

*Inria*



# **Modèle quasi-statique pour simuler les échanges ioniques dans les cellules de garde**

**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](mailto:guillaume.mestdagh@inria.fr)

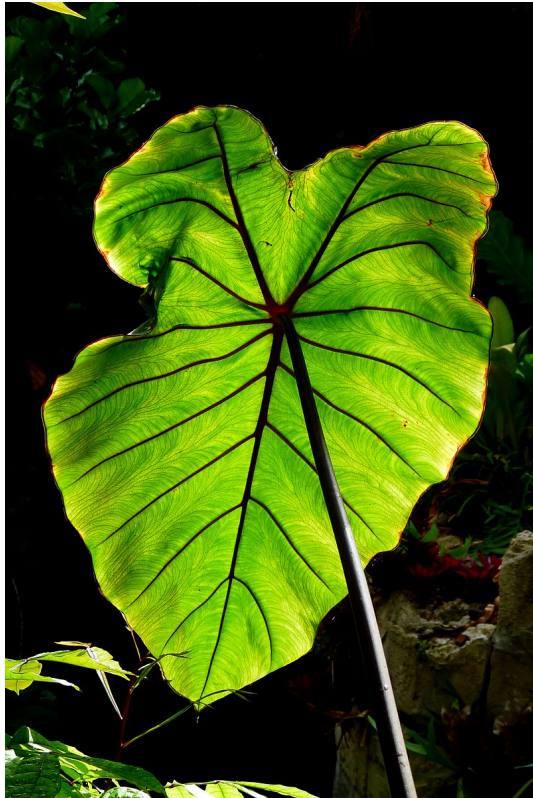
# Introduction

# Stomates et cellules de garde

Définition de **stomate**  nom masculin

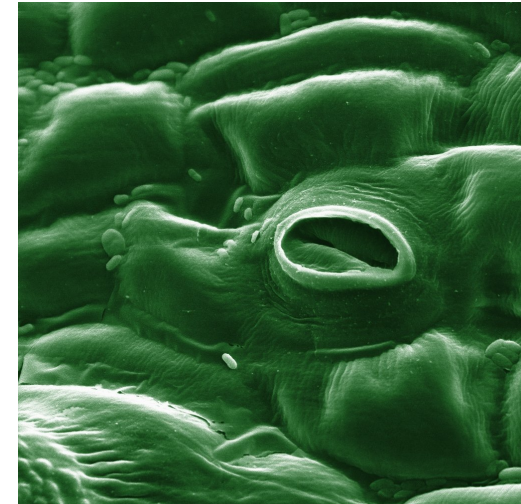
(source : Le Robert en ligne)

**Botanique** Ouverture naturelle sur l'épiderme de la tige ou de la feuille, qui assure des échanges gazeux avec le milieu extérieur (respiration, excrétion). → pore.



**Feuille** (image : Gilles Pretet)

- Stomates situés principalement sur les feuilles
- Peuvent s'ouvrir et se fermer
- Contrôlent les échanges de CO<sub>2</sub> et d'eau avec l'atmosphère



**Stomate**  
(image : Photohound)



**Cellules de garde**  
(image : Alex Costa)

# ***Pourquoi étudie-t-on les stomates ?***

- **Objectif principal : production agricole dans un climat sec (avoir à manger dans le futur)**
- **Besoin de plantes qui gèrent bien la sécheresse**
- **Les stomates permettent aux plantes de gérer leur eau**

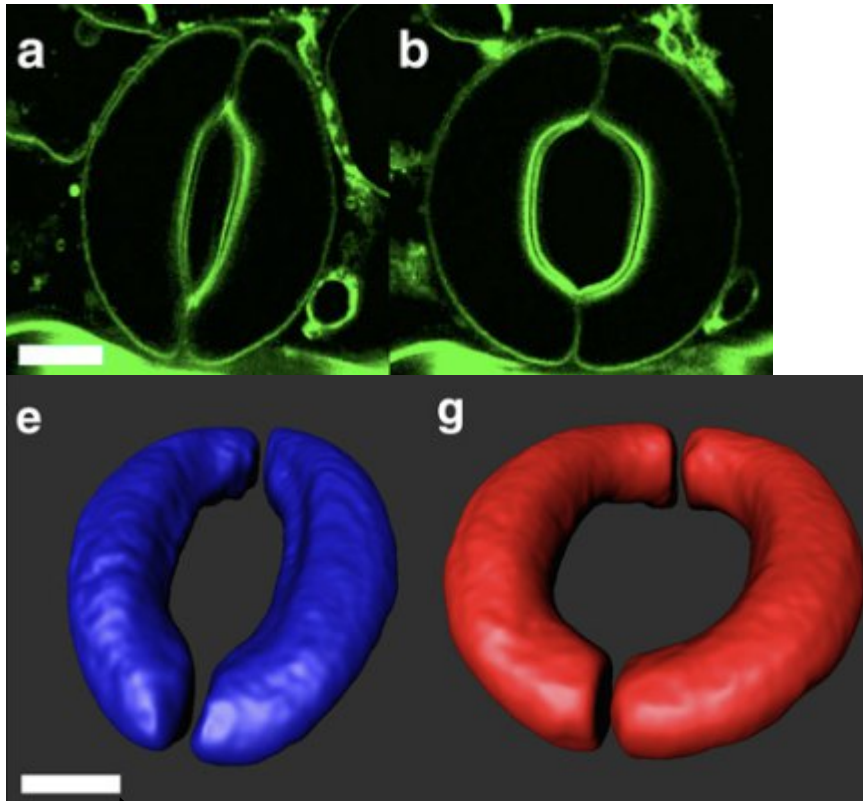
***But du projet: Comprendre la physique du mouvement des stomates***

*Introduction*  
**Sommaire**

- 1. Cellules de garde**
- 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie**
- 3. Interprétation des simulations**

# 1. Cellules de garde

## Les portes du stomate



- Situées de chaque côté du stomate
- Contrôlent l'ouverture du stomate
- Déformation causée par l'entrée d'eau

10  $\mu\text{m}$

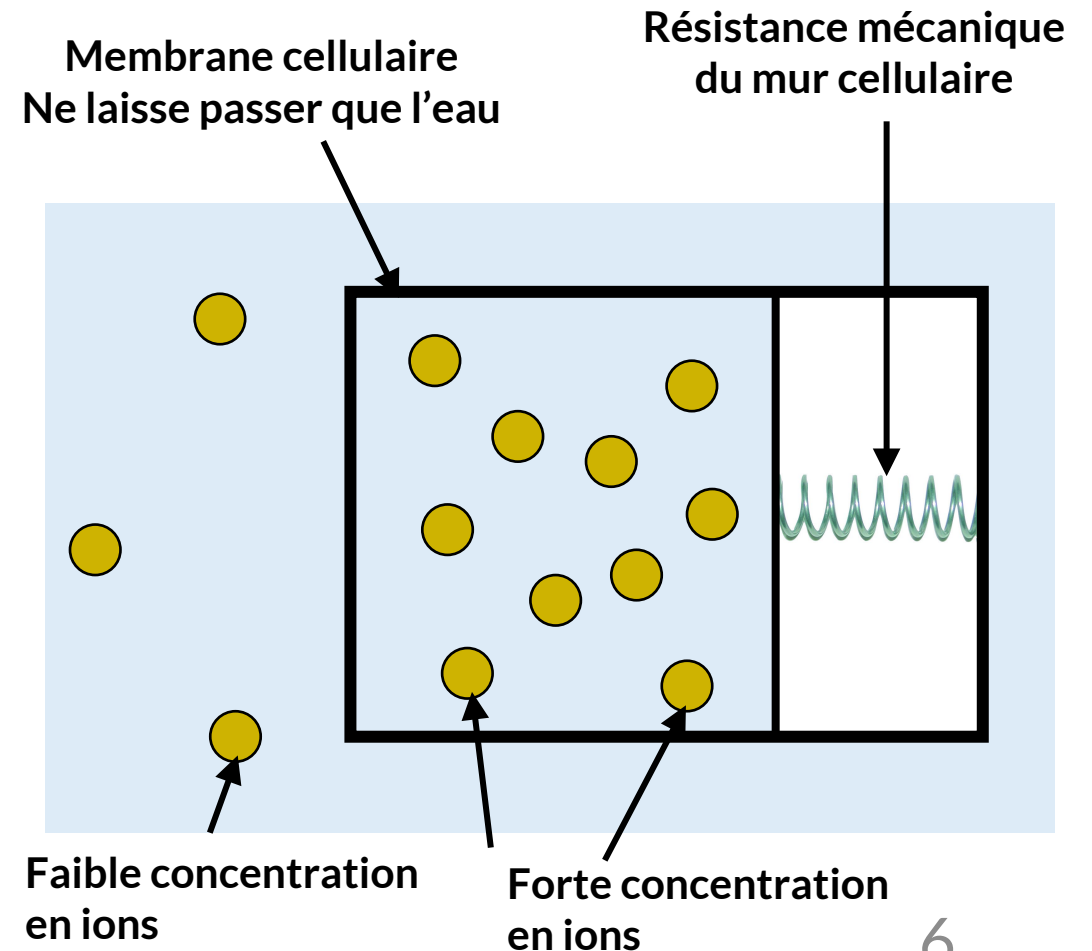
**Stomate fermé, stomate ouvert**

(Meckel et al, 2007)

# Osmose et forces chimiques

## Forces chimiques contre forces mécaniques

- Les forces chimiques veulent des concentrations égales en osmolytes
- Les forces mécaniques s'opposent à la déformation du mur

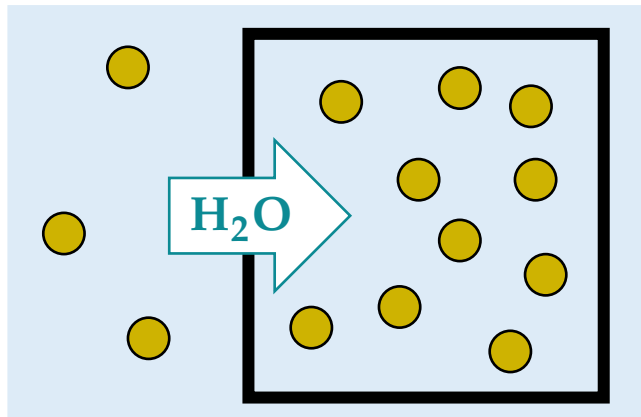


## 1. Cellules de garde

# Forces impliquées dans la cellule de garde

### Forces chimiques

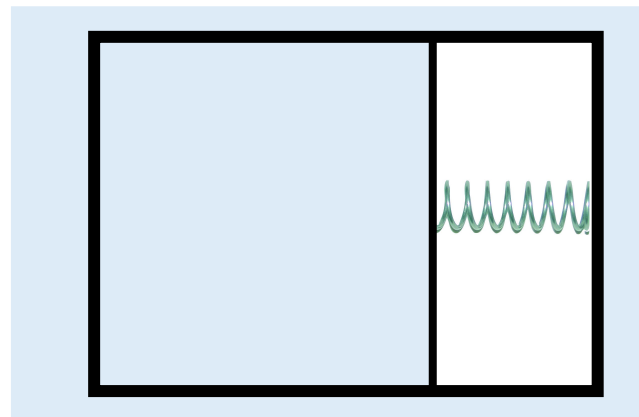
- Visent à équilibrer les concentrations en ions



Phénomène d'osmose

### Forces élastiques

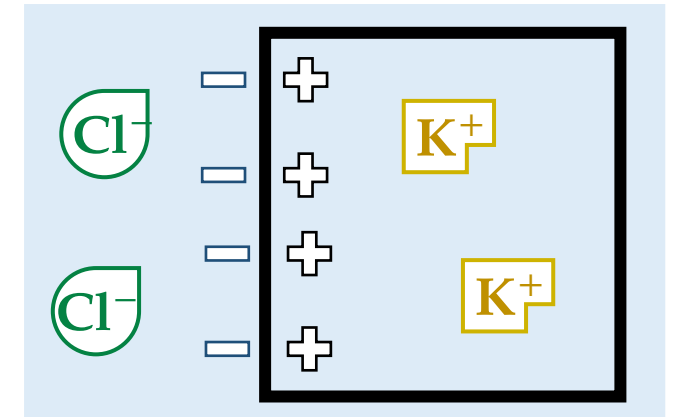
- S'opposent à l'accroissement du volume



Raideur des murs cellulaires

### Forces électrostatiques

- Visent à équilibrer les charges



Membrane = condensateur

# Approche basée sur l'énergie

Énergie totale à minimiser

$\mathbf{n}$ : état du système

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

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

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

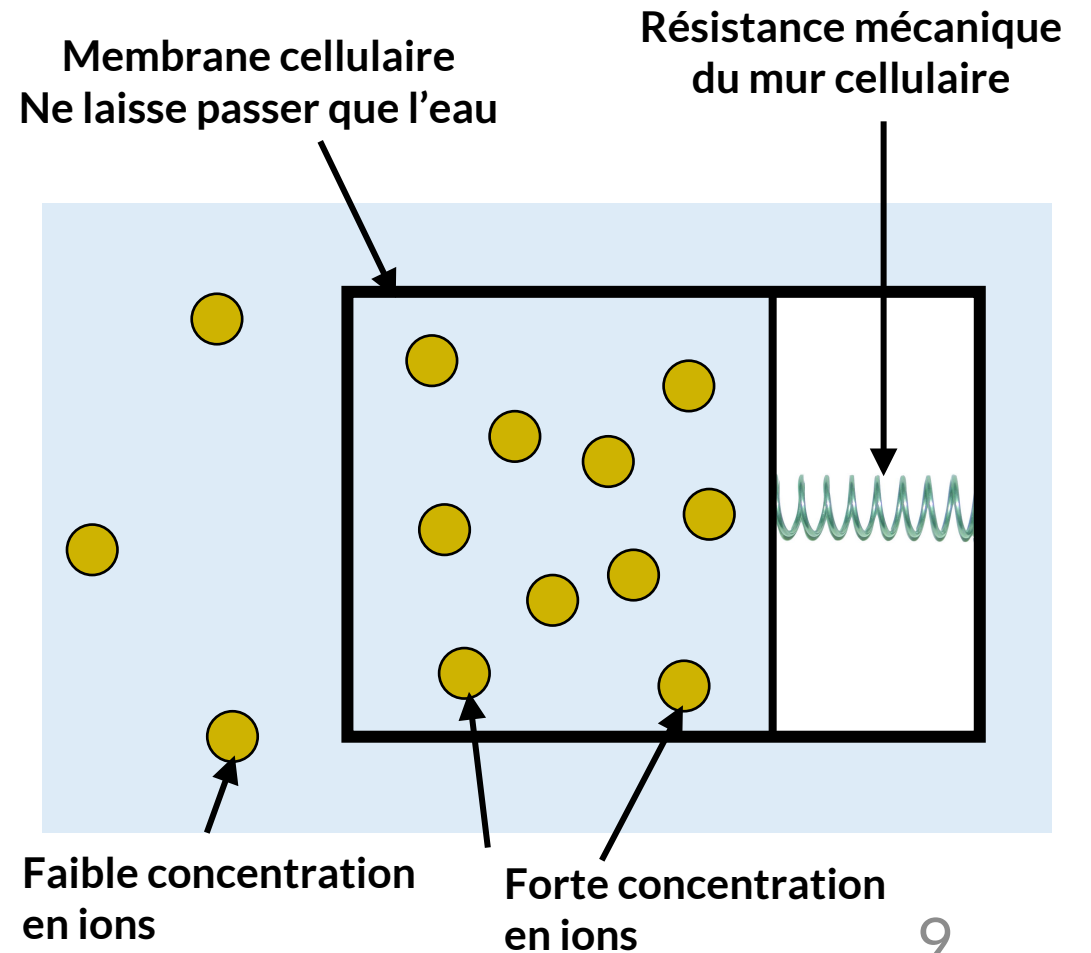
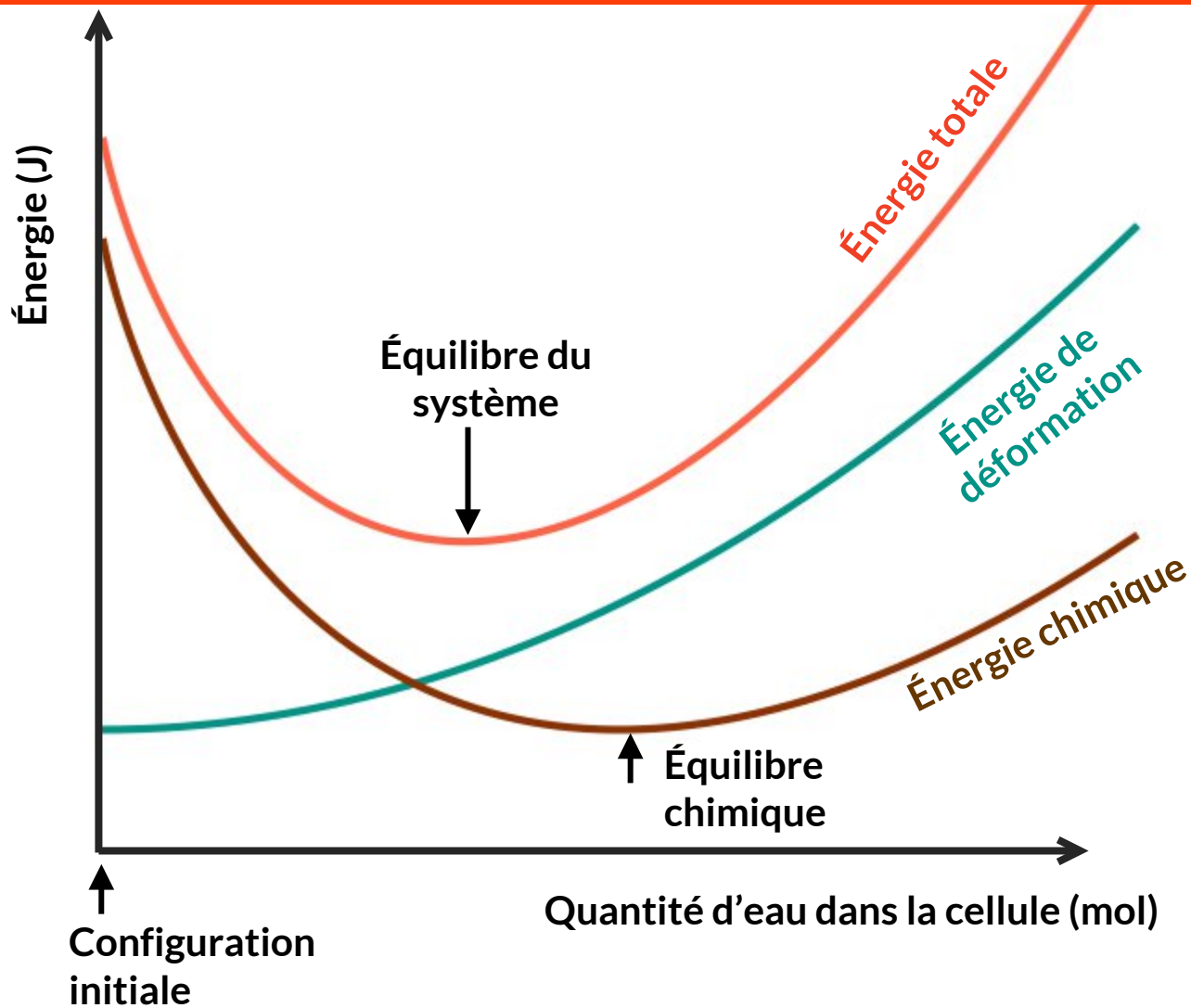
$$\frac{1}{2} \underbrace{\frac{Q(\mathbf{n})^2}{C(\mathbf{n})}}_{\text{Énergie stockée dans un condensateur}}$$

- Monnaie commune entre toutes les forces



# 1. Cellules de garde

## Approche basée sur l'énergie



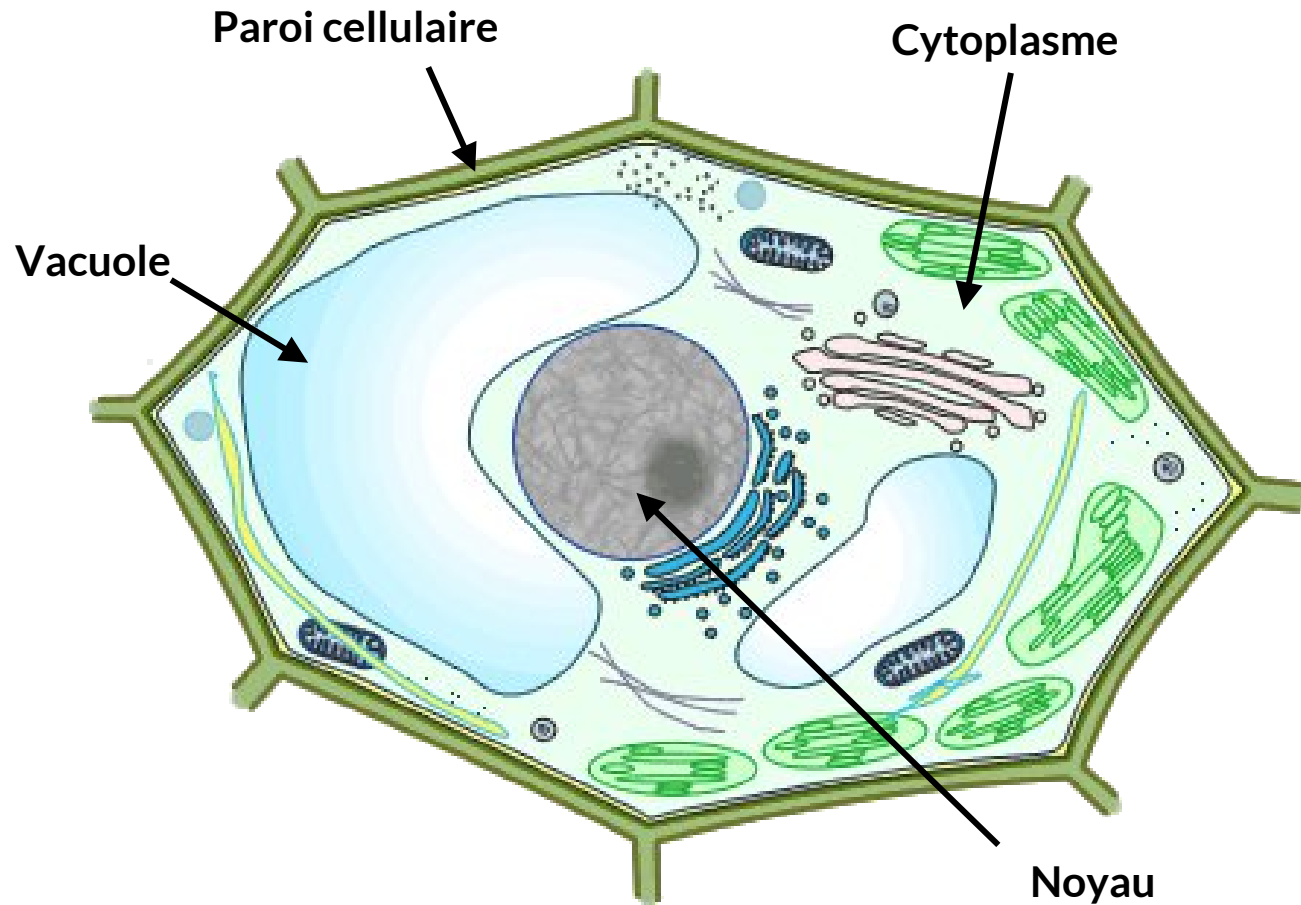
# Modèles existants

- Modèles dépendant du temps (équations différentielles ordinaires)
- Modèles exhaustifs (tous les ions, tous les transporteurs), basés sur des lois empiriques
- Pas de couplage chimie/mécanique

*Notre approche : Modèle facile à interpréter qui relie les mouvements d'ions et d'eau.*

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Modèle simplifié de cellule

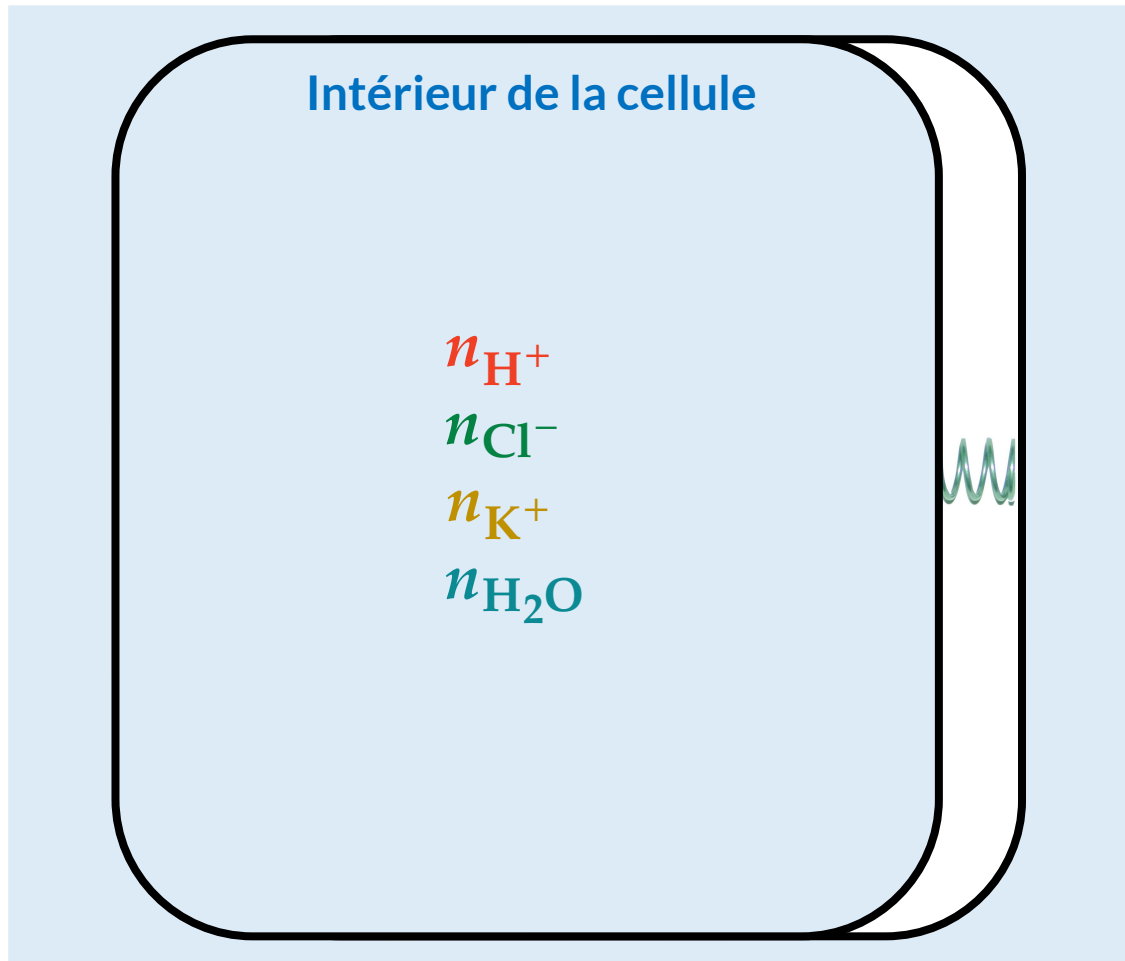


Une cellule de plante (image : unamur.be)

- Un compartiment entouré d'un mur cellulaire
- Conditions extérieures fixées
- Ions et eau présents dans le compartiment

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Modèle à un compartiment



Modèle représentant une cellule de garde

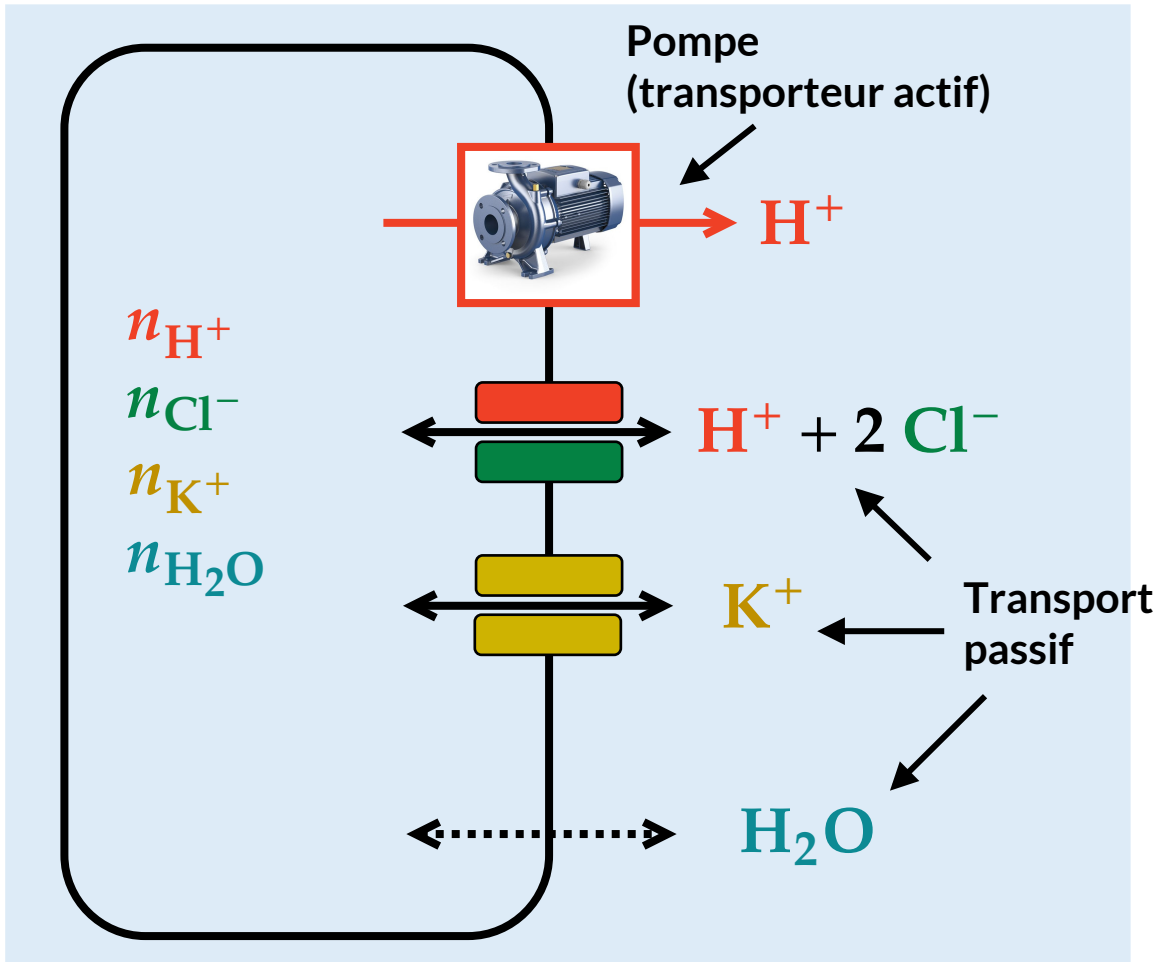
- Un compartiment entouré d'un mur cellulaire
- Conditions extérieures fixées
- Ions et eau présents dans le compartiment

**Espace d'états du système**

$$\mathbf{n} = (n_{\text{H}^+}, n_{\text{Cl}^-}, n_{\text{K}^+}, n_{\text{H}_2\text{O}}) \in \mathbb{R}^4$$

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Membranes et transporteurs



Modèle à une membrane

### Espace d'états du système

$$\mathbf{n} = (n_{H^+}, n_{Cl^-}, n_{K^+}, n_{H_2O}) \in \mathbf{R}^4$$

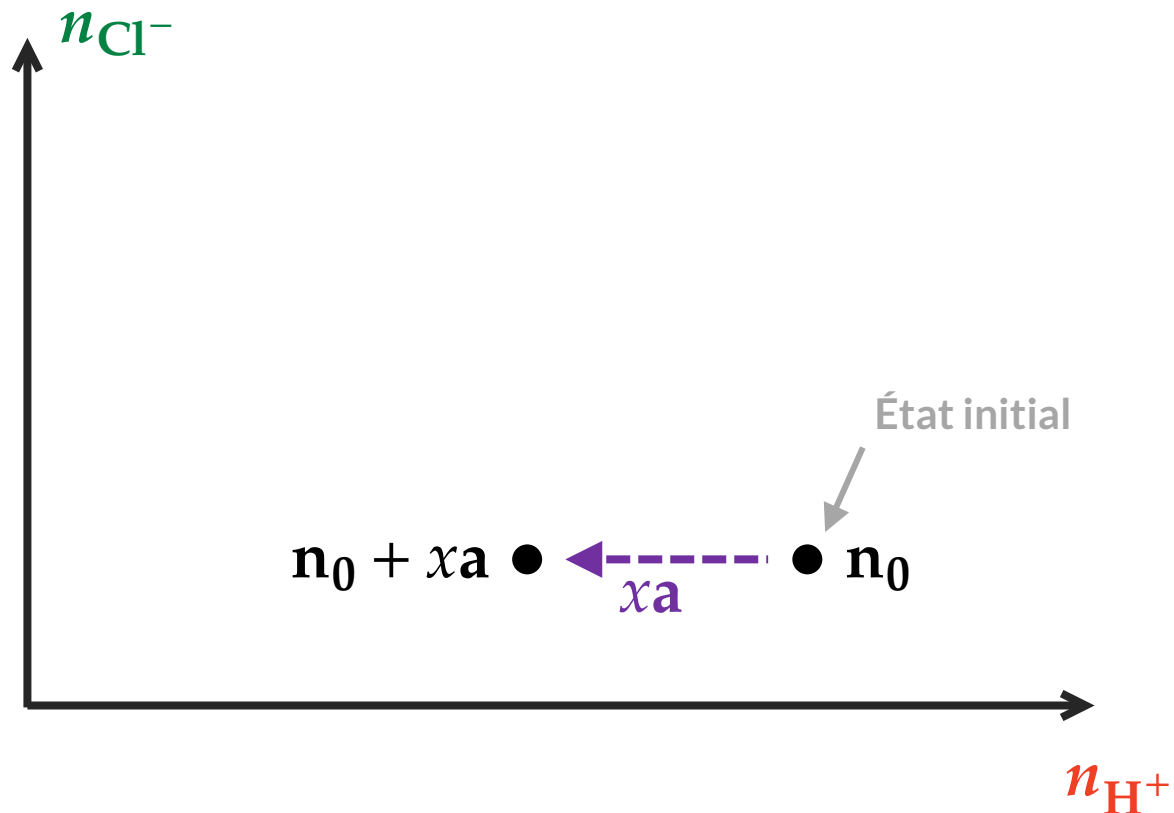
### Transporteurs

Permettent la circulation des réactifs

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

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

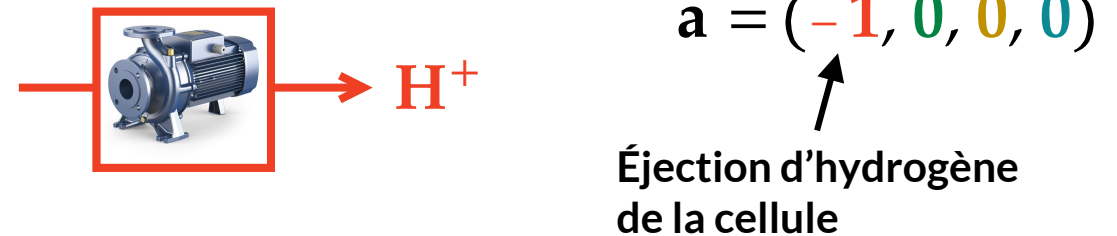
# Membranes et transporteurs



Vue projetée de l'espace d'états

### Transporteur actif (la pompe)

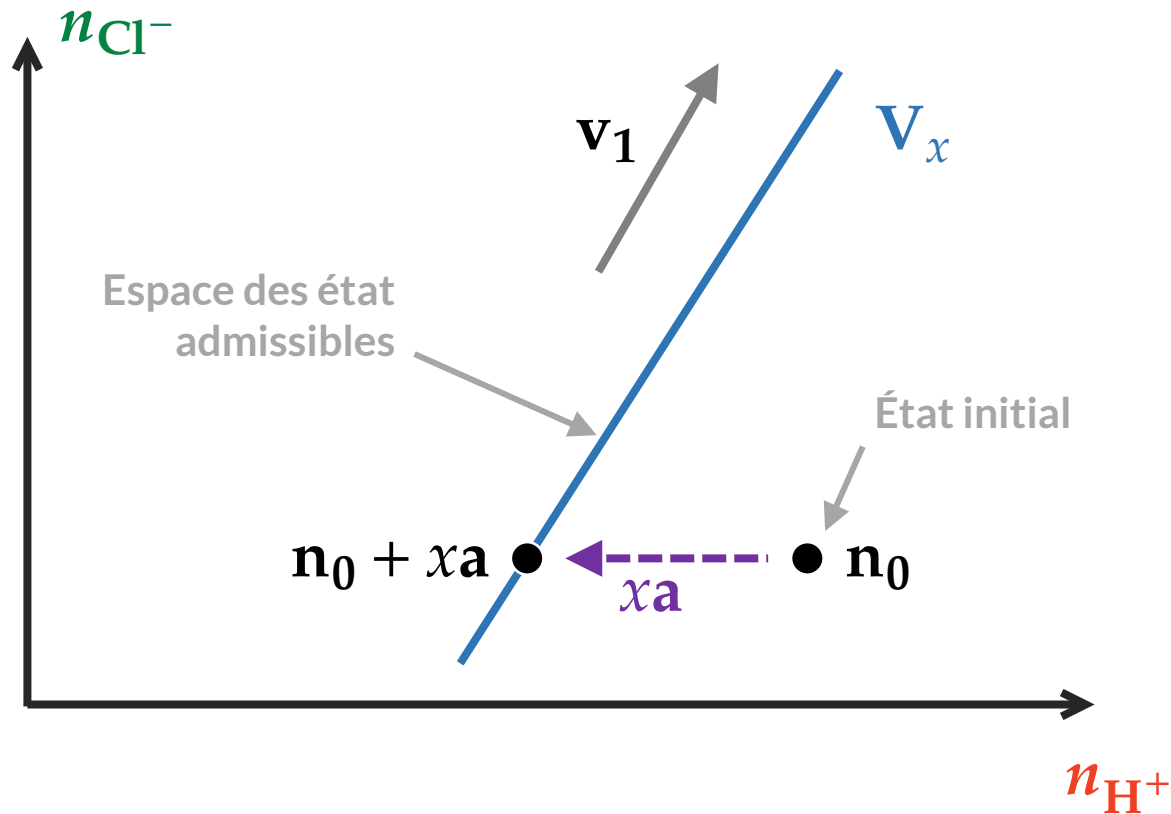
- Pousse le système dans une direction donnée



- Contrôlé  
Avancement de la pompe:  $x$

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Membranes et transporteurs



Vue projetée de l'espace d'états

### Transporteurs passifs (membrane, canaux)

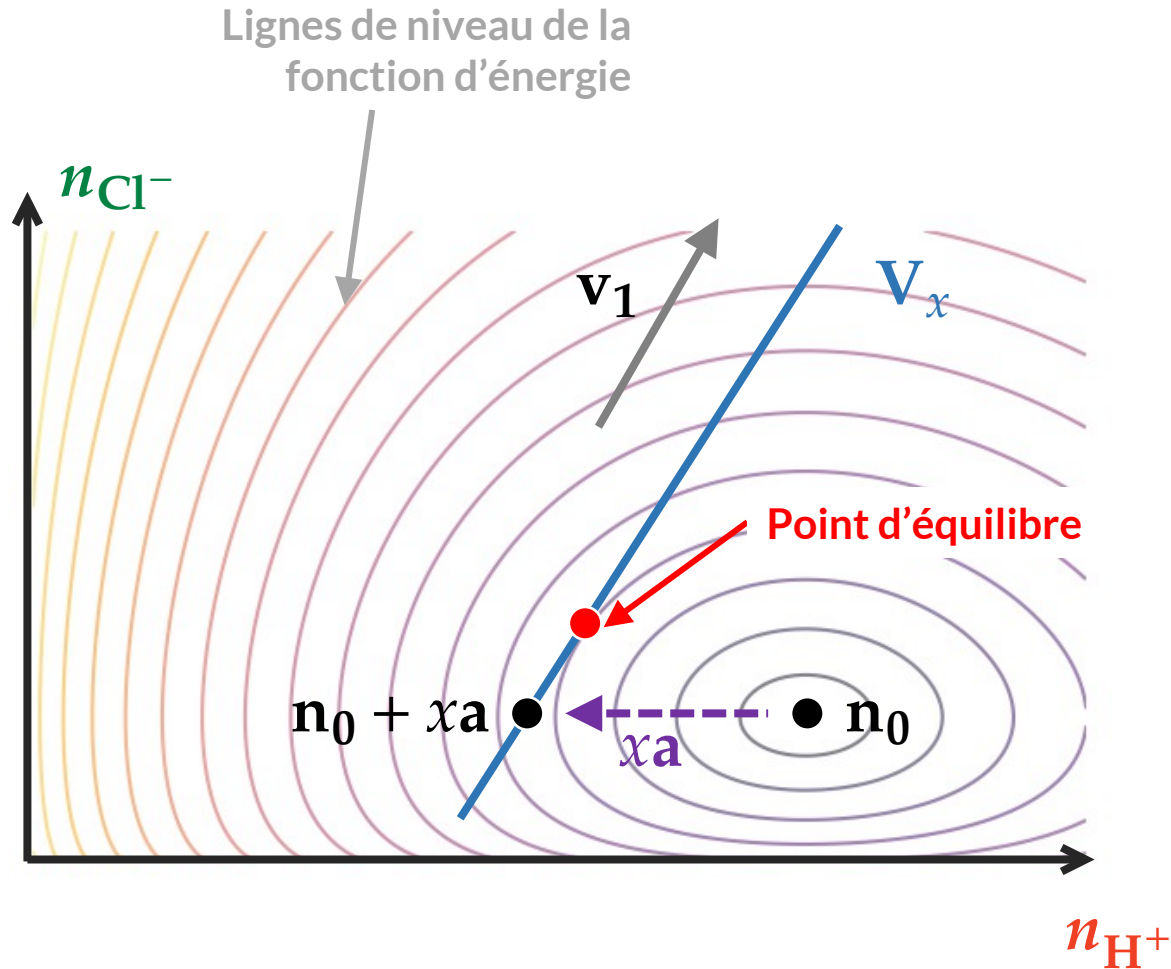
- Laissent le système se déplacer dans certaines directions



- Non contrôlé  
Le système trouve un état d'équilibre

## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Minimisation de l'énergie



Vue projetée de l'espace d'états

### Fonction d'énergie $G$

- Détermine l'équilibre du système

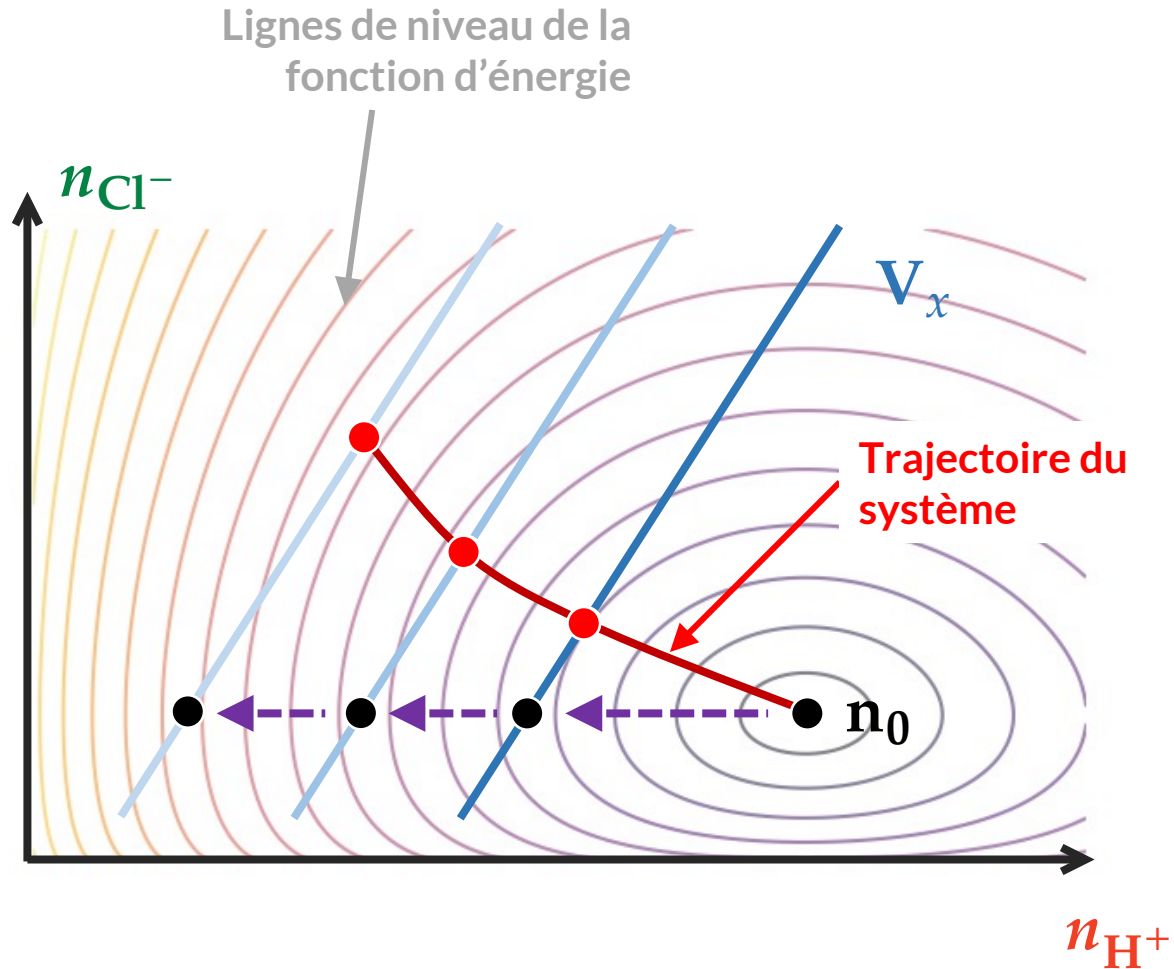
### Problème de minimisation

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



## 2. Modèle basé sur la minimisation d'une énergie

# Minimisation de l'énergie



Vue projetée de l'espace d'états

### Fonction d'énergie $G$

- Détermine l'état d'équilibre

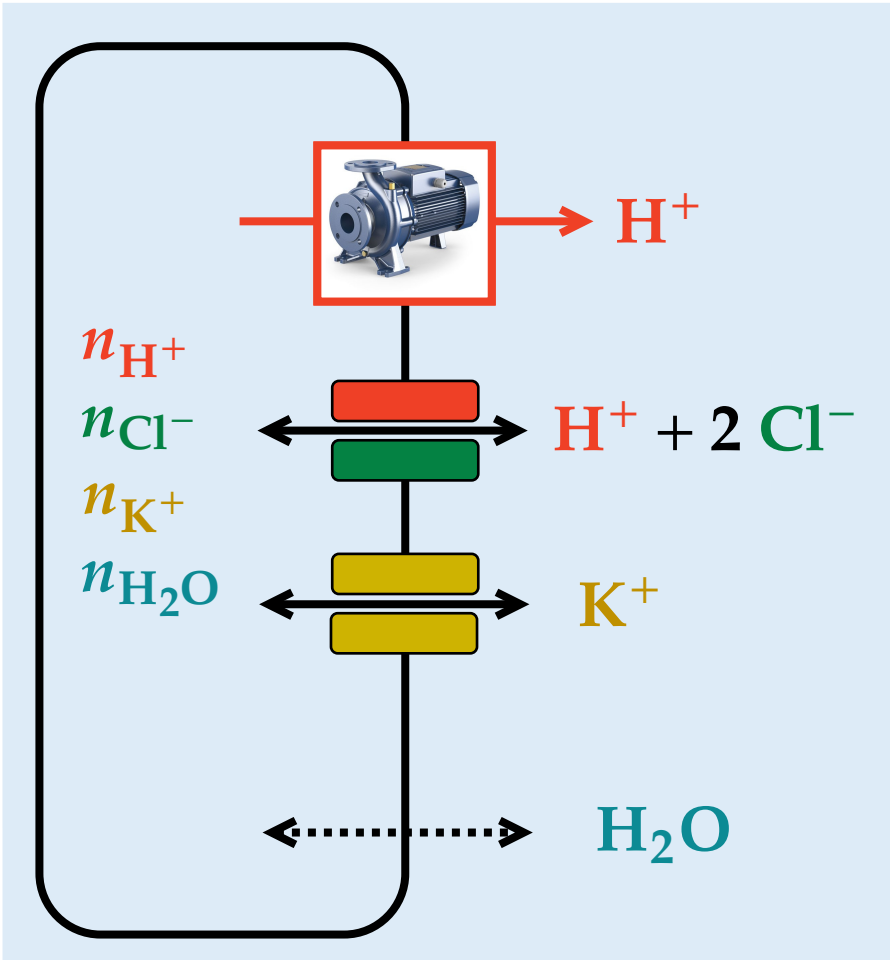
### Problème de minimisation

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

- Évolution quasi-statique pilotée par les transporteurs actifs

### 3. Interprétation des simulations

# Simulation numérique

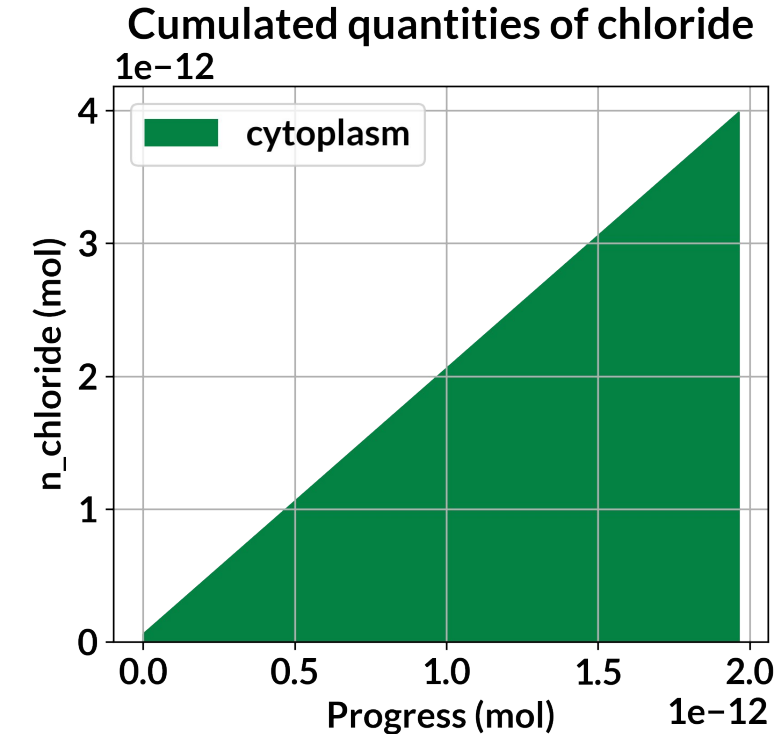
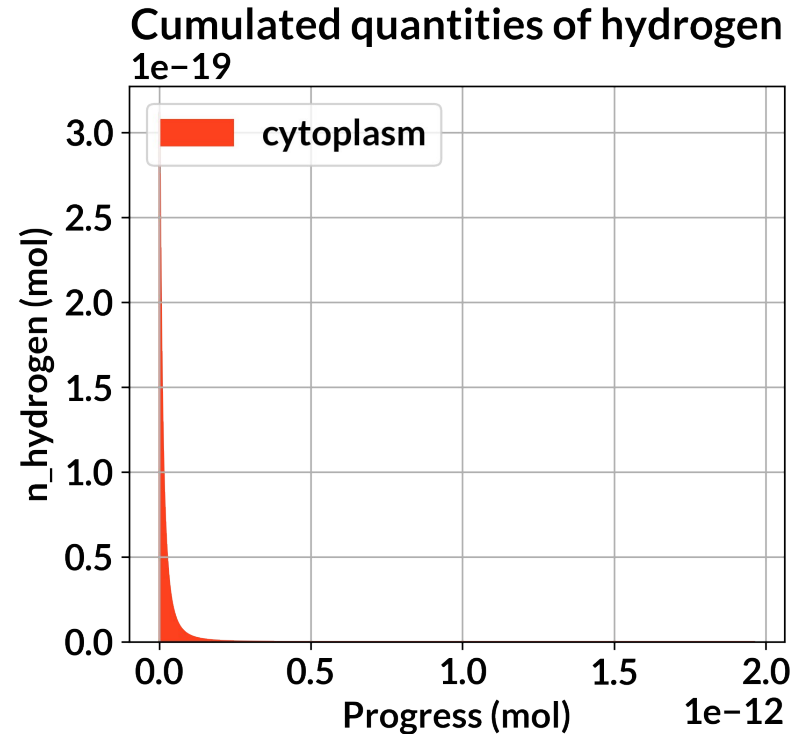
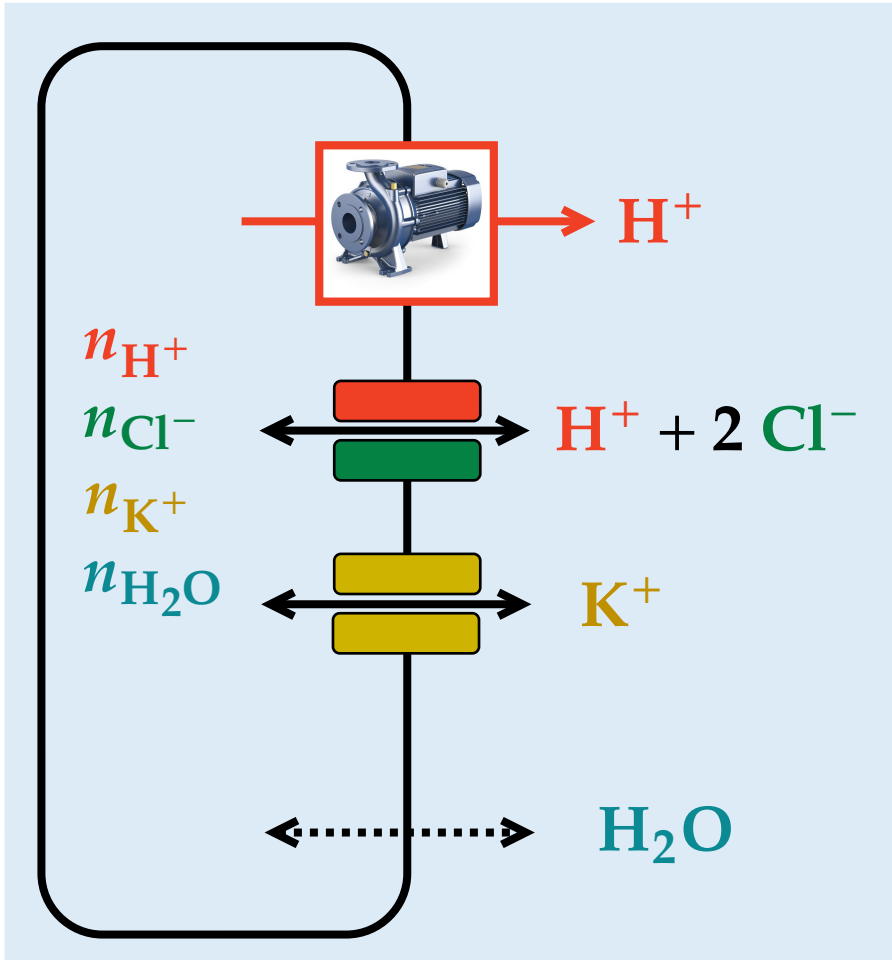


## Modèle à une membrane

- Entrée : avancement de la pompe  $x$
- Calcul des quantités à l'équilibre pour une série de  $x$
- Résultat attendu : Augmentation du volume de la cellule

### 3. Interprétation des simulations

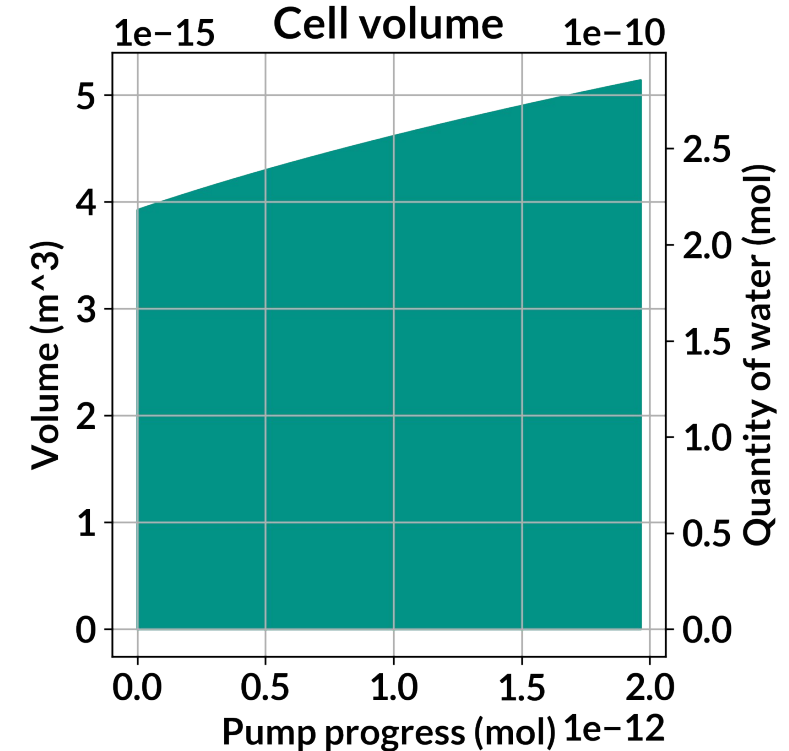
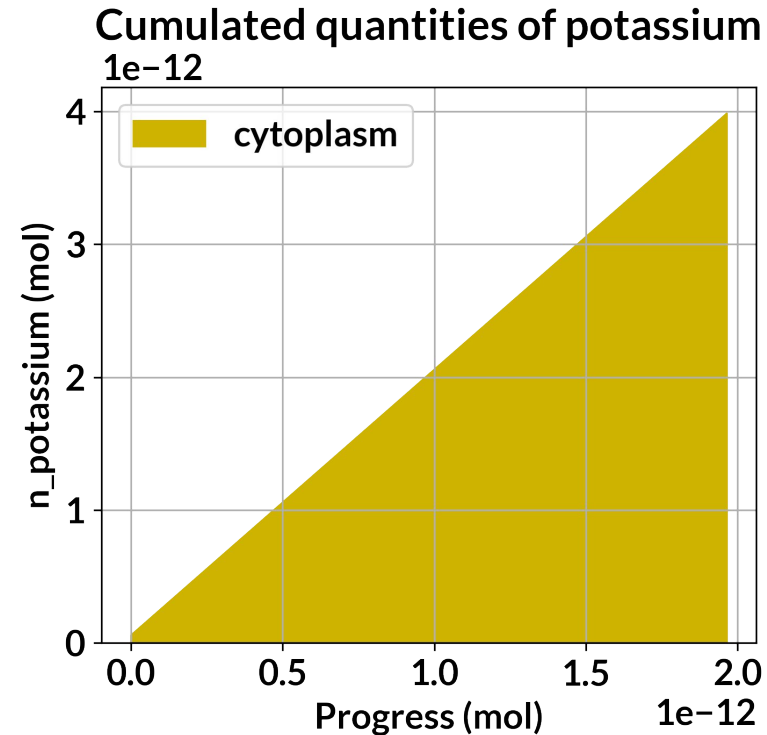
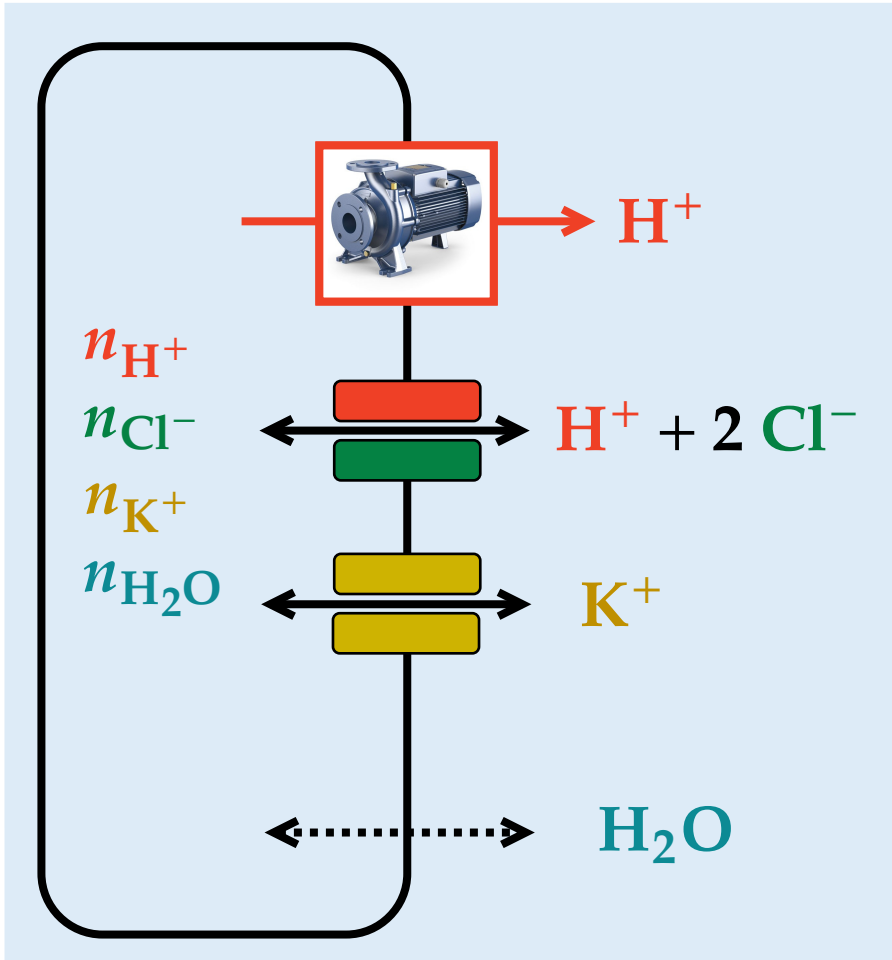
# Simulation numérique



L'hydrogène éjecté revient dans la cellule, accompagné de chlore.

### 3. Interprétation des simulations

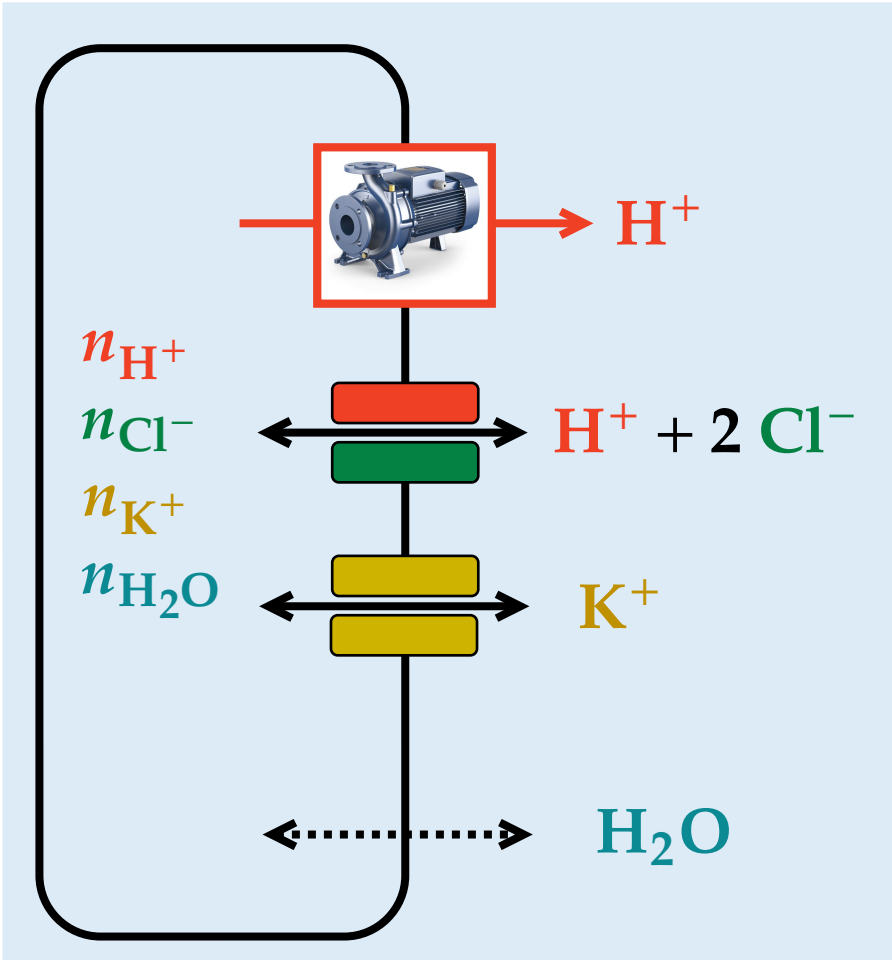
# Simulation numérique



Le potassium et l'eau sont attirés dans la cellule.

### 3. Interprétation des simulations

# Analyse de sensibilité



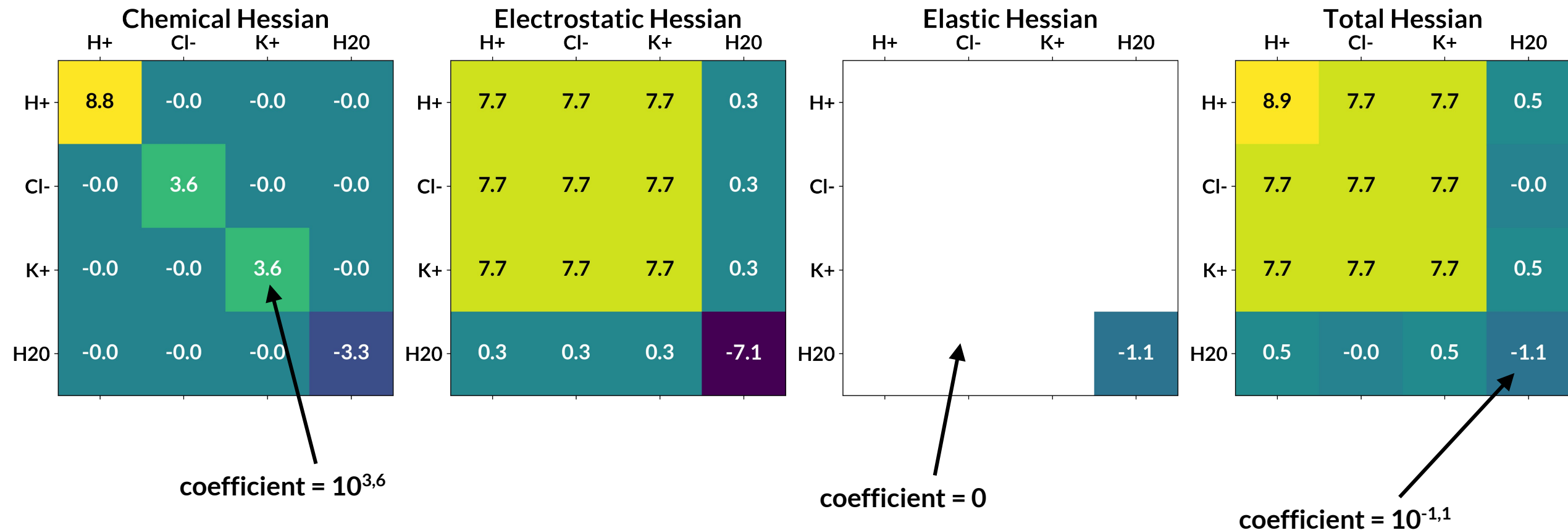
Quelles forces interviennent dans les différents couplages ?

Comment expliquer l'amplitude des variations de chaque quantité ?

- Informations de sensibilité : les dérivées secondes de l'énergie
- Pour un ressort :  $E(x) = \frac{1}{2}kx^2$   
dérivée seconde de l'énergie = raideur

### 3. Interprétation des simulations

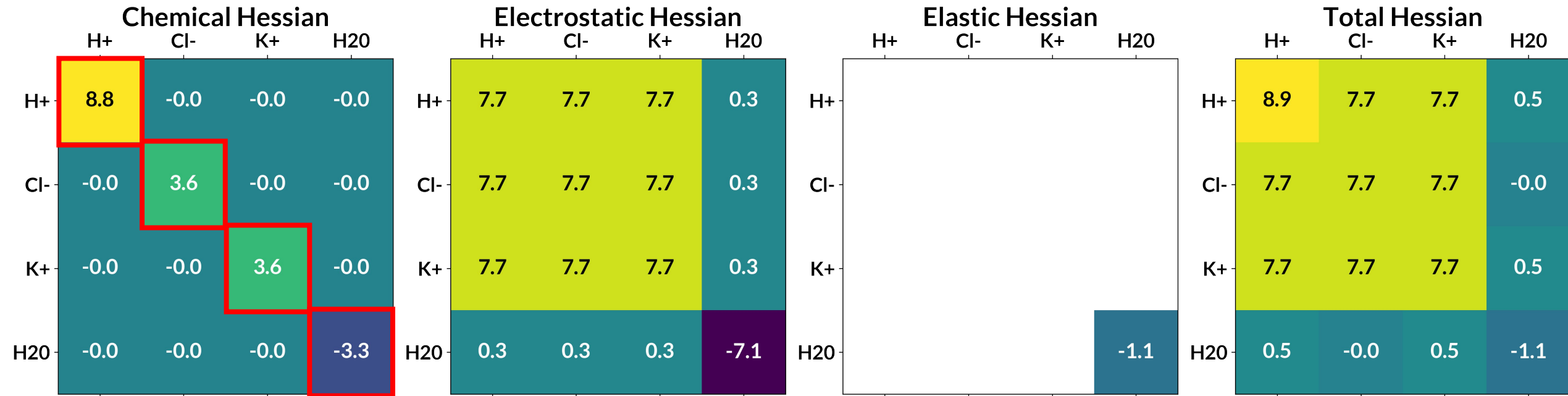
# Analyse de sensibilité



Matrices hessiennes de chaque terme de l'énergie (échelle logarithmique)

### 3. Interprétation des simulations

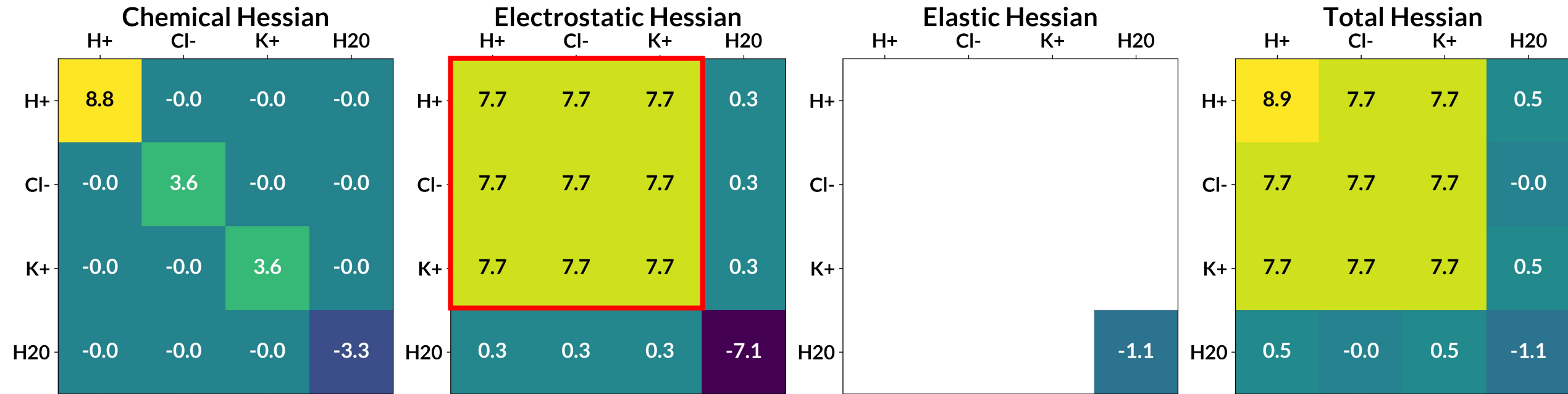
# Analyse de sensibilité



Quantité d'hydrogène : très résistante aux perturbations  
Autres quantités : plus flexibles

### 3. Interprétation des simulations

# Analyse de sensibilité

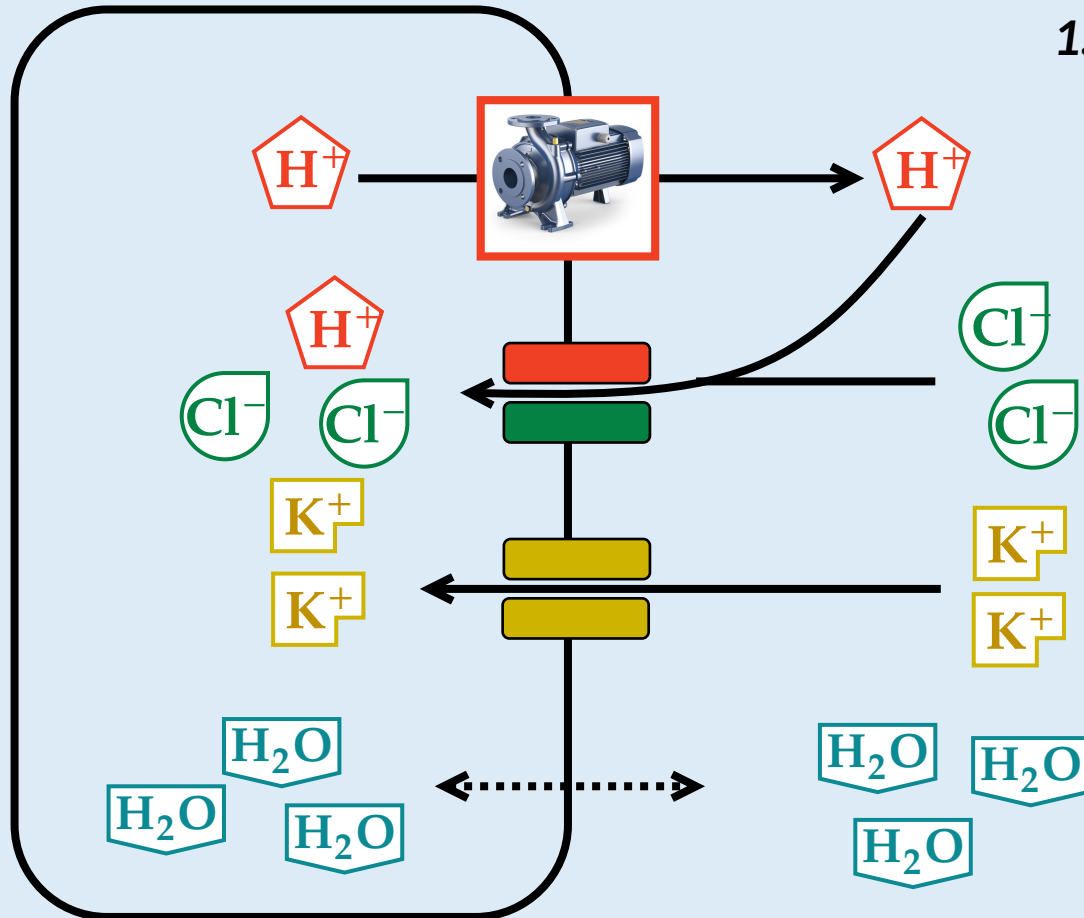


Énergie électrostatique : couplage fort entre les ions



### 3. Interprétation des simulations

# 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

#### 3. Entrée de potassium

Équilibre des charges rétabli

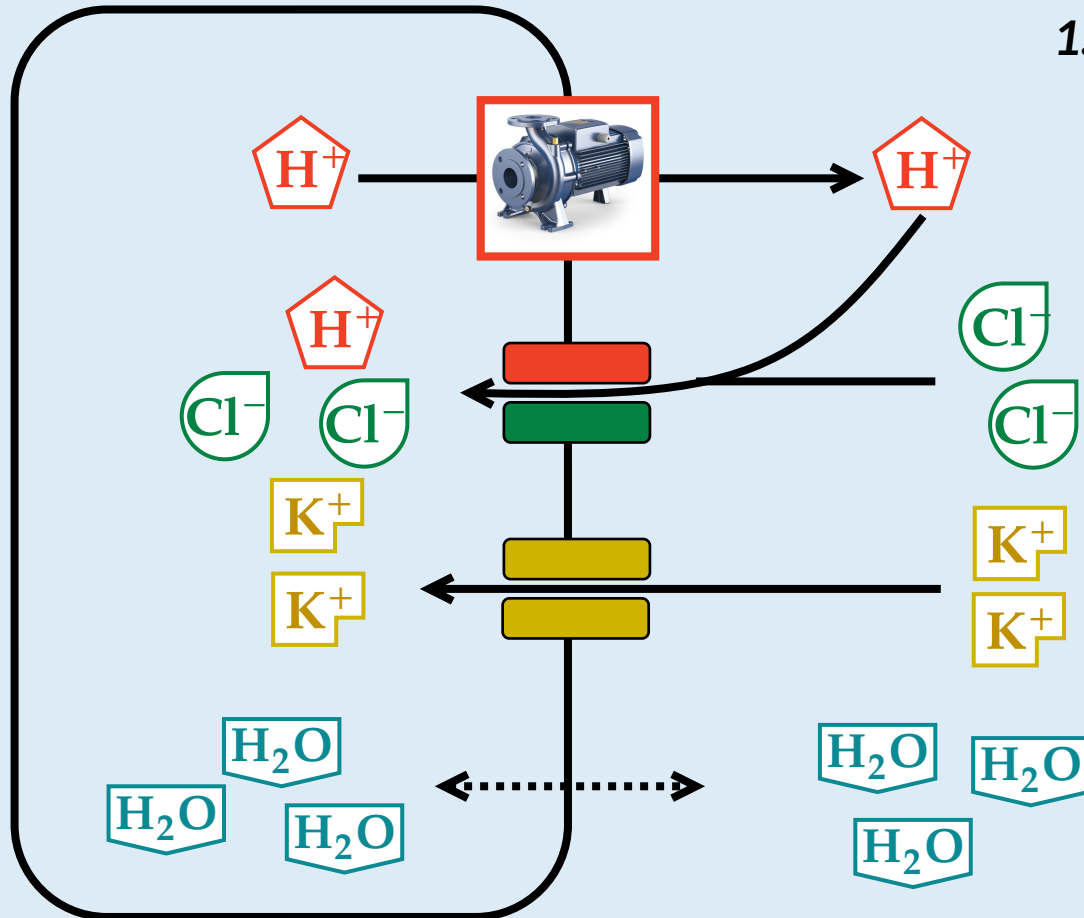
Déséquilibre du potassium

#### 4. Entrée d'eau (augmentation du volume)

Compromis forces chimiques vs élastiques

### 3. Interprétation des simulations

# 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

#### 3. Entrée de potassium

Équilibre des charges rétabli

Déséquilibre du potassium

#### 4. Entrée d'eau (augmentation du volume)

Compromis forces chimiques vs élastiques

# Conclusion

- **Modèle basé sur l'énergie : pratique quand il y a plusieurs types de forces**
- **Assez facile à gérer numériquement avec de la différentiation automatique**
- **Mise en évidence du rôle de chaque force dans l'ouverture du stomate**

## **Travail en cours**

- **Analyse similaire sur des structures plus compliquées**

***Merci pour votre attention !***

*Inria*



# **Modèle quasi-statique pour simuler les échanges ioniques dans les cellules de garde**

**Alexis De Angeli, Christophe Godin, Guillaume Mestdagh**

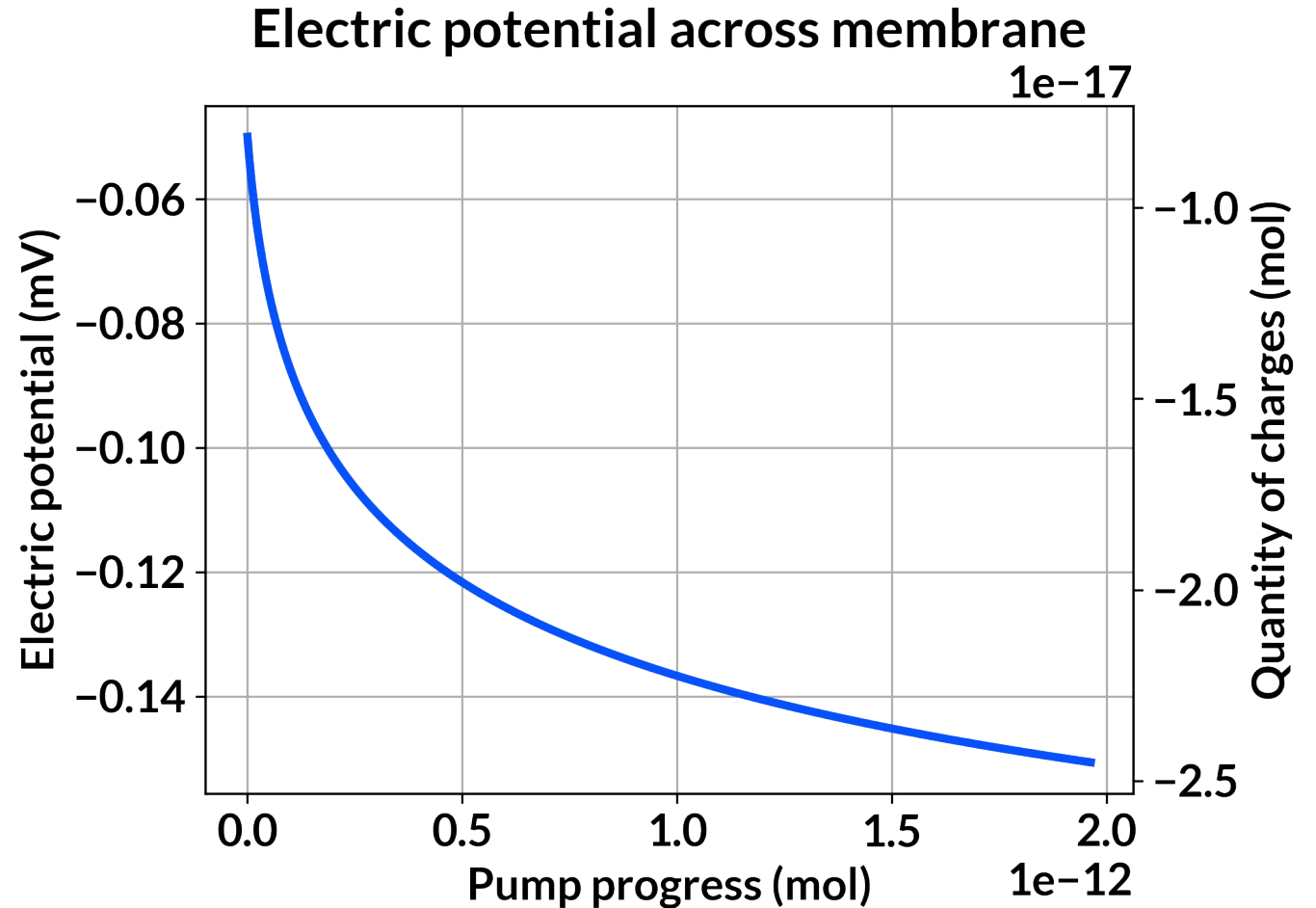
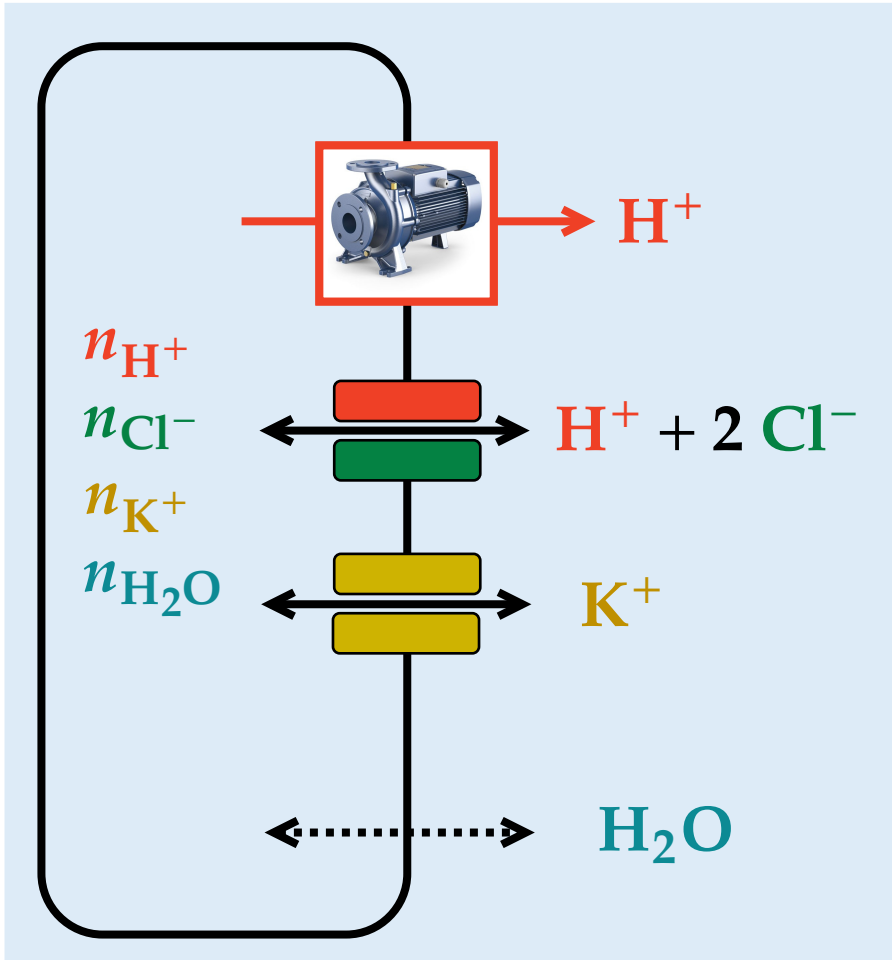


Reproduction et développement des plantes  
ENS de Lyon  
46 allée d'Italie  
69007 Lyon FRANCE

**Courriel:** [guillaume.mestdagh@inria.fr](mailto:guillaume.mestdagh@inria.fr)

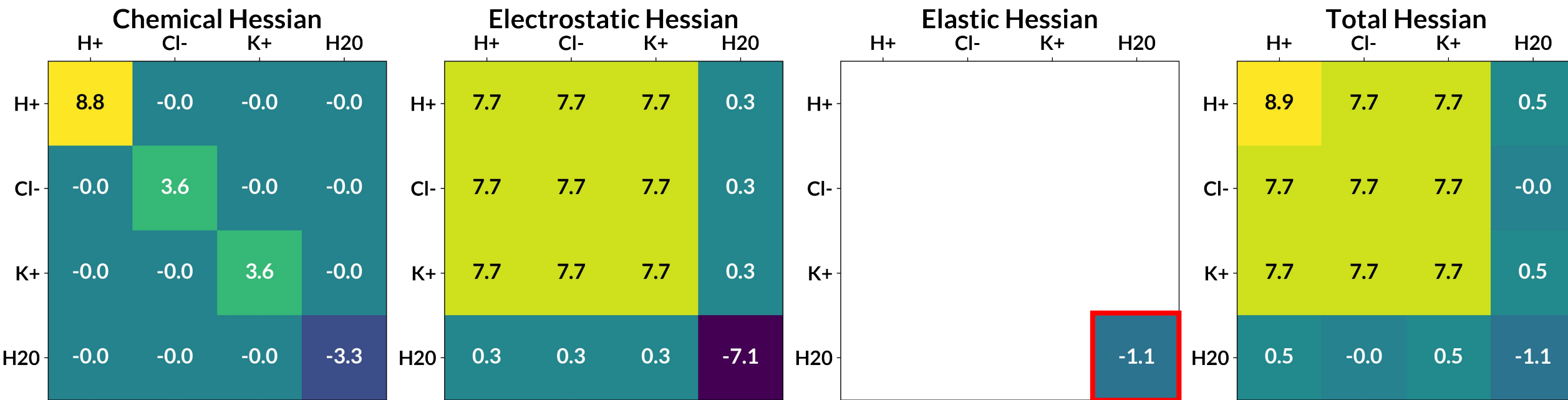
### 3. Interprétation des simulations

# Simulation numérique



### 3. Interprétation des simulations

# Analyse de sensibilité



Énergie élastique : principale résistance au changement de volume