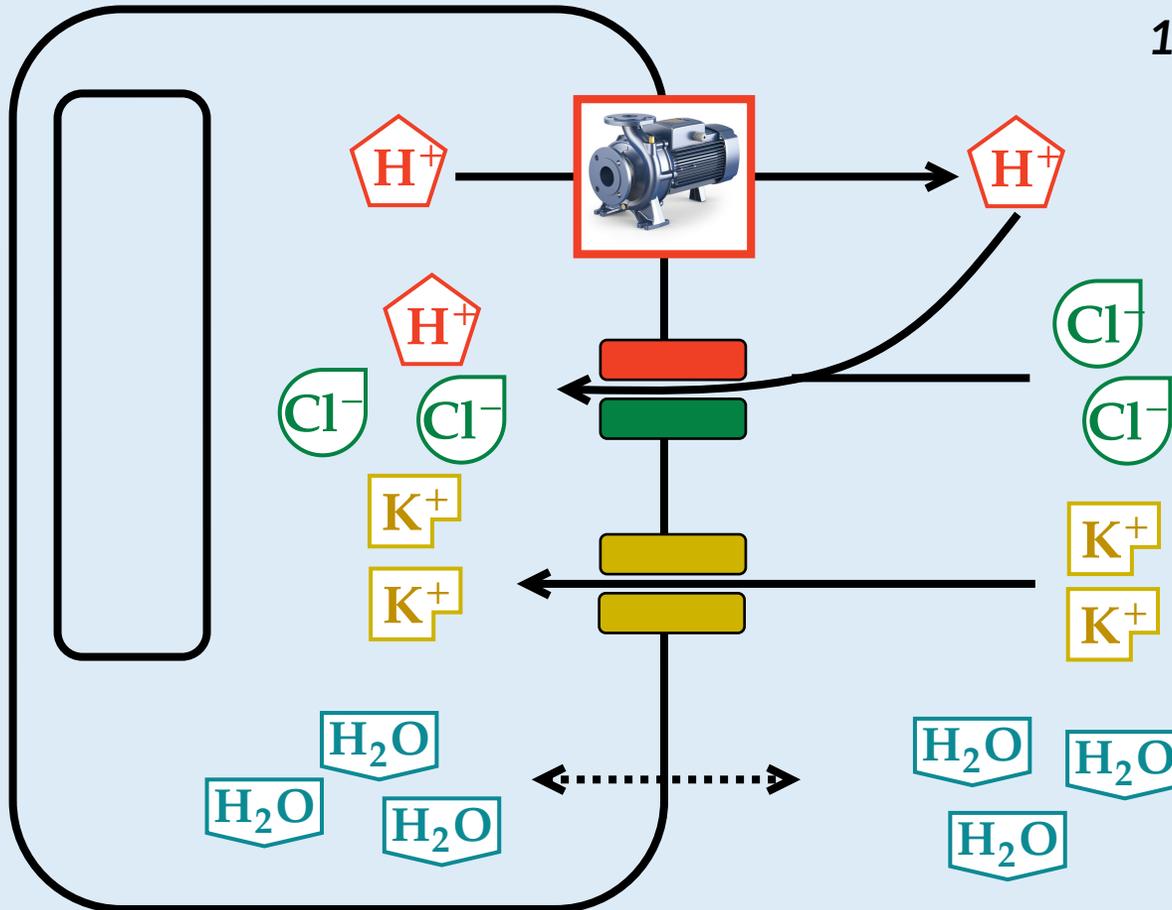
| Espèce | Coefficient | Variations |
|-----------|-------------|----------------|
| Hydrogène | 10^{22} | 10^{-19} mol |
| Charges | 10^{21} | 10^{-17} mol |
| Chlore | 10^{17} | 10^{-12} mol |
| Potassium | 10^{17} | 10^{-12} mol |
| Eau | 10^{12} | 10^{-10} mol |

Conclusion

Hiérarchie entre les forces qui influencent le système

3. Analyse de sensibilité

Hiérarchie entre les énergies



1. Hydrogène éjecté

Déséquilibre de l'hydrogène

Déséquilibre des charges

2. Entrée d'hydrogène et de chlore

Équilibre d'hydrogène rétabli

Déséquilibre de charge inchangé/augmenté

Déséquilibre du chlore

3. Entrée de potassium

Équilibre des charges rétabli

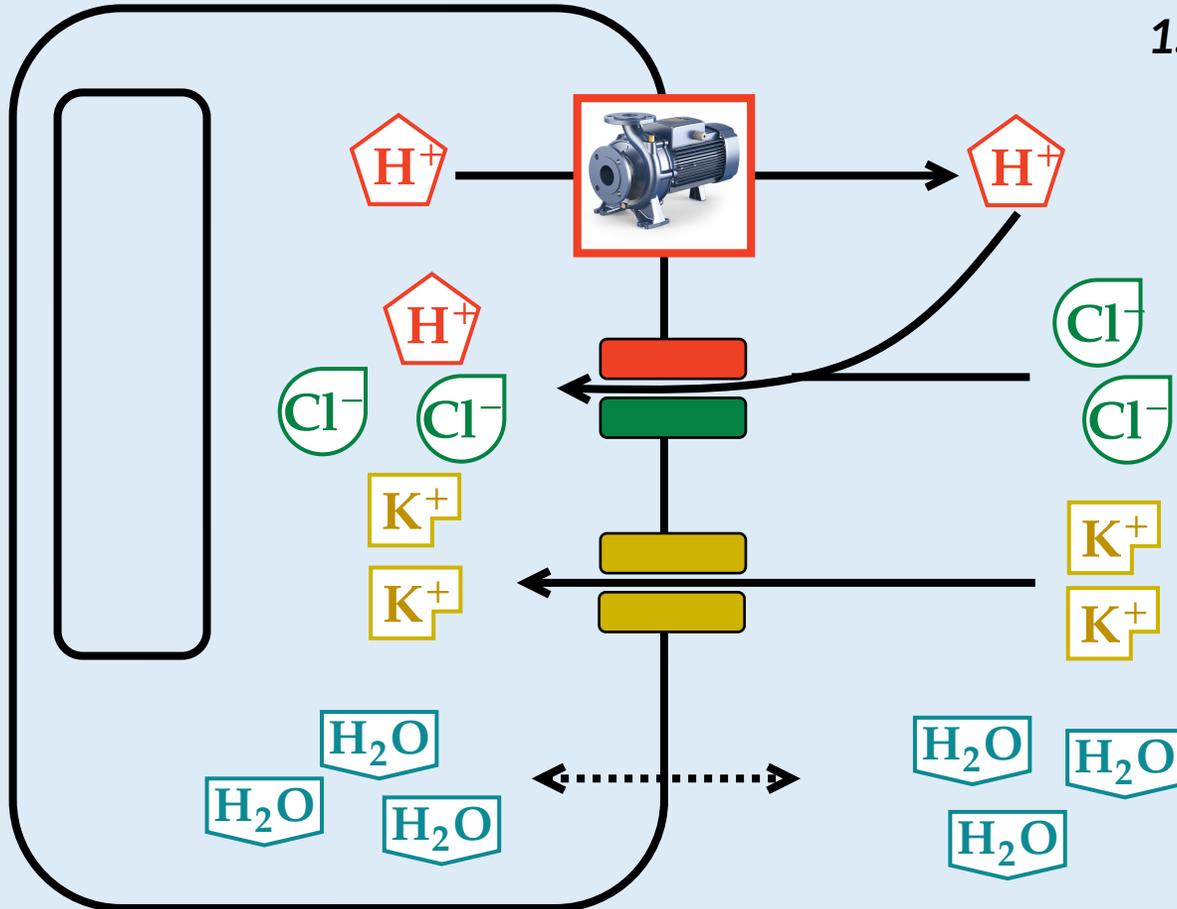
Déséquilibre du potassium

4. Entrée d'eau (augmentation du volume)

Compromis forces chimiques vs élastiques

3. Analyse de sensibilité

Hiérarchie entre les énergies



Conclusion

- **Modèle basé sur l'énergie : pratique quand il y a plusieurs types de forces**
- **Hiérarchie entre les différentes forces impliquées dans l'ouverture du stomate**
- **Informations de sensibilité indépendantes des transporteurs**

Travail en cours

- **Modèles similaires pour des tissus multicellulaires**

Merci pour votre attention !

Inria



Modélisation multiphysique des échanges d'ions et d'eau dans les cellules de plante

Alexis De Angeli, Christophe Godin, Guillaume Mestdagh



Reproduction et développement des plantes
ENS de Lyon
46 allée d'Italie
69007 Lyon FRANCE

Courriel: guillaume.mestdagh@inria.fr