

ПРИНЦИП ОПТИМАЛЬНОСТИ В МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ ОРГАНОГЕНЕЗА

© А.Г. Топаж, Р.А. Полуктов

Агрофизический научно-исследовательский институт

Работа поддержана грантом РФФИ 04-05-64980

Проведен анализ существующих подходов к математическому описанию регуляторных аспектов развития и органогенеза в динамических моделях продукционного процесса растений. Предложен новый метод моделирования принципиальных сторон органогенеза, основанный на применении экстремальных принципов математического программирования.

OPTIMALITY PRINCIPLE IN MATHEMATICAL MODELS OF ORGANOGENESIS

A.G. Topaj, R.A. Poluektov

Agrophysical Research Institute

Review of existing approaches to mathematical description of regulatory aspects of plant development and organogenesis in agroecosystem dynamic models has been provided. The new method for modeling the principal features of organogenesis is proposed. It is based on extreme principles of mathematical programming.

Введение

Пожалуй никакая сторона продукционного процесса растений не вызывает столько сложностей и противоречий при попытке ее математического описания как органогенез. Действительно, физическая сущность процессов, управляющих появлением и гармоничным развитием различных органов растения в течение его жизни, остается во многом белым пятном даже для самих биологов. Тем более сказанное относится к математикам, строящим прикладные модели роста и развития живых растительных организмов. Отсутствие прозрачных механических или физических аналогий оставляет крайне широкий выбор для применения самых разнообразных, качественно отличных друг от друга математических подходов.

Рассмотрим упрощенное представление о модели роста. Имитационный образ растения при его структурной декомпозиции представляет собой набор сущностей или компартментов, которым в реальности соответствуют органы растения. Текущее состояние каждого из рассматриваемых компартментов характеризуется совокупностью определяющих показателей (часто в этом качестве выступает единственная величина – биомасса). Компартменты связаны между собой информационными связями и могут обмениваться потоками вещества и энергии. Принципиальная программа роста (в самом примитивном понимании рост – это последовательное увеличение биомассы органов) заключается в следующем. Часть органов (корни, листья, стебли) являются вегетативными. Их роль состоит в снабжении растения питательными и структурообразующими веществами. Так, в зеленых листьях происходит процесс фотосинтеза, в ходе которого из углекислого газа и воды на свету образуются первичные углеродные соединения – сахара. Корни поглощают из почвы воду, а вместе с почвенным раствором в растение поступают питательные вещества (азотные и фосфорные соединения), соли и микроэлементы. С помощью цепочек сложных химических реакций (трансформацией и соединением всех поглощен-

ных или образованных субстратов) образуется элементарное структурное вещество (аминокислоты), называемое первичными ассимилятами и непосредственно служащее для образования новой живой биомассы.

При этом математические модели процессов поглощения структурообразующих веществ и процессов метаболизма (их химической трансформации в первичные ассимиляты) разработаны и носят сравнительно наукообразный характер. То есть, в каждый момент времени, зная характеристики текущего состояния растения, можно с достаточной степенью точности описать в математических терминах общее возможное приращение его биомассы - суммарную приходную статью баланса роста. И основной проблемой становится моделирование программы распределения поступивших ассимилятов между всеми включенными в рассмотрение органами растения – как вегетативными, так и невегетативными (не принимающими участие в снабжении растения субстратами роста). Именно математическая формализация этой программы и составляет сущность построения модели органогенеза, или, говоря о более конкретной задаче – модели распределения первичных ассимилятов. Общая математическая постановка проблемы в терминах теории динамических систем выглядит следующим образом. Эволюция моделируемой системы записывается в виде системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U} \cdot Z, \\ \frac{dZ}{dt} = F_Z(\mathbf{Y}, \mathbf{V}, t), \\ \frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{F}_Y(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{V}, t), \end{cases} \quad \sum_i U_i = 1; \quad U_i \geq 0,$$

где \mathbf{X} представляет собой вектор всех динамических переменных, описывающих текущее состояние компартментов – органов растения, Z определяет общее количество доступных первичных ассимилятов (ресурс роста), \mathbf{Y} – вектор текущих значений концентраций, или абсолютных содержаний питательных, или структурообразующих элементов, \mathbf{V} – вектор случайных неконтролируемых внешних воздействий (погода). Вектор управления \mathbf{U} характеризует относительную долю первичных ассимилятов, поступающих в каждый момент времени t на рост того или иного органа. В терминах введенных переменных построение модели органогенеза представляет собой нахождение зависимости $\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{V}, Z, t)$, то есть определение динамической программы управления доступным ресурсом роста.

Существующие подходы

Хотя число различных подходов и математических аппаратов, применяемых для математического описания регуляторных, кибернетических сторон онтогенеза исключительно велико, не существует общепризнанного мнения о том, какой из них способен наиболее адекватно отразить реально наблюдаемую, порой весьма нетривиальную и адаптивную к изменяющимся условиям внешней среды программу индивидуального развития растения. Детальный анализ предложенных методов можно найти в специальных обзорах [1, 2]. При этом для их классификации обычно используются понятия из своей предметной области – биологии. Если же смотреть на проблему с математической или кибернетической точки зрения, в основу классификации логично положить место и характер процессов регуляции или управления в соответствующей математической формализации. С этой точки зрения все многообразие подходов разбивается на два класса. К первому относятся модели, в которых распределение ассимилятов носит предопределенный, жесткий характер. Так, одна из первоначальных идей, которой до последнего времени следует большинство авторов, сводится к использованию т.н. ростовых функций [3]. Суть метода сводится к следующему. Накопленные на каждом шаге модели первичные ассимиляты распределяются между отдельными органами растения в соответствии с предопределен-

ными долями. Методы вычисления этих долей от так называемого «физиологического времени» (являющегося математической формализацией стадии развития растения [4]) собственно и носят название ростовых функций.

Близким по сути к методу ростовых функций является метод, основанный на использовании «правил приоритетов» [5]. Предполагается, что в каждый момент развития для каждого органа существует объективная величина – потенциальный темп роста. Она представляет собой то максимально возможное приращение биомассы, которое может произойти за заданный промежуток времени при отсутствии каких-либо ограничений. И удовлетворение запросов роста каждого из органов из общего пула лабильного ресурса роста происходит в порядке их приоритетности (который, естественно, меняется в течение сезона вегетации).

Подобные детерминистические подходы к распределению ассимилятов в различных модификациях нашли свое применение во многих моделях, что позволило получить новые и нетривиальные результаты для решения ряда прогнозных задач [6]. Тем не менее, их основной недостаток очевиден. Это «жесткость» программы развития, не позволяющая учесть адаптивную реакцию растений на условия выращивания. Невозможно, в частности, применить аппарат ростовых функций к таким культурам, как многолетние травы, для которых характерно возобновление вегетации после перезимовки или очередного укоса. Ясно, что все это является следствием применения механистического подхода, не учитывающего физиологических реакций растений на условия их выращивания. С математической точки зрения последнее означает отсутствие механизмов обратной связи или регуляции. Подходы, которые мы в нашей классификации относим ко второму классу, направлены на то, чтобы тем или иным способом учесть эти реакции. Перечислим кратко некоторые из них.

В 1972 году Дж. Торнли была предложена концептуально новая модель для описания распределения первичных ассимилятов между надземной и корневой частями растения в процессе его индивидуального развития. В основу этой модели было положено допущение о том, что для построения структурного вещества растению необходимо наличие двух строительных веществ (субстратов) – углерода и азота. При этом источником первичных углеродных соединений выступает процесс фотосинтеза, протекающий в зеленых листьях, а азот поступает из почвенного раствора при поглощении его корнями. То есть сбалансированность роста достигается лишь в той мере, в которой растение имеет в наличии оба необходимых структурообразующих элемента. Согласно модели Торнли в каждый момент времени в растении имеют место два противоположно направленных потока вещества – поток углеродных соединений из листьев в корни и поток азота из корней в надземную часть растения. При этом процесс производства структурного вещества также сконцентрирован в двух пространственных компартментах – способность побега и корней к росту определяется, исходя из текущего содержания в них азота и углерода [7]. Характерной чертой данного подхода, часто декларируемой в качестве ее преимущества, является отсутствие в нем понятия управления или регуляции, вводимого в явном виде [8]. Тенденция к поддержанию сбалансированного роста двух рассматриваемых составляющих частей растения не «навязывается» в ней растению извне, а является результатом взаимодействия прозрачно физически интерпретируемых процессов метаболизма и транспорта.

Пожалуй, в наибольшей степени соответствует представлениям о классической системе управления модель Рейнольдса и Чена [9], называемая самими авторами координационным подходом. В рамках этого подхода управляющая переменная – доля первичных ассимилятов – выражается в явном виде и контролируется путем наложения на нее обратной связи по дисбалансу выходной переменной – пулу не утилизируемого углерода или азота на каждом шаге модели. Оригинальный алгоритм, используемый в большинстве моделей, разрабатываемых в нашей лаборатории, также близок по духу к координационному подходу. Его сущность состоит в том, что дискретная программа управления в растении на каждом шаге модели строится так,

чтобы обеспечить полную утилизацию питательных веществ на следующем шаге. Иными словами, программа пытается обеспечить строительство «с колес», чтобы вновь образуемые углеродные и азотные ассимиляты связывались в структурную биомассу сразу и без остатка [10]. Новый подход, излагаемый в настоящей работе, также используют понятие управления в явном виде. Однако для вывода формы закона управления используется принципиально иные соображения, базирующиеся на применении принципа оптимальности.

Экстремальные принципы в физиологии растений

Попытки применения принципа оптимальности для формализации законов поведения живых организмов предпринимаются достаточно давно. Подробный и профессиональный обзор соответствующих работ в приложении к различным аспектам математической биологии приведен в [11]. Более того, существуют попытки его применения конкретно к описанию органогенеза культурных растений. Так, в модели Клеомолы-Теттинена [12] динамика распределения первичных ассимилятов ищется как решение соответствующей вариационной задачи. При этом оптимизируемой характеристикой на каждом шаге является суммарный относительный темп роста.

Причины интереса к вариационной формализации для целей описания кибернетических аспектов жизнедеятельности организмов очевидны. Вариационный (или Лагранжев) подход дает блестящие результаты в аналитической механике, в области, где введение понятия цели для механической системы отнюдь не столь уж естественно. С этой точки зрения гораздо более оправданным представляется говорить о цели существования живого организма, в качестве которой на популяционном уровне выступает стремление к сохранению вида, а, соответственно, на организменном – воспроизводство себе подобных. Таким образом, цель существования, например, культурного однолетнего растения может быть сформулирована как максимизация количественных и качественных характеристик потомства (генерация следующего года). Видится крайне заманчивым попытаться сформулировать сказанное на формальном математическом языке в виде количественных соотношений - функционала цели. В настоящем параграфе описана попытка применения вариационного подхода к задаче построения математической модели органогенеза. При этом естественным математическим аппаратом будут являться методы и алгоритмы математической теории оптимального управления.

Сформулируем перечень основных постулатов, которые служат базой соответствующих исследований:

1) Растение рассматривается как сложная открытая динамическая система (развивающийся и циклически воспроизводящийся механизм) с определенной целью своего функционирования.

2) Цель формулируется в тем или иным способом интерпретируемых понятиях воспроизводства наиболее мощного в количественном и качественном отношении потомства.

3) Законы метаболизма (производства и транспорта структурных веществ внутри растения) известны и неизменны. Они, в определенном смысле, представляют собой ограничения, формирующие допустимый набор траекторий развития.

4) Онтогенез (развитие) интерпретируется как программа управления метаболизмом, то есть распределением структурных и питательных веществ между органами растения в течение жизненного цикла. Он представляет собой набор статических директив по внешним условиям и динамических обратных связей по внутренним переменным.

5) Законы развития (онтогенез) таковы, что они обеспечивают достижение оптимального показателя поставленной цели, то есть являются решением некоей обобщенной задачи оптимизации.

Заметим, что перечисленные постулаты никоим образом не привязаны к конкретной решаемой задаче – математическому описанию распределения первичных ассимилятов в процес-

се роста. Они равным образом могут быть отнесены и использованы для решения любой проблемы имитационного моделирования биотических процессов в растительной экосистеме.

Принцип оптимальности в модели фенологического развития

Первоначально вариационный подход использовался в работах лаборатории математического моделирования агроэкосистем Агрофизического НИИ для описания фенологического развития. Действительно, развитие, как и рост, чрезвычайно слабо научно описано в современных прикладных динамических моделях агроэкосистем. То, как и когда растение переходит с одной фазы развития на другую, вычисляется во всех этих моделях с помощью чисто эвристических соотношений. Как правило, используется понятие биологического времени, тем или иным способом связанное с интегральными показателями метеорологических характеристик. Переход с одной фазы развития на другую соответствует в данной методике моментам превышения биологическим временем заранее заданных пороговых значений, определяемых эмпирическим путем в процессе идентификации. Ясно, что такой подход не имеет под собой ни научной, ни идеологической основы, а является чисто эмпирическим. Вариационный метод служит не единственной, но одной из возможных альтернатив. Как пример, демонстрирующий возможности применения этого аппарата, рассмотрим простейшую абстрактную модель развития растения.

Пусть в растении выделяются лишь два составляющих компартмента – вегетативные и генеративные органы, каждый из которых описывается единственным показателем мощности [13]. Окружающая среда представляет собой резервуар питательного субстрата или ресурс роста. Ресурс автономно уменьшается (распадается) с течением времени. Скорость потребления ресурса определяется мощностью вегетативных органов. Доля ресурса, направляемая растением в каждый момент времени на рост вегетативных и генеративных органов, представляет собой управление. Тогда для простейшего случая уравнения динамики системы могут быть записаны в виде

$$\frac{dW_V}{dt} = u \cdot S, \quad \frac{dW_G}{dt} = (1 - u) \cdot S,$$

$$\frac{dR}{dt} = -S - \lambda \cdot R, \quad S = k \cdot W_V \cdot R.$$

В приведенных формулах W_G , W_V суть «мощности» вегетативных и генеративных органов, R – ресурс, S – темп общего роста, k и λ – коэффициенты роста структуры и распада ресурса (постоянные параметры). Дать физические аналогии введенным абстрактным понятиям при желании нетрудно. Структурная схема модели развития приведена на рис. 1.

Функционал цели формулируется в виде $J(u) = W_G(t \rightarrow \infty)$. Заметим, что предположение о распаде ресурса позволяет избежать необходимости вводить в функционал искусственные временные границы (наступление «зимы») для получения нетривиальной схемы управления.

Простейший анализ системы показывает, что «полезной» частью растения являются именно вегетативные органы. С их помощью осуществляется поглощение энергии и питания из внешней среды. С этой точки зрения следовало бы в первую очередь удовлетворять именно их потребности роста. Но конечной целью является наоборот рост генеративной части, которая в процессе роста представляет собой чистый сток, то есть является своеобразным «паразитом». Оптимальное управление должно найти разумный компромисс между явным движением к цели и поддержанием инструментов, необходимых для ее достижения.

Тривиальными выкладками показывается, что оптимальная схема управления заключается в следующем. До определенного момента весь потребляемый ресурс направляется на рост вегетативных органов. Затем происходит переключение, и ресурс используется только на рост генеративной части. Открытым остается лишь вопрос о нахождении момента переключения,

который однозначно интерпретируется, как окончание ювенильной и начало генеративной стадии развития (например, цветение). Причем интуитивно ясно, что существует некое оптимальное значение момента переключения. Действительно, если генеративная стадия начнется слишком рано, то накопленной к данному моменту мощности вегетативных органов будет недостаточно для обеспечения хороших темпов потребления ресурса. Большая его часть при этом придется на распад, то есть пропадет бесполезно. И, наоборот, при слишком позднем переключении почти весь оставшийся ресурс будет использован по назначению, но количество его само по себе будет мало. Количественной же иллюстрацией существования оптимального момента переключения служит график на рис.2, где показана динамика роста генеративных органов в зависимости от момента начала их формирования. Видно, что у гипотетической кривой «конечная мощность генеративных органов (момент переключения)» действительно имеется точка глобального максимума. Последовательное усложнение данной абстрактной модели с все большим приближением к реальности позволяет получать момент начала генеративной стадии роста в физически интерпретируемых и даже верифицируемых временных величинах.

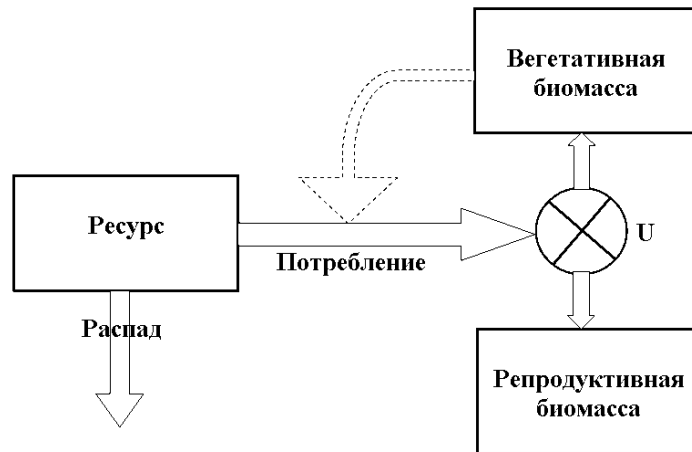


Рис.1. Структурная схема простейшей модели роста

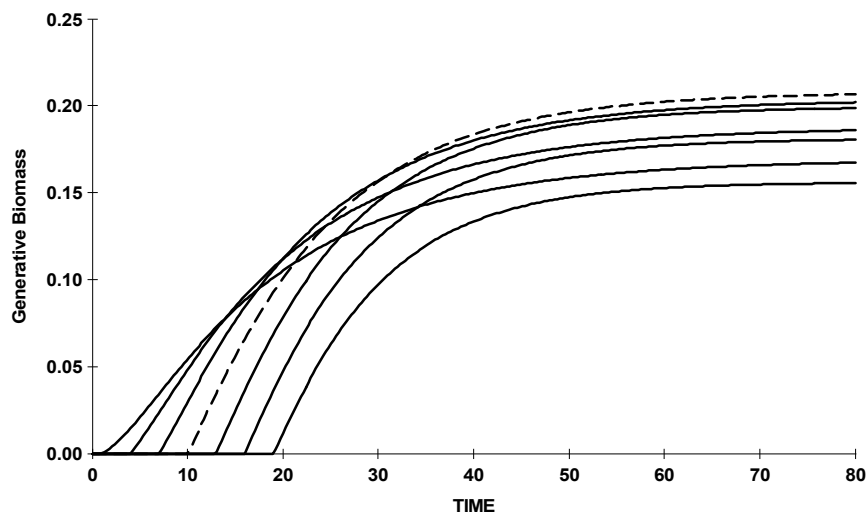


Рис.2. Исследование простейшей модели роста. Графики динамики мощности генеративных органов. Демонстрация наличия «оптимального» момента переключения на генеративный путь развития

Принцип оптимальности в модели органогенеза

Абсолютно тот же подход, который используется в вариационной задаче описания развития, может быть с успехом применен и к рассматриваемой проблеме моделирования органогенеза. Действительно, для этого достаточно детализировать изложенную выше простейшую абстрактную модель, то есть дифференцировать общие компартменты «вегетативные органы» и «генеративные органы» на составляющие их реальные части растения – корни, листья, колос и т.д. Для получившейся более сложной, но и более приближенной к реальности модели, можно будет по-прежнему сформулировать функционал цели в терминах максимальной мощности генеративных органов на конечный момент вегетации. Сказанное, конечно, относится, только к однолетним растениям. Ясно, что не умирающий зимой организм обладает большей степенью «эгоизма», и понятие выживаемости имеет для него не меньший смысл, чем производство потомства в данном конкретном году. Это не означает, что принцип оптимальности воспроизводства в данном случае неприменим – просто он должен быть записан в некоей интегральной форме по всему жизненному циклу растения, с учетом множественности сезонов плодоношения. Аналогично, вряд ли метод оптимальности в изложенной интерпретации годится для растений, размножающихся преимущественно вегетативным способом, например, клубники или картофеля. Для простоты будем считать, что все дальнейшее изложение ведется для злаковых культур. Решением вариационной задачи, то есть оптимальным управлением, будут доли первичных ассимилятов, используемые для роста выделенных органов в каждый момент онтогенеза. Причем в данном случае вид решения аналитически находится для самого общего случая, то есть для базовой системы дифференциальных уравнений, приведенной в первой главе настоящей работы. Действительно, в самой простой трактовке можно сослаться на интуитивно понятный факт или аналогию с линейным программированием – если управление входит в уравнения эволюции системы линейным образом, то максимум функционала цели достигается на поверхности ограничений. Можно, однако, дать и четкое математическое доказательство высказанной гипотезы. Для этого проще всего воспользоваться аппаратом динамического программирования.

Перепишем базовую систему дифференциальных уравнений для случая отсутствия внешних случайных возмущений

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{U} \cdot Z, \\ \frac{dZ}{dt} = F_Z(\mathbf{Y}, t), \\ \frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{F}_Y(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, t), \end{cases}$$

где интерпретация динамических переменных и параметров приведена выше. Будем искать управление в виде решения вариационной задачи

$$\mathbf{U} = \arg \max_{\mathbf{U}} (\mathbf{X}_G(t_N)); \quad \mathbf{U} > 0 \quad \|\mathbf{U}\| = 1,$$

где t_N – время окончания вегетации, \mathbf{X}_G – часть вектора (подвектор) состояния \mathbf{X} , включающая в себя описание состояния генеративных органов. Внешние неконтролируемые воздействия исключены из рассмотрения лишь для простоты изложения. Их учет требует записать выражение для функционала цели в вероятностной форме, то есть использовать вместо случайной теперь величины \mathbf{X}_G некую характеристику ее распределения (например, математическое ожидание). Это усложняет решение задачи, но нисколько не меняет принципиальный алгоритм его нахождения. Для поиска управления воспользуемся стандартной процедурой динамического программирования Беллмана.

Пусть $L(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, Z, t)$ – максимальное значение функционала цели, которое можно достичь при условии, что к моменту времени t величины динамических переменных модели достигли

соответственно значений \mathbf{X} , \mathbf{Y} и Z . Заметим, что запись функционала в точечном, а не в интегральном виде (цель определяется исключительно конечным состоянием системы, но не ее траекторией) исключает появление в функции L явного выражения для накопленного к данному моменту показателя полезности. Дадим теперь времени малое виртуальное приращение Δt и запишем для него выражение для введенного функционала L

$$\begin{aligned} L(\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}(\mathbf{U}, \Delta t), \mathbf{Y} + \delta\mathbf{Y}(\mathbf{U}, \Delta t), Z + \delta Z(\mathbf{U}, \Delta t), t + \Delta t) = \\ = L(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, Z, t) + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}} * \delta\mathbf{X} + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{Y}} * \delta\mathbf{Y} + \frac{\partial L}{\partial Z} \delta Z + \frac{\partial L}{\partial t} \Delta t = \\ = L(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, Z, t) + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}} * \frac{d\mathbf{X}}{dt} \Delta t + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{Y}} * \frac{d\mathbf{Y}}{dt} \Delta t + \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot \frac{dZ}{dt} \Delta t + \frac{\partial L}{\partial t} \Delta t + O(\Delta t) = \\ = L + \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}} * \mathbf{U} \cdot Z + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{Y}} * \mathbf{F}_Y(\mathbf{X}, t) + \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot F_Z(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, t) + \frac{\partial L}{\partial t} \right) \Delta t + O(\Delta t). \end{aligned}$$

Теперь необходимо учесть, что по определению L представляет собой максимальное значение функционала цели, достижимое от заданного состояния. Последнее утверждение позволяет записать для данного случая основное уравнение динамического программирования

$$L(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, Z, t) = \max_{\mathbf{U}} (L(\mathbf{X} + \delta\mathbf{X}(\mathbf{U}, \Delta t), \mathbf{Y} + \delta\mathbf{Y}(\mathbf{U}, \Delta t), Z + \delta Z(\mathbf{U}, \Delta t), t + \Delta t)).$$

Подставляя в последнюю формулу выражение для измененного значения L и собирая члены, зависящие от управления, получаем

$$\mathbf{U} = \arg \max_{\mathbf{U}} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}} * \mathbf{U} \right).$$

Объединяя последнее соотношение с заданными ограничениями легко показать, что оптимальная программа управления для нашего случая записывается в виде

$$U_i = \begin{cases} 0, & \frac{\partial L}{\partial X_i} \neq \max_j \left(\frac{\partial L}{\partial X_j} \right), \\ 1, & \frac{\partial L}{\partial X_i} = \max_j \left(\frac{\partial L}{\partial X_j} \right). \end{cases}$$

Логическая интерпретация полученного решения тривиальна. В каждый момент времени все доступные ассимилянты направляются тому единственному органу, рост которого наиболее важен в смысле достижения конечной поставленной цели. В теории поставленная задача оказывается полностью решена. Действительно, если записать в явном виде тривиальное выражение для функционала L в конечный момент

$$L(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, Z, t_N) \equiv \mathbf{X}_G(\mathbf{X}),$$

т, значение функционала L для произвольного момента времени и состояния динамической системы должны находиться решением «обратным ходом» вытекающего из вышеприведенных соотношений дифференциального уравнения в частных производных

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{X}} * \mathbf{U} \cdot Z + \frac{\partial L}{\partial \mathbf{Y}} * \mathbf{F}_Y(\mathbf{X}, t) + \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot F_Z(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, t) + \frac{\partial L}{\partial t} = 0,$$

где вектор оптимального управления на каждом шаге определяется исходя из текущих значений частных производных L по X . На практике, однако, аналитическое решение последнего уравнения возможно лишь в исключительных случаях и для крайне узкого класса функций F_Y, F_Z . Но общий вид решений – управление на границе – всегда остается неизменным.



Рис.3. Кривая равновесного роста и характер оптимального управления потоками первичных ассимилятов в простейшей модели органогенеза.

Графическая интерпретация полученного решения для случая двух переменных состояния (ξ, ζ) показана на рис.3. В пространстве этих переменных существует некая кривая равновесного роста, определяемая уравнением $\partial L / \partial \xi = \partial L / \partial \zeta$ (здесь рассматривается случай, когда время явно не входит в уравнения динамики). Сбалансированное, гармоничное развитие растения в онтогенезе должно происходить по траектории, задаваемой этой кривой. Если точка, определяющая текущее положение системы лежит ниже кривой, то вектор управления направлен вертикально вверх, и все ресурсы направляются на рост органа ζ . Аналогично, если точка лежит выше кривой, то есть основным лимитирующим рост фактором выступает малость величины ξ , то стремление системы к равновесной кривой происходит по горизонтальной траектории.

В ходе реализации подобной программы развития неизбежно наступает момент, когда система достигает равновесной кривой. Соответственно возникает вопрос - каково должно быть вырожденное управление в этом случае? Интуитивно ясно, что заложенное в определение стремление к оптимальному росту должно поддерживать нахождение системы на наилучшей траектории развития. И при нахождении на равновесной кривой распределение темпов роста должно определяться ее наклоном (текущим значением производной). Классическая теория управления, однако, не позволяет получить этот результат в явном виде. Для доказательства высказанного положения приходится привлекать немногим более изощренный математический аппарат, чем стандартную схему динамического программирования. Ниже приводятся подобные выкладки на частном примере. Легко, однако, показать, что примененная последовательность рассуждений работает и для общей рассматриваемой схемы, приводя к тождественным выводам.

Рассмотрим упрощенную математическую модель роста растения, в котором выделяется два абстрактных вегетативных органа (например, листья и корни). Пусть модель определяется системой следующих дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{Z} = F_Z(Z, X_1, X_2), \\ \dot{X}_1 = U \cdot Z, \\ \dot{X}_2 = (1-U) \cdot Z \end{cases},$$

и управление U ищется как выражение, доставляющее максимум некому функционалу $I = I(X_1(T), X_2(T))$ при естественном условии $0 \leq U \leq 1$. Начнем искать оптимальное управление согласно общей методике динамического программирования. Как и прежде, введем функцию достижимости $L(Z, X_1, X_2, t)$ и запишем основное соотношение, связывающее ее значения в моменты времени, отделенные малым промежутком Δt

$$L(Z, X_1, X_2, t) = \max_U \{L(Z + \delta Z(U, \Delta t), X_1 + \delta X_1(U, \Delta t), X_2 + \delta X_2(U, \Delta t), t + \Delta t)\}.$$

Теперь, как и ранее, преобразуем правую часть этого уравнения, разложив ее по степеням Δt . Но, в отличие от классического случая, не ограничимся величинами первого порядка малости, а будем оставлять в записи все члены до второго порядка малости включительно. При этом прежде всего заметим, что

$$\begin{aligned} L(Z + \delta Z, X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, t + \Delta t) &= L(Z, X_1, X_2, t) + \frac{\partial L}{\partial Z} \delta Z + \frac{\partial L}{\partial X_1} \delta X_1 + \\ &+ \frac{\partial L}{\partial X_2} \delta X_2 + \frac{\partial L}{\partial t} \Delta t + L_{ZZ} \cdot (\delta Z)^2 + L_{11} \cdot (\delta X_1)^2 + L_{22} \cdot (\delta X_2)^2 + L_{tt} \cdot (\Delta t)^2 + \\ &+ 2L_{Z1} \cdot \delta Z \cdot \delta X_1 + 2L_{Z2} \cdot \delta Z \cdot \delta X_2 + 2L_{Zt} \cdot \delta Z \cdot \Delta t + 2L_{12} \cdot \delta X_1 \cdot \delta X_2 + \\ &+ 2L_{1t} \cdot \delta X_1 \cdot \Delta t + 2L_{2t} \cdot \delta X_2 \cdot \Delta t + O\{(\Delta t)^2\}, \end{aligned}$$

где под $L_{..}$ понимается главная или смешанная вторая производная функции L по соответствующим величинам. Далее, учитывая уравнения динамики, разложим по степеням Δt малые приращения переменных состояния:

$$\begin{aligned} \delta Z &= \frac{dZ}{dt} \cdot \Delta t + \frac{d^2 Z}{dt^2} \cdot (\Delta t)^2 = F_Z \cdot \Delta t + \dot{F}_Z \cdot (\Delta t)^2 + O\{(\Delta t)^2\}, \\ \delta X_1 &= \frac{dX_1}{dt} \cdot \Delta t + \frac{d^2 X_1}{dt^2} \cdot (\Delta t)^2 = U \cdot Z \cdot \Delta t + U \cdot F_Z \cdot (\Delta t)^2 + O\{(\Delta t)^2\}, \\ \delta X_2 &= \frac{dX_2}{dt} \cdot \Delta t + \frac{d^2 X_2}{dt^2} \cdot (\Delta t)^2 = (1-U) \cdot Z \cdot \Delta t + (1-U) \cdot F_Z \cdot (\Delta t)^2 + O\{(\Delta t)^2\}. \end{aligned}$$

Подставив выражения для приращений переменных в формулу для приращения L и собирая члены при одинаковых степенях Δt , окончательно получим

$$\begin{aligned} \delta L &= \Delta t \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial Z} \cdot F_Z + \frac{\partial L}{\partial X_1} \cdot U \cdot Z + \frac{\partial L}{\partial X_2} \cdot (1-U) \cdot Z \right) + \\ &+ (\Delta t)^2 \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial Z} \cdot \dot{F}_Z + \frac{\partial L}{\partial X_1} \cdot U \cdot F_Z + \frac{\partial L}{\partial X_2} \cdot (1-U) \cdot F_Z + \right. \\ &+ L_{tt} + L_{ZZ} \cdot F_Z^2 + L_{11} \cdot U^2 \cdot Z^2 + L_{22} \cdot (1-U)^2 \cdot Z^2 + \\ &+ 2L_{Zt} \cdot F_Z + 2L_{Z1} \cdot F_Z \cdot U \cdot Z + 2L_{Z2} \cdot F_Z \cdot (1-U) \cdot Z + 2L_{12} \cdot U \cdot (1-U) \cdot Z^2 + \\ &+ 2L_{1t} \cdot U \cdot Z + 2L_{2t} \cdot (1-U) \cdot Z \left. \right) + O\{(\Delta t)^2\}. \end{aligned}$$

Последнее соотношение служит для определения текущей величины оптимального

управления. Легко заметить, что возможны два качественно различающихся случая. Если $\partial L / \partial X_1 \neq \partial L / \partial X_2$, то есть текущее состояние системы не удовлетворяет условию равновесного роста, то коэффициент при первой степени приращения времени явно зависит от величины управления. При этом его оптимальное значение оказывается равным нулю или единице, в зависимости от того, частная производная от какой переменной больше (что именно является основным лимитирующим фактором). Этот вариант полностью соответствует классической схеме. При этом коэффициент при квадрате Δt никакого значения не имеет, так как это величина высшего порядка малости.

Другое дело при $\partial L / \partial X_1 = \partial L / \partial X_2$. В этом случае управление явно входит лишь в коэффициент при квадрате приращения времени, то есть мы можем управлять и оптимизировать функцию лишь начиная с квадратичного временного слагаемого. Элементарно показывается, что управление в этом случае ищется как решение следующей задачи оптимизации:

$$U_{opt} = \arg \max_U \left(L_{11} \cdot U^2 \cdot Z^2 + L_{22} \cdot (1-U)^2 \cdot Z^2 + \right. \\ \left. + 2L_{Z1} \cdot F_Z \cdot U \cdot Z + 2L_{Z2} \cdot F_Z \cdot (1-U) \cdot Z + 2L_{12} \cdot U \cdot (1-U) \cdot Z^2 + \right. \\ \left. + 2L_{1t} \cdot U \cdot Z + 2L_{2t} \cdot (1-U) \cdot Z \right).$$

Взяв производную по U от данной квадратичной формы, получим уравнение для поиска точки, подозрительной на глобальный экстремум

$$U \cdot (L_{11} \cdot Z + L_{22} \cdot Z - 2L_{12} \cdot Z) = L_{22} \cdot Z - L_{12} \cdot Z - L_{1t} + L_{2t} + (L_{Z2} - L_{Z1}) \cdot F_Z.$$

Остается интерпретировать полученное решение. Докажем, что управление, вычисляемое по последней формуле, соответствует движению системы “по касательной” к кривой равновесного роста, то есть система стремится к поддержанию сбалансированного развития органов. Доказательство будем вести от обратного. Считая, что в данный момент времени t удовлетворяется условие равновесного роста $\partial L / \partial X_1 = \partial L / \partial X_2$, найдем, каким должно быть управление, чтобы через малый промежуток времени Δt система продолжала удовлетворять этому соотношению, то есть

$$\frac{\partial L}{\partial X_1}(Z + \delta Z, X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, t + \Delta t) = \frac{\partial L}{\partial X_2}(Z + \delta Z, X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, t + \Delta t).$$

Как и ранее, разложим соответствующие приращения в ряд по степеням приращения независимой переменной, оставляя только члены первого порядка малости

$$\frac{\partial L}{\partial X_1}(Z + \delta Z, X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, t + \Delta t) = \frac{\partial L}{\partial X_1}(Z, X_1, X_2, t) + \delta \left(\frac{\partial L}{\partial X_1} \right),$$

где

$$\delta \left(\frac{\partial L}{\partial X_1} \right) = (L_{Z1} \cdot F_Z + L_{11} \cdot U \cdot Z + L_{12} \cdot (1-U) \cdot Z + L_{1t}) \cdot \Delta t.$$

Аналогично

$$\frac{\partial L}{\partial X_2}(Z + \delta Z, X_1 + \delta X_1, X_2 + \delta X_2, t + \Delta t) = \frac{\partial L}{\partial X_2}(Z, X_1, X_2, t) + \delta \left(\frac{\partial L}{\partial X_2} \right),$$

где

$$\delta \left(\frac{\partial L}{\partial X_2} \right) = (L_{Z2} \cdot F_Z + L_{12} \cdot U \cdot Z + L_{22} \cdot (1-U) \cdot Z + L_{2t}) \cdot \Delta t \cdot$$

Приравняв необходимые выражения, после несложных преобразований получим формулу для искомого управления

$$U \cdot (L_{11} \cdot Z + L_{22} \cdot Z - 2L_{12} \cdot Z) = L_{22} \cdot Z - L_{12} \cdot Z - L_{1t} + L_{2t} + (L_{Z2} - L_{Z1}) \cdot F_Z \cdot$$

Она полностью совпадает с ранее выведенным частным решением вариационной задачи. То есть тезис о том, что при нахождении системы на кривой равновесного роста оптимальным является распределение ассимилятов, при котором реализуется поддержание системы на данной кривой, оказывается доказанным.

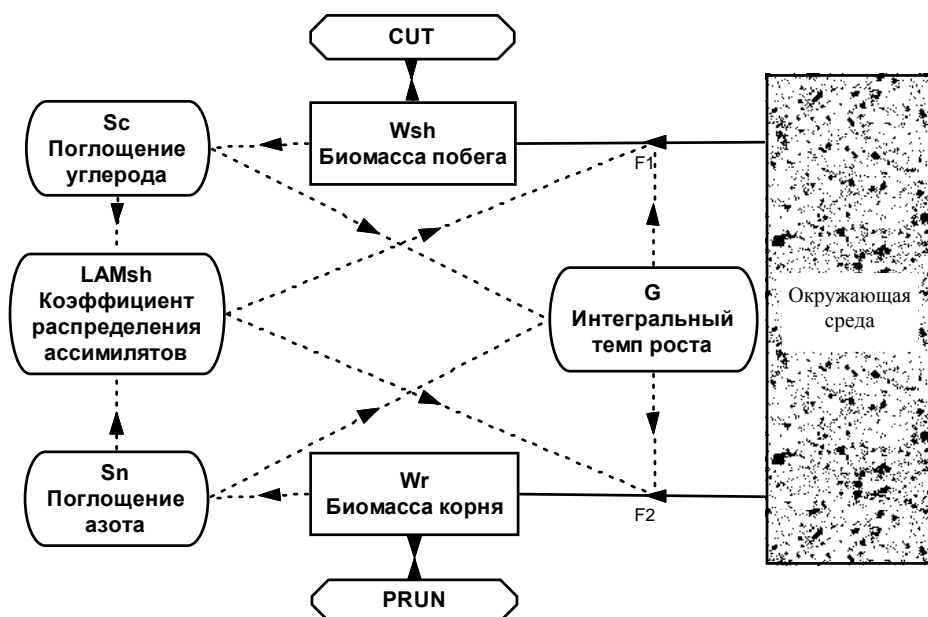


Рис.4. Структурная схема модели органогенеза в нотации пакета «Model Maker»

Анализ и обсуждение модели

Изложенная модель органогенеза на основе вариационного подхода была реализована и исследована нами в специализированной среде «Model Maker», служащей для визуального проектирования и численного анализа камеральных поточно-балансовых моделей [14]. Структурная схема исследуемой динамической модели органогенеза в графической нотации данного программного пакета приведена на рис.4. Заложенные в модель уравнения динамики выглядят следующим образом:

$$\frac{dW_{sh}}{dt} = u_{sh} \cdot Z,$$

$$\frac{dW_{rt}}{dt} = u_{rt} \cdot Z = (1 - u_{sh}) \cdot Z,$$

$$S_C = \sigma_C \cdot W_{sh}, \quad S_N = \sigma_N \cdot W_{rt}, \quad Z = \min \left(\frac{S_C}{f_C}, \frac{S_N}{f_N} \right).$$

В приведенных выше уравнениях под S_C и S_N понимаются потоки поглощенного углерода и азота, а параметры f_C, f_N имеют физический смысл их относительного содержания в структурной биомассе. В качестве функционала цели для данного случая выберем величину $I = W_{sh}(T) \cdot W_{rt}(T) | T \rightarrow \infty$. Заметим, что в данном случае мы формулируем цель отнюдь не в терминах конечной мощности генеративных органов – соответствующий компартмент даже не включен в исходную модель. Но мы можем интерпретировать ее как математическое описание строго вегетативной стадии развития. Из общей же вариационной постановки вытекает, что на этом этапе жизни локальной целью существования для растения является именно максимизация накопления вегетативной биомассы в тех или иных интегральных показателях. Для выбранного функционала цели уравнения динамического программирования в принципе могут быть разрешены явным образом, приводя нас к априорно интуитивно понятной схеме управления

$$u = \begin{cases} 0, & \frac{S_C}{f_C} > \frac{S_N}{f_N}, \\ 1, & \frac{S_C}{f_C} < \frac{S_N}{f_N}, \end{cases}$$

а приведенные выше соображения о форме управления на равновесной кривой дают третью ветку решения

$$u = \frac{S_N/f_N}{S_C/f_C + S_N/f_N}$$

для случая точного равенства темпов поглощения структурообразующих субстратов.

При численной реализации точное равенство двух внутренних модельных переменных никогда, разумеется, не достигается. Соответственно, никогда не будет реализован третий невырожденный и наиболее интересный режим управления – эволюция по кривой равновесного роста. Временная развертка управления и, соответственно, эволюция динамических переменных будут представлять собой ступенчатые функции, «дергающиеся» в малой окрестности кривой равновесного роста. При таком поведении неизбежно накопление ошибок интегрирования. Поэтому в рассматриваемой численной схеме функция зависимости управления от текущего состояния выбиралась в более «мягкой» форме

$$u = \begin{cases} 0, & \text{при } \frac{S_C}{f_C} \cdot (1-\delta) > \frac{S_N}{f_N} \\ 1, & \text{при } \frac{S_C}{f_C} < \frac{S_N}{f_N} \cdot (1-\delta) \\ \frac{S_N/f_N}{S_C/f_C + S_N/f_N}, & \text{в остальных случаях,} \end{cases}$$

где δ – малый параметр. При этом поведение численных решений гораздо более адекватно описывает поведение исследуемой абстрактной непрерывной системы. Некоторые получаемые результаты представлены на рис.5. Вычисление значения выбранного функционала цели (произведение биомасс побега и корня на момент остановки счета) показывает, что его величина для вариационного подхода действительно оказывается хотя и незначительно, но больше, чем для подходов, основанных на применении обратных связей (координационный подход Рейнольдса-

Цена с учетом и без учета пула запасных веществ), для которых также были построены соответствующие модели. Последнее служит косвенным доказательством того, что выбранная схема управления действительно обладает свойством оптимальности в смысле выбранного критерия.

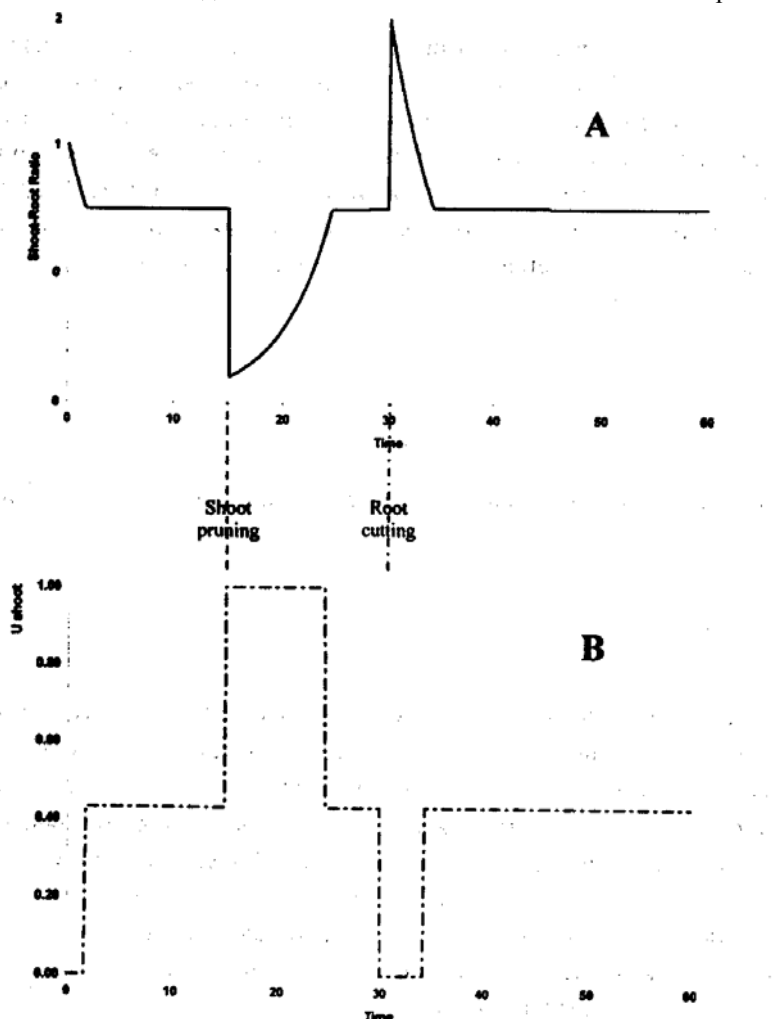


Рис.5. Исследование модели органогенеза в оптимальном режиме управления. Динамика доли первичных ассимилятов, поступающих в побег (А) и отношения «побег-корень» (Б) как реакций на внешние раздражения (подрезка части побега, удаление части корней).

Исходные посылки для применения телеономического подхода в математическом описании регуляторных процессов в растении кажутся вполне оправданными. Однако качественный характер результатов, полученных в ходе исследования простейших абстрактных моделей, описанных в данной работе, вызывает вполне закономерную критику. Действительно, кривые роста растения (какие бы показатели мы ни выбрали в качестве индикаторов роста) обычно изображаются гладкими кривыми, дифференцируемыми в каждой точке. И это отнюдь не удобная математическая формализация – это реальное отражение эмпирических данных фактических измерений. В то же время, использование вариационных принципов в задачах, с линейной зависимостью от управления, всегда будет приводить к релейному характеру решения (оптимального управления). При этом видимая динамика ростовых характеристик неизбежно будет иметь форму кривых с изломами в моменты переключения. Так, например, в задаче об оптимизации репродуктивных усилий [15] (ее постановка во многом схожа с принципами, изложенными в

данной работе) также строго доказывается математически, что в предсказуемой среде максимум репродуктивных усилий достигается только с полным переключением от вегетативного роста к производству семян. При этом кривая роста обязана содержать излом, являющийся индикатором начала репродукции. Его отсутствие в реальных биометрических кривых объясняется в [15] соображениями недостаточной предсказуемости среды, что сглаживает переход. Действительно, возможно вероятностная постановка задачи оптимизации, то есть поиск оптимального управления в условиях неопределенности с выбором в качестве функционала некой статистической характеристики интегральной продуктивности как случайной величины даст результаты, более качественно близкие к реальности. Нам, однако, кажется, что более перспективным направлением поиска было бы усложнение исходных моделей от чисто абстрактных постановок к более детальным формализациям процессов, протекающих в растении в течение его жизненного цикла. В любом случае, экстремальные принципы остаются одним из немногих «идеологически» обоснованных подходов к математической формализации кибернетических аспектов функционирования растительных организмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Wilson J.B.* A review of evidence on the control of shoot:root ratio, in relation to models. *Annals of Botany*, 1988, v.61, p.433-449.
2. *Marceils L.F.M.* Simulation of biomass allocation in glasshouse crops - a review. *Acta Horticulturae*, 1993, v. 328, p. 49-67.
3. *Росс Ю.К.* Система уравнений для количественного описания роста растений. // Фитоактинометрическое исследование растительного покрова. – Таллин: Валгус, 1971, с. 64-88.
4. *Полужтков Р.А., Опарина И.В., Финтушал С.М.* Прогнозирование темпов фенологического развития сельскохозяйственных растений. // Физиология растений 2000, т. 44, №4. с. 557-564.
5. *Lescourret F., Ben Mimoun M., Génard M.* A simulation model of growth at the shoot-bearing fruit level. I. Description and parameterization for peach. *European Journal of Agronomy* 9, 1998, p.173-188.
6. *Полужтков Р.А., Кумаков В.А., Евдокимова О.А., Захарова Е.Т., Финтушал С.М.* Динамическая модель продукционного процесса яровой пшеницы с учетом влияния на рост и развитие растений водного стресса // С.-х. биология, 2002, №1, с. 44-53.
7. *Thornley J. H. M.* A balanced quantitative model for root:shoot ratios in vegetative plants. *Annals of Botany*, 1972, v.36, p. 431-441.
8. *Thornley J. H. M.* Modelling Shoot:Root Relations: the Only Way Forward? *Annals of Botany*, 1998, v.81, p. 165-171.
9. *Reynolds J.F., Chen J.* Modelling whole-plant allocation in relation to carbon and nitrogen supply: Coordination versus optimization: Opinion. *Plant and Soil*, 1996, v.185, p. 65-74.
10. *Poluektov, R.A., E.T.Zakharova.* Two approaches to the description of distribution keys in crop simulation models// Int. Agrophysics, 2000, №1, p.99-104.
11. *Фурсова П.В., Левич А.П., Алексеев В.Л.* Экстремальные принципы в математической биологии. // Успехи современной биологии, 2003, том 123, № 2, с.115-137.
12. *Kleemola J., Tettinen M., Karvonen T.* Modelling crop growth and biomass partitioning to shoots and roots in relation to nitrogen and water availability, using a maximization principle. *Plant and Soil*, 1996, v.185, p.101-111.
13. *Колкер Ю.И.* Модель репродуктивного органогенеза сообщества растений. Научно-технический бюллетень по агрономической физике №21. Агрофизический НИИ, 1974, с.36-40.
14. <http://www.modelkinetix.com>
15. *Zeide B.* Quality as a characteristic of ecological models // Ecological Modelling, 1991, v.55, № 3–4, p.161.