

Guilherme Bovi Ambrosano

Modelo de Fotossíntese de Farquhar

Piracicaba

2018

Guilherme Bovi Ambrosano

Modelo de Fotossíntese de Farquhar

Relatório exigido pela disciplina CEN0257 –
Modelagem de Sistemas Agrícolas e Ecológicos

Universidade de São Paulo – USP
Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz

Piracicaba
2018

Sumário

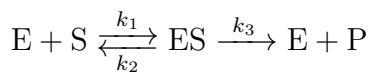
	Sumário	2
1	INTRODUÇÃO	3
1.1	Reações Químicas	3
1.2	Fotossíntese	5
1.2.1	Fase clara	5
1.2.2	Fase escura	6
2	MODELO	9
3	CIRCUITO	11
3.1	Leitura de temperatura	11
3.2	Leitura de luminosidade	12
3.3	Conversão do sinal analógico para digital	13
4	CÓDIGO	14
4.1	leitura_dados.py	15
4.2	farquhar.py	16
4.3	grafico.py	20
	REFERÊNCIAS	22

1 Introdução

1.1 Reações Químicas

A fotossíntese é resultado de uma série de reações químicas que ocorrem no interior das células das plantas. Portanto, para modelar a fotossíntese, é preciso modelar estas reações (DENNING, 1993).

Em uma reação catalizada por uma enzima, ocorre o seguinte:



A enzima (E) se liga aos substratos (S) da reação, formando um composto intermediário (ES). A seguir, este composto intermediário dá origem aos produtos da reação (P), fazendo com que a enzima retorne a seu estado original (E).

Cada uma das etapas desta série de reações apresenta uma constante de equilíbrio k_i . Quando a reação entra em equilíbrio, a variação da concentração de enzima é igual a zero e se dá conforme a Equação 1.1 (DENNING, 1993).

$$\frac{d[ES]}{dt} = k_1[E][S] - (k_2 + k_3)[ES] = 0 \quad (1.1)$$

Neste caso, a concentração de ES segue a equação 1.2 (DENNING, 1993). Como o denominador desta equação é formado somente por constantes, é introduzida a K_M , chamado de constante de Michaelis.

$$[ES] = \frac{[E][S]}{\frac{k_2+k_3}{k_1}} = \frac{[E][S]}{K_M} \quad (1.2)$$

Isto é, $K_M = \frac{k_2+k_3}{k_1}$ (DENNING, 1993).

Esta constante é utilizada na Equação de Michaelis-Menten (1.3) para o cálculo da velocidade de uma reação (V) em função de sua velocidade máxima (V_{max}) e da

concentração de substrato ($[S]$).

$$V = V_{max} \times \frac{[S]}{[S] + K_M} \quad (1.3)$$

O efeito de temperatura de uma reação também pode ser modelado utilizando algumas equações. Entre elas, estão as Equações 1.4, 1.5 e 1.6 (FARQUHAR et al., 1980; BERNACCHI et al., 2001; MEDLYN et al., 2002).

$$k = k_{25} \times Q_{10}^{(T_k - 298,15)/10} \quad (1.4)$$

$$k = k_{25} \times \exp\left(\frac{E_a \times (T_k - 298,15)}{298,15 \times R \times T_k}\right) \quad (1.5)$$

$$k = k_{opt} \times \frac{H_d \times \exp\left(\frac{H_a \times (T_k - T_{opt})}{T_k \times R \times T_{opt}}\right)}{H_d - H_a \times \left(1 - \exp\left(\frac{H_d \times (T_k - T_{opt})}{T_k \times R \times T_{opt}}\right)\right)} \quad (1.6)$$

A Equação 1.4 modela um parâmetro k em função de seu valor a 25°C, ou 298,15K, (k_{25}), da temperatura atual (T_k), em K, e do parâmetro empírico Q_{10} . Já a Equação 1.5, conhecida como equação de Arrhenius, utiliza também, como parâmetros, a energia de ativação da enzima (E_a) e a constante universal dos gases ($R = 8,314$). A Equação 1.6 é desenvolvida a partir da Equação 1.5, porém esta utiliza a temperatura ótima da reação (T_{opt}) e o valor do parâmetro a esta temperatura (k_{opt}). Além disso, utiliza os parâmetros H_a , equivalente à E_a , e H_d , equivalente ao decréscimo da equação depois do ponto ótimo.

1.2 Fotossíntese

1.2.1 Fase clara

Durante a fase clara, é gerada a energia utilizada na fase escura da fotossíntese (DENNING, 1993; FARQUHAR et al., 1980).

O início desta fase se dá quando as moléculas de clorofila presentes nos cloroplastos são excitadas por fótons do espectro fotossinteticamente ativo, provindos do Sol. Estes fótons são absorvidos por moléculas componentes do Complexo Antena dos fotossistemas. Ao absorver um fóton, estas moléculas transmitem sua energia, até alcançar o chamado Centro de Reação do fotossistema. A molécula presente no centro de reação absorve esta energia e, em troca, emite um elétron. Este elétron precisa ser recebido por um aceptor de elétrons próximo ao centro de reação, e deve ser repostado por um doador de elétrons.

A membrana dos tilacoides, nos cloroplastos, apresenta dois fotossistemas: Fotossistema 1 e Fotossistema 2. No caso do Fotossistema 1, o aceptor final reduz uma molécula de NADP, a transformando em NADPH_2 . O doador de elétron para o Fotossistema 1 está no final de uma cadeia de transporte de elétrons, iniciada pelo aceptor de elétrons do Fotossistema 2. Nesta cadeia de transporte de elétrons, uma molécula de ADP é transformada em ATP, armazenando energia. Por fim, o doador de elétrons para o Fotossistema 2 são moléculas de H_2O fotolisada, gerando H^+ e O_2 .

Este esquema é representado na Figura 1, por Denning (1993).

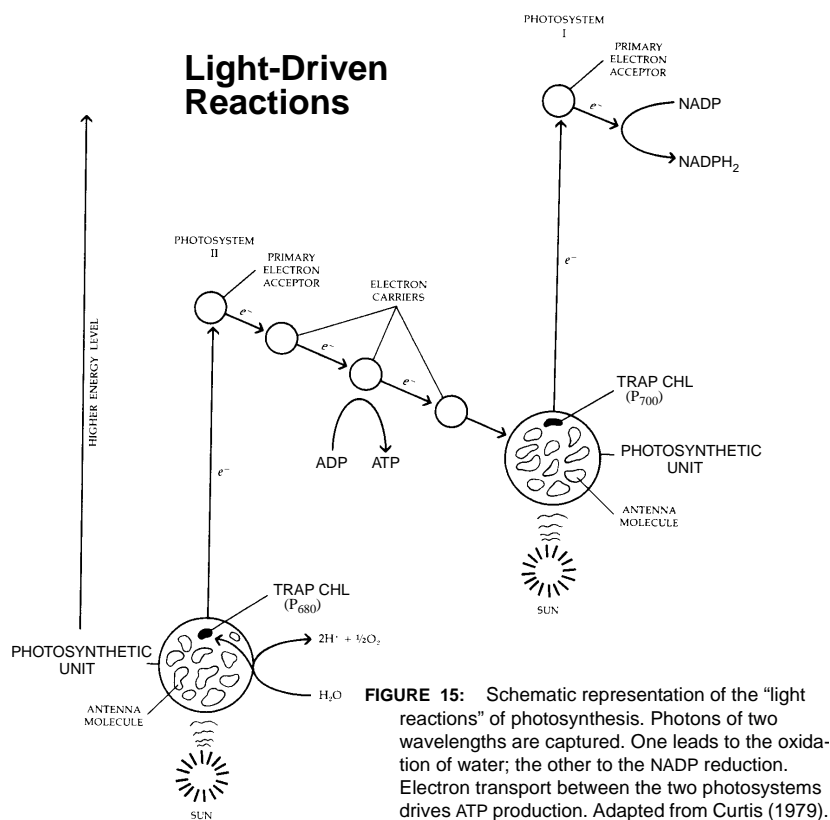


Figura 1 – Esquema da cadeia de transporte de elétrons, durante a fase clara da fotossíntese.

1.2.2 Fase escura

Durante a fase escura da fotossíntese, acontece a fixação do carbono proveniente do CO₂ atmosférico (DENNING, 1993). Para isto, inicialmente, uma molécula de ribulose-1,5-bisfosfato (RuBP) é convertida em duas moléculas de 3-fosfoglicerato, pela ação da enzima ribulose-1,5-bisfosfato carboxilase (RuBisCO), processo chamado de carboxilação da RuBisCO (Figura 2).

No entanto, caso a RuBisCO utilize uma molécula de O₂ no lugar da molécula de CO₂ como substrato, faltará um átomo de carbono para um dos 3-fosfoglicerato, gerando um 2-fosfoglicolato em seu lugar. Este processo é conhecido como oxigenação da RuBisCO, ou fotorrespiração (Figura 3).

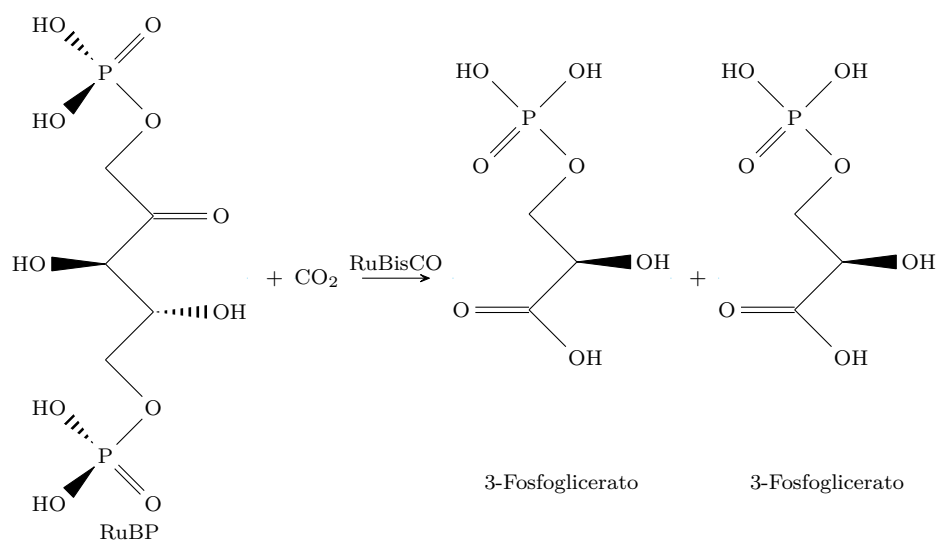


Figura 2 – Processo de carboxilação da enzima RuBisCO.

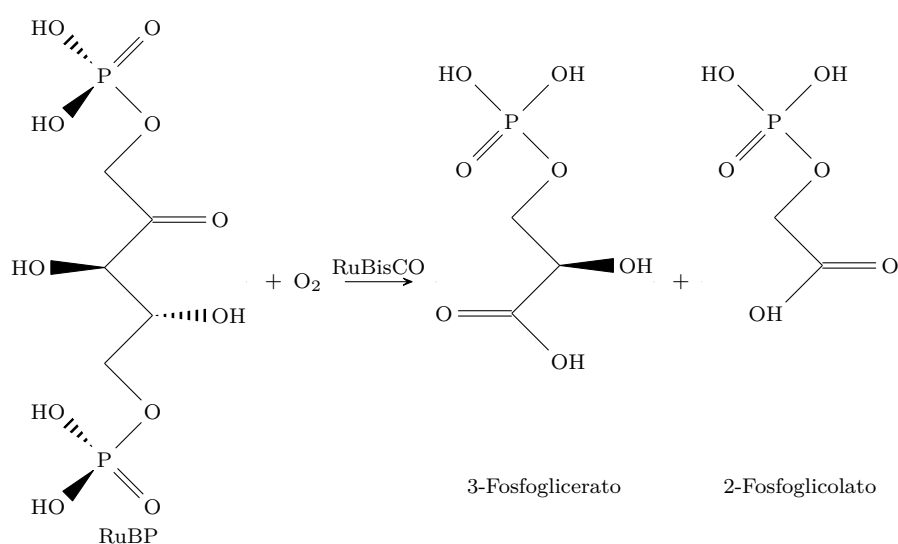


Figura 3 – Processo de oxigenação da enzima RuBisCO (fotorrespiração).

Ao fim da fase escura, o carbono da atmosfera deve ser transferido a uma molécula de açúcar e a molécula de RuBP deve ser recomposta. Isto ocorre através do Ciclo de Calvin-Benson, mostrado na Figura 4 (DENNING, 1993).

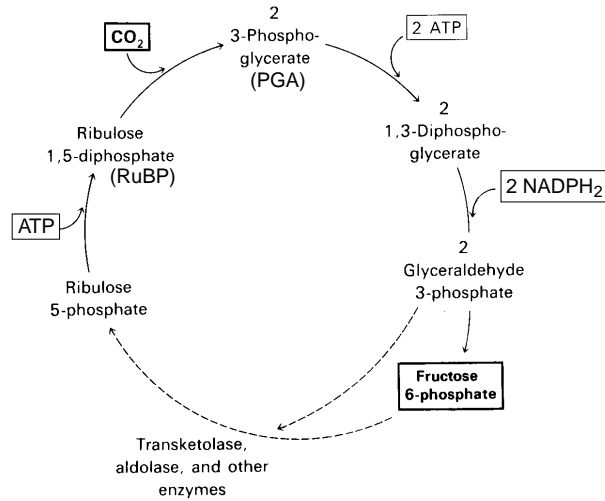


FIGURE 17: The Calvin Cycle. Six rounds of the cycle are required to form one six-carbon sugar. Scanned without permission from Stryer (1981).

Figura 4 – Ciclo de Calvin-Benson.

Todos os passos da fotossíntese são resumidos na Figura 5 (FARQUHAR et al., 1980)

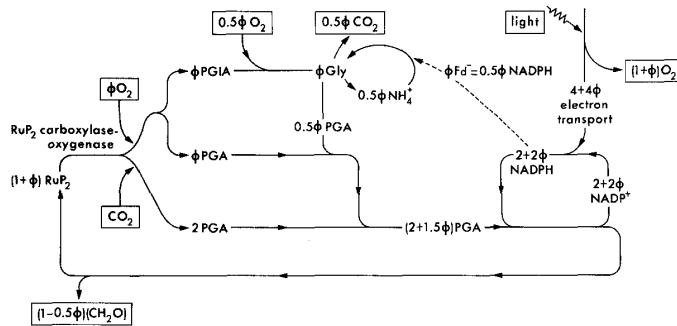


Fig. 1. Simplified photosynthetic carbon reduction (PCR) and photorespiratory carbon oxidation (PCO) cycles, with cycle for regeneration of NADPH linked to light driven electron transport. For each carboxylation, ϕ oxygenations occur. Gly denotes glycine, Fd^- denotes reduced ferredoxin (assumed equivalent to $1/2$ NADPH), PGA denotes 3-phosphoglycerate, PGIA phosphoglycolate. At the compensation point $\phi = 2$

Figura 5 – Esquema geral da fotossíntese.

Neste caso, ϕ representa a razão entre a velocidade de oxigenação da RuBisCO e a velocidade de carboxilação, isto é, $\phi = \frac{V_o}{V_c}$.

2 Modelo

Foi utilizado principalmente o modelo de Farquhar et al. (1980), com algumas modificações para o efeito da temperatura, propostas por Collatz et al. (1991), Bernacchi et al. (2001) e Medlyn et al. (2002).

Por este modelo, a assimilação líquida de carbono (A_n) é dada pela Equação 2.1.

$$A_n = \min\{w_c, w_j, w_s\} - R_d \quad (2.1)$$

Em que w_c é a taxa de fotossíntese limitada pela RuBisCO, w_j é a taxa de fotossíntese limitada pela cadeia de transporte de elétrons, w_s é a taxa de fotossíntese limitada pela síntese do produto final (açúcar) e R_d representa o carbono perdido pela respiração. A dependência do Ciclo de Calvin em w_c , w_j e w_s pode ser observada na Figura 5, enquanto a diferença entre o mínimo destes valores e R_d vem do fato que se deseja calcular a fotossíntese *líquida*, isto é, a fotossíntese bruta menos a respiração.

Segundo Farquhar et al. (1980), w_c pode ser dado pela Equação 2.2, a qual, por sua vez, vem da equação de Michaelis-Menten (Equação 1.3).

$$w_c = V_{c_{max}} \times \frac{C}{C + K_c \times (1 + O/K_o)} \quad (2.2)$$

Em que $V_{c_{max}}$ é a velocidade máxima da carboxilação da RuBisCO, K_c é a constante de Michaelis para a carboxilação e K_o é a constante de Michaelis para a oxigenação da RuBisCO, C é a concentração de carbono e O é a concentração de oxigênio.

Já w_j , segundo Medlyn et al. (2002), é obtido pela Equação 2.3, em que J é a taxa de transporte de elétrons e Γ^* é o ponto de compensação de gás carbônico, desconsiderando-se R_d .

$$w_j = \frac{J}{4} \times \frac{C - \Gamma^*}{C + 2\Gamma^*} \quad (2.3)$$

Também segundo Medlyn et al. (2002), J pode ser obtido em função de J_{max} , a taxa máxima de transporte de elétrons, e de $APAR$, a radiação fotossinteticamente ativa absorvida, encontrando-se as raízes da Equação 2.4.

$$\theta J^2 - (\alpha \times APAR + J_{max})J + \alpha \times APAR \times J_{max} = 0 \quad (2.4)$$

Em que α e θ são parâmetros empíricos.

Também, Collatz et al. (1991) afirmam que a Equação 2.5 é uma boa estimativa de w_s .

$$w_s = \frac{V_{max}}{2} \quad (2.5)$$

Farquhar et al. (1980) também apresenta a Equação 2.6 como forma de calcular Γ^* , em que $V_{o_{max}}$ é a velocidade máxima da oxigenação da RuBisCO.

$$\Gamma^* = \frac{K_c \times V_{o_{max}} \times O}{2 \times K_o \times V_{c_{max}}} \quad (2.6)$$

Por fim, Collatz et al. (1991) apresentaram as Equações 2.7 e 2.8, como uma forma de ajustar $V_{c_{max}}$ e R_d à temperatura (T_k , em Kelvin), respectivamente. Neste modelo, $V_{c_{max}}^o$ representa a $V_{c_{max}}$ original calculada pelo modelo de Farquhar et al. (1980). Também de acordo com Farquhar et al. (1980) $R_d^o = 0,015 \times V_{c_{max}}$. Além disso, a e b são constantes empíricas, oferecidas por Collatz et al. (1991).

$$V_{c_{max}} = \frac{V_{c_{max}}^o}{1 + \exp\left[\frac{-a+b \times (T_k)}{R \times T_k}\right]} \quad (2.7)$$

$$R_d = \frac{R_d^o}{1 + \exp[1,3 \times (T_k - 328,15)]} \quad (2.8)$$

$\pm 0,5^{\circ}\text{C}$.

3.2 Leitura de luminosidade

A leitura de luminosidade foi feita com o sensor LDR GL5528. Foi feita uma calibração da leitura obtida por este sensor com os dados do INMET, durante um dia, conforme a Figura 7.

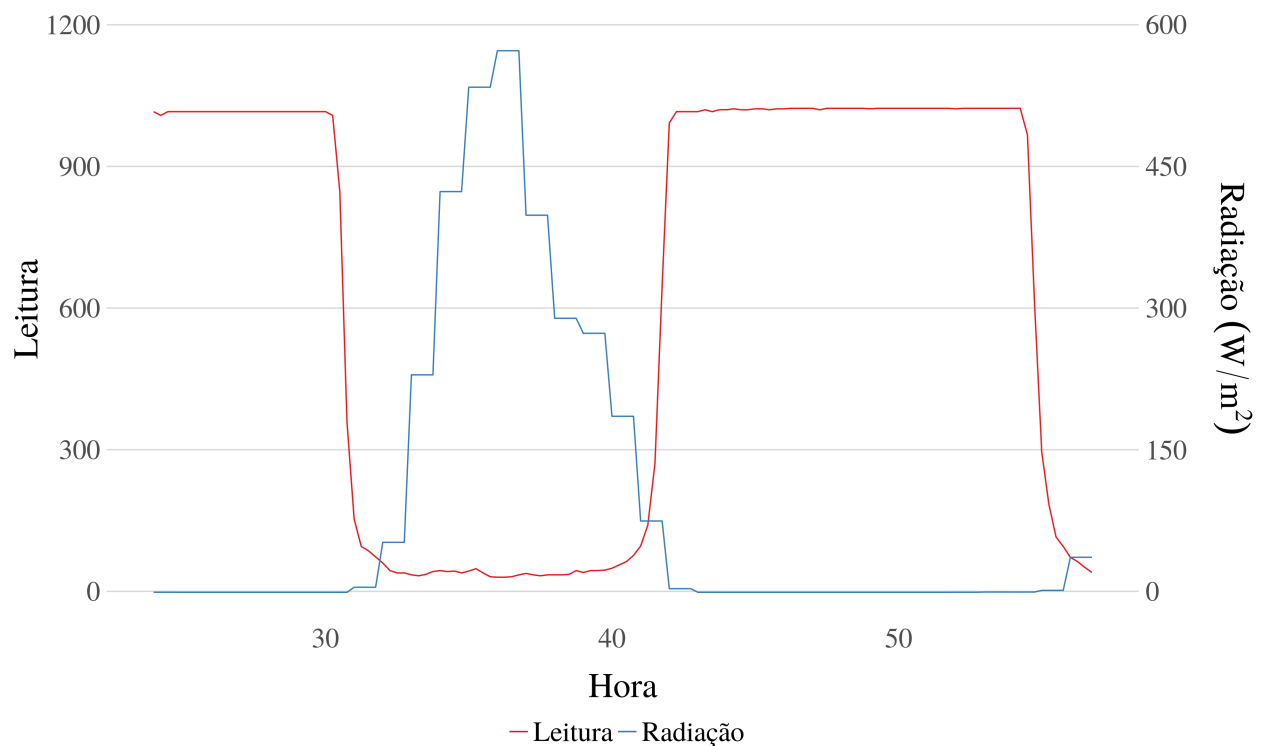


Figura 7 – Leitura do sensor LDR GL5528 comparada com dados de radiação (W/m^2) do posto meteorológico de Piracicaba do INMET (disponível em: <http://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=estacoes/estacoesAutomaticas>).

Com estes dados, obteve-se a Equação 3.1 e a Figura 8. Para esta curva, obteve-se um R^2 de 0,7435 e uma raiz do erro quadrático médio (RMSE) igual a $84,34 \text{ W}/\text{m}^2$.

$$Y = -12954,9 + 12932,99 \times e^{1/X} \quad (3.1)$$

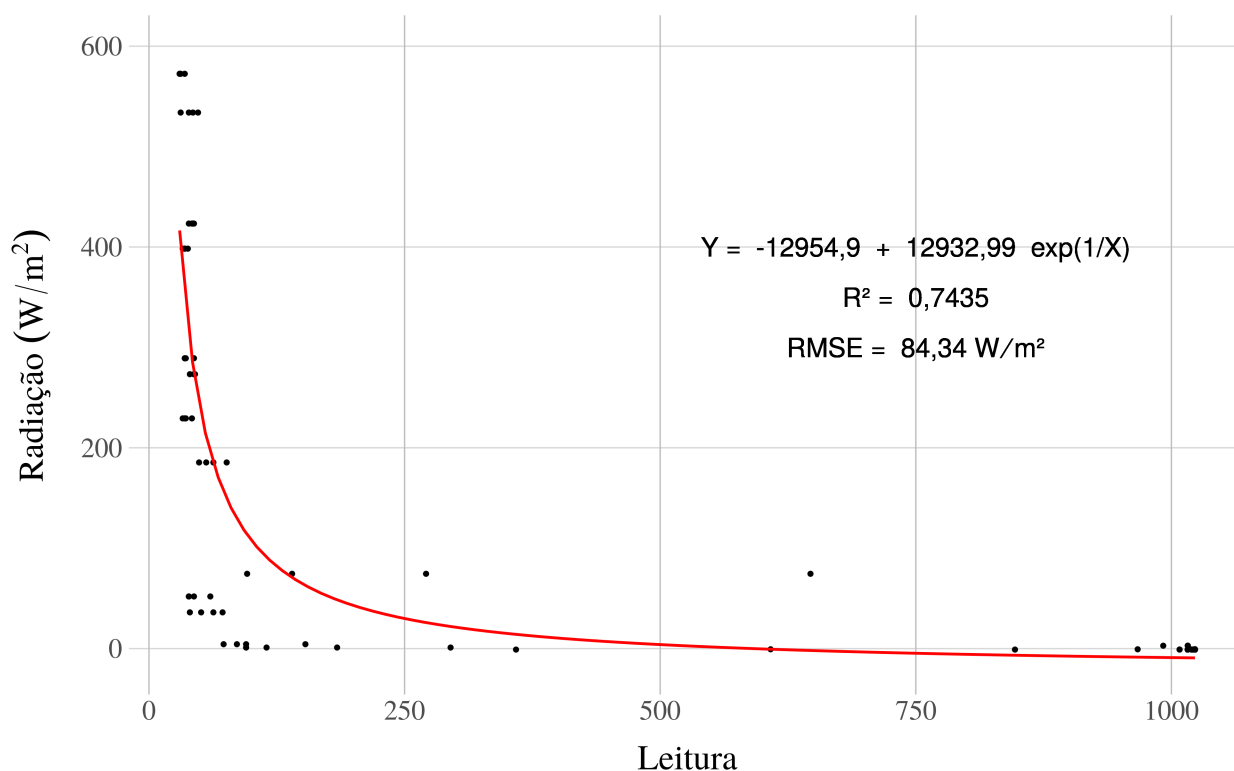


Figura 8 – Curva obtida com dados de radiação (W/m^2) do posto meteorológico de Piracicaba do INMET em função da das leituras do sensor LDR GL5528.

3.3 Conversão do sinal analógico para digital

Por fim, foi feita a conversão do sinal analógico para digital utilizando o conversor MCP3008. Este componente utiliza o protocolo de comunicação serial SPI para se comunicar com o Raspberry Pi. Por este protocolo, o Raspberry Pi envia um sinal de “relógio” (CLK) para o MCP3008, que marca os bits enviados entre ambos. O Raspberry Pi controla de qual canal do MCP3008 deseja obter os dados através do pino MOSI (do inglês, *Master-Out, Slave-In*), enquanto o MCP3008 devolve os dados pelo pino MISO (do inglês, *Master-In, Slave-Out*). Conforme ilustrado na Figura 6, é necessário um divisor de tensão para reduzir a tensão no pino MISO de 5V para 3,3V, tensão máxima suportada pelo Raspberry Pi.

Este protocolo é ilustrado na Figura 9, extraída da documentação do MCP3008.

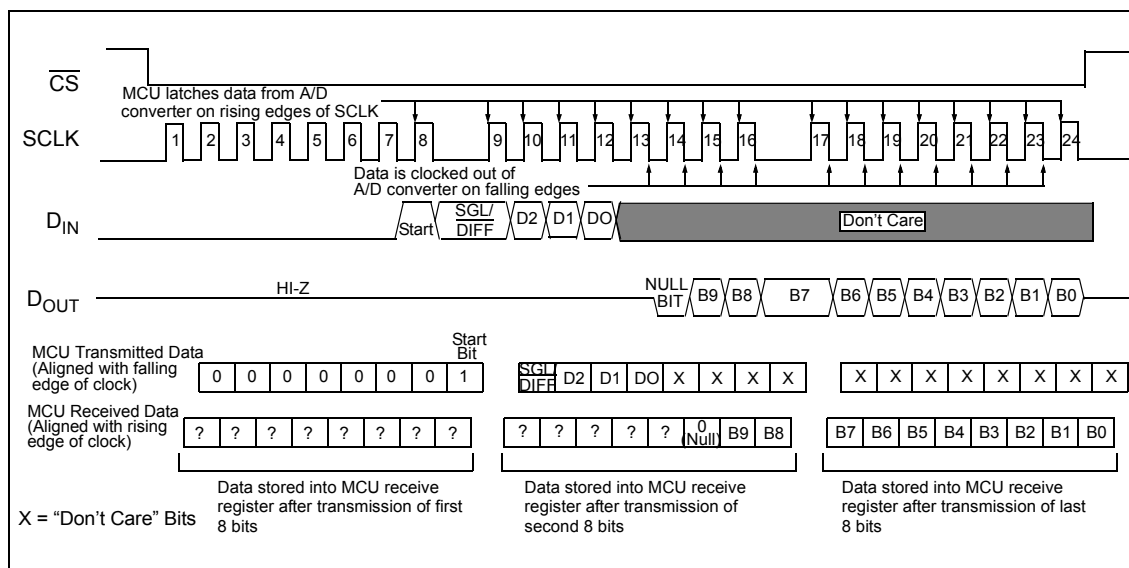


FIGURE 6-1: SPI Communication with the MCP3004/3008 using 8-bit segments (Mode 0,0: SCLK idles low).

Figura 9 – Comunicação entre o MCP3008 (Slave) e Raspberry Pi (Master), em que CS representa a seleção do Slave, SCLK, o pino CLK, D_{IN}, o pino MOSI e D_{OUT}, o pino MISO.

4 Código

O código foi escrito utilizando a linguagem Python e foi dividido em três arquivos: `leitura_dados.py`, que faz a leitura dos dados, `farquhar.py`, onde foi implementado o modelo de fotossíntese e `grafico.py`, que gera um gráfico em tempo real da fotossíntese em função do tempo.

Com isso, obtém-se um gráfico como o da Figura 10.

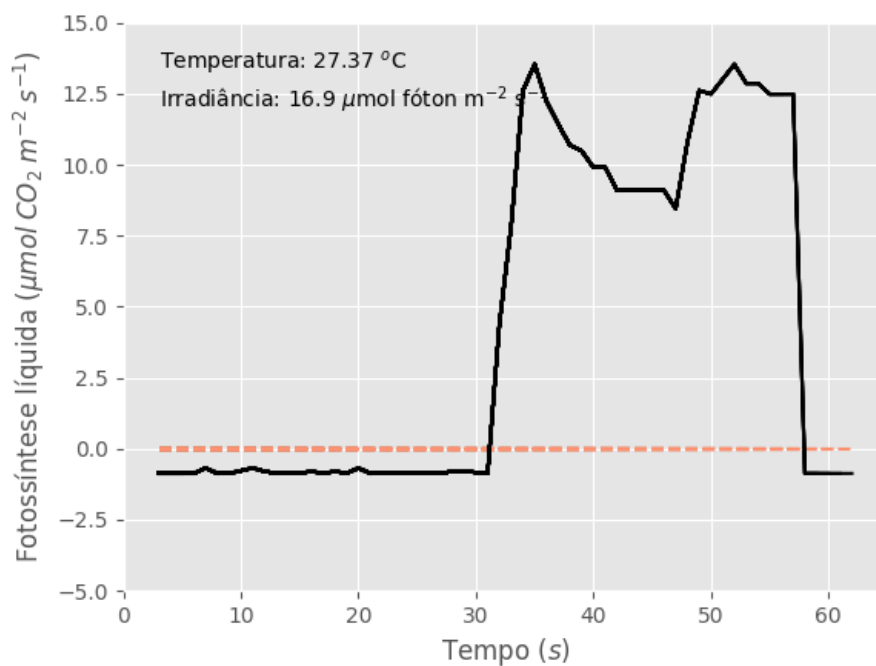


Figura 10 – Gráfico gerado pelo Raspberry Pi sob lâmpada no interior de um quarto. Por volta de 30 segundos, foi ligada uma lanterna, incidindo sobre o leitor de luminosidade.

4.1 leitura_dados.py

```
import spidev
import time
import os
import math

spi = spidev.SpiDev()
spi.open(0,0)
spi.max_speed_hz=1000000

def ReadChannel(channel):
    adc = spi.xfer2([1,(8+channel)<<4,0])
    data = ((adc[1]&3) << 8) + adc[2]
```



```

    return data

light_channel = 0
temp_channel  = 1

def read():
    leituraLuz = ReadChannel(light_channel)
    voltLuz = leituraLuz*5.0/1023.0
    light = math.exp(1/leituraLuz)*12932.99 - 12954.9
    light /= 0.248
    light = round(light, 2)
    temp = round(ReadChannel(temp_channel)*5.0/1023.0*100, 2)
    return([light, temp])

```

4.2 farquhar.py

```

import math
import numpy as np
import leitura_dados

#R = constante universal dos gases (J/(mol*K))
R = 8.314

def medlyn(kopt, Ha, Hd, Topt, Tk):
    #kopt = valor do parametro na condicao de temperatura otima
    #Ha = energia de ativacao (taxa de ascencao antes do ponto otimo)
    #Hd = taxa de decrescimo depois do ponto otimo
    #Topt = temperatura ótima da enzima
    e1 = np.exp(Ha*(Tk - Topt)/(Tk*R*Topt))
    e2 = np.exp(Hd*(Tk - Topt)/(Tk*R*Topt))

```

```

peak = kopt*Hd*e1/(Hd - Ha*(1 - e2))

return(peak)

def arrhenius(k25, Ha, Tk):
    #k25 = valor a 25 graus
    #Ha = energia de ativacao
    #Tk = temperatura atual
    return(k25*np.exp((Ha*(Tk-298.15))/(298.15*R*Tk)))

def collatz(vmax, temp):
    a = 220
    b = 703
    return(vmax*pow((1 + np.exp(-a+b*(temp)/(R*temp))), -1))

def Q10(k25, q10, temp):
    #Q10 = sensibilidade da reacao a uma mudanca de 10 graus celsius
    return(k25*pow(q10, (temp-298.15)/10))

def farquhar(temp=25.0,APAR=500.0):
    #temperatura em kelvin
    temp += 273.15

    #jmax = taxa maxima de fotossintese limitada pelo transporte de eletrons
    #Medlyn (soja)
    kopt_jmax = 328.57
    Ha_jmax = 88820
    Hd_jmax = 113770
    Topt_jmax = 38.17+273.15
    jmax = medlyn(kopt_jmax, Ha_jmax, Hd_jmax, Topt_jmax, temp)

```

```

#farquhar
q10_vmax = 2.21
k25_vmax = 98
vmax = Q10(k25_vmax, q10_vmax, temp)

#Collatz (1991)
vmax = collatz(vmax, temp)

#psfc = pressao atmosferica na superficie
psfc = 95000
#ci = pressao parcial de co2 (Pa)
ci = 30
#oi = pressao parcial de o2 (Pa)
oi = 0.209*psfc

#gammac = ponto de compensacao de co2 sem Rd corrigido p temperatura
# Bernacchi et al. (2001) / tabaco
k25_gammac = 3.1
Ha_gammac = 37830
gammac = arrhenius(k25_gammac, Ha_gammac, temp)

#kc = constante de Michaelis-Menten para carboxilacao
#ko = constante de Michaelis-Menten para oxidacao
k25_kc = 46
Ha_kc = 59356
kc = arrhenius(k25_kc, Ha_kc, temp)
k25_ko = 33000
Ha_ko = 35948

```

```

ko = arrhenius(k25_ko, Ha_ko, temp)

#respiracao - fase escura
Rd_o = 0.015*vmax
#corrigido por Collatz (1991)
Rd = Rd_o/(1 + np.exp(1.3*(temp-(55+273.15))))

#gamma = ponto de compensacao de co2 com Rd
gamma = (gammac + kc*(1+oi/ko)*Rd/vmax)/(1 - Rd/vmax)

#solucao da equacao quadratica por Bonan (2008)
alfa = 0.3
theta = 0.9
a = theta
b = -(jmax + alfa*APAR)
c = alfa*jmax*APAR
j1 = (-b + np.sqrt(pow(b, 2) - 4*a*c))/(2*a)
j2 = (-b - np.sqrt(pow(b, 2) - 4*a*c))/(2*a)
j = min(j1, j2)

#taxa de fotossintese limitada pela rubisco
wc = vmax*(ci - gammac)/(ci+kc*(1+oi/ko))

#taxa de fotossintese limitada pela luz
wj = j*(ci - gammac)/(4*(ci+2*gammac))

#taxa de fotossíntese limitada pelo produto final
ws = vmax/2

```

```
#assimilacao

An = min(wc, wj, ws) - Rd

return An
```

4.3 grafico.py

```
import time
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import math
import farquhar
import leitura_dados

tempo_inicial = float(time.strftime("%S")) + float(time.strftime("%M"))*60 +
float(time.strftime("%H"))*3600

plt.style.use("ggplot")

plt.ion()

time.sleep(1)

x = []
y = []

plt.ylabel(r'Fotossíntese líquida ( $\mu\text{ mol } \backslash; \text{CO}_2 \backslash; \text{m}^{-2} \backslash; \text{s}^{-1}$ 
$)')
```

plt.xlabel(r'Tempo (\$s\$)')

ymin=15

```

plt.ylim(-5, ymax)

while True:
    try:
        tempo = (float(time.strftime("%S")) + float(time.strftime("%M"))*60 + float(time.strftime("%H"))*3600) - tempo_inicial
        r,t = leitura_dados.read()
        y.append(farquhar.farquhar(t, r))
        x.append(tempo)

        txt = plt.text(x[0], ymax*0.8, "Temperatura: {}  $^{\circ}\text{C}$ 
\nIrradiância: {}  $\mu\text{mol f\acute{o}ton}$ ".format(t, r) + r'  $\text{m}^{-2}$   $\text{s}^{-1}$ ')

        plt.hlines(0,xmin = x[0], xmax = x[-1], linestyle = "dashed",
colors = "#fc9272")
        if y[-1] > ymax:
            ymax = y[-1] + 1

        plt.ylim(-5, ymax)

        plt.scatter(x, y, color = "black", marker = "")
        plt.plot(x, y, color = "black", marker = "")

        plt.pause(1)
        txt.remove()
    except KeyboardInterrupt:
        plt.close()
        break

```


Referências

BERNACCHI, C. et al. Improved temperature response functions for models of rubisco-limited photosynthesis. *Plant, Cell & Environment*, Wiley Online Library, v. 24, n. 2, p. 253–259, 2001. 4, 9

COLLATZ, G. J. et al. Physiological and environmental regulation of stomatal conductance, photosynthesis and transpiration: a model that includes a laminar boundary layer. *Agricultural and Forest meteorology*, Elsevier, v. 54, n. 2-4, p. 107–136, 1991. 9, 10

DENNING, A. S. Relating surface energy budgets to the biochemistry of photosynthesis: A review for non-biologists. *Lecture Notes, Colorado State University, USA*, 1993. 3, 5, 6, 7

FARQUHAR, G. v.; CAEMMERER, S. v. von; BERRY, J. A biochemical model of photosynthetic co₂ assimilation in leaves of c₃ species. *Planta*, Springer, v. 149, n. 1, p. 78–90, 1980. 4, 5, 8, 9, 10

MEDLYN, B. et al. Temperature response of parameters of a biochemically based model of photosynthesis. ii. a review of experimental data. *Plant, Cell & Environment*, Wiley Online Library, v. 25, n. 9, p. 1167–1179, 2002. 4, 9, 10