



©Florent Grélard - Illustration des déformations appliquées à une coupe de grain observée en MALDI pour la superposer à son homologue observé en IRM. La couleur des flèches traduit l'intensité du déplacement (faible en bleu, modérée en vert, importante en jaune et rouge).

Le couplage de plusieurs méthodes d'imagerie améliore la caractérisation des produits agronomiques



En savoir plus

Grélard F. *et al.*

Esmraldi: efficient methods for the fusion of mass spectrometry and magnetic resonance images

BMC Bioinformatics . 2021

<https://doi.org/10.1186/s12859-020-03954-z>

Valorisation

L'ensemble des méthodes développées est distribué sous la forme d'une bibliothèque pour le langage Python, rendue accessible sur la plateforme de développement GitHub, et a été intégrée dans une « compute capsule » pour faciliter la reproductibilité de l'analyse.

Contacts

David Legland, Loïc Foucat, Hélène Rogniaux, Mathieu Fanuel

UR BIA

david.legland@inrae.fr

loic.foucat@inrae.fr

helene.rogniaux@inrae.fr

mathieu.fanuel@inrae.fr



Contexte

L'eau et les polysaccharides des parois sont deux composantes qui impactent fortement les propriétés technologiques ou d'usage des produits agronomiques, notamment du grain. Différentes modalités d'imagerie sont à même de caractériser ces deux composantes : l'imagerie par spectrométrie de masse (MSI) peut cartographier la composition chimique des échantillons sans *a priori* sur les molécules à analyser, et l'imagerie par résonance magnétique (IRM), modalité non destructive, permet d'accéder à l'anatomie des organes et à l'état d'hydratation (teneur / mobilité). Obtenir une vision complète de l'échantillon nécessite de pouvoir comparer et fusionner les informations obtenues par ces deux modalités. Les difficultés concernent la différence de résolution des images, et les déformations induites par la MSI lors de la préparation des échantillons.

Résultats

Nous avons développé une chaîne complète de traitement d'images pour fusionner les informations obtenues par les deux modalités d'imagerie. Elle comprend les étapes de pré-traitement spécifiques à chaque modalité, de recalage des images pour mettre en correspondance spatiale les informations, et de réduction de dimension pour simplifier les données. La superposition des informations spatialisées permet de mettre en correspondance la composition

chimique et la mobilité de l'eau et donc connaître, sans *a priori*, les molécules dont la localisation corrèle le mieux avec celle de l'eau.

Appliquée à des grains de blé à différents stades de développement, la méthode permet de relier la nature de l'hydratation à celle du degré de substitution et d'acétylation des polysaccharides non cellulosiques présents dans les parois du grain. En particulier, la co-localisation des xylanes les plus substitués et/ou fortement acétylés dans les régions les plus hydratées suggère une plus grande porosité des parois liée à la modification des xylanes. Ces deux éléments structuraux ont été décrits comme ayant un impact sur l'organisation des parois et les interactions des polysaccharides dans les parois. Cependant, il s'agit à notre connaissance de la première mise en évidence claire de cette corrélation à l'échelle de la plante.

Perspectives

Après avoir validé la démarche sur des coupes 2D, nous étudions actuellement les variations conjointes de composition et de teneur / mobilité de l'eau à l'échelle de la graine en 3D, pour différents stades de développement. Nous explorons également les méthodes d'analyse de données multi-blocs afin de tirer parti de la multiplicité des informations.