

УДК 51-76:579.26

АГЕНТНЫЙ ПОДХОД В МОДЕЛИРОВАНИИ СИМБИОТИЧЕСКОЙ АЗОФИКСАЦИИ: ОТ ПАССИВНЫХ ОБЪЕКТОВ К АКТИВНЫМ СУБЪЕКТАМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

А. В. Абрамова¹, А. Г. Топаж², Л. А. Хворова¹

¹ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет»,
656049, Барнаул, пр. Ленина, 61

E-mail: abramova.math@gmail.com, khvorovala@gmail.com

²ФГБНУ Агрофизический НИИ,
195220, Санкт-Петербург, Гражданский пр., 14

E-mail: alex.topaj@gmail.com

Поступила в редакцию 14 ноября 2015 г., принята к печати 08 декабря 2015 г.

В статье рассматриваются перспективы и преимущества использования агентного (индивидуально-ориентированного) подхода к моделированию производственных процессов в агроэкосистемах на примере описания процесса симбиотической азотфиксации. Установлено, что переход к представлению комплексной системы в виде совокупности активных агентов с целенаправленным поведением позволяет не просто имитировать динамику системы в рамках причинно-следственного подхода, но и объяснять наблюдаемые в природе закономерности и явления с точки зрения их эволюционного генезиса. Для построения и идентификации соответствующих гибридных моделей наряду с классическими методами системной динамики используется математический аппарат теории оптимизации и оптимального управления.

Ключевые слова: агентные модели, симбиотическая азотфиксация, ризобии, клубеньки, системная динамика.

AGENT-BASED SIMULATION OF BIOLOGICAL NITROGEN FIXATION: FROM PASSIVE OBJECTS TO ACTIVE ENTITIES

A. V. Abramova¹, A. G. Topaj², L. A. Khvorova¹

¹Altai State University, 61, Lenina pr., Barnaul, 656049

E-mail: abramova.math@gmail.com, khvorovala@gmail.com

²Agrophysical Research Institute, 14, Grazhdanskiy pr., Saint-Petersburg, 195220

E-mail: alex.topaj@gmail.com

This paper discusses the prospects and advantages of using the agent-based individual-oriented approach to the modeling of production processes in agro-ecosystems as an example to describe the process of symbiotic nitrogen fixation. It was found that the transition to complex system representation as an assembly of active agents with purposeful behavior allows not only to simulate system dynamics in the cause-effect approach, but also to explain the observed regularities in nature and phenomena in terms of their evolutionary origin. Mathematical apparatus of the theory of optimization and optimal control are used along with the classical methods of system dynamics for construction and identifying the corresponding hybrid models.

Keywords: agent-based models, biological nitrogen fixation, rhizobia, nodules, system dynamics.

ВВЕДЕНИЕ

Магистральная тенденция развития современных методов имитационного моделирования связана с появлением мультипарадигменных (или гибридных) моделей. Наряду с традиционными формами описания динамики нестационарных систем в дискретном и непрерывном времени – системами дифференциальных и разностных уравнений – все большее распространение

получает подход, связанный с построением агентных (или индивидуально-ориентированных) алгоритмов (Grimm, 2005; Wooldridge, 2009). Принципиальная идея данного подхода заключается в том, что поведение целостной сложной системы моделируется как интегральное проявление совокупности составляющих ее поведений и взаимодействующих между собой отдельных элементарных активных сущностей –

динамических агентов. При этом каждый агент в отдельности обладает способностью к независимому изменению своего состояния в соответствии с predetermined правилами и законами. Характеристики агента могут также меняться в ходе его взаимодействий с другими функционирующими в единой топологической сети или непрерывной среде агентами, формируя сложное поведение объединяющей системы.

Иными словами, вместо того, чтобы попытаться описать динамику целостной системы в терминах макрохарактеристик состояния, как это делается в рамках классических системно-динамического или дискретно-событийного подходов, авторы настоящего исследования пытаются получить ее методом статистического усреднения параметров состояния для множества объектов на индивидуальном или микроуровне (моделирование снизу-вверх). С гносеологической точки зрения системно-динамические модели отвечают дедуктивному, а агентные модели – индуктивному методу познания действительности (Swinerd, McNaught, 2012). Базовыми концепциями системно-динамического описания выступают накопители (компарменты, пулы, динамические переменные состояния) и потоки вещества и энергии; агентные модели обычно оперируют понятийным аппаратом диаграмм состояний-переходов и конечных автоматов.

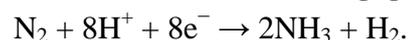
В открытых источниках можно найти большое количество работ, посвященных сравнению традиционного и индивидуально-ориентированного (агентного) подходов при построении моделей конкретных процессов в экологии. В качестве примера можно привести работы, посвященные анализу процессов убегания-преследования в системе «хищник-жертва» (Tutyunov et al., 2007) или моделям роста популяций грибов (Вигонт и др., 2015). Безусловно, агентно-ориентированный подход к моделированию зачастую приносит дополнительные сложности, главными из которых являются нетривиальность интерпретации и воспроизведения получаемых результатов, а также потребность в значительных

вычислительных ресурсах для расчета. С другой стороны, в качестве преимуществ использования данной методологии в научных исследованиях можно привести следующие соображения: приближенность модели к реальности; возможность учета внутренней структурной неоднородности объекта моделирования; уход от неестественного описания счетных множеств индивидуальных организмов непрерывными величинами; возможность получения нетривиального и сложного поведения комплексной системы из простых и естественных законов поведения составляющих ее элементарных агентов (эмерджентный эффект); естественный учет стохастических процессов; перспективы перехода от причинно-следственного описания к описанию активного (адаптивного) поведения агентов, то есть принципиальное изменение парадигмы моделирования.

Настоящая статья посвящена раскрытию последнего тезиса на примере описания процесса симбиотической азотфиксации.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Биологическая фиксация атмосферного азота клубеньковыми бактериями в симбиозе с корневой системой бобовых растений – уникальный механизм и потенциально практически неисчерпаемый естественный источник минеральных соединений азота, являющегося важнейшим питательным элементом сельскохозяйственных посевов. Сущность процесса азотфиксации заключается в восстановлении молекулы азота и включении ее прокариотными микроорганизмами в состав своей биомассы. Обобщенное уравнение реакции данного процесса может быть записано в форме:



Решающий вклад в азотный баланс многих природных и антропогенных экосистем вносят бобовые растения. Это связано с их способностью объединяться со специфическими клубеньковыми бактериями (традиционно называемыми «ризобиями»). Инфицирование корней бобовых растений ризобиями вызывает деление клеток и образование новых органов – клубеньков, в

которых ризобии фиксируют азот из атмосферы. Симбиотические отношения подразумевают обмен между обоими симбионтами – растение, в свою очередь, обеспечивает бактерии необходимыми им углеводами, белками и кислородом. Такое взаимодействие позволяет растениям адаптироваться к условиям дефицита почвенного азота. В сельскохозяйственной практике создание специфических севооборотов с участием бобовых культур за счет использования бобово-ризобияльных систем составляет основу «биологического земледелия». Поэтому включение алгоритмов симбиотической азотфиксации в математические модели продукционного процесса бобовых культур, а, следовательно, и в «моделецентрические» системы расчета сельскохозяйственных севооборотов с участием бобовых культур представляется совершенно необходимым (Хворова и др., 2015a, Liu et al., 2011).

Безусловно, модель симбиотической азотфиксации может быть построена, верифицирована и исследована в рамках традиционной системно-динамической парадигмы, то есть с помощью поточно-балансового подхода. При этом законы поведения исследуемой системы формулируются в виде предопределенных причинно-следственных связей, а также потоков вещества и энергии, математическим выражением которых

выступают системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В частности, ранее авторами настоящей работы была разработана и описана подобная системно-динамическая двухпоточная модель симбиотической азотфиксации (Хворова и др., 2015b). Она включает в себя четыре функциональных компартмента: биомассы надземной и корневой частей растения (генерирующие органы), общую биомассу пула бактерий-симбионтов и содержание минерального азота в почве. В качестве ростовой функции выбрано правило монолимитирования, то есть интегральный ресурс роста на каждом шаге определяется исключительно уровнем текущего лимитирующего фактора – углерода или азота (принцип «бочки Либиха»). Ниже приводится краткая сводка определяющих соотношений, составляющих алгоритмическое наполнение данной опорной (или базовой) модели, которая далее будет рассматриваться в работе как отправная точка для дальнейшей агентно-ориентированной модификации.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

а. Модель системной динамики

Основные уравнения, описывающие динамику выделенных структурных компартментов (динамических переменных) системы, имеют следующий вид:

$$TGR = \min\left(\frac{C_{photosynthesis}}{f_C}; \frac{N_{uptake} + N_{fixation}}{f_N}\right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial Biomass_{shoot}}{\partial t} = TGR \cdot u_s', \quad (2)$$

$$\frac{\partial Biomass_{root}}{\partial t} = TGR \cdot (1 - u_s) \cdot u_r, \quad (3)$$

$$\frac{\partial Biomass_{nod}}{\partial t} = TGR \cdot (1 - u_s) \cdot (1 - u_r) - Biomass_{decay}', \quad (4)$$

$$\frac{\partial N_{soil}}{\partial t} = -N_{uptake} + N_{decay}', \quad (5)$$

где TGR – Total Growth Rate – общий потенциальный прирост биомассы растения при текущих ресурсах углерода и азота; $Biomass_{shoot}$ – биомасса побега; $Biomass_{root}$ – биомасса корней; $Biomass_{nod}$ – биомасса клубеньков; $Biomass_{decay}$ – распад биомассы

клубеньков; $C_{photosynthesis}$ – количество углерода, полученного в процессе фотосинтеза; N_{soil} – концентрация почвенного азота; N_{uptake} – количество азота, полученного из почвы; $N_{fixation}$ – количество азота, полученного путём азотфиксации;

N_{decay} – количество азота, полученного в результате распада биомассы клубеньков; f_C и f_N – параметры, равные доле содержания углерода и азота в структурной биомассе растения соответственно; u_s , u_r – доля общего ресурса роста, направляемая на рост побега (корней).

Интенсивности фотосинтеза (производства первичных углеродных соединений) и поглощения азота корнями из почвы полагаются пропорциональными биомассам соответствующих вегетативных органов (побега и корней):

$$C_{photosynthesis} = \sigma_C \cdot Biomass_{shoot} \cdot Radiation, \quad (6)$$

$$N_{uptake} = \sigma_N \cdot Biomass_{roots} \cdot N_{soil}, \quad (7)$$

где σ_C – условный параметр, равный удельному фотосинтезу единицы биомассы побега; $Biomass_{shoot}$ – биомасса побега; $Radiation$ – внешняя переменная, позволяющая учесть изменение приходящей солнечной радиации в нестационарной постановке; σ_N – удельная скорость поглощения азота из почвы; $Biomass_{roots}$ – биомасса корней растения.

Аналогично фиксация азота происходит пропорционально биомассе клубеньков с удельной интенсивностью K_{fix} . Клубеньки отмирают с определённой интенсивностью (K_{decay}), распад отмершей биомассы пополняет запасы почвенного азота (N_{decay}). Таким образом, уравнения, описывающие процессы в клубеньках, имеют вид:

$$N_{fixation} = K_{fix} \cdot Biomass_{nod}, \quad (8)$$

$$Biomass_{decay} = K_{decay} \cdot Biomass_{nod}, \quad (9)$$

$$N_{decay} = f_N \cdot Biomass_{decay}. \quad (10)$$

Для замыкания модели необходимо сделать предположения о характере регуляторных механизмов, в соответствии с которыми осуществляется «диспетчеризация» ростовых процессов, то есть распределение общего текущего ресурса роста между тремя биологическими компартментами системы (побег, структурные корни и клубеньки). Для этого используется вычислительный алгоритм, изложенный в работе (Полуэктов, Топаж, 2005) и состоящий в том, что в каждый момент времени все доступные ресурсы

направляются к тому единственному органу, рост которого наиболее важен. Иными словами, если на текущем шаге для полного израсходования всех запасов углерода и азота (строительства «с колес») недостаточно азота, то для растения приоритетнее увеличивать биомассу корней или клубеньков, что приведет к повышению количества поглощённого из почвы (или фиксируемого) азота на следующем шаге. Аналогично при недостатке углерода все ресурсы следует направить на прирост биомассы побега. Таким образом:

$$u_s = \begin{cases} 0, & \frac{C_{photosynthesis}}{f_C} > \frac{N_{uptake} + N_{fixation}}{f_N} \\ 1, & \frac{C_{photosynthesis}}{f_C} < \frac{N_{uptake} + N_{fixation}}{f_N} \end{cases}. \quad (11)$$

Согласно аналогичным представлениям о «максимальной выгоде», полученной от «текущих инвестиций», в рост того или

иного центра ассимиляции распределяются отправляемые «вниз» ресурсы между корнями и клубеньками:

$$u_r = \begin{cases} 0, & \sigma_N \cdot N_{soil} < K_{fix} \\ 1, & \sigma_N \cdot N_{soil} > K_{fix} \end{cases}, \quad (12)$$

где u_r – доля роста корней; доля роста клубеньков соответственно равна $(1 - u_r)$.

На рисунке 1 представлена структурно-поточковая диаграмма модели в нотации среды имитационного моделирования AnyLogic, использованной для ее реализации и исследования. Анализ поведения модельной системы показывает, что в начале вегетации «работают» контура автотрофного роста побега и корней, так как в почве содержится достаточное количество доступного минерального азота. Это в полной мере соответствует известному экспериментальному факту отсутствия азотфиксации на богатом фоне удобрений. Однако по мере роста данные запасы

истощаются, и подключается контур роста клубеньков, а вместе с ним процесс симбиотической азотфиксации. Одновременно происходит распад старых клубеньков с пополнением пула почвенного азота, и система, в конце концов, выходит на устойчивый режим роста всех составляющих компартментов. Таким образом, построенная модель позволяет отразить такие процессы бобово-ризобийного взаимодействия, как рост побега и корней растения в зависимости от приоритета, образование клубеньков при истощении почвенного азота, реакция системы на внос азотных удобрений и подрезку побега.

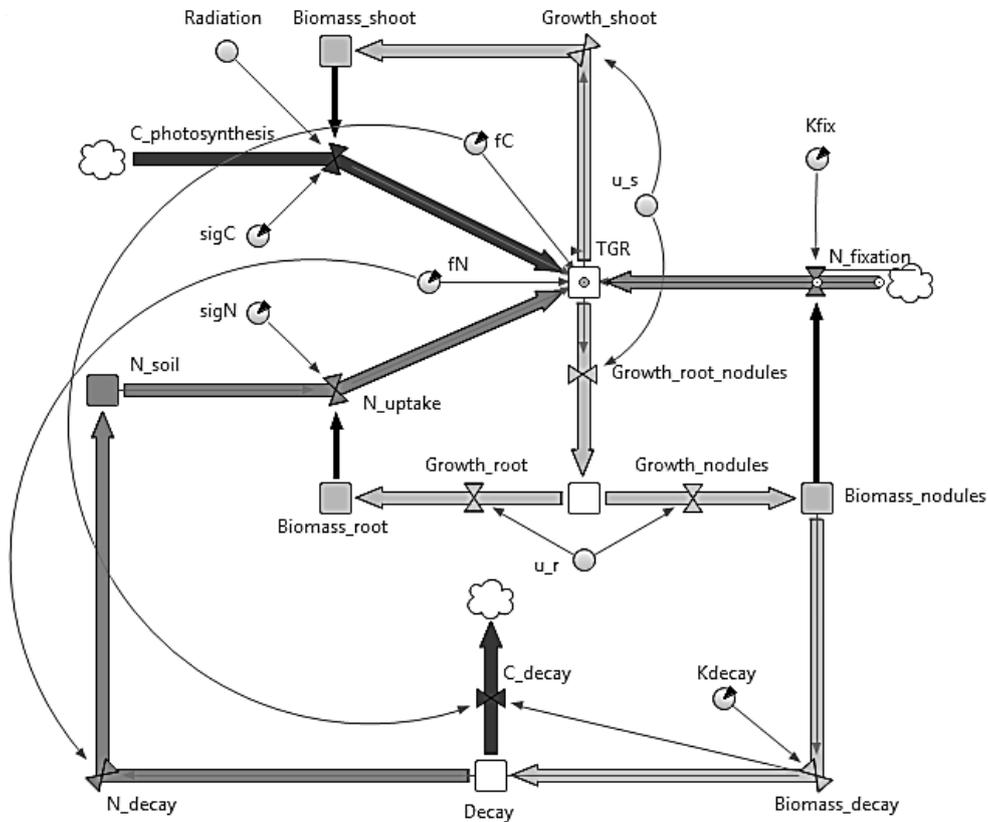


Рис. 1. Диаграмма поточно-балансовой модели в нотации среды AnyLogic

б. Детерминистическая агентная модель

Естественным шагом при переходе от чисто системно-динамического уровня описания к агентному является отказ от представления в модели клубеньков в виде неделимого интегрального компартмента, характеризующегося единственным параметром – общей биомассой. Вместо этого каждая колония бактериодов/ризобий будет описываться как отдельный независимый объект со своим моментом

рождения, жизненным циклом роста и развития и продолжительностью существования. При этом в комплексной имитационной системе наряду с объектом «растение», модель которого в целом остается похожей на исходную формализацию, представленную на рисунке 1, появляется новый объект «клубенек» со своей уникальной динамикой поведения. Основное структурное изменение в модели верхнего уровня при этом заключается в том, что из нее исключается

динамическая переменная (накопитель) *Biomass_nodules*, которая заменяется коллекцией ссылок на экземпляры нововведенного модельного класса *Nodule*, что требует проведения соответствующих изменений в способе вычисления всех зависимых потоков. В свою очередь, внутренняя модель класса *Nodule* описывается отдельно, что представляет собой комбинацию двух подходов к описанию процессов. Динамика биомассы каждой конкретной колонии описывается

единственной переменной состояния (биомасса) с простейшей моделью динамики ее изменения (пополнение вследствие потока инвестиций ресурса роста из агрегирующей системы и уменьшение за счет распада). В свою очередь, жизненный цикл колонии представляет собой элементарный конечный автомат с двумя состояниями («жизнь» и «смерть») и соответствующим образом описанными правилами перехода между данными состояниями (рис. 2).

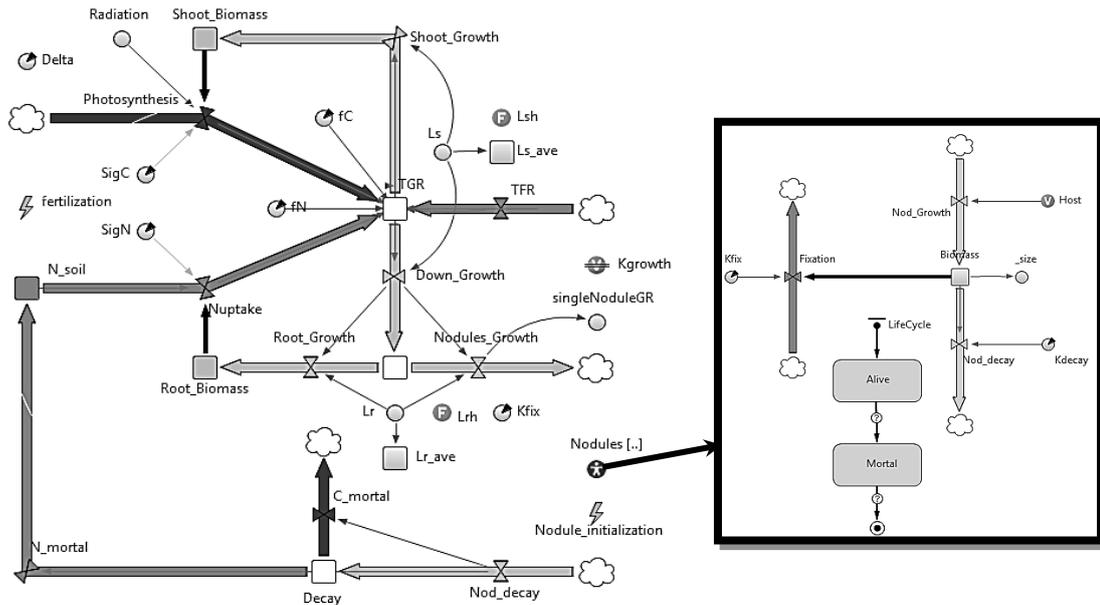


Рис. 2. Диаграмма агентной модели в нотации среды AnyLogic

В базовой модели комплексной системы производятся следующие модификации.

- Уравнение (4) для скорости изменения общей биомассы всех колоний ризобий в модели верхнего уровня трансформируется в приводимое ниже

$$Growth_{total} = TGR \cdot (1 - u_s) \cdot (1 - u_r), \quad (13)$$

и интенсивности роста каждой отдельной колонии

$$Growth_{single} = \frac{Growth_{total}}{N_{alive}}, \quad (14)$$

а также определение условия рождения новой колонии ризобий. В уравнении (14) величина N_{alive} представляет собой текущее количество активных, то есть находящихся в «живом» состоянии, колоний. Нетрудно заметить, что в данной версии модели принято упрощающее предположение о том, что назначаемый клубенькам ресурс роста делится между всеми ними поровну, вне

уравнение (19) для динамики роста каждой колонии в отдельности. При этом в сфере ответственности модели верхнего уровня (как «центра управления ростом») остается вычисление общей интенсивности роста всех колоний

зависимости от их текущего возраста и/или текущей биомассы.

- Уравнения (8)–(9) для потоков фиксированного и высвобождаемого азота из клубеньков в растительную систему и в почву переписываются в виде операций суммирования соответствующих индивидуальных потоков от всех отдельно рассматриваемых агентов:

$$N_{fixation} = \sum_{i=1}^N N_{fixation}^i, \quad (15)$$

$$Biomass_{decay} = \sum_{i=1}^N Biomass_{decay}^i, \quad (16)$$

где N – общее число клубеньков (как живых, так и отмерших).

- Условие рождения новой колонии ризобий формулируется в виде следующего

$$Growth_{single} \geq Growth_{thr}, \quad (17)$$

где $Growth_{thr}$ – постоянный параметр, имеющий смысл пороговой интенсивности роста отдельного клубенька. Иными словами, побудительным механизмом к образованию новой колонии ризобий служит наличие свободных ресурсов роста, которые не могут быть востребованы уже

правила. Считается, что соответствующий триггер в процессе интегрирования системы срабатывает при выполнении условия:

имеющимися колониями в силу физиологических ограничений потенциальной скорости роста.

Модель роста и развития отдельного клубенька (изображена на выноске рис. 2) описывается следующими соотношениями:

$$N_{fixation}^i = \begin{cases} K_{fix} \cdot Biomass_{nod}^i, & i \leq N_{alive} \\ 0, & i > N_{alive} \end{cases}, \quad i = 1 \dots N, \quad (18)$$

$$\frac{\partial Biomass_{nod}^i}{\partial t} = Growth_{single} - Biomass_{decay}^i, \quad i = 1 \dots N, \quad (19)$$

$$Biomass_{decay}^i = \begin{cases} 0, & i \leq N_{alive} \\ K_{decay} \cdot Biomass_{nod}^i, & i > N_{alive} \end{cases}, \quad i = 1 \dots N. \quad (20)$$

Таким образом, предполагается, что фиксируют азот только живые, а распадаются с высвобождением азота в почву – только отмершие колонии азотфиксирующих бактерий. Для замыкания модели остается только сформулировать условие прекращения жизни для модельных колоний микроорганизмов. В настоящей

версии модели в качестве данного условия принимается правило «внезапной смерти», а именно считается, что переход в мертвое состояние (с мгновенной инициализацией процесса распада биомассы) осуществляется в момент, когда биомасса колонии превышает некую критическую величину (предел роста $Biomass_{thr}$)

$$Biomass_{nod}^i \geq Biomass_{thr}. \quad (21)$$

Примеры расчетов по агентной модели продемонстрированы на графиках, представленных на рисунке 3. На них приведена динамика роста числа и суммарной активной биомассы клубеньков. Для сравнения на правом графике показана динамика роста клубеньков как единого функционального компартмента в исходной системно-динамической модели для тех же значений определяющих параметров. Очевидно, что структурная дискретизация модели приводит лишь к незначительному и практически незаметному изменению качественной картины поведения целостной

системы в терминах макрохарактеристик ее состояния (кривая роста суммарной биомассы азотфиксирующего компонента содержит малые «биения», вызванные актами рождения новых и смерти старых колоний ризобий). Судить о полезности произведенной модификации, ориентируясь на полученные результаты, весьма затруднительно – в данной постановке принципиальное усложнение структуры модели действительно не приносит в описание исследуемой природной системы никакого нового качества.

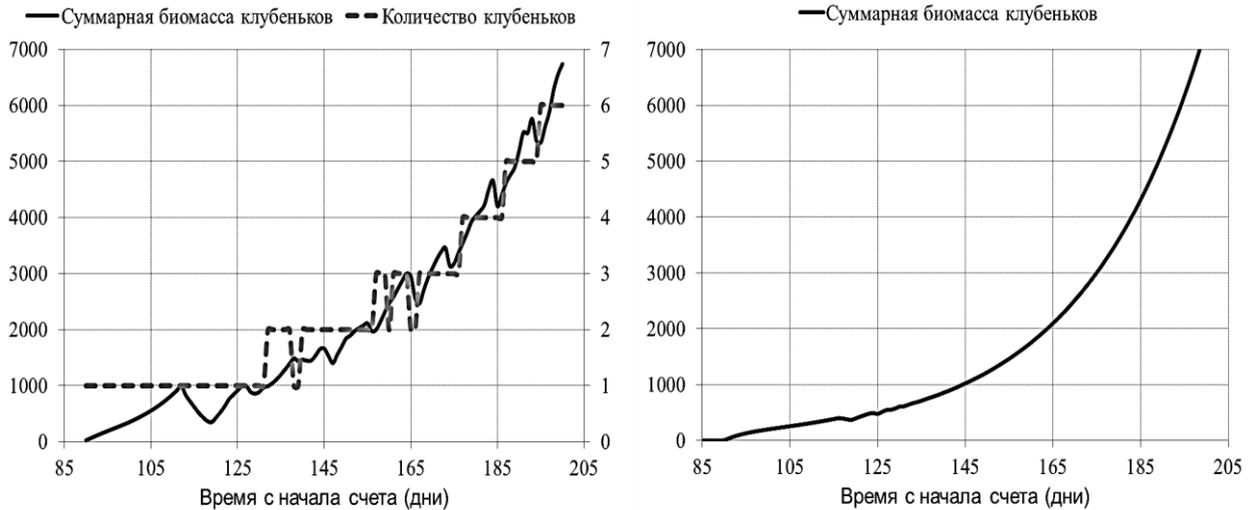


Рис. 3. Динамика роста общего числа (шт.) и суммарной активной биомассы (мг) клубеньков на одно модельное растение в детерминистической агентной (А) и системно-динамической модели (В)

Однако осуществленный переход к агентной формализации следует считать лишь первым шагом к принципиальному обогащению семантики и алгоритмической логики модели. Действительно, в рамках алгоритма моделирования, задаваемого соотношениями (13)–(21), содержится неявное предположение о том, что все экземпляры класса-агента «клубенек» абсолютно одинаковы и неразличимы между собой как по законам поведения, так и по значениям параметров, характеризующих данное поведение. При этом действительно нет никакой принципиальной разницы между интегральным и детализированным описанием. Однако именно в рамках агентного подхода появляется возможность заложить в алгоритм интегрирования модели неодинаковость (или гетерогенность) составляющих ее структурных частей одного типа. Польза от подобного изменения подхода к моделированию очевидна. Во-первых, нет сомнения, что данное предположение гораздо больше соответствует ситуации в живой природе, где каждый организм – представитель животной популяции или растительного ценоза – обладает индивидуальностью свойств и поведения, заключающейся в их генотипическом и фенотипическом различии. Во-вторых, индивидуальный

подход к каждому единичному агенту позволяет применить для исследования поведения целостной системы принципиально иную парадигму описания, а именно осуществить переход от причинно-следственных механистических моделей к моделям телеономической направленности.

В первом варианте моделирование сводится к имитации поведения пассивных агентов в заранее заданных условиях и со строго заданными реакциями на внешние возмущения. Во втором полагается, что агенты могут обладать целеустремленным поведением и способны оптимизировать те или иные свои характеристики, обеспечивая наилучшую приспособленность к окружающей среде. Можно сказать, что в рамках указанного подхода в модели не просто фиксируются наблюдаемые в природе закономерности, но также делается попытка объяснить и интерпретировать их с точки зрения эволюционной теории, вывести причины их возникновения, то есть проследить генезис. Разработка и исследование моделей экологических процессов в рамках телеономических представлений требует привлечения нового математического аппарата – теории оптимизации и/или теории автоматического управления, которые должны применяться наряду с традиционными методами

формализации в виде систем обыкновенных дифференциальных или разностных уравнений. Можно привести многочисленные примеры успешного применения принципа оптимальности для построения имитационных моделей в различных областях математической биологии (Фурсова и др., 2003) и, в частности, в теории продукционного процесса сельскохозяйственных растений (Iwasa, Roughgarden, 1984; Топаж, Полуэктов, 2005).

Ниже описываются две модификации построенной агентной модели симбиотической азотфиксации, в которых, во-первых, учитывается гетерогенность популяции клубеньков, а, во-вторых, рассматривается возможность оптимизации агентами своих характеристик, исходя из гипотезы наличия целеполагания. Принципиальным здесь является вопрос о том, какой из двух взаимодействующих симбионтов (ризобии или бобовое растение) считается активным агентом (обладающим возможностью выбора), а какой - пассивным.

в. Агентная модель с «мошенниками» (активные агенты – ризобии)

Известно, что свободно живущие ризобии не нуждаются в симбиозе с растениями для поддержания своей популяции и что в данном состоянии они не задействуют энергетически затратные механизмы фиксации атмосферного азота (Воробьев, Проворов, 2010). Сущность бобово-ризобиального симбиоза заключается именно в том, что бактерии вырабатывают лабильный азот в качестве своеобразной «платы» за снабжение их растением углеродосодержащими питательными веществами (сахарами и т.п.). Более того, известен факт, что вступившая в симбиоз с корневой системой колония микроорганизмов существует в клубеньке в

виде особой органической формы – бактериоида. Бактериоиды утрачивают способность к размножению, превращаясь в генерирующие центры по фиксации атмосферного азота и, в свою очередь, потребляя углеродсодержащие питательные вещества, предоставляемые им растением. Часть питательных веществ утилизируется, то есть связывается в структурную биомассу в процессе роста самих клубеньков, однако остальная часть поступает в ризосферу, где может быть использована для питания свободноживущих ризобий. Таким образом, популяция живых ризобий в каждый момент времени может быть разделена на две группы: бактериоиды, фиксирующие азот, и «cheaters» (мошенники) – свободноживущие микроорганизмы, пользующиеся всеми преимуществами симбиотического взаимодействия с бобовым растением, но сами не играющие в данном симбиозе никакой полезной роли (Provorov, Vorobyov, 2008). Для отражения указанной разнотипности введем соответствующие изменения в исходную агентную модель.

Дополнительно к имеющимся переменным состояния каждая колония ризобий будет характеризоваться еще одним параметром булевского типа *isCheater*, значение которого показывает, являются ли ризобии данной колонии «мошенниками». Факт принадлежности очередного агента к «мошенникам» задается случайным образом в момент его рождения; вероятность отнесения каждого такого агента к классу «честных» или «мошеннических» организмов определяется дополнительным управляющим параметром системы P_{cheate} . Проявление «мошеннических» свойств состоит в том, что соответствующие ризобии не фиксируют азот даже в «живом» состоянии. То есть уравнение (18) для данного случая переписывается в виде:

$$N_{fixation}^i = \begin{cases} K_{fix} \cdot Biomass_{nod}^i, & i \in N_{alive} \cap not\ isCheater \\ 0, & i \in N_{alive} \cup isCheater \end{cases}, \quad i = 1 \dots N. \quad (22)$$

Получившуюся модифицированную систему можно исследовать численно, однако в рамках простого имитационного эксперимента отличия от базового варианта в форме кривых роста определяющих

переменных состояния проявляются только на количественном, но не на качественном уровне. Представляется интересным поставить и решить следующий вопрос: какой процент «мошенников» в популяции

ризобий будет оптимальным с точки зрения интегральной приспособленности всей популяции целиком? Иными словами, какая доля ризобий в устоявшемся режиме роста должна «жертвовать собой», становясь бактериоидами и утрачивая способность к репродукции, для того, чтобы суммарный темп роста популяции свободноживущих бактерий оказался наибольшим? Активное поведение агентов в данном случае сводится к нахождению оптимального баланса между количеством «альтруистов» и «эгоистов» в сообществе. Тем самым можно сказать, что предпринимается попытка воспроизвести в рамках простейшей модели механизм популяционного, или семейственного (kin selection) отбора (West et al., 2002a).

Математически поставленная проблема представляется в форме задачи алгебраической оптимизации, а именно нахождения оптимальной величины P_{cheat} , при которой достигаются максимальные темпы прироста биомассы субпопуляции «мошенников» на временах интегрирования, стремящихся к бесконечности. Данную задачу можно решить с помощью встроенных в среду AnyLogic алгоритмов планирования и проведения многовариантных экспериментов с имитационными динамическими моделями. Причем поскольку в текущей модификации имитационной модели присутствуют элементы стохастики, то для получения

представительных результатов следует воспользоваться механизмом репликаций, или повторностей, а именно, во всех процедурах, связанных с перебором значений входных параметров (оптимизация, анализ чувствительности и др.), необходимо для каждого текущего кортежа значений осуществлять не один, а несколько прогонов модели, повышая тем самым объем выборки и увеличивая точность оценки выбранного критерия качества для текущего варианта.

Результаты подобного многовариантного стохастического эксперимента, связанного с варьированием вероятности (или доли «мошенников» в сообществе), приведены на рисунке 4. Нетрудно заметить, что хотя элемент случайности вносит значительный разброс в получаемые результаты, тем не менее, кривая средних значений однозначно демонстрирует тенденцию к наличию максимума в области невырожденных значений оптимизируемого параметра. Таким образом, в рамках данной постановки действительно можно определить величину «относительного мошенничества» популяции микроорганизмов, при которой симбиотическое взаимодействие с «пассивным» растением оказывается наиболее выгодным с точки зрения интегральной видовой приспособленности бактерий.

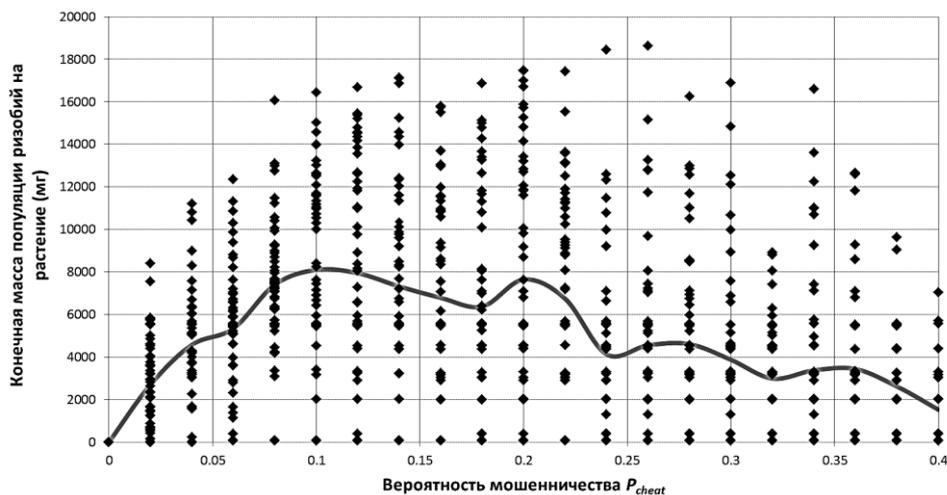


Рис. 4. Зависимость конечной микробной биомассы от доли «мошенников» в популяции симбиотических бактерий по данным эксперимента множественных прогонов с повторностями

г. Агентная модель с санкциями
(активный агент – растение)

В рассмотренной выше модификации модели адаптивное, то есть целеустремленное поведение, направленное на нахождение оптимальной стратегии жизнедеятельности, приписывалось популяции симбиотических микроорганизмов. Партнерская сторона симбиоза (растение) рассматривалась как объект с предопределенным и неизменным поведением, то есть фактически как часть среды обитания микроорганизмов.

Весьма логично попытаться встать на противоположную точку зрения, а именно посчитать растение активной управляющей стороной в симбиозе. Из анализа литературных источников можно заключить, что основным и самым простым механизмом адаптации растения в симбиотической азотфиксации служит возможность оценивать текущий уровень фиксации азота каждым клубеньком и отключать от снабжения углеродными ассимиляцией наименее полезные из них. Подобная стратегия поведения носит в литературе название «санкций» (West et al., 2002b). Модификация агентной модели, позволяющая учесть «санкционную политику» растения по отношению к взаимодействующим с ним ризобиям, формализуется в виде следующих положений.

Гипотеза о неоднородности популяций микроорганизмов по уровню характерной фиксации азота остается в силе. Однако, в

отличие от рассмотренного выше случая, величина удельной фиксации (степень «мошенничества») каждой отдельной колонии не является предметом осознанного выбора, а задается случайным образом, отражая априорно существующую в природе гетерогенность организмов по данному фенотипическому признаку. Таким образом, теперь параметр K_{fix} считается не константой в масштабе всей имитируемой системы, а варьируется для каждого агента в отдельности. Присвоение величины характерной фиксации K_{fix}^i происходит в момент рождения каждого нового экземпляра класса «клубенок» методом генерации случайной величины, подчиняющейся заданному закону распределения. На каждом шаге интегрирования модели растение распределяет общий ресурс роста отнюдь не по всем живущим колониям ризобий, а только по тем из них, у которых уровень фиксации выше некоего критического значения, которое естественно интерпретировать как «уровень притязаний». Дополнительным условием, гарантирующим невырожденность получаемых оптимальных решений, является предположение о том, что определение растением степени «честности» каждого агента-симбионта требует некоторого количества времени. Математическая формализация выдвинутых предположений заключается в изменении ряда соотношений базовой агентной модели. В частности, уравнение (18) превращается в следующее:

$$N_{fixation}^i = \begin{cases} K_{fix}^i \cdot Biomass_{nod}^i, & i \leq N_{alive}, \\ 0, & i > N_{alive} \end{cases}, \quad i = 1 \dots N. \quad (23)$$

где K_{fix}^i представляет собой случайную величину, равномерно распределенную на интервале $[0; K_{fix}^{max}]$. Выражение (21),

описывающее правило прекращения жизни отдельного клубенька, трансформируется и имеет следующий вид:

$$(Biomass_{nod}^i \geq Biomass_{thr}) \cup ((Age \geq Age_{test}) \cap (K_{fix}^i < \gamma \cdot K_{fix}^{max})), \quad (24)$$

где Age_{test} и γ – глобальные параметры модели, обозначающие промежуток времени, необходимый растению, чтобы оценить степень фиксации у вновь образовавшегося клубенька («испытательный срок») и

«уровень притязаний» растения, то есть порог применения санкций. В свою очередь Age представляет собой новую внутреннюю динамическую переменную для класса Nodule – возраст клубенька.

Задачей исследования построенной модификации модели с активным растением и пассивными ризобиями является определение оптимального «уровня притязаний» растения γ , обеспечивающего наибольший темп роста генерирующих органов растения в установившемся режиме. Интуитивно ясно, что когда данный уровень стремится к нулю, то есть когда стратегией поведения растения является полная «толерантность» к «эгоизму» симбиотических партнеров, значительная доля общего ресурса роста тратится на питание клубеньков-«паразитов». Напротив, при очень высоком уровне притязаний, ($\gamma \rightarrow 1$) распределение ресурса формально является очень эффективным (поддерживаются только самые «трудоспособные» клубеньки), но число

подобных «передовиков» в силу неидеальности сообщества в каждый момент времени оказывается небольшим, а накладные расходы на поиск и тестирование большого количества «претендентов» нивелируют все преимущества оптимальной организации конечного «производственного процесса».

Результаты исследования описанной модификации в эксперименте варьирования оптимизируемого параметра с репликациями приведены на рисунке 5. Нетрудно заметить, что в середине выбранного интервала варьирования действительно существует в среднем наилучшее значение «уровня притязаний», приводящее к наиболее высокому уровню приспособленности растения в терминах максимизации темпов его удельного роста.

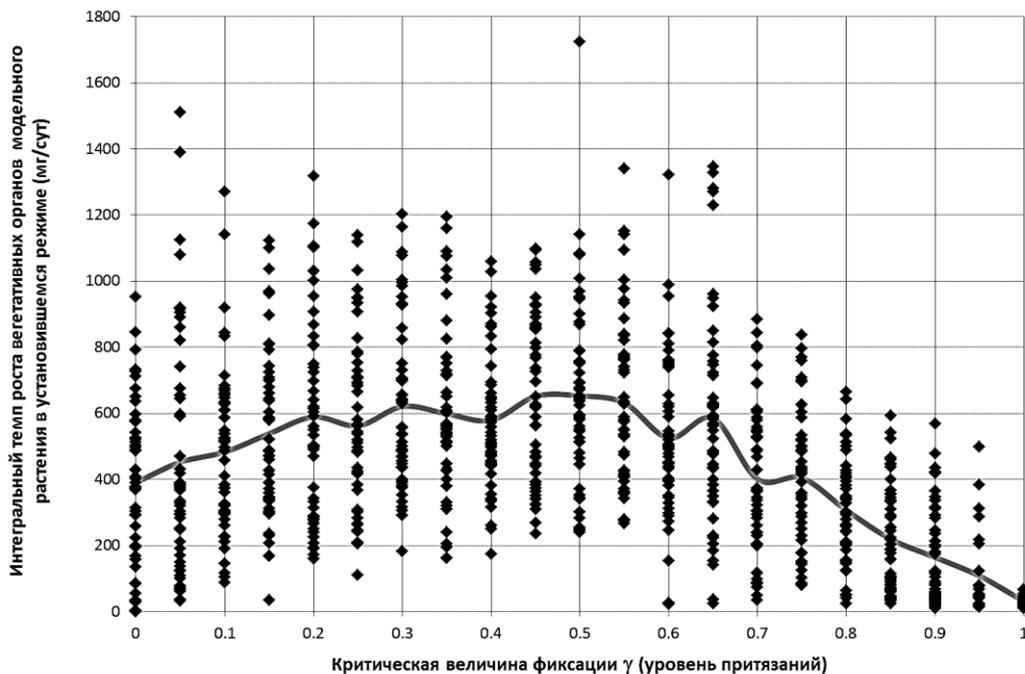


Рис. 5. Зависимость интегрального темпа роста растения в установившемся режиме в зависимости от величины параметра «уровень притязаний» в модели «с санкциями». Данные эксперимента множественных прогонов с повторностями

д. Перспективы развития. Агентная модель в игровой постановке (и ризобии и растение – активные агенты).

Естественной перспективой применения агентного подхода для описания симбиотической азотфиксации может служить рассмотрение случая, когда *оба* симбионта представляют собой независимые активные субъекты, каждый из которых

имеет собственную цель и преследует собственные интересы. В простой постановке можно считать, что при этом каждый агент представляет собой неограниченно растущий организм, способный генерировать один конкретный ресурс (растения производят углерод в процессе фотосинтеза, а ризобии фиксируют почвенный азот). Однако для обеспечения собственного роста обоим агентам

необходимы одновременно оба производимых элемента. Иными словами, развитие всей системы становится возможным, только если агенты будут взаимно «делиться» частью производимого ими ресурса в обмен на ресурс, производимый партнером по кооперации. Таким образом, вариативность поведения каждого из агентов (его функция управления) состоит в динамическом законе изменения доли производимого первичного ресурса, который он отдает партнеру. Результатом является типичная игровая постановка, при которой партнеры, каждый с собственной целью, методом проб и ошибок должны выработать согласованное кооперативное поведение (Аксау, Roughgarden, 2007). Математическим аппаратом, используемым для анализа подобных проблем, как правило, является теория оптимального управления и теория неантагонистических дифференциальных игр (Топаж, Абрамова, 2015).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описано несколько модификаций разработанной агентно-ориентированной модели симбиотической азотфиксации. Их принципиальное отличие состоит в выборе центра управления и принятия решений в системе из двух взаимодействующих агентов. В детерминистической постановке оба объекта симбиотического взаимодействия (бобовое растение и азотфиксирующие бактерии) рассматриваются как пассивные агенты с предопределенными законами функционирования. В моделях «мошенничества» и «санкций» один из агентов описывается как компонент с пассивным предопределенным поведением, а второй обладает адаптивными механизмами, позволяющими ему найти оптимальную стратегию, максимизирующую его интегральную приспособленность в

рамках двухвидовой симбиотической экосистемы.

Следует отметить, что разные модификации модели, отличающиеся выбором фокуса интереса, можно интерпретировать как точки зрения специалистов различных предметных областей на процесс биологической азотфиксации. Действительно, детерминистическая, или причинно-следственная постановка (наличие в модели двух пассивных агентов) наиболее близка по духу к области традиционного агроэкологического моделирования, где единым и неделимым объектом исследования выступает вся агроэкосистема. Модель «мошенничества», в которой основное внимание сосредоточено на поведении и адаптации микроорганизмов, может быть отнесена к сфере ответственности сельскохозяйственной микробиологии. «Санкционная» модель, в которой центр управления и выбора стратегии поведения смещен в сторону растения, в большей степени соответствует традиционному представлению ученых-агрохимиков. И, наконец, гипотетическая модель взаимодействия двух активных агентов в игровой постановке является типичной проблемой математической теории эволюции. Таким образом, можно заключить, что переход к агентно-ориентированным (или гибридным) имитационным моделям экологических систем, помимо прочего, создает основу и потенциал для их анализа в рамках мультидисциплинарного подхода, тем самым обеспечивая принципиально новое качество модельных исследований.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта «15-34-50961 мол_нр».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Вигонт В. А., Миронычева Е. С., Топаж А. Г. Модификация модели роста грибов Чантера–Торнли и ее анализ средствами многоподходного имитационного моделирования // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. VII. № 2. С. 375–385.
- Воробьев Н. И., Проворов Н. А. Моделирование эволюции бобово-ризобияльного симбиоза на повышение функциональной интегрированности партнеров и экологической эффективности их взаимодействия // Экологическая генетика. 2010. Т. VIII. № 3. С. 16–26.
- Полужтков Р. А., Топаж А. Г. Расчет отношения root/shoot в моделях органогенеза высших растений // Физиология растений. 2005. Т. LII. № 5. С. 769–775.
- Топаж А. Г., Полужтков Р. А. Принцип оптимальности в математических моделях органогенеза // Математическое моделирование. 2005. Т. XVII. № 7. С. 59–73.
- Топаж А. Г., Абрамова А. В. Многоподходное математическое моделирование симбиотических взаимодействий на примере модели симбиотической азотфиксации // Материалы Четвертой Национальной конференции с международным участием «Математическое моделирование в экологии». 18-22 мая 2015 г. Пущино, ИФХиБПП РАН. С. 183-184.
- Фурсова П. В., Левич А. П., Алексеев В. Л. Экстремальные принципы в математической биологии // Успехи современной биологии. 2003. Т. CXXXII. № 2. С. 115–137.
- Хворова Л. А., Топаж А. Г., Абрамова А. В. Математическая модель симбиотической азотфиксации // Известия АлтГУ. 2015. №1 (85/2). С. 158–163.
- Хворова Л.А., Топаж А.Г., Абрамова А.В., Неупокоева К.Г. Подходы к описанию симбиотической азотфиксации. II. Анализ подходов к математическому моделированию процесса // Известия АлтГУ. 2015. № 1(85/1). С. 192–196.
- Akcaay E., Roughgarden J. Negotiation of mutualism: rhizobia and legumes // Proceedings of the Royal Society B, 2007. 274. P. 5–32.
- Grimm V. Pattern-oriented modeling of agent-based complex systems: lessons from ecology // Science, 2005. 310, P. 987–991.
- Iwasa Y., Roughgarden J. Shoot/Root Balance of Plants: Optimal Growth of a System with Many Vegetative Organs. / Theoretical Population Biology, 1984. Vol. 25. P. 78–105.
- Liu Y., Wu L., Baddeley J. A., Watson C. A. Models of biological nitrogen fixation of legumes // Agronomy for Sustainable Development, Springer Verlag, Germany. 2011. № 31(1), P. 883–905.
- Provorov N. A., Vorobyov N. I. Equilibrium between the «genuine mutualists» and «symbiotic cheaters» in the bacterial population co-evolving with plants in a facultative symbiosis / Theoretical Population Biology, 2008. V. 74. P. 345–355.
- Swinerd C., McNaught K. R. Design classes for hybrid simulations involving agent-based and system dynamics models // Simulation Modelling Practice and Theory, 2012. 25. P. 118–133.
- Tyutyunov Yu., Titova L., Arditi R. A minimal model of pursuit-evasion in a predator-prey system // Mathematical Modelling of Natural Phenomena, 2007. 2(4), P. 122–134.
- West S. A., Toby Kiers E., Simms E. L., Denison R.F. Sanctions and mutualism stability: why do rhizobia fix nitrogen? // Proceedings of the Royal Society London B, 2002. 269, P. 685–694.
- West S. A., Toby Kiers E., Pen I., Denison R. F. Sanctions and mutualism stability: when should less beneficial mutualists be tolerated? // 2002. Journal of Evolutionary Biology. v.15, P. 830–837.
- Wooldridge M. 2009. An Introduction to MultiAgent systems. John Wiley & Sons.