

UNIVERSITATEA "ALEXANDRU IOAN CUZA" DIN IAȘI

FACULTATEA DE INFORMATICĂ



LUCRARE DE LICENȚĂ

Modelarea matematică a biosistemelor



Propusă de:

Sebastian DARIE

Coordonator științific:

Lector. dr. Florin IACOB

Sesiunea: Iulie, 2017

UNIVERSITATEA “ALEXANDRU IOAN CUZA” DIN IAȘI
FACULTATEA DE INFORMATICĂ

Modelarea matematică a biosistemelor

Propusă de:

Sebastian Darie

Coordonator științific :

Lector Dr. Florin Iacob

Sesiunea: Iulie, 2017

DECLARAȚIE PRIVIND ORIGINALITATEA ȘI RESPECTAREA DREPTURILOR DE AUTOR

Prin prezenta declar că lucrarea de licență cu titlul „Modelarea matematică a biosistemelor” este scrisă de mine și nu a mai fost prezentată niciodată la o altă facultate sau instituție de învățământ superior din țară sau străinătate. De asemenea, declar că toate sursele utilizate, inclusiv cele preluate de pe Internet, sunt indicate în lucrare, cu respectarea regulilor de evitare a plagiatului:

- toate fragmentele de text reproduse exact, chiar și în traducere proprie din altă limbă, sunt scrise între ghilimele și dețin referința precisă a sursei;
- reformularea în cuvinte proprii a textelor scrise de către alți autori deține referința precisă;
- codul sursă, imagini etc. preluate din proiecte open-source sau alte surse sunt utilizate cu respectarea drepturilor de autor și dețin referințe precise;
- rezumarea ideilor altor autori precizează referința precisă la textul original.

Iași
30.06.2017

Absolvent: Sebastian Darie

DECLARAȚIE DE CONSIMȚĂMÂNT

Prin prezenta declar că sunt de acord ca lucrarea de licență cu titlul „Modelarea matematică a biosistemelor”, codul sursă al programelor și celelalte conținuturi (grafice, multimedia, date de test etc.) care însoțesc această lucrare să fie utilizate în cadrul Facultății de Informatică.

De asemenea, sunt de acord ca Facultatea de Informatică de la Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași să utilizeze, modifice, reproducă și să distribuie în scopuri necomerciale programele-calculator, format executabil și sursă, realizate de mine în cadrul prezentei lucrări de licență.

Iași

30.06.2017

Absolvent: Sebastian Darie

Cuprins

Introducere.....	1
Capitolul I.....	3
Biosisteme. Generalități	3
1.1 Biosisteme acvatice	5
1.2 Biosisteme terestre	8
1.3 Generalități cu privire la modelarea matematică.....	12
Capitolul II	17
Modele matematice în domeniul biosistemelor	17
2.1 Modele mecaniciste	18
2.2 Modele fenomenologice	19
2.2.1 Validarea	25
2.3 Modele elastice de creștere.....	30
2.3.1 Modele de creștere în teoria unidimensională	34
2.3.2 Modele de creștere tridimensională	39
Capitolul III	45
Implementarea în Matlab a unor modele biosistemice de creștere	45
3.1 Implementarea în Matlab a modelului Lockhart-Ortega-Cosgrove	46
3.2 Implementarea în Matlab a modelului morfoelastic.....	50
Concluzii	51
Bibliografie.....	52

Introducere

Complexitatea și dinamica organismelor ce interacționează pe planetă constituie un subiect pe cât de fascinant și important, pe atât de complex și multivalent în perspectiva abordării interdisciplinare. De la celulele vegetale, la dezvoltarea virusurilor cum ar fi HIV, a rezistenței la tratament a acestora, formațiunile patologice și dezvoltarea bacteriilor și până la studiul genomului, toate sunt supuse unor fenomene dinamice care influențează evoluția organismelor de la cel mai de jos nivel.

Fiind o temă de studiu cu un potențial de continuă explorare într-un areal științific ce parcurge informatica, biologia, bioinformatica, statistica, chimia, fizica, precum și ramuri ale acestora, tema aleasă prezintă un pronunțat interes în cercetarea multiplelor medii de viață și a organismelor cuprinse în constituția acestora.

Lucrarea de față își propune să abordeze modelarea matematică a unor biosisteme vegetale, tratând evoluția celulară a acestora, în starea lor naturală, precum și sub incidența unor factori perturbatori.

Primul capitol al prezentei lucrări prezintă biosistemele din perspectivă generală, tipurile acestora, precum și mediile în care se întâlnesc. Tot în acest capitol sunt cuprinse și etapele generale ale elaborării unui model matematic, procedeele și principiile care se parcurg în vederea obținerii unui model matematic generic, fiabil și fidel parametrilor tratați.

Al doilea capitol prezintă principalele tipuri de modele matematice, legătura lor cu domeniul biosistemelor, precum și tipurile de abordări specifice fiecărui tip, coroborat cu conceptele de validare și componentele materiale premergătoare acestora. În acest capitol este prezentat și un fenomen de o relevanță semnificativă pentru biosisteme, anume cel al creșterii.

Cel de-al treilea capitol prezintă implementarea, prin scripturi Matlab, și tratarea grafică a unor modele ce au la bază ecuații descrise în capitolul doi. Pe baza acestora se obțin soluții relative la modelele Lockhart-Ortega-Cosgrove și modelul de morfoelasticitate.

După capitolul trei se prezintă concluziile, evidențiindu-se importanța și potențialul de extindere al studiului temei abordate în această lucrare.

Finalmente, lista bibliografică menționată enumeră o parte din sursele consultate pentru descrierea aspectelor teoretice cu privire la biosisteme și modelele aplicabile acestora.

Contribuții

Una dintre contribuții constă în parcurgerea, selectarea și utilizarea lucrărilor incluse în bibliografie.

Documentarea, conceperea și organizarea materialului din lucrare ar putea fi privite în categoria contribuțiilor personale.

Chestiunile teoretice și practice ale temei, în special implementarea ecuațiilor care stau la baza modelelor matematice în prezenta lucrare, pot fi prin substanța lor, incluse de asemenea în categoria contribuțiilor.

Utilizarea mediului Matlab pentru tratarea numerică, simbolică și grafică a chestiunilor de implementat, reprezintă o opțiune personală, sugerată de parcurgerea cursului de „Modele continue și Matlab”.

Capitolul I

Biosisteme. Generalități

Forma „canonică” a unui biosistem este constituită din organisme vii (macro și microorganisme) și componente abiotice ale mediului (aer, apă, sol). Cele două componente interacționează, formând un sistem cu cicluri nutriționale și energetice. Biosistemele sunt caracterizate de rețeaua de interacțiuni pe care o dezvoltă între organisme și mediul în care trăiesc, în spațiul pe care-l ocupă. Planeta în sine este considerată un amplu biosistem.

Biosistemele sunt controlate de factori interni și externi. La factorii externi se încadrează clima, structura solului și timpul. Acești factori controlează structura și dinamica biosistemelor, fără ca biosistemul să influențeze factorii. Datorită dinamicii ce le caracterizează, biosistemele sunt perpetuu supuse anomaliilor și totodată își refac anomaliile anterioare.

Factorii interni controlează biosistemul dar în același timp sunt influențați la rândul lor de biosisteme, generând astfel o retroacțiune (feedback loop). Biosistemele aflate în medii asemănătoare dar în zone geografice diferite pot varia substanțial datorită tipurilor diverse de specii pe care le conțin.

Resursele furnizate sunt în cea mai mare parte influențate de procese externe cum ar fi climatul și baza solului, dar în același timp disponibilitatea resurselor este influențată de factori interni ca descompunerea și degradarea. Alți factori interni sunt anomaliile, succesiunile și tipurile de specii prezente. Omul trăiește în interiorul biosistemelor, dar prin acțiunile cumulate poate influența factori externi, cum ar fi clima.

Ingineria biosistemelor include aplicarea unor soluții ingineresti în domeniul biologiei, agriculturii și mediului. Ariile implicate includ: producția de bioenergie, dezvoltarea biosenzorilor, ingineria ecologică și a mediului, agricultura în mediu controlat, procesarea și siguranța hranei, ingineria agricolă (mașini, irigații, depozitare), calitatea și reciclarea apei (managementul contaminării apei).

Ierarhia biosistemelor poate fi proiectată începând cu microsistemele, constituite din arealuri individuale omogene, ocupând în jurul suprafeței de 10 km², continuând cu mezosistemele, care cuprind diverse modele, tipare în structura multiplelor arii ocupate, pe suprafețe de până la 1000 km², ajungând până la macrosisteme, cuprinzând bioregiuni – suprafețe mari de până la 100.000 km², având caracteristici ale factorilor biotici diferite de alte bioregiuni.

În cadrul unui biosistem au loc diverse procese, sub influența acțiunilor organismelor individuale. Natura acestor organisme – speciile, grupurile funcționale și nivelurile trofice față de care se situează, determină tipurile de acțiuni pe care indivizii le pot întreprinde, precum și eficiența relativă a acestora.

Astfel, procesele biosistemelor sunt dirijate de numărul speciilor, de natura fiecărei specii în parte și de numărul relativ al organismelor din aceste specii, biodiversitatea reprezentând astfel un important rol funcțional.

Conform teoriilor ecologice, speciile trebuie să aibă un anumit nivel de similaritate limitativă, pentru a putea coexista – trebuie să fie diferite una față de cealaltă într-un mod fundamental. În caz contrar, o specie ar ajunge să o excludă complet pe cealaltă în competiția dintre ele. (Schroener, Thomas W)

În pofida acestui lucru, efectul cumulativ al speciilor adiționale dintr-un ecosistem nu este liniar. Apariția sau dispariția unor specii, similare ecologic cu cele deja prezente într-un biosistem, indică un efect redus asupra funcționării biosistemului, în timp ce speciile distincte au un efect mai mare. În mod similar, speciile dominante au un impact mai mare în funcționarea unui ecosistem, în timp ce speciile rare tind să aibă un efect mai scăzut. Speciile-cheie din lanțul trofic tind să aibă un efect disproporționat asupra funcționării unui ecosistem, în raport cu răspândirea lor în acel ecosistem. (Chapin et al.)

1.1 Biosisteme acvatice

Biosistemele acvatice sunt biosisteme aflate într-o acumulare de apă, care conțin comunități de organisme dependente de mediul în care trăiesc și dependente unele de celelalte. Biosistemele acvatice se împart în alte două subcategorii: biosistemele marine și cele de apă dulce.

Biosistemele marine acoperă aproximativ 71% din suprafața planetei, conținând aproximativ 97% din totalul apei de pe Terra. Distincția față de biosistemele de apă dulce o realizează prezența compușilor chimici dizolvați în apă, în special săruri, din care se re remarcă cele de sodiu și de clor, cu aproximativ 85% din totalul substanțelor dizolvate.

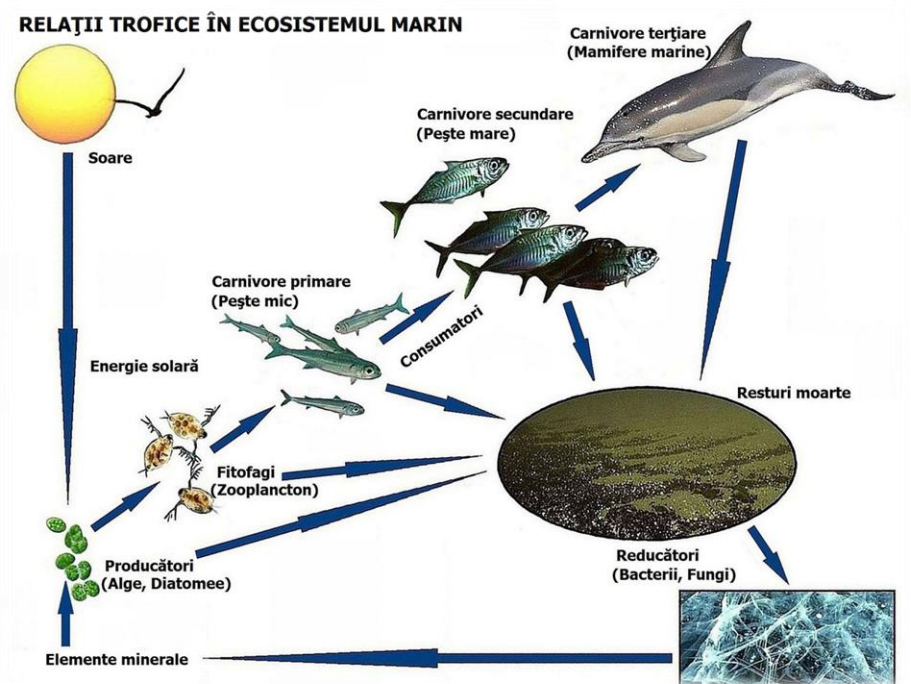


Fig.1.1 Structura unui biosistem marin

Acestea pot fi împărțite în numeroase zone în funcție de adâncime și de caracteristicile litoralului. Zona oceanică constituie suprafața cea mai mare ca întindere unde trăiesc și cele mai mari organisme (balene, rechini, pești mari). Zona bentonică reprezintă substraturile din adâncurile apelor, unde se regăsesc numeroase organisme, în special nevertebrate. Zona tidală reprezintă o suprafață ce devine descoperită în timpul refluxului (al mării joase), respectiv este acoperită de apă în timpul fluxului, populată cu numeroase microorganisme. (Archibold, O.W., 1995)

Alte zone neritice, apropiate de țărm pot include estuare, mlaștini sărate, recife de corali, lagune și mlaștini cu mangrove. În biosistemele marine se întâlnesc numeroase organisme, de la alge, corali, cefalopode, echinoderme, până la rechini.

Biosistemele de apă dulce se întind pe 0.78% din suprafața planetei, reprezentând 0.009% din totalul de apă și conținând până la 41% din speciile cunoscute de pești.

Se întâlnesc trei tipuri principale de biosisteme de apă dulce: lenitice, riverane și zonele umede.

Lenitice – ape stătătoare: lacurile, iazurile și heleșteele

La rândul lor, biosistemele lenitice pot fi distinse în trei zone: zona litorală, zona din larg și zona de adâncime. Zona litorală, aflată în vecinătatea țărmului, de adâncime redusă, populată de plante rădăcinoase specifice zonelor umede. Zona din larg, numită și zonă fotică sau pelagică, permite luminii să întrețină viața algelor prin fotosinteză, împreună cu speciile care se hrănesc cu alge, pe când în zonele de adâncime (numite și afotice) lumina nu este disponibilă, iar lanțul trofic este bazat pe materie organică din resturi animale și vegetale aflate în descompunere.

Ca subclasă a lacurilor, iazurile, se disting prin adâncimea mică și vegetația specifică mlaștinilor. Dimensiunile și adâncimea iazurilor variază în funcție de perioada anului, multe dintre ele apărând în perioada de revărsări ale râurilor primăvara, respectiv secând în perioadele calde. Această dinamică favorizează existența unei rețele trofice extinse, bazată în principal pe alge și alte plante acvatice, dar cu interacțiuni între diverse alte organisme precum moluște (melci), insecte, amfibieni, pești mai mari, păsări, reptile (aligatori) și mamifere (vidre). Dinamica trofică a acestui cadru biosistemic se poate remarca și prin efectele diverse pe care le au transformările mediului, cu efecte opuse pentru organismele aflate la niveluri diferite ale lanțului trofic: secarea iazurilor oferă un refugiu important pentru dezvoltarea larvelor insectelor și amfibienilor, în detrimentul peștilor, care pot fi afectați decisiv din cauza secării.

Riverane – apele curgătoare

Principalele zone ale biosistemelor riverane sunt determinate de viteza curentului apei și de panta albiei. Apele mai repezi conțin de cele mai multe ori, concentrații mai mari de oxigen dizolvat, care asigură o diversitate mai mare a organismelor față de apele mai line, care se regăsesc în lacuri. Aceste deosebiri stau la baza clasificării apelor curgătoare în râuri joase și râuri înalte.

Interacțiunile organismelor ce împart acest tip de biosistem variază în funcție de vecinătatea zonelor acvatice. Principala bază nutritivă diferă la cursurile de apă aflate lângă păduri, față de celelalte, unde baza nutritivă este formată din alge și fitoplancton. Pe lângă acestea, un rol important îl au mușchii și plantele de apă, în special în apele mai reci. Interacțiunile diferă și în funcție de dimensiunile mediului, care pot fi de câțiva centimetri în cazul unor izvoare sau pâraie, până la mii de kilometri în cazul fluviilor.

Biosistemele riverane oferă unele caracteristici care le fac unice față de alte ecosisteme acvatice: cursul apei este unidirecțional, schimbarea fizică continuă, organismele special adaptate la condițiile fluxului acvatic, precum și o mare diversitate atât spațială cât și temporală a habitatelor.

Zonele umede

Zonele umede – mlaștinile și turbăriile - sunt predominant populate de plante și mușchi, care s-au adaptat la suprafețe inundate de apă fie periodic, fie permanent. Datorită vecinătății foarte strânse dintre sol și apă, sunt considerate cel mai productiv biosistem, găzduind un număr însemnat de organisme, productivitate care este deseori transformată prin asanare și / sau îndiguire, pentru a fi configurate ulterior ca terenuri agricole. Tipurile de ape întâlnite în cadrul zonelor umede variază de la ape dulci până la salmastre și sărate.

1.2 Biosisteme terestre

Biosistemele terestre sunt biosisteme aflate la nivel terestru, aflate pe suprafețele de uscat ale planetei (pe continent și pe insule). Biosistemele terestre se disting de cele acvatice prin disponibilitatea mai redusă a apei, importanța acesteia acționând ca un factor limitator, prin fluctuațiile mai mari de temperatură în funcție de sezon dar și de ciclul zi-noapte și prin cantitatea mai mare de lumină disponibilă față de biosistemele acvatice. Prezența mai mare a unor gaze este de asemenea o trăsătură a biosistemelor terestre, precum dioxidul de carbon, care asigură fotosinteza, oxigenul care asigură respirația aerobă și azotul care este esențial în fixare.

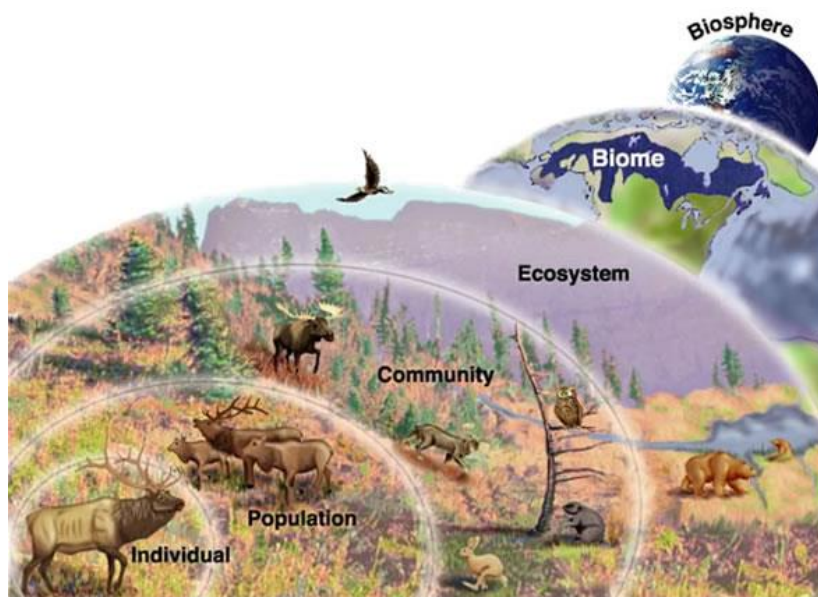


Fig.1.2 Reprezentarea unui biosistem terestru

Biosistemele terestre prezintă o diviziune subterană, de unde se obține cea mai mare parte a apei și a ionilor, precum și o diviziune atmosferică de unde se preiau gazele și unde energia fizică a luminii se transformă în energie organică prin procesul de fotosinteză.

Biosistemele terestre ocupă o suprafață mult mai mică a planetei (aproximativ 28.26%) spre deosebire de cele acvatice și sunt mai recente ca apariție istorică, primele organisme terestre fiind datate cu aproximativ 425 milioane de ani în urmă. Cu toate acestea, biosistemele terestre au avut parte de o puternică evoluție atât a organismelor vegetale cât și a celor animale.

Principalele trăsături evolutive ale organismelor terestre le permit acestora să își asigure necesarul de apă, fără ca ele să trăiască efectiv în apă, transportând apa din zonele de alimentare către restul corpului, prevenind evaporarea acesteia de pe suprafața corpului. Alte caracteristici evolutive le permit suportul în atmosferă, adaptarea la condiții extreme de temperatură, umiditate și vânt, specifice biosistemelor terestre.

Interacțiunile dintre organismele mediului terestru se deprind din structura rețelelor trofice, unde la bază se regăsesc plantele verzi, singurele capabile să folosească energia solară și nutrienții obținuți din sol pentru a produce molecule organice.

Biosistemele terestre se ramifică în șase tipuri primare: câmpia, pădurea tropicală, pădurea temperată (de foioase), taigaua, tundra și deșertul. Acestea reflectă diversitatea

precipitațiilor și temperaturii de pe Pământ. Cele mai mici suprafețe sunt ocupate de tundră și de câmpie, iar pe cea mai mare parte se află pădurea tropicală, care sunt și cele mai productive, în timp ce deșertul și tundra sunt cele mai puțin productive.

Câmpia reprezintă suprafața dominată de ierburi și arbuști de dimensiuni reduse, regăsindu-se pe aproape fiecare continent, având diviziuni și caracteristici ecoregionale în funcție de zonă (preeria, savana, stepa). Prezintă o varietate largă de organisme, de la insecte, la animale mari, găzduind printre cele mai mari diversități (în special savana).

Pădurea tropicală ocupă o suprafață însemnată din arealul terestru, fiind raportat ca gazda a 40-75% din speciile de organisme terestre, fiind foarte probabil să conțină și numeroase specii încă nedescoperite. Reprezintă zonele cu umiditate și temperatură crescută tot timpul anului, fiind și cele care au suferit cea mai mare reducere a suprafeței ocupate în ultimul secol.

Pădurea temperată este dominată în principal de arbori de foioase, cu o climă echilibrată: veri calde și ierni blânde, prezentând o diversitate a speciilor de arbori mai ridicată în zonele mai calde, față de zonele montane. Principalul factor de influență îl constituie apariția și dispariția sezonieră a coronamentului, a cărei umbră influențează creșterea diverselor organisme vegetale, multe dintre ele adaptându-și creșterea în perioada în care coronamentul nu este încă extins, precum și păsări care își planifică migrația astfel încât să coincidă cu deschiderea coronamentului.

Taigaua, supranumită pădure boreală este caracterizată de păduri de conifere, precum și un număr redus de păduri de foioase în partea sudică. Taigaua cuprinde o suprafață consistentă a globului, fiind al doilea cel mai mare biosistem, după ocean. Este populată de o varietate relativ redusă de organisme adaptate la condiții de viață dificile. Insectele au un rol important în rețeaua trofică, în calitate de polenizatori și descompunători și drept hrană pentru păsări în verile scurte. Alături de organismele aflate în vârful lanțului trofic, se regăsesc și populații de mamifere rumegătoare mai mari, care se hrănesc în principal cu vegetația limitată disponibilă.

Tundra este unul din biosistemele extreme, fiind caracterizat de vegetație redusă, alcătuită în principal din mușchi și licheni, precum și un număr limitat de arbuști și arbori izolați. Se ramifică în trei diviziuni: tundra alpină, Arctică și Antarctică. Fiind un mediu înghețat în cea mai mare parte a anului, coroborat cu climatul sărac în precipitații, similar

deșertului, dezvoltarea organismelor este îngreunată. Plantele au o perioadă scurtă de dezvoltare în perioada limitată a verii, când gheața se topește superficial, ducând ulterior la apariția unor micro-mlaștini, concomitent cu apariția păsărilor migratoare. În cazul tundrei antarctice, vegetația este aproape inexistentă, diversitatea fiind extrem de scăzută, reducându-se la câteva specii de mamifere mari.

Deșertul reprezintă un alt biosistem extrem prin condițiile de viață pe care le oferă. Se remarcă numărul foarte scăzut de precipitații, temperaturile înalte sau foarte scăzute și diversitatea limitată a organismelor, fiind unul din cele mai puțin populate biotopuri. În funcție de regiune și de climat, deșerturile pot fi aride (nisipoase, stâncoase sau sărate) sau înghețate (polare). Lipsa vegetației determină nivelarea solului și apariția eroziunii, suprafața suferind modificări substanțiale în timp. Organismele endemice zonelor deșertice sunt special adaptate condițiilor aspre. Plantele au dezvoltat structuri dure, cu foliaj redus sau cu spini, unele având un ciclu de viață extrem de scurt, putând germina, înflori și muri în decurs de câteva săptămâni de la căderea unor precipitații, altele având o structură rezistentă conferită de rădăcinile adânci care accesează umezeala din subteran. Animalele își conservă temperatura, multe dintre ele fiind predominant nocturne, adăpostindu-se în timpul zilei, în timp ce altele sunt într-o stare de hibernare perioade lungi, conservându-și resursele de apă și redevenind active pentru scurtele perioade în care plouă.

Biosistemele care se regăsesc în medii similare, dar aflate în părți diferite ale lumii pot avea caracteristici substanțial contrastante, datorită speciilor diferite pe care le conțin. Introducerea unor specii străine, care nu sunt native zonelor respective, poate cauza schimbări semnificative în funcționarea biosistemului.

Introducere în context

Modelele sunt esențiale când avem de a face cu descrierea unui fenomen sau a unui sistem, prin prisma faptului că ne pot oferi răspunsuri cu privire la caracteristici și comportamente importante ale unor sisteme în prezența unor anumite condiții. Modelele pot fi de tip verbal, mental, fizic sau matematic (*Ljung & Gland, 1994*). În cadrul modelării matematice se transpun un număr considerabil de ipoteze, fapt ce presupune numeroase avantaje: cel al preciziei și conciziei de limbaj pe care o are matematica, foarte util în formularea ideilor, ale cărui reguli bine definite facilitează manipularea datelor, disponibilitatea rezultatelor matematice demonstrate anterior și folosirea computerelor pentru efectuarea calculelor numerice.

Există diferite modele matematice asociate cu variabile biochimice, fiziologice și fizice ce se raportează la biosisteme. Biosistemele rezidă în orice sistem de ființe vii, cu toate că termenul a fost folosit în sens larg fie pentru grupuri de plante sau animale. Ca exemplu de sisteme, mlaștinile (wetlands) antropice au fost recunoscute ca medii active de „tehnologie verde” pentru sisteme de epurare a apei, datorită proceselor biologice pe care le utilizează (asimilarea țesutului vegetal și transformările microbiene), ducând astfel la considerarea lor drept biosisteme (*Kumar & Zhao, 2011*).

Tehnologia biosistemelor folosește aplicații ale modelelor matematice în biomasă și în prognoza productivității. Acest lucru se obține prin utilizarea sistemelor de măsurare și control a variabilelor asociate producției plantelor.

Modelele matematice pot avea la bază diverse principii și metode, cum ar fi: mecanica staționară, funcțiile termice, integrarea gaussiană, conductanța stomatală (stomă), analiza azotului, modele de sisteme biologice dinamice, PAR (precision approach radar - aviație), gradienti 3D ai parametrilor climatici, regresie lineară și non-lineară, difuzie-reacție (sistem).

1.3 Generalități cu privire la modelarea matematică

Determinarea domeniului (scope) modelului este esențială în construirea acestuia, în cadrul procesului de construire a modelului matematic și folosirea acestuia pentru a rezolva diferite situații reale (procesul de modelare matematică- Miwa 1986a). Procesul constă în mod uzual din patru etape: 1. Formularea matematică, 2. Programarea, 3. Estimarea parametrilor și 4. Evaluarea modelului (*Soltani & Sinclair 2012*). Uneori dezvoltatorii de modele agricole nu parcurg în mod clar fiecare etapă, claritatea acestora fiind importantă. Nedezvoltarea completă a fiecărui pas poate duce la compromiterea modelului rezultat, în cazul în care este folosit în afara contextului în care a fost prevăzut de către dezvoltator. Dacă procesul de modelare recunoaște toate etapele, șansele sunt mari ca în urma procesului să rezulte un model mai puternic (*Haefner, 2005; Sinclair and Seligman, 2000*). Cel mai important pas din acest proces este cel al formulării, anume stabilirea de ipoteze bazate pe eliminarea sau neglijarea metodică (deliberată) a detaliilor irelevante.

De stabilirea corectă a ipotezelor depinde veridicitatea și naturalețea situației și rezolvarea corectă a problemei, stabilirea ipotezelor potrivite fiind considerată cea mai

importantă decizie în procesul de modelare matematică, aspect ce conferă un rol important în proces ipotezelor.

Definirea obiectivelor

Înainte de începerea unui proiect de modelare este importantă clarificarea obiectivelor modelului, fapt ce influențează în două moduri direcția proiectului. Obiectivele operației de modelare se explică și se definesc în mod amplu la începutul procesului, fiind esențială o specificare clară a obiectivelor, în vederea definirii necesităților și caracterului unui model agricol (*Sinclair and Seligman, 2000*). Claritatea, simplitatea și maleabilitatea obiectivelor cresc șansele de reușită ale proiectului (*Sinclair and Seligman, 1996*).

Criteriile de stabilire a caracterului acceptabil al unui model trebuie definite în funcție de obiectivele modelului. Este posibilă definirea în mod cantitativ a unor reguli de oprire (stopping rule), din punct de vedere al criteriilor statistice, cu privire la prognozele corespunzătoare unui anumit eșantion de observații.

Se pregătește astfel pe baza obiectivului, o listă de ipoteze specifice care va fi inclusă în model. Inițial poate fi utilă listarea ipotezelor sub formă de cuvinte și fraze.

Trebuie considerate următoarele situații în identificarea ipotezelor ce vor fi folosite la construirea modelului: 1) modelele trebuie să aibă generalitate, 2) ipotezele vor necesita date de intrare ca parametri sau variabile independente (driving variables), 3) cele mai utile modele includ parametri și variabile de stare ce pot fi ușor determinate prin măsurători sau observații simple, 4) Ipotezele/ modelele existente reprezintă o resursă utilă, dar trebuie evaluate luând în considerare obiectivele construirii modelului curent (*Sinclair and Seligman, 1996*).

Descrierea cantitativă a ipotezelor

Ipotezele calitative trebuie exprimate sub forma funcțiilor matematice, modul în care fiecare ipoteză este reprezentată în sistemul de modele fiind exprimat prin intermediul ecuațiilor. Interacțiunea ipotezelor trebuie luată și ea în considerare, fapt ce deseori va crea un întreg nou strat de ipoteze, în general fiind presupus că nu există interacțiuni între ipoteze, în afara a ceea ce a fost definit în mod explicit. Determinarea cantitativă a modelului poate fi cea mai dificilă, necesitând o cunoaștere riguroasă a sistemului care este modelat și o înțelegere a celor mai relevante relații.

Întotdeauna se pot adăuga funcții suplimentare modelului, dar trebuie analizată ponderea acestora în îmbunătățirea performanței modelului pentru obiectivul stabilit. În mod frecvent selectarea funcțiilor cantitative se consideră ca fiind cea mai crucială fază a construirii modelului, astfel încât funcțiile să descrie componenta modelului în cauză în mod suficient dar și eficient. Adunarea ecuațiilor fără a înțelege și a evalua relevanța acestora asupra obiectivelor constituie o neglijare a unui aspect esențial al modelării (*Soltani & Sinclair, 2012*).

Programarea, ca etapă necesară în context

După ce ipotezele au fost definite și cuantificate, modelul va fi transpus (construit) în cod. Acest fapt presupune buna cunoaștere și înțelegerea sistemului și ar trebui să fie o sarcină simplă, chiar banală, lucru ce nu trebuie să excludă atenția necesară transformării modelului în cod. Este esențială verificarea algoritmilor și corectitudinea codului, în raport cu relațiile matematice definite, precum și depanarea în vederea eliminării erorilor, lucru uzual în construirea programelor.

Codul programului poate fi organizat în secțiuni individuale, fiind reprezentat sub formă de diagrame secvențiale (flow diagram), iar la modelele mai scumpe structurarea codului astfel încât fiecare secțiune să fie plasată în propriul ei submodel.

Plasarea valorilor pentru parametrii funcțiilor în secțiunea lor separată de inițializare poate ajuta la folosirea modelului în simulări cu diverși parametri, aspect realizat prin scrierea funcțiilor din model folosind numele parametrilor și apoi definirea tuturor parametrilor la începutul programului. Astfel se poate facilita simularea altor condiții (o cultură diferită) prin adaptarea parametrilor relevanți la inițializare (*Haefner, 2005*).

Estimarea parametrilor

Sunt acceptate două metode generale pentru estimarea parametrilor:

1. **Literatura** - Dacă valoarea unui parametru a fost definită în urma cercetărilor publicate anterior, acele date pot constitui un început solid, aceasta fiind o sursă de parametri oportună, studiul făcut fiind supus rigorilor evaluării competente și rezultatele fiind disponibile oricui.
2. **Măsurarea** - Experimentele sau observațiile trebuie făcute de persoana care construiește modelul, stabilindu-se și executându-se protocoale speciale de cercetare

pentru a obține informații despre parametrii doriți. Este necesară analiza statistică temeinică pentru obținerea parametrilor, aceasta fiind o metodă costisitoare, lentă și migăloasă. S-au prezentat (*Soltani et al. 2004-2006*) exemple de proceduri de estimări ai parametrilor raportate la diferite aspecte ale creșterii și dezvoltării culturilor.

O altă metodă foarte frecvent folosită la estimarea parametrilor este „calibrarea” parametrilor, astfel încât rezultatul final al modelelor totale să coincidă cu rezultatele estimate, acest aspect realizându-se prin testarea modelului cu diferite valori pentru un anumit parametru, apoi alese valorile care corespund cel mai aproape observațiilor rezultatelor majoritare.

Este dificil de făcut adaptări ale parametrilor prin observații ale modelului complet pentru a obține valori mai apropiate, deoarece nu se știe sigur care parametri trebuie adaptați. O problemă importantă este că adaptările parametrilor se pot echilibra (compensa) reciproc, parametrii deviind astfel de la modul de operare al sistemului vegetal.

Cea mai mare limitare a abordării prin „calibrare” o constituie reducerea modelului la un exercițiu de potrivire empirică la observațiile sub un anumit set de circumstanțe. Parametrii sunt mai curând adaptați să obțină rezultate finale decât să se bazeze pe înțelegerea modului cum funcționează plantele și să definească anumite funcții pentru procesele individuale.

Uneori „calibrarea” se face prin rezervarea unui set de date separat pentru procedura de calibrare, aspect ce nu depășește problema empirică de bază a acestei abordări. Succesul parametrilor „calibrați” în găsirea unui al doilea set de date indică doar reușita împărțirii celor două seturi de date, astfel încât să reprezinte aceeași grupare (populație) de date. Astfel, succesul cu un model calibrat asigură doar corespondența empirică cu al doilea set de date (*Soltani & Sinclair, 2012*).

Evaluarea și / sau validarea unui model în general

Orice model ar trebui evaluat având în vedere robustețea și transparența sa. Transparența se referă la ușurința înțelegerii modelului, iar robustețea la cât de exacte sunt prognozele modelului cu rezultatele observate din sistem. În urma pașilor construirii modelului menționați anterior, acesta poate fi rulat și rezultatul său comparat cu măsurători din sistem.

Un test al rezultatului modelului în comparație cu observațiile este necesar în special când modelul va fi folosit într-un mod aplicație, iar utilizatorii modelului necesită unele idei

cu privire la situațiile în care modelul s-a dovedit util, împreună cu o repudiare a fiabilității (disclaimer) în orice alte situații (*Sinclair and Seligman, 1996*).

Evaluarea modelului trebuie făcută pe baza unor criterii predefinite stabilite la etapa definirii obiectivelor. Dacă aceste criterii predefinite stau la baza unor corespondențe rezonabile a prognozelor cu măsurătorile din sistem, procesul de modelare este complet și gata de utilizare. Dacă rezultatele evaluării modelului nu sunt satisfăcătoare, este necesară reconsiderarea ipotezelor, ecuațiilor și metodelor cantitative folosite la construirea modelului.

Dacă sunt identificate metode și ecuații alternative, atunci evaluarea modelului va fi repetată și dacă prognozele și rezultatul sunt încă nesatisfăcătoare, cel mai probabil indică o problemă de bază cu ipotezele. Este necesară o mai amplă investigație experimentală, iar procesul de modelare poate fi lăsat deoparte până când observațiile permit ipoteze îmbunătățite (*Soltani & Sinclair, 2012*).

Când se analizează oportunitatea unui model se țin cont de două criterii esențiale: transparența și robustețea.

Transparența presupune înțelegerea facilă a parametrilor modelului, diagramelor secvențiale (flow) și a codului, de către cei neimplicați în dezvoltarea lui. Pe cât posibil, funcțiile sunt descrieri de sine stătătoare ale proceselor din plante și din cultură. Transparența este redată de un număr minim de coeficienți empirici, aceștia putând fi observați și măsurați în mod independent.

Robustețea presupune producerea de către model a rezultatelor de simulare comparate favorabil cu observațiile. Aprecierea „favorabilului” va depinde direct de obiectivele originale ale modelului.

Capitolul II

Modele matematice în domeniul biosistemelor

Modelarea matematică poate fi împărțită în două grupe principale: modele mecaniciste (white box) și fenomenologice (black box). Modelele white box sunt deterministe și folosesc modelarea fizică, fiind astfel clare asupra sistemului modelat. Modelele black box, numite și de identificare, reprezintă descrieri directe ale datelor și prezintă dezavantajul neexplicării mecanismelor de nivel inferior. Combinarea celor două modele are ca rezultat modelele gray box.

2.1 Modele mecaniciste

Dezvoltarea unui model mecanicist implică înțelegerea temeinică a proceselor fizice, chimice și biologice care au loc într-un sistem, iar utilizarea acestuia necesită o validare adecvată. Aceste modele sunt explicative, putând fi statice sau dinamice (Kita, 2011).

Studierea și descrierea unui sistem constă în două procese: construirea modelelor matematice și soluția numerică a mulțimii de ecuații ce descrie comportamentul sistemului. Modelele mecaniciste au la bază ipoteza conform căreia starea unui sistem poate fi cuantificată, iar schimbările care au loc în sistem pot fi descrise prin intermediul ecuațiilor matematice de variație ale schimbării sau ecuații diferențiale. Modelele cuprind diverse componente: variabile de stare, ecuații diferențiale, parametri și date de intrare.

Fazele de modelare

Procesul modelării matematice constă în trei faze (*Ljung & Gland 1994*):

1. Structurarea problemei
2. Formularea ecuațiilor de bază
3. Formarea modelului stare-spațiu

Dacă modelul nu este foarte complex la nivel de variabile de stare, poate fi utilizat la construirea sistemelor de control și a strategiilor optime de control pentru obținerea celei mai bune creșteri, producții și calități ale recoltelor.

Structurarea problemei

Înțelegerea structurii generale a sistemului este importantă (*Ljung & Gland 1994*), aceasta facilitându-se prin clarificarea următoarelor aspecte:

- Ce fel de semnale reprezintă intrările și ieșirile
- Ce se întâmplă în sistem
- Care din cantități sunt constante
- Ce fel de semnale reprezintă variabilele interne

După ce decizia în privința variabilelor de sistem care sunt relevante a fost luată și a fost stabilit modul în care acestea interacționează, se trece la faza de împărțire a sistemului în subsisteme. Această fază reprezintă o solicitare consistentă pentru modelator, fiind necesară înțelegerea intuiției sistemului fizic. Tot în această fază sunt determinate nivelul complexității și gradul de aproximare. (*Ljung & Gland 1994*)

Formularea ecuațiilor de bază:

Se formulează relațiile cantitative dintre intrările și ieșirile din sistem (*Ljung & Gland 1994*), aici fiind utile cunoștințele despre procesele mecanice, fizice, chimice și biologice ce au loc în sistem.

Relațiile dintre variabilele sistemului pot fi de diferite tipuri: legi de conservare și relații fundamentale. Legile de conservare sunt cele bine stabilite: cele fizice, chimice, mecanice.

Relațiile constitutive pot fi construite de date experimentale sau din simple formule ce descriu caracteristicile generale ale relației (*Ljung & Glad 1994*).

O bună modalitate de formulare a ecuațiilor de bază dintr-un subsistem constă în:

1. Scrierea legilor de conservare care sunt relevante pentru subsistemul în cauză.
2. Folosirea unor relații constitutive potrivite pentru descrierea legilor de conservare din variabilele modelului și calcularea dimensiunilor diferitelor cantități ca verificare.

Formarea modelului stare-spațiu:

Deciderea variabilelor interne care vor fi considerate variabile de stare are loc în această fază. Apoi se exprimă derivata fiecărei variabile de stare ca funcție a variabilelor de stare $x(t)$ și a intrărilor $u(t)$ precum și ieșirile $y(t)$ ca funcții ale variabilelor de stare și de intrare astfel:

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(x(t), u(t))$$

$$y(t) = h(x(t), u(t))$$

2.2 Modele fenomenologice

Regresia lineară

Acuratețea măsurătorii depinde de modelul folosit și de cunoașterea procesului studiat. Specificitatea sistemului către anumite aplicații simplifică ecuațiile modelului (*André 2013*).

Un exemplu de model black box linear ar fi cel al măsurării fotorespirației la nivelul plantei integrale și al atmosferei. Acesta asigură corespondența dintre schimburile de oxigen și dioxid de carbon, evitând astfel ecuații complexe și demonstrând factorii principali în reglarea fotosintezei cu asocierea inevitabilă cu fotorespirația. Un astfel de model, chiar dacă este simplu, reprezintă un instrument util cu o aproximare bună, facilitând înțelegerea relației globale dintre plante și biosferă.

Observând corespondența diferitelor grafice de variabile care participă la proces, se poate conchide dacă variabila în cauză are sau nu un rol important în derularea procesului studiat.

Regresia lineară multiplă

În multe cazuri, y va depinde de numeroase variabile independente, ca $x_1, x_2, x_3 \dots x_n$. Un astfel de caz se poate trata prin metoda regresiei lineare multiple.

Această metodă a fost folosită pentru modelarea sporilor de polen și cei ai unor fungi, luând în calcul concentrații ale unor poluanți ne-biologici, doza zilnică de ozon (O_3), concentrațiile de PM_{10} , parametri meteorologici de temperatură (T), umiditatea relativă (RH), precipitațiile și viteza vântului ca factori predictivi.

Rezultatele au arătat diferențe între modelele pentru fiecare spor de polen și de fungi, în funcție de perioada analizată, indicând astfel că corelațiile stabilite ca statistic semnificative, nu pot fi, totuși, suficient de consistente.

Regresia nonlineară

În multe aplicații funcțiile de regresie vor depinde într-un mod nonlinear de coeficienții de regresie.

Importanța modelelor de regresie nonlineară este remarcată prin reprezentarea mai bună de către modele nonliniare - în detrimentul celor liniare - a diverselor procese în care sunt implicate solurile și recoltele.

În funcție de domeniul de aplicare și de obiectiv, sunt stabilite diferite priorități în corespondența modelelor nonliniare, care se pot restrânge la obținerea de estimări acceptabile pentru parametri și la existența unui model potrivit care să coincidă cu întrunirea ipotezelor standard ale modelelor statistice.

Un model de regresie nonliniară a fost folosit de Aufhammer et al.(2006) pentru modelarea rolului „norului brun” cu ajutorul unei liste cuprinzând productivitatea și efectele meteorologice din India.

Tipul logistic

Se întâlnesc multe fenomene în natură care manifestă o creștere inițială rapidă (efectiv exponențială) ce apoi încetinește după un anumit punct (în care graficul atinge un punct de inflexiune) până la atingerea unui punct de echilibru sau de saturație a sistemului (sarcina admisibilă). Curbura logistică a fost introdusă de Verhulst în secolul al XIX-lea, având ca obiectiv studiul creșterii demografice.

În anii 1920 interesul pentru acest tip de metodă a revenit, datorită eficienței în modelarea dezvoltării și evoluției de creștere a diverselor altor fenomene (*Román-Román, Torres Ruiz 2012*). Modelele de acest tip au fost folosite în ecologie, demografie, biologie și medicină, pentru analiza creșterii bacteriilor, tumorilor și diverselor specii de animale și plante.

Modelul logistic determinist este definit ca o ecuație diferențială unde constanta lineară definește rata de creștere, în timp ce termenul pătratic corespunde inhibării sau opririi ratei de creștere. În acest sens, termenul pătratic este de cele mai multe ori mai mic decât cel linear.

Când populația este redusă, termenul pătratic are un efect neînsemnat asupra creșterii, ceea ce va însemna că populația pornește cu o creștere aproape exponențială. Pe măsură ce populația crește însă, termenul inhibitor va ajunge să încetinească substanțial rata creșterii.

Fluctuațiile de mediu și lipsa unor măsurători de precizie reprezintă zgomote omniprezente care contribuie cu entropie la nivelul modelului logistic.

Pentru procesele a căror funcție de medie reprezintă o curbă logistică, funcția tranziție de densitate se poate determina explicit, ceea ce permite estimarea parametrilor prin eșantionarea discretă a traiectoriilor după ce se evidențiază corespondența dintre funcțiile

tranziție de densitate și distribuția inițială. O astfel de ameliorare permite calcularea densității primului moment de trecere, ceea ce necesită o formă explicită de astfel de densități (*Román-Román, Torres Ruiz 2012*).

Modelele logistice fac posibilă găsirea densităților de tranziție explicite, caracteristică ce permite analizarea deducțiilor din eșantionarea discretă a traiectoriilor. Permit de asemenea și estimarea unor funcții care fac posibilă utilizarea anticipativă a modelelor. Studiind primul moment de trecere, aceste modele ajută la determinarea variabilelor temporale care identifică când anume este verificată o condiție prestabilită.

Abordări statistice

Metodele statistice de abordare a modelării sistemelor și a proceselor constau, în esență, în evaluarea și aplicarea unor tehnici de statistică asupra unor seturi de date. Singura limitare o reprezintă numărul mare de seturi de date cu diferite condiții necesare pentru aplicarea oricăror pachete statistice. Exemple de tehnici de statistică: metoda Levenberge-Marquardt (LeM), efecte nonlineare mixte (NLME) și dinamici (cinetici) de ordinul întâi (*Stein et al. 2007*).

Considerând că aceste modele folosesc un număr mare de seturi de date, este o concluzie frecventă faptul că magnitudinea coeficienților generați variază semnificativ în funcție de specie.

Modele de încetinire (retardation) dependente de timp

Aceste modele presupun existența unei variații continue în procesul studiat, care este comună fiecărui proces al unui biosistem, în care timpul este o variabilă comună care se degradează.

Este de remarcat totuși că performanța acestui tip de modele este adesea limitată de un flux rezidual de anumite variabile ale sistemului studiat.

Acest tip de modelare este văzut printre cele mai eficiente metode în proiectarea mlaștinilor antropice, datorită scăderii în stare staționară (steady-state) a necesarului de oxigen sau a oricărei alte componente. În astfel de aplicații s-a plecat de la premisa că ratele de eliminare scad de-a lungul timpului, deoarece substanțele ușor biodegradabile sunt eliminate primele în mod rapid, lăsând astfel în urmă o soluție de componente mai puțin biodegradabile, implicit cu dinamici de eliminare mai scăzute. Această schimbare continuă în

compoziția soluției poate fi reprezentată printr-o constantă volumetrică cu rată de ordin întâi (*Khumar & Zhao 2011*).

Rețele neuronale

Rețelele neuronale artificiale constituie modele computaționale paralele alcătuite din unități de procesare adaptive interconectate. Ele sunt implementări paralele dense ale unor sisteme nelineare statice sau dinamice.

O caracteristică foarte importantă a acestor rețele o reprezintă natura lor adaptivă, care se bazează pe „învățarea prin exemplu” în detrimentul „programării”, în contextul rezolvării problemelor. Acest aspect ajută ca modelele computaționale în cauză să fie de interes în domenii de aplicare în care problema ce trebuie rezolvată este înțeleasă incomplet, dar pentru care există date de antrenament .

O rețea neuronală artificială este un model matematic care încearcă să simuleze structura și funcționalitățile unei rețele neuronale biologice. Elementul constitutiv de bază al unei rețele îl reprezintă neuronul artificial, care este, în speță, un simplu model, o funcție matematică.

Un astfel de model are trei seturi de reguli simple: multiplicare, însumare și activare. La intrare, într-un neuron artificial, datele (input) sunt estimate (weighted), ceea ce implică multiplicarea fiecărei valori de intrare cu o pondere individuală.

În secțiunea mediană a neuronului se găsește funcția de sumă, care adună toate intrările (inputs) împreună cu eroarea (bias). (Fig. 2.1.) În final, la ieșirea neuronului artificial se află suma datelor de intrare estimate (weighted) anterior, iar eroarea (bias) este trecută printr-o funcție de activare, numită și funcție de transfer. (*Krenker et al. 2011*)

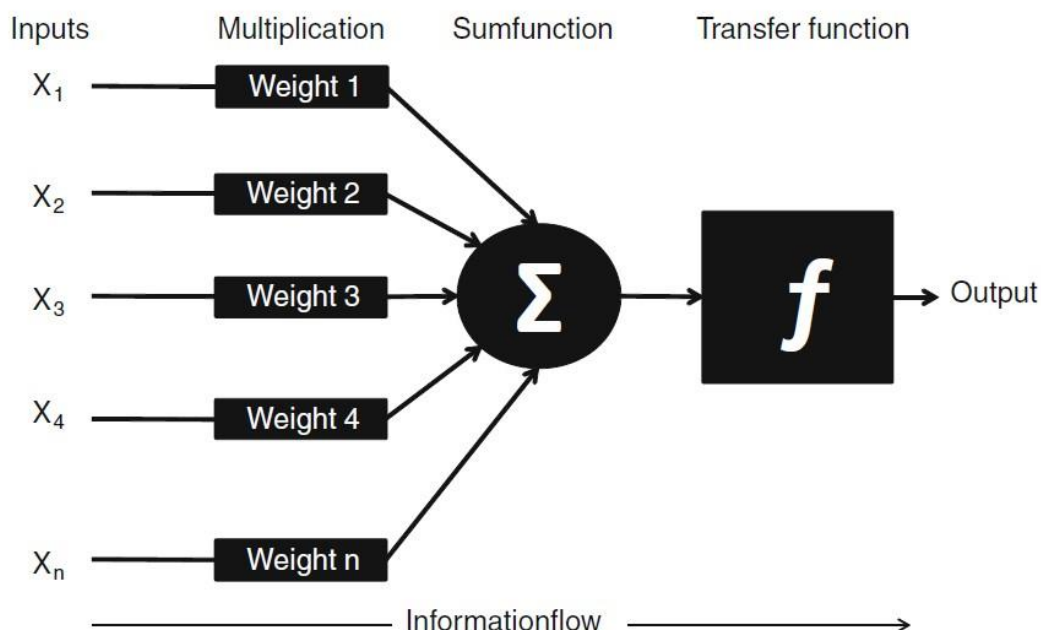


Fig. 2.1 Arhitectura de bază a unui neuron artificial

Rețelele neuronale artificiale sunt compuse din două elemente: neuronii formali și conexiunile dintre neuroni. Modalitatea în care neuronii individuali sunt interconectați este numită topologie, arhitectură sau graf al unei rețele. Potențialul și abilitățile de calcul aferente se evidențiază pe măsură ce neuronii se interconectează în rețele.

Neuronii sunt așezați în straturi, necesitând cel puțin două straturi, unul de intrare și unul de ieșire, pentru construirea unei rețele. Fiecare neuron dintr-un strat este conectat la fiecare neuron din următorul strat, fără să existe conexiuni în cadrul aceluiași strat (intra-conexiune) indiferent de arhitectură. Această proprietate le conferă titulatura de „perceptroni multistrat”, chiar dacă este conținut doar un singur neuron.

Modurile diverse de interconectare creează diferite topologii posibile, care se împart în două tipuri de bază (Fig. 2.2). În topologia de tip *feed-forward*, informația circulă de la intrări la ieșiri, într-o singură direcție, pe când în topologia recurentă, unele fragmente de informație circulă nu doar într-o singură direcție, de la intrare la ieșire, ci și în direcția opusă.

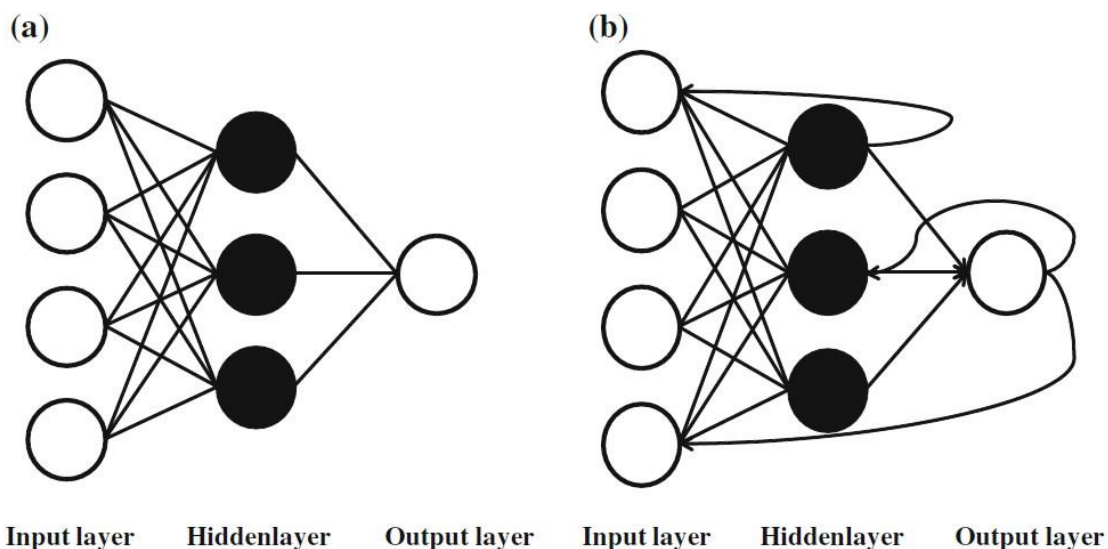


Fig. 2.2 Arhitectura rețelelor neuronale artificiale simple: **a)** topologie feed-forward (FNN) și **b)** topologie recurentă (RNN)

Rețelele de tip feed-forward complet conectate sunt de departe cele mai folosite rețele neuronale pentru modelarea nonliniară, *pattern recognition*, clasificare, filtrarea semnalelor și prognozare.

Neuronii formali transformă date de intrare numerice într-o valoare de ieșire, conexiunile neuronale reprezentând valori de pondere numerice, care reprezintă variabilele interne ale neuronilor (consemnate ca bias sau valori de prag – *threshold values*). Ele constituie variabile libere din sistem, care trebuie determinate în etapa de dezvoltare a rețelei numită „etapă de antrenare”. Antrenarea stabilește răspunsul optim al unei rețele neuronale în concordanță cu specificațiile problemei care trebuie rezolvată.

2.2.1 Validarea

Verificarea și validarea modelelor sunt procesele principale pentru cuantificare și credibilizare la modelele numerice. În cadrul procesului de verificare se determină dacă implementarea unui model reprezintă cu acuratețe descrierea conceptuală și soluția modelului date de programator.

Prin validare se determină gradul de acuratețe al reprezentării lumii reale de către un model, din perspectiva modurilor de folosire pentru modelul în cauză. Atât validarea cât și verificarea reprezintă procese care evidențiază corectitudinea sau acuratețea unui model într-o situație reală, ele nefiind capabile să dovedească însă, dacă un model este precis sau corect

pentru toate scenariile posibile, ci mai curând să demonstreze că un model este suficient de precis pentru scopul destinat acestuia.

Verificarea și validarea temeinică este importantă pentru un model, pentru a extrapola rezultatele la alte situații similare, prognozând noi evenimente. Datele folosite pentru validarea modelului sunt diferite de cele folosite la construirea acestuia. Motivul pentru care nu sunt folosite datele la fel ca la estimarea parametrilor este reprezentat de supoziția conform căreia modelul va oferi predicții mai bune decât este capabil în realitate.

În regresia lineară, estimarea a doi parametri este „corectată” prin împărțirea sumei reziduale a pătratelor prin $(n - 2)$ în loc de (n) . Ținând cont de predispoziția datelor spre erori, uneori este suficient să se demonstreze că nu există o diferență statistică semnificativă între datele experimentale și predicțiile modelului (Bender 1978).

Diferența dintre date și predicțiile modelului poate fi măsurată prin comparare grafică, intervale de încredere și teste statistice. Testarea ipotezelor este utilă pentru compararea distribuțiilor, varianțelor sau a seriilor dinamice (**time series**) corespunzătoare rezultatelor modelelor, pentru a determina dacă predicțiile acestor modele se încadrează într-un interval de precizie admisibil.

Criterii de validare

Criteriile de validare pot avea reprezentări diverse: comparații cu rezultatele disponibile, generarea de rezultate noi pentru comparare, în timp ce altele se bazează pe răspunsuri de la experți. Unele dintre aceste criterii se folosesc pentru verificarea în cadrul validării modelelor.

Tipurile de validare pot fi clasificate astfel: **Comparări cu alte soluții numerice** – rezultatele modelului sunt asociate cu altă soluție ce identifică proximitatea dintre acestea - în speță, unele rezultate aproximative validează alte rezultate aproximative obținute la rândul lor de alți autori sau prin alte metode. Această tehnică nu efectuează o verificare a reprezentării modelului din realitate.

Compararea cu alte soluții analitice – se presupune că cercetătorul este de acord cu teoria de la baza formulării analitice și cu aceeași abordare matematică, care poate fi folosită și pentru verificarea modelului. În cazul în care codul numeric nu este o soluție analitică validă, este probabil să existe o problemă cu formularea modelului.

Compararea cu rezultate experimentale – este privit ca cel mai bun tip de validare, arătând corespondența modelului cu realitatea. Rezultatele obținute în urma experimentelor sunt de cele mai multe ori de o complexitate ridicată, putând surveni erori dacă nu este făcută o evaluare a condițiilor de mediu. Pe lângă posibilitatea ca rezultatele să nu reprezinte cu acuratețe realitatea, există și riscul ca modelul să funcționeze doar pentru un anumit caz, nefiind capabil să facă predicții pentru alte situații similare.

Instrumente statistice

Printre numeroasele instrumente statistice folosite la validarea modelelor, cel mai important pentru majoritatea aplicațiilor ce implică procese de modelare, este reprezentat de analiza reziduală grafică. Statisticile pot fi distinse în două categorii:

1. Diferențe între predicții și măsurători
2. Corelații între rezultatele modelelor și măsurătorile din sistem.

Statistica bazată pe deviație este folosită deseori cu cea bazată pe corelații. Deși aceste două tipuri reprezintă aspecte diferite ale discrepantei de măsurare, statistica bazată pe deviație (radical din medie la pătrat) și cea corelațională (coeficient de corelație) sunt diferite prin ipotezele lor.

Resturile(residuals) de la un anumit model fixat reprezintă diferențele dintre răspunsuri observate la fiecare combinație între valorile corespunzătoare variabilelor explicative și între predicțiile specifice răspunsului estimat folosind modelul. Aceste valori pot fi standardizate prin scăderea mediei și împărțirea prin deviația standard. Definiția **restului** pentru observația i din setul de date se scrie matematic astfel:

$$e_i = y_i - x_i$$

Graficul rezidual poate fi o alternativă pentru a testa omogenitatea varianței în timp ce totalul rezidual ajută la determinarea acurateței unui model (cât de multă inconstanță este oferită de către model) și este folosită la testarea presupunerilor care sunt implicite în analiza regresiei.

Modelele mecaniciste oferă un grad de înțelegere - o explicare a fenomenelor ce sunt modelate - care pentru a fi obținută, necesită construirea modelului pe două nivele de descriere. Un model mecanicist este bazat pe ideile despre funcționarea sistemului, despre elementele esențiale și modul în care acestea interacționează.

O curbă regresivă între rezultatele măsurate și cele simulate este inclusă frecvent în graficul variabilelor simulate versus cele măsurate. Acest model de regresie va identifica orice eroare (**bias**) în prezicerea modelului și va determina corelații între predicțiile modelului și măsurătorile sistemului.

Probabil cea mai importantă statistică este reprezentată de radicalul mediei deviației (RMSD), care este calculată din ecuația:

$$RMSD = \left(\frac{\sum x_i - y_i}{n-1} \right)^{0.5}$$

y_i reprezintă variabila prezisă în raport cu variabila x_i , iar n reprezintă numărul de perechi de valori simulate și măsurate. RMSD este în mod obișnuit menționată și discutată ca un procent al mediei performanței măsurate a sistemului.

În cea de-a doua abordare, este calculat coeficientul corelațional dintre valorile măsurate și cele simulate. Coeficientul corelațional (r) poate fi obținut astfel:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

unde x_i și y_i reprezintă datele măsurate și estimate separat în timpul i , iar \bar{x} și \bar{y} sunt mediile datelor măsurate și estimate separat, verificând dacă $-1 \leq r \leq 1$.

Având un r mare, s-ar putea concluziona că avem de a face cu un model robust, cu un număr finit de variabile y_i pentru a prezice relativ la variabila x_i , caz în care, pentru a determina relația dintre model și datele cuantificate, sunt folosite următoarele criterii:

$$\text{Bias (B)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i)$$

$$\text{Deviația standard (SD)} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i - B)^2}$$

$$\text{Predicția mediei pătratice (MSE)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2 = SD + B^2$$

Fiecare dintre acestea pot fi schițate relativ la o variabilă aleasă, pentru a testa omogenitatea în cardul performanței.

Pentru modelele dinamice care prezic variația cantitativă în timp, se remarcă prezentarea modelului în forma unei mulțimi de ecuații diferențiale ordinare, împreună cu analizele rezultatelor obținute, la care se folosesc tehnici generale de statistică. (*Benes & Feiresl 2008*)

O măsură a varianței este dată de eroarea standard de predicție procentuală (**%SEP**). Aceasta stabilește gradul de dispersie între variabila observată și variabila estimată. Coeficientul de eficiență (**E**) și varianța medie relativă (**ARV**) sunt utilizate pentru a determina modul în care variația totală a datelor poate fi explicată de către model.

Eroarea standard de predicție procentuală se definește astfel:

$$\%SEP = \frac{100}{x} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}{n}}$$

Eficiența (**E**) reprezintă o sumă de pătrate ce oferă un index relativ al comportamentului unui model. Valorile obținute pot fi mai mici sau egale cu 1, cele de 1 indicând o potrivire perfectă. Valoarea zero indică relevanța scăzută a predicțiilor modelului, fiind suficientă doar preluarea valorilor medii ale datelor observate. O valoare negativă poate fi interpretată ca o abordare ineficientă, aspect indicat de faptul că rezultatele sunt mai rele decât dacă s-ar folosi valorile medii ale datelor observate.

Coeficientul de eficiență (**E**) și varianța medie relativă (**ARV**) sunt definite ca $E = \frac{S_{obs} - S}{S_{obs}}$ și

$$ARV = \frac{S}{S_{obs}}, \text{ unde } S_{obs} = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \text{ și } S = \sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2.$$

Pentru a avea o potrivire perfectă, r și E ar trebui să fie apropiate de 1 și valorile %SEP și ARV apropiate de 0.

Dacă rezultatele validării modelului nu sunt acceptabile, este necesară o reconsiderare a ipotezelor, ecuațiilor și a metodelor cantitative, precum și a datelor folosite la construirea modelului. Dacă se identifică metode și ecuații alternative, se va repeta validarea modelului. În cazul în care predicțiile și rezultatul nu sunt încă satisfăcătoare, cel mai probabil există o problemă de bază cu ipotezele (*Soltani & Sinclair 2012*). Procesul de modelare poate fi oprit pentru investigații experimentale amănunțite, până când observațiile vor permite ipoteze îmbunătățite.

2.3 Modele elastice de creștere

Creșterea face parte din multe procese biologice fundamentale – morfogeneza, unele afecțiuni (tulburări) patologice și reglările fiziologice. Este un proces de o complexitate masivă, care implică diverse componente genetice, biochimice și fizice aflate în interacțiuni complexe la dimensiuni variate.

Un important aport la modelarea fizică a creșterii o au biomecanicile cantitative – dimensiunile mecanice (tensiunea și deformarea / stress & strain), precum și interacțiunea acestora cu schimbările din geometria organismului, care apar în timpul creșterii. În acest context au apărut diverse abordări ale creșterii macroscopice în mecanica mediilor continue, cu scopul clarificării interacțiunii geometriei cu mecanica, în vederea identificării anumitor mecanisme ce pot fi folosite în dezvoltarea proprietăților materialelor, în reglarea homeostatică, precum și în dezvoltarea embrionară, prin formarea unor tipare de instabilitate.

Teoria unidimensională – elasticitate, vîsco-elasticitate, plasticitate

Această teorie are ca premisă un concept contextual ce are în vedere fenomenele de creștere într-o singură dimensiune, putând considera în acest caz creșterea unei structuri fibroase (filamentare). Acest tip de creștere este întâlnit la multe sisteme microbiene, precum bacterii filamentoase și fungi, dar și la plante la care tulpinile, rădăcinile și lujerii prezintă aspecte ale creșterii unidimensionale.

Ca dimensiune, aceste biosisteme se întind pe cel puțin 6 ordine de mărime, de la microni la metri, aspect ce relevă complexitatea și detaliile structurale de la nivelul peretelui celular, care sunt necesare pentru descrierea caracteristicilor legate de creștere. Aceste biosisteme vor fi abordate prin spectrul uni continuu mecanic, unde evoluția temporală și unele trăsături sunt influențate de subțietatea acestora (a sistemelor), putând fi astfel modelate ca filamente elastice.

Pentru a face mai facilă analiza modelelor de creștere ale plantelor, se vor folosi noțiunile de model linear solid standard (solid Kelvin), material Maxwell (fluid) și fluid Bingham

Solide Kelvin

Un material complet elastic este acela la care răspunsul tensiunilor aplicate este instantaneu și reversibil. Un solid Kelvin este acel material solid elastic în care răspunsul la tensiune are loc de-a lungul unei perioade finite, determinate de caracteristica vâscoasă a acelui material.

În cel mai simplu caz unidimensional, proprietatea se poate scrie astfel:

$$\sigma = E_{\varepsilon} + \eta \frac{\pi \varepsilon}{\pi t},$$

unde σ indică tensiunea (aplicată), ε indică deformarea, E reprezintă coeficientul de elasticitate, iar η desemnează coeficientul de vâscozitate. Dacă $\eta = 0$, ecuația se reduce la relația de bază pentru un elastic solid. Dacă $\eta \neq 0$, ideea de bază poate fi redată printr-o aplicare unei tensiuni constante σ_0 .

$$\sigma_0 = E_{\varepsilon} + \eta \frac{\pi \varepsilon}{\pi t}$$

Ecuația se rezolvă pentru ε , rezultând:

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0}{E} + \left(1 - e^{-t/\tau_r}\right),$$

unde

$$\tau_r = \eta/E,$$

reprezintă timpul de relaxare „vâsco-elastic”. O altă practică standard este impunerea unei tensiuni periodice $\sigma(t) = \sigma_0 \cos(\omega t)$, care în limita $t \rightarrow \infty$

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0 E}{E^2 + \eta^2 E^2} \cos(\omega t - \alpha),$$

care indică un defazaj α între deformare și tensiunea aplicată, unde

$$\alpha = \arctan(\tau_r/\tau_\sigma),$$

reprezintă competiția dintre timpul de răspuns al solidului $\tau_r = \eta/E$ și durata tensiunii aplicate $\tau_\sigma = 1/\omega$. În cazul în care tensiunea este eliminată, deformarea se va relaxa astfel:

$$\varepsilon \sim e^{-t/\tau_r}$$

Fluide Maxwell

Un fluid Maxwell reprezintă un fluid vâscos cu anumite proprietăți elastice. Cel mai simplu model îl reprezintă acela în care *rata deformării* satisface ecuația

$$\frac{\pi \varepsilon}{\pi t} = \frac{1}{\eta} \sigma + \frac{1}{E} \frac{\pi \sigma}{\pi t}$$

Dacă se elimină al doilea termen din membrul drept al ecuației, vom rămâne cu un model fluid simplu

$$\frac{\pi \varepsilon}{\pi t} = \frac{1}{\eta} \sigma,$$

pentru care rata deformării este proporțională cu tensiunea, fluidul manifestând un flux ireversibil.

Dacă se elimină primul termen din membrul drept al ecuației, aceasta se va reduce la:

$$\frac{\pi \varepsilon}{\pi t} = \frac{1}{E} \frac{\pi \sigma}{\pi t},$$

reprezentând componenta elastică a materialului: după integrarea ambilor membri dependent de timp, rezultă o receptivitate elastică pură $\varepsilon = \sigma/E$.

În cazul în care deformarea este eliminată, tensiunea se relaxează astfel:

$$\varepsilon \sim e^{-t/\tau_r},$$

unde τ_r , este același ca în cazul anterior, comparându-se cu relaxarea deformării unui solid Kelvin atunci când tensiunea este oprită.

Caracteristicile de bază ale unui model Maxwell pot fi ilustrate prin intermediul unei tensiuni aplicate sub forma

$$\sigma = \sigma_0 (1 - e^{-t/T})$$

Dacă T este mic, tensiunea crește rapid, iar dacă este mare, tensiunea va crește încet. Ecuația ratei de deformare se poate integra, rezultând astfel

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0}{\eta} + \left(t + T(e^{-t/T} - 1) \right) + \frac{\sigma_0}{E} (1 - e^{-t/T})$$

- a) În cazul în care $0 < t < T$, cu T de dimensiune mică, pentru scurte perioade, când avem o tensiune crescută rapid, se află că

$$\varepsilon \sim \frac{\sigma_0}{ET} t$$

ceea ce arată că deformarea urmează tensiunea aplicată, în raport cu partea elastică a sistemului $\dot{\varepsilon} \sim \dot{\sigma}/E$ (derivata var. ε , relativ la timp)

- b) Pentru $t \gg T$ (mult mai mare), se află că

$$\varepsilon \sim \frac{\sigma_0}{\eta} t,$$

ceea ce indică dominarea tensiunii de către componenta fluidă a sistemului,

$$\dot{\varepsilon} \sim \sigma/\eta$$

Fluide Bingham

În fluidele simple există fluxul ca răspuns la tensiunea aplicată, oricât de mică ar fi. Pentru fluidele nenewtoniene, cum ar fi vopseaua, fluxul nu începe până când nu este depășit un anumit efort de curgere critic (yield stress), σ^* . În cea mai simplă formă, modelul Bingham poate fi exprimat astfel:

$$\frac{\pi \varepsilon}{\pi t} = \frac{1}{\nu} [\sigma - \sigma^*],$$

unde $[\sigma - \sigma^*] = \max(0, (\sigma - \sigma^*))$. Acest model are un flux ireversibil, din momentul în care se depășește o tensiune critică și a fost paradigma pentru cele mai multe modele de creștere ale plantelor. Un model Bingham poate fi abstractizat la un sistem de tip Maxwell-Bingham, reprezentat de

$$\frac{\pi \varepsilon}{\pi t} = \frac{1}{\nu} [\sigma - \sigma^*] + \frac{1}{E} \frac{\pi \sigma}{\pi t}$$

Terminologic, prin convenție, un fluid Maxwell este numit vâsco-elastic, iar un fluid Bingham se numește plastic. O comparație între deformările produse de diferitele modele se poate observa în graficul:

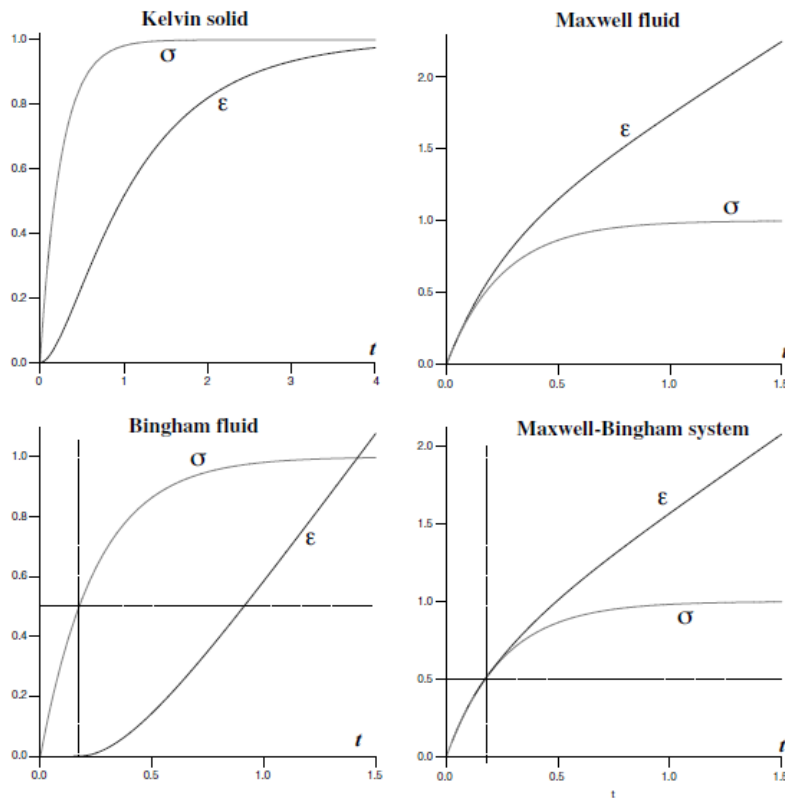


Fig. 2.3. Comparație între deformările produse de o creștere a tensiunii pentru materiale diferite, $\nu = 1/4$, $\sigma^* = 1/2$, $E = \sigma_0 = \eta = 1$, $T = 1/4$

2.3.1 Modele de creștere în teoria unidimensională

Modelul Lockhart-Ortega-Cosgrove

Este unul dintre primele modele cantitative de creștere celulară a plantelor (*J. A. Lockhart*). Din punct de vedere geometric, celula vegetală este considerată un cilindru simetric în jurul axei, având o rază constantă, dar o lungime în creștere, care este legată de creșterea în volum, datorată apei care intră în celulă, creșterea ireversibilă în lungime fiind astfel pusă pe seama presiunii de turgescență exercitată pe peretele celulei (pe capătul cilindrului, în acest caz).

Modelul Lockhart pornește de la formularea deformării elastice astfel:

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0},$$

formulare aflată sub legea lui Hooke, cunoscută prin

$$\varepsilon = \frac{1}{E} \sigma$$

Presupunând o tensiune aplicată constantă σ , diferențierea temporală a deformării produce

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{l}}{l_0} - \frac{l}{l_0} \frac{\dot{l}_0}{l_0} = 0,$$

rezultând

$$\frac{\dot{l}}{l} = \frac{\dot{l}_0}{l_0}.$$

Dacă vom considera l ca fiind lungimea curentă și l_0 lungimea de referință, dacă ambele cresc în timp, atunci poate fi menținută o rată constantă de deformare, dacă lungimea de referință se extinde elastic, în fiecare moment, cu aceeași lungime ca lungimea curentă.

Este evidențiat faptul că durata echilibrului elastic pentru celulele vegetale (de ordinul minutelor) este mult mai rapidă decât durata extensiei ireversibile (de ordinul orelor). În acest mod, se presupune că sistemul se află întotdeauna într-o stare de echilibru elastic pe măsură ce crește.

Argumentarea este descrisă în două părți. Creșterea în lungime (curentă) datorită creșterii în volum (datorită osmozei) se exprimă astfel:

$$\frac{dl}{dt} = \frac{KA}{a}(\Delta\Pi - P),$$

unde K este o constantă a permeabilității apei, $A = 2\pi rl$ reprezintă aria părții peretelui cilindrului, $a = \pi r^2$ reprezintă aria transversală, $\Delta\Pi$ o variabilă a presiunii osmotice și P presiunea de turgescență. Aceasta se poate exprima și astfel:

$$\frac{1}{l} \frac{dl}{dt} = \frac{2K}{r}(\Delta\Pi - P).$$

Membrul stâng \dot{l}/l poate fi considerat ca o „rată curentă de configurare a deformării”. Acesta este urmat de definirea „extinderii ireversibilă a peretelui” astfel:

$$\frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \Phi \sigma,$$

unde Φ indică „rata fluxului ireversibil” al peretelui celular (*Lockhart*).

Această definiție poate fi modificată pentru a corespunde unui flux de tip Bingham, astfel:

$$\frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \Phi [\sigma - \sigma^*]$$

Tensiunea σ este exprimată în mod standard, în funcție de presiunea de turgescență, asupra vârfului și grosimii peretelui, δ , astfel încât $\sigma = \pi r^2 P / 2\pi r \delta$. Ecuația mișcării este folosită apoi pentru a exprima P în funcție de extensie, astfel:

$$P = \frac{2\delta}{r\Phi} \frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \frac{2\delta}{r\Phi} \frac{1}{l} \frac{dl}{dt},$$

din ecuațiile anterioare obținându-se

$$\frac{1}{l} \frac{dl}{dt} = \frac{2rK\Delta\Pi\Phi}{4\delta K + r^2\Phi},$$

rezultat ce face legătura dintre rata curentă de deformare și o tensiune reprezentând interacțiunea dintre presiunea osmotică și cea de turgescență.

Modelul Goodwin

Are ca premisă rezumatul modelului Lockhart-Cosgrove-Ortega sub forma:

$$\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} = \Phi [P - Y] + \frac{1}{E} \frac{dP}{dt},$$

unde Y descrie pragul de fluiditate (yield threshold), Φ coeficientul de extensibilitate al peretelui celular, iar E reprezintă coeficientul elastic volumetric $E = VdP/dV$. Considerând că rata volumetrică de creștere $(1/V)dV/dt$ e similară cu o rată a deformării, iar P corespunde unei tensiuni mecanice, ecuația se va recalcula sub forma:

$$E \frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{1}{\tau} [\sigma - Y] + \frac{d\sigma}{dt},$$

unde ε reprezintă deformarea, sub modelul unei relații de bază Maxwell-Bingham.

Când $\sigma > Y$, deformarea ε constituie o combinaire între o deformare elastică (relativă la variațiile de tensiune) și o deformare de creștere Γ , rata creșterii fiind exprimată astfel:

$$E \frac{d\Gamma}{dt} = \frac{1}{\tau} [\sigma - Y].$$

Din rescrierea ecuației anterioare se poate scrie:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{d\Gamma}{dt} + \frac{1}{E} \frac{d\sigma}{dt},$$

aceasta constituind și „trecerea” către modelul tridimensional de creștere. La modelul Goodwin, rata creșterii este descrisă în funcție de lungimea de referință, astfel:

$$\frac{d\Gamma}{dt} = \frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt},$$

de unde rezultă ecuația ratei de creștere:

$$\frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \frac{1}{\tau} [\varepsilon - s],$$

unde $s = Y/E$, iar tensiunea σ este exprimată în funcție de deformarea elastică, anume $\sigma = \varepsilon E$. Ecuația ratei de creștere devine un model bazat pe tensiune, în speță extensia ireversibilă în cazul în care deformarea elastică depășește pragul critic. Se poate considera ipotetic și existența unei contribuții la creștere ca rezultat al unei schimbări în coeficientul de elasticitate. Astfel, presupunând prin legea lui Hooke, $\sigma = \varepsilon E$ și diferențiindu-se ambii membri în funcție de timp, presupunând o tensiune constantă va rezulta:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{\varepsilon}{E} \frac{dE}{dt}.$$

Dacă se consideră $\varepsilon = (l - l_0)/l_0$ și variațiile ε sunt datorate schimbărilor l_0 , atunci ecuația anterioară poate fi scrisă astfel:

$$\frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} \frac{1}{E} \frac{dE}{dt},$$

care adăugată la ecuația ratei de creștere va rezulta:

$$\frac{1}{l_0} \frac{dl_0}{dt} = \frac{1}{\tau} [\varepsilon - s] + \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} \frac{1}{E} \frac{dE}{dt}$$

Identificarea unei rate totale a deformației care se separă de o parte într-o rată de creștere, similar unui flux al unui fluid Bingham simplu, iar de cealaltă parte într-o rată de deformație elastică este esențială pentru model, fiind practic echivalent cu forma cea mai simplă a unor ecuații Prandtl-Reuss specifică deformării elasto-plastice.

Modelul Stein

Are ca punct de pornire $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_g + \dot{\varepsilon}_e$, care poate fi interpretată ca rata totală a deformării, $\dot{\varepsilon}_g$ reprezentând rata creșterii, iar $\dot{\varepsilon}_e$ rata elastică a deformării. Rata creșterii ia forma generală

$$\dot{\varepsilon}_g = A + M\sigma,$$

cu deformarea elastică ε_e , ce satisface o relație Hooke astfel: $\varepsilon_e = K\sigma$.

În cele trei ecuații anterioare, variabilele sunt considerate a fi tensoriale. Considerând relațiile de mai sus, se poate transpune în forma analitică astfel:

$$\dot{\varepsilon}_{kl} = A_{kl} + M_{klmn}\sigma^{mn} + \frac{d}{dt}(M_{klmn}\sigma^{mn}).$$

Modelul Stein este folosit pentru ilustrarea creșterii la organisme vegetale, în special la nivel de lăstari, precum și la creșterea unor bacterii precum *Bacillus subtilis*.

2.3.2 Modele de creștere tridimensională

În cadrul acestui tip de creștere sunt vizate cu precădere corpurile elastice nelineare.

Morfoelasticitatea

Considerând un corp continuu având *configurația de referință* \mathcal{B}_0 , cu \mathbf{X} reprezentând vectorii de poziție din \mathcal{B}_0 , se presupune o deformare a corpului într-o nouă configurație, \mathcal{B}_1 , care va fi *configurația curentă*, în care corpul va fi definit prin $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$.

Gradientul de deformare, $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \text{Grad}_{\chi}$, reprezintă legătura dintre un segment material al configurației de referință și același segment din configurația curentă.

În urma descompunerii deformăției totale într-un vector (tensor) de creștere – $\mathbf{G}(\mathbf{X}, t)$ - și un vector elastic - $\mathbf{A}(\mathbf{X}, t)$ - , se va obține

$$\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{X}, t) \cdot \mathbf{G}(\mathbf{X}, t).$$

Astfel, deformăția creșterii nu reprezintă numai o schimbare continuă în toate detaliile, nefiind compatibilă. În cazul în care continuitatea este necesară pe măsură ce

creșterea se produce, se va introduce o deformare elastică pentru a menține compatibilitatea. Conform figurii de mai jos, vectorul de creștere $\mathbf{G}(\mathbf{X}, t)$ direcționează \mathcal{B}_0 către configurația virtuală V_I , care nu este supusă vreunei tensiuni. Deformarea elastică direcționează apoi V_I către o stare \mathcal{B}_I supusă unei tensiuni de creștere, pentru menținerea continuității corpului, gradientul total al deformării fiind reprezentat de compoziție. Deformarea elastică introdusă, va cauza o tensiune reziduală (rămasă după ce tensiunea inițială este eliminată) în corp, aspect asumat pentru a asigura compatibilitatea.

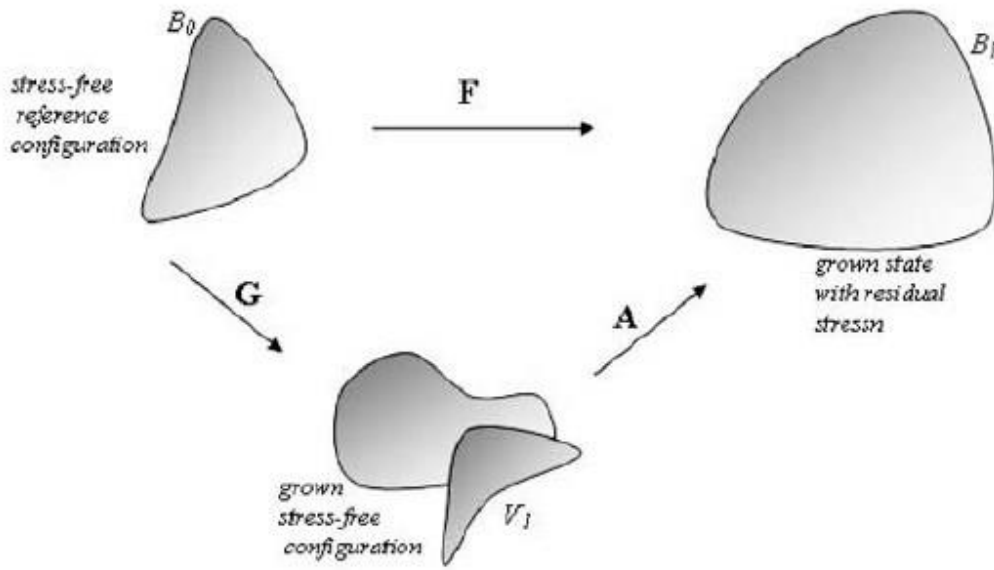


Fig. 2.4 Analiza unei creșteri finite. Gradientul de deformare \mathbf{F} direcționează configurația de referință $B_0(\mathbf{X}, t)$ către configurația curentă \mathcal{B}_I . \mathbf{F} poate fi reprezentat ca produs al vectorului de creștere \mathbf{G} și al vectorului de deformare elastică \mathbf{A} . Configurația intermediară V_I reprezintă o stare virtuală, \mathbf{G} nemenținând continuitatea.

Rata deformării

Ca premisă în prezentarea ratei deformării, se identifică gradientul de deformare reprezentat prin vectorul \mathbf{F} , vectorul de deformare Green (Lagrange): $E = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I})$, precum și gradientul de deplasare: $\mathbf{D} = \mathbf{A} - \mathbf{I}$.

Astfel avem

$$E = \frac{1}{2}(\mathbf{D} + \mathbf{D}^T + \mathbf{D}^T \mathbf{D}).$$

Linearizarea acestei ecuații, $E = \frac{1}{2}(D + D^T)$, reprezintă vectorul de tensiune care se regăsește în teoria elasticității lineare. Având diferențierea relativă la timp pentru valorile coordonatelor fixate, X , atunci se poate indica rata deformării ca fiind

$$\dot{F} = \Gamma F,$$

unde

$$\Gamma = \text{grad } v(x, t)$$

reprezintă vectorul gradient eulerian de viteză, din care se poate scrie

$$\dot{E} = F^T \Sigma F,$$

cu $\Sigma = \frac{1}{2}(\Gamma + \Gamma^T)$ reprezentând vectorul eulerian al ratei de deformare.

Dat fiind faptul că $\Sigma = F^{-T} \dot{E} F^{-1}$ nu este o derivată totală a lui E , neputând fi numită o rată a deformării reală, se poate face aproximația de ordin întâi

$$\dot{E} = A^T \Sigma F \simeq (I + D)^T \Sigma (I + D) \simeq \Sigma,$$

iar coform teoriei lineare, putem numi Σ un vector al ratei de deformare.

Pornind de la ecuația $F(X, t) = A(X, t) \cdot G(X, t)$, se va aborda creșterea tridimensională, sub denumirea de *morfoelasticitate*. Inițial aceasta a fost descrisă pentru un oarecare sistem cu densitate ρ și rata creșterii masei pe unitatea de volum V ,

$$\dot{m} = \frac{d(\rho V)}{dt},$$

din care se poate obține

$$\dot{m} = \frac{\pi \rho}{\pi t} + \text{div}(\rho v_g),$$

unde v_g reprezintă vectorul creșterii de viteză, fiind definit în cadru eulerian. La o densitate constantă, cele două ecuații se pot combina pentru a rezulta

$$\frac{dV}{dt} = \text{div } \mathbf{v} = \text{Tr} D_g,$$

D_g fiind vectorul ratei de creștere – similar cu vectorul ratei de deformare din mecanica mediilor continue. Acesta nu va necesita o configurație de referință, fiind eulerian, dar poate fi legat de un *vector de întindere al ratei de creștere* lagrangian \dot{U}_g astfel:

$$D_g = \frac{1}{2} (\dot{U}_g U_g^{-1} + U_g^{-1} \dot{U}_g).$$

\dot{U}_g fiind lagrangian, vectorul de întindere al creșterii - U_g - va fi dat de

$$U_g = \int^t \dot{U}_g dt$$

U_g este legat de gradientul deformării de creștere – G – prin descompunerea

$$G = R_g U_g$$

Tensiunea Cauchy și ecuații de mișcare

Pe un corp \mathcal{B}_1 , forțele distribuite includ o densitate a forței de contact \mathbf{t}_n și o densitate a forței corpului \mathbf{b} . Potrivit legilor de mișcare ale lui Euler, echilibrul impulsului linear se poate scrie ca:

$$\int_{\mathcal{B}_1} \rho(x,t) \mathbf{b}(x,t) dv + \int_{\partial \mathcal{B}_1} \mathbf{t}_n da = \int_{\mathcal{B}_1} \rho(x,t) \dot{\mathbf{v}}(x,t) dv$$

Teorema lui Cauchy afirmă că dacă \mathbf{t}_n e continuă în \mathbf{x} , atunci \mathbf{t}_n depinde linear de vectorul \mathbf{n} , existând o transformare lineară \mathbf{T} independentă de \mathbf{n} astfel încât

$$\mathbf{t}_n = \mathbf{T} \mathbf{n},$$

unde \mathbf{T} este numit ca vector de tensiune Cauchy. Aplicând teorema de divergență, putem obține:

$$\int_{\mathcal{B}_1} (\rho(x,t) + \text{div} \mathbf{T} - \rho(x,t) \dot{\mathbf{v}}(x,t)) dv = 0,$$

ecuație validă pentru orice corp \mathcal{B}_1 .

De aici putem face referire la prima lege a mișcării a lui Cauchy:

$$\text{div}(\mathbf{T}) + \rho \mathbf{b} = \rho \dot{\mathbf{v}}$$

În cazul în care corpul este în repaus, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}$, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{B}_1$, ecuația echilibrului va deveni:

$$\operatorname{div}(\mathbf{T}) + \rho \mathbf{b} = \mathbf{0},$$

care se reduce la $\operatorname{div}(\mathbf{T}) = \mathbf{0}$, în cazul în care nu sunt prezente forțe ale corpului.

Funcții specifice energiei de deformare

Presupunem un material hiperelastic având o funcție a energiei $W = W(\mathbf{F})$, de unde se pot obține deformările.

$$\mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{F} \frac{\partial W}{\partial \mathbf{F}} - p \mathbf{1}$$

unde $J = \det(\mathbf{F}) = 1$ în cazul incompresibil, iar p reprezintă un multiplicator Lagrange asociat cu restricția internă de incompresibilitate ($p = 0$ în cazul compresibil).

Pentru modelarea elastomerilor sau a țesuturilor moi se identifică anumite funcții, specifice reacției materialelor elastice aflate sub sarcină, în principal materialele izotrope omogene. Energia se poate descrie în funcție de principalele întinderi $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, sau în funcție de primii doi invarianti principali ai vectorilor de deformare Cauchy-Green, în cazul solidelor incompresibile,

$$I_1 = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2, \quad I_2 = \lambda_2^2 \lambda_3^2 + \lambda_3^2 \lambda_1^2 + \lambda_1^2 \lambda_2^2.$$

O proprietate importantă a multor materiale biologice o constituie rigidizarea sub acțiunea tensiunii, care poate fi modelată cu ajutorul mai multor modele, redată cu un singur parametru (ν , α , sau β), astfel încât modelul clasic neo-Hookean poate fi obținut în limitele $\nu \rightarrow 2, \alpha \rightarrow 0, \beta \rightarrow 0$.

Modelul Mooney-Rivlin este de asemenea folosit, în special în modelarea elastomerilor. Utilizarea morfoelasticității în modelare și înțelegerea efectului creșterii, precum și a răspunsului la tensiune include numeroase situații, precum creșterea constantă, creșterea dependentă de poziție, sau dependența de tensiune.

Numeroase procese de creștere depind de localizarea în cadrul materialului, efect numit și creștere diferențială, indicând creșterea mai rapidă față de altele a unor părți din țesut, situație ce poate fi exemplificată prin cazul reproducerii celulare, care poate depinde de

disponibilitatea unor nutrienți ce se răspândesc spre extremitățile țesutului de la o anumită distanță, într-un anumit moment de timp.

În privința dependenței de tensiune, se poate recunoaște atât experimental cât și teoretic, tensiunea ca principal regulator biomecanic al creșterii în numeroase sisteme, precum aorta, mușchii sau oasele. De asemenea, tensiunea asupra peretelui celular are un rol de pacemaker, stabilind reglarea colectivă a creșterii țesuturilor.

Capitolul III

Implementarea în Matlab a unor modele biosistemice de creștere

Capitolul de față se ocupă, pe rând, de implementarea în Matlab a modelului de creștere Lockhart-Ortega-Cosgrove (§2.3.1), precum și prelucrarea în Matlab a uneia dintre ecuațiile care guvernează modelul de morfoelasticitate (§2.3.2).

3.1 Implementarea în Matlab a modelului Lockhart-Ortega-Cosgrove

Întrucât una dintre ecuațiile de bază ale modelului Lockhart-Ortega-Cosgrove este

$$\frac{dl}{dt} = \frac{KA}{a}(\Delta\Pi - P),$$

atenția paragrafului de față se concentrează asupra acesteia. Scriptul cu denumirea *bios_LOC_1.m* se ocupă de soluționarea respectivei ecuații în regim Matlab simbolic dar și prin tratare numerică, în scopul reprezentării grafice a soluției.

Codul se prezintă după cum urmează:

```
syms lzero l(t) r k a deltaPi p;
eqn = diff(l,t) == ((2*pi*r*l*k)/a)*((deltaPi)-p);
cond = l(0) == 4*(10^(-5));
l = dsolve(eqn, cond);
pretty(l);
lt = subs(l, [k, deltaPi, p, a, r], [3*(10^(-4)), 0.08206, 0.1, 0.4*(10^(-5)),
0.03]);
vt = 0:1:10;
vlt = zeros(1, length(vt));
n = length(vt);

vlt = vpa(subs(lt, vt));

plot(vt,vlt);
```

Efectul său constă atât în obținerea expresiei soluției ecuației în cauză, cât și în realizarea graficului redată în figura imediat următoare:

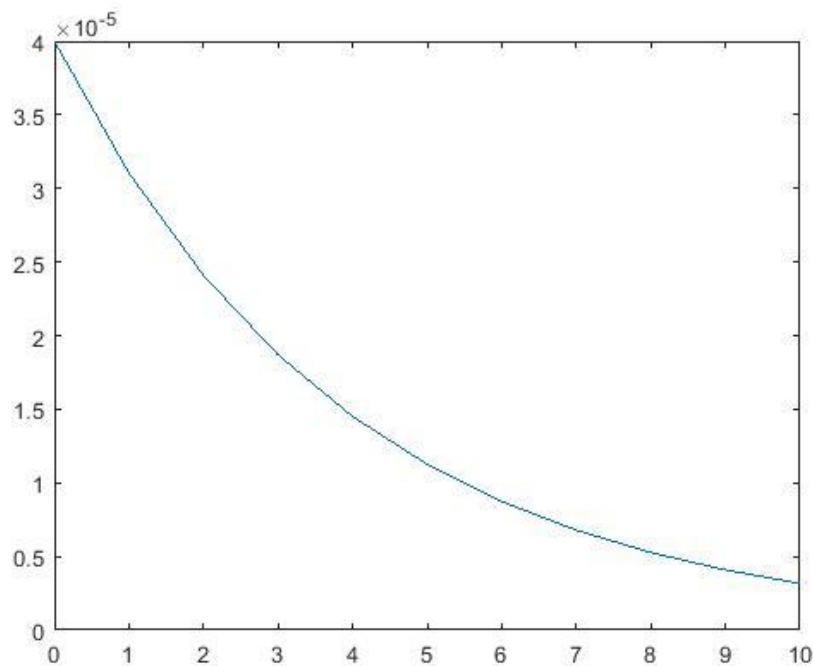


Fig.3.1

Graficul de mai sus ilustrează modificarea lungimii peretelui celular, implicit deformarea acestuia, în urma acțiunii unei presiuni de turgescență, aplicându-se o tensiune asupra ariei transversale a ceulei, într-un regim de neperturbare din partea altor factori.

În condițiile în care se manifestă și anumiți factori perturbatori de altă natură, precum ruperea, strivirea sau arderea plantei în cauză, evoluția lungimii peretelui celular se manifestă semnificativ diferit față de cea din **Fig.3.1**, după cum se poate observa din figurile **Fig.3.2** și **Fig. 3.3**, obținute pe baza surselor redade în continuare:

```
syms lzero l(t) r k a deltaPi p pert(t)
pert(t) = sin(t^3+0.1);
eqn = diff(l,t) == ((2*pi*r*l*k)/a)*((deltaPi)-p) + pert(t);
cond = l(0) == 3*(10^(-6));
l = dsolve(eqn, cond);
pretty(l);
lt = subs(l, [k, deltaPi, p, a, r], [3*(10^(-4)), 0.08206, 0.1, 0.4*(10^(-5)), 0.03]);
vt = 0:0.1:10;
vlt = zeros(1, length(vt));
n = length(vt);

vlt = vpa(subs(lt, vt));

plot(vt,vlt);
```

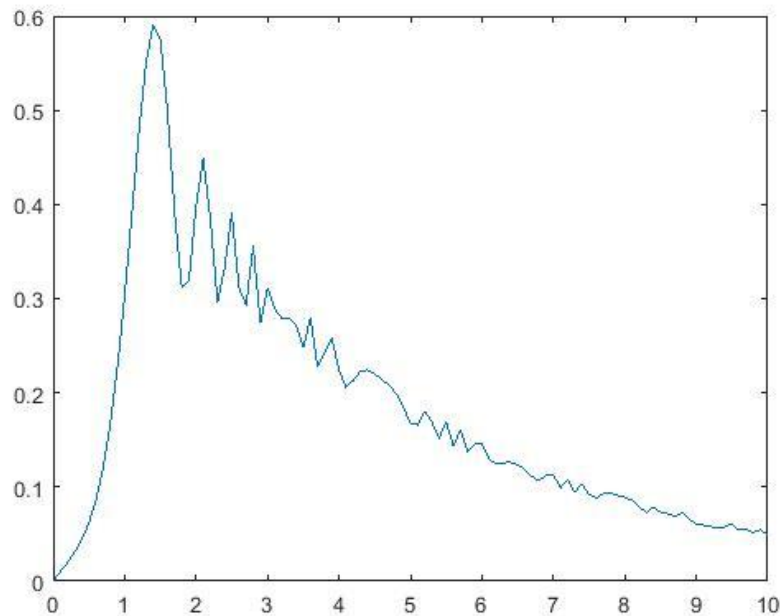


Fig. 3.2

În graficul de mai sus se poate observa modificarea lungimii peretelui celular în urma arderii tulpinii.

În urma unei secționări a tulpinii, lungimea peretelui celular suferă o modificare ce se poate remarca în graficul de la **Fig.3.3**. Această modificare este obținută pe baza sursei de mai jos.

```
syms lzero l(t) r k a deltaPi p pert(t)
pert(t) = log(t^3+0.1);
eqn = diff(l,t) == ((2*pi*r*l*k)/a)*((deltaPi)-p) + pert(t);
cond = l(0) == 3*(10^(-6));
l = dsolve(eqn, cond);
pretty(l);
lt = subs(l, [k, deltaPi, p, a, r], [3*(10^(-4)), 0.08206, 0.1, 0.4*(10^(-5)), 0.03]);
vt = 0:0.1:10;
vlt = zeros(1, length(vt));
n = length(vt);

vlt = vpa(subs(lt, vt));

plot(vt,vlt);
```

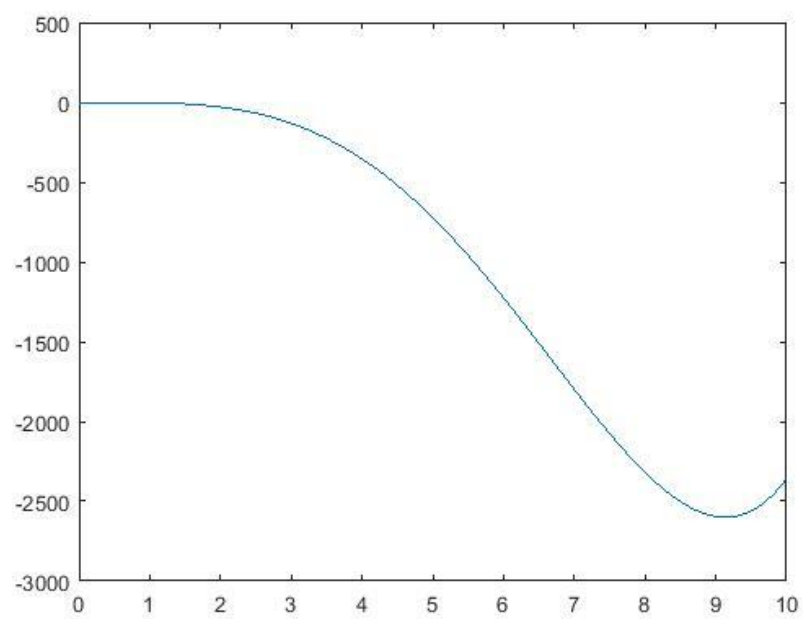


Fig. 3.3

În situația în care tulpina ar suferi o strivire, evoluția lungimii peretelui celular s-ar produce în conformitate cu graficul următor:

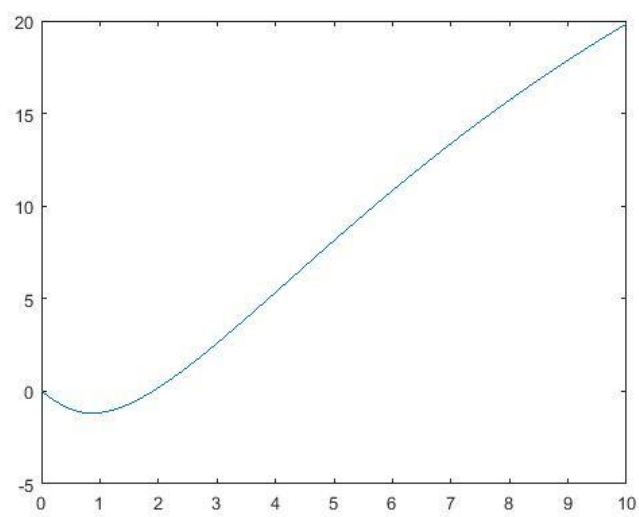


Fig. 3.4

3.2 Implementarea în Matlab a modelului morfoelastic

Se are în vedere ecuația

$$\frac{dV}{dt} = \text{div } \mathbf{v} = \text{Tr} \mathbf{D}_g,$$

în situația concretă a creșterii lujerului viței de vie, caz în care $\text{Tr} \mathbf{D}_g$ are o expresie dependentă numai de t și de V , având semnificația de volum al lujerului, modificabil în timp (t).

Pentru două dintre expresiile concrete ale lui $\text{Tr} \mathbf{D}_g$, sunt concepute scripturi Matlab adecvate.

Primul dintre ele, denumit *model_3D.m*, are codul următor:

```
syms v(t)
eqn = diff(v,t) == (2*v*t) + (t^2 - v) + (v * sin(t));
cond = v(0) == 0.003;
v = dsolve(eqn, cond);
fplot(v, [0,0.5]);
```

Ca efect al rulării sale, se obține următoarea reprezentare grafică a variației unității de volum celular, în raportul cu timpul :

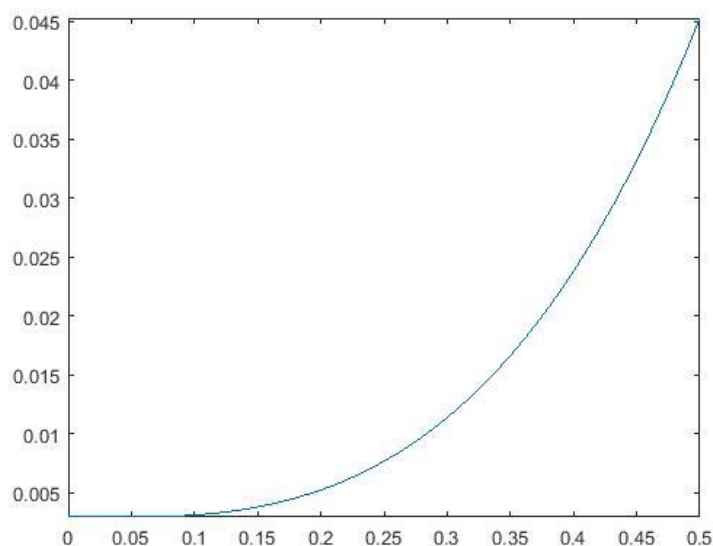


Fig. 3.5

Din această figură se observă că, în realitate, tipul de creștere în cauză este unul exponențial.

În cel de al doilea caz, se deduce că are loc o creștere similară.

Concluzii

În urma elaborării lucrării, se poate constata evoluția unora dintre biosistemele tratate prin modelare matematică, felul în care se comportă organismele care alcătuiesc astfel de biosisteme și cum reacționează ele la diverși factori perturbatori existenți sau potențiali.

Importanța temei alese este dată de multitudinea de aplicații pe care le poate avea modelarea biosistemelor, acestea având o semnificativă utilitate științifică. Între domeniile în care sunt utile modelele matematice, se numără agricultura (în vederea creșterii și dezvoltării recoltelor), cel energetic (unde se pot concepe și studia modele pentru dezvoltarea unor combustibili din biomasă), genetica (prin tratarea unor aspecte legate de modelarea genomului uman), medicina (prin studiul celulelor canceroase și evoluția unor formațiuni tumorale), dinamica unor virusuri sau dezvoltarea unor aminoacizi (peptide), precum și bacteriologia (unde se pot studia evoluțiile și modul de dezvoltare a diverselor bacterii benefice, dar și adverse).

Lucrarea de față ar putea fi continuată în viitor prin studierea modelelor analizate și în cazul altor organisme vegetale, abordând evoluția acestora în situațiile unor patologii și degradări celulare progresive. Tratarea unor modele relative la celule animale și chiar umane are ca scop studiul reacției la anumite tratamente medicale.

Rolul unui informatician este, după cum se constată, destul de important, întrucât fără contribuția sa ca specialist, rezultatele obținute ar fi mai sărace în conținut.

Bibliografie

1. André MJ, *Modeling 1802 and 1602 unidirectional fluxes in plants: IV. Role of conductance and laws of its regulation in C3 plants. J Biosyst 113:104-114 ; 2013*
2. Archibold, O.W., *Ecology of World Vegetation*, Chapman and Hall, London, 1995
3. Bailey, Robert G., *Ecosystem Geography. Second edition*, Springer, New York, 2009
4. Benes M, Feiresl E, *Topics in mathematical modeling*. Jindrich Necas center for mathematical modeling, Lecture notes Volume 4, Matfyz Press, Prague, 2008
5. Boonen C, Samson R, Janssens K, Pien H, Lemeur R, Berckmans D, *Scaling the spatial distribution of photosynthesis from leaf to canopy in a plant growth chamber. Ecology Model 156:201-212, 2002*
6. Chapin, F. Stuart; Pamela A. Matson; Harold A. Mooney,. *Principles of Terrestrial Ecosystem Ecology*, Springer, New York; 2002
7. Epstein M., G. Maugin. *Thermomechanics of volumetric growth in uniform bodies*, 16: 951–978, Int. J. Plasticity, 2000
8. Farquhar G., Von Caemmerer S., Berry J., *Models of photosynthesis*, Plant Physiology 125:42-45, 2001
9. Fung Y.C, *Stress, strain, growth and remodeling of living organisms*, Z. angew. Math. Phys., 46: S469-S482, 1995
10. Goriely A., M. Ben Amar. *On the definition and modeling of incremental, cumulative and continuous growth laws in morphoelasticity. Biomechanics and modeling in Mechanobiology*, Springer, 2006
11. Guevara-Gonzalez R., I.Torres-Pacheco, *Biosystems Engineering: Biofactories for Food Production in the Century XXI*, Springer, 2014
12. Guzmán-Cruz R., *Evolutionary algorithms for the parameters estimation of the climatic model of a greenhouse. Biosystems Eng 104:135-142, 2010*
13. Haefner J.W., *Modeling biological systems: principles and application*, Springer, New York, 2005
14. Hsu F.H. *The influences of mechanical loads on the form of a growing elastic body*, J.Biomechanics, 1:303-311, 1968
15. Krenker A, Bester J, Kos A, *Introduction to the artificial neural networks*; InTech, Rijeka 2011

16. Kumar JLG, Zhao YQ, *A review on numerous modeling approaches for effective, economical and ecological treatment wetlands*. J Environ Manage 92:400-406; 2011
17. Ljung L., Gland T., *Modeling of dynamic systems*, Prentice Hall, Englewood, 1994
18. Lockhart J.A. *An analysis of irreversible plant cell elongation*. J.Theoretical Biology., 8:264-275m 1965
19. Ortega J.K.E.. *Augmented growth equation for cell wall expansion*. Plant Physiology, 79:318-320, 1985
20. Rodriguez E.K, A.Hoger, A.McCulloch. *Stress-dependent finite growth in soft elastic tissue*. J.Biomechanics, 27:455-467, 1994
21. Román-Román P, Torres-Ruiz F, *Modelling logistic growth by a new diffusion process: Application to biological systems*. BioSystems 110:9-21; 2012
22. Schroener, Thomas W. *Ecological Niche*. In Simon A.Levin *The Princeton Guide to Ecology*, Princeton University Press, pp. 2-13
23. Schoener, Thomas W., *Resource partitioning in ecological communities*, Science 2:369-404.
24. Schoener, Thomas W., *The Princeton Guide to Ecology. Ecological Niche*, Princeton University Press, pp 2-13
25. Seginer I, Ioslovich I , *A single state variable model model to mimic TOMGRO for control applications*, Acta Horti 456:93-100; 1998
26. Sinclair T.R., Seligman N., *Criteria for publishing papers on crop modeling*, 68:165-172, Field Crops Res, 2000
27. Sinclair T.R., Seligman N., *Crop modeling: from infancy to maturity*, 88:698-704; Agron J, 1996
28. Smith Thomas M.; Robert Leo Smith. *Elements of Ecology (8th ed.)*, Benjamin Cummings (Pearson), Boston, 2012
29. Soltani A., Sinclair TR, *Modeling physiology of crop development, growth and yield*, CAB International, Egham. ISBN 978-1-84593-970-0
30. Sumpter BG, Getino C, Noid DW, *Theory and applications of neural computing in chemical science* 45:439-481. Annu Rev Phys Chem, 1994
31. *** <https://academic.oup.com/bib/article/13/4/395/182133/Multiscale-modeling-of-macromolecular-biosystems>

