

2 Classificazione dei modelli di simulazione

Come esposto nel capitolo precedente, un modello di simulazione al computer è uno strumento per l'analisi dei sistemi che tenta di rappresentare il comportamento dei sistemi stessi attraverso un certo numero di equazioni e algoritmi logici, codificati in un linguaggio di programmazione. E' opportuno tentare di classificare i modelli perché ciò permette all'utente di valutare a priori il modello in rapporto alle prestazioni che può fornire, scegliendo quindi opportunamente in rapporto all'obiettivo prefissato.

Modelli empirici e modelli meccanicistici

La premessa obbligatoria è che tutti i modelli sono, a un certo livello, empirici; ciò che li differenzia è essenzialmente quindi il livello al quale sono empirici.

I modelli "empirici" sono in sostanza descrizioni dirette dei dati osservati e sono in genere definiti stimando i parametri di una regressione multipla. Questi modelli sono costruiti principalmente con lo scopo di descrivere il comportamento di un sistema e di dimostrare l'esistenza di relazioni tra variabili selezionate, ma senza tentare di spiegare la natura di queste relazioni. La struttura generale e il livello di dettaglio è in genere semplice. Il livello di empirismo è lo stesso al quale si attua la stima (Acock e Acock, 1991); un esempio è dato da quei modelli che stimano la produzione come funzione di variabili ambientali, come i cumuli di piogge e/o temperature, o l'accumulo di sostanza secca come funzione del tempo. Questi modelli non permettono alcuna estrapolazione (vale a dire che non permettono alcuna previsione al di fuori dell'intervallo dei dati utilizzati) e non aggiungono alcunché alla conoscenza del sistema.

I modelli meccanicistici tentano invece per definizione di spiegare le relazioni tra gli elementi del sistema modellato. Questi modelli sono utili in biologia dati i diversi livelli di organizzazione di un organismo vivente (strutture cellulari, cellule, tessuti, organi, individui, popolazioni, ecosistemi). Un modello meccanicistico tenta di descrivere il sistema ad un certo numero di livelli al di sotto di quello cui viene effettuata la stima; in genere, i modelli di simulazione dei sistemi agricoli non vanno al di sotto di due livelli di quello d'interesse per le simulazioni. Nei modelli meccanicistici, la rappresentazione dei livelli inferiori di organizzazione è empirica; ciò può accadere o perché non sono chiari i meccanismi che governano i processi al livello inferiore o per una scelta deliberata in rapporto agli scopi o alla facilità d'uso che si vuole abbia il modello. La natura della connessione tra i livelli di organizzazione inclusi nel modello dipendono dalla conoscenza dei processi coinvolti, accompagnati da ipotesi ed assunzioni. In molti casi, differenti componenti del modello sono rappresentate a diversi livelli di organizzazione in funzione delle conoscenze a disposizione, anche se ciò va evitato quando possibile in quanto l'omogeneità nella rappresentazione del sistema dovrebbe essere preferita.

La differenza tra modelli più o meno meccanicistici può essere illustrata se consideriamo, per esempio, la simulazione del processo di produzione di biomassa di una coltura. L'accumulo di biomassa risulta dalla fissazione di CO_2 da parte delle foglie e dal successivo trasporto nei differenti organi, quando il fabbisogno in carbonio per il mantenimento della pianta e per la sua crescita sia stato soddisfatto. La fotosintesi e la respirazione sono processi complessi, che possono però essere rappresentati facendo ricorso ad alcuni empirismi. La fotosintesi dipende dall'irraggiamento cui la foglia è soggetta, che dipende a sua volta dall'irraggiamento dell'intero manto vegetale, che è anche questo un processo complesso. Un modello meccanicistico considererà tutti questi elementi per calcolare l'accumulazione di biomassa, probabilmente

usando un passo d'integrazione temporale di un minuto o al più di un'ora. Saranno quindi considerate la posizione del sole nel suo evolversi durante la giornata, la struttura spaziale del manto vegetale (altezza, angolo d'inserzione delle foglie, loro superficie, ecc.), le proprietà ottiche del manto vegetale, ecc. Un approccio empirico ampiamente usato consiste nel definire una regressione lineare tra il cumulo di radiazione intercettata dal manto vegetale durante il ciclo biologico e la biomassa prodotta durante lo stesso periodo, quantità queste rilevate durante la sperimentazione in campo. La pendenza di questa retta, in genere definita come efficienza nell'uso della radiazione, rappresenta la quantità di biomassa prodotta per unità di luce intercettata. Questo valore, moltiplicato per il valore di luce intercettata giornalmente (calcolata utilizzando un'altra semplice equazione), permette la stima della produzione giornaliera di biomassa. Questo secondo approccio non ci fornisce spiegazioni sui meccanismi di intercettazione della luce nel manto vegetale, ma richiede un input di dati minori senza per questo produrre risultati peggiori.

Modelli statici e dinamici

Un modello statico non ha il tempo come variabile. Questi modelli raramente hanno un interesse nelle applicazioni biologiche, ma talvolta i modelli dinamici possono contenere elementi che sono rappresentati staticamente. I modelli di regressione sono tipici esempi di modelli statici; si considerino per esempio quei modelli di regressione multipla nei quali la produzione finale è funzione di alcuni parametri meteorologici.

I modelli dinamici, per contro, contengono il tempo come variabile esplicita. Le loro componenti possono essere espresse in termini di equazioni differenziali continue o di equazioni discrete, che sono integrate per descrivere il comportamento del sistema nel tempo. Queste equazioni, e alcuni approcci per la loro soluzione, saranno descritti più avanti.

Modelli deterministici e modelli stocastici

Un modello deterministico effettua una previsione fornendo come output un valore numerico senza dare nessuna misura della distribuzione probabilistica di quel risultato. Per esempio, un modello deterministico simulerà la crescita della biomassa ad intervalli giornalieri, producendo valori per ogni passo d'integrazione, ma senza fornire alcuna informazione sulla variabilità di queste quantità nel campo.

Un modello stocastico è caratterizzato invece dal contenere procedure che tengano conto delle distribuzioni di probabilità, assieme ad elementi che aggiungono una componente casuale nel caratterizzare lo stato di alcune o tutte le variabili. Questo in genere è attuato considerando le variabili ed i parametri del modello come variabili casuali. Viene in questo caso utilizzata la capacità del modello di generare numeri casuali oppure si utilizzano stime della variabilità dei parametri, verificando l'effetto di questa variabilità nel comportamento del sistema. Una tecnica ampiamente usata in questo tipo di modelli è il metodo Monte Carlo, che consiste nel generare numeri casuali secondo alcune distribuzioni di probabilità (esponenziale, di Poissons, normale) per simulare variabilità. Per esempio, il metodo Monte Carlo può essere utilizzato per generare variabili meteorologiche che sono utilizzate come variabili guida nei modelli di sistemi agricoli oppure per simulare l'incontro casuale tra predatore e preda nel tempo e nello spazio in modelli dinamici predatore-preda. Un altro metodo, che è intermedio tra modelli deterministici e modelli completamente stocastici, è il metodo della catena di Markov. In questo metodo, la probabilità per una variabile di essere in dato stato ad un tempo determinato è legato allo stato immediatamente precedente della stessa variabile.

I modelli deterministici possono comunque essere utilizzati con un approccio stocastico. Outputs relativi a periodi molto lunghi possono, per esempio, essere utilizzati per determinare la probabilità secondo la quale certi sistemi rispondono al clima. In questo caso le variabili meteorologiche sono utilizzate come variabili guida stocastiche, essendo stati ottenuti i loro valori da un "generatore di clima". Altro metodo consiste nel generare serie di parametri di input con tecniche stocastiche, utilizzando i valori ottenuti per un numero corrispondente di simulazioni deterministiche; gli output delle simulazioni sono quindi analizzati per stabilire le tendenze e la distribuzione dei risultati delle simulazioni.

Tipi di modelli usati frequentemente nella simulazione di sistemi agricoli

Nei primi approcci nell'uso del computer nella ricerca in agricoltura è stata dedicata molta attenzione a modelli statici ed empirici, basati su regressioni statistiche. Questa tendenza è ora mutata e sta mutando verso l'uso di modelli dinamici e deterministici, che variano per il loro grado di empirismo. La maggior parte di queste note riguarderà questo secondo tipo di modelli, anche se saranno illustrati alcuni esempi di modelli stocastici. Inoltre, l'attenzione perlopiù sarà dedicata sulle previsioni a livello di coltura, mentre sarà richiesta attenzione per considerare gli effetti dei processi che sono alla base del risultato produttivo.

	modelli regressivi	modelli di simulazione semplici	modelli di simulazione meccanicistici
tipo:	statistico, statico	dinamico	dinamico
relazioni utilizzate:	empirico	empirico, meccanicistico	meccanicistico, empirico
livelli di organizzazione inclusi:	coltura	coltura, pianta	coltura, pianta, organo
scala spaziale:	regionale	campo	m ² , foglia
intervallo di esecuzione:	stagionale	giornaliero	orario o più breve
uso:	gestionale	gestionale, ricerca	ricerca
caratteristiche:	richiedono molti anni di dati per poter stimare i parametri	producono outputs con vari elementi (produzione, stadi di crescita, uso dell'acqua, ecc)	producono outputs più dettagliati (produzione e sue componenti, comportamento degli stomi, ecc.)

Tabella 2.1 - Caratteristiche di modelli colturali comunemente utilizzati per l'analisi di sistemi agricoli (modificato da Steiner, 1987)

Nella tabella 2.1 sono riportate un certo numero di caratteristiche che sono tipiche dei modelli per colture comunemente usati nell'analisi di sistemi agricoli. Il termine colturale è qui utilizzato facendo riferimento a simulazioni a quel livello di organizzazione, includendo l'effetto delle pratiche agricole, lo sviluppo della coltura e la sua interazione con patogeni fungini ed entomatici, la competizione dovuta alle infestanti e molti altri.

Elementi di modelli dinamici e deterministici

La maggior parte dei modelli utilizzati in agricoltura sono modelli dinamici e deterministici. Un approccio largamente utilizzato per costruire questi modelli è quello della variabile di stato. In questo approccio si assume che in qualsiasi momento si può quantificare lo stato di un sistema, e che le modificazioni che il sistema subisce nel tempo possano essere descritte attraverso equazioni matematiche. Di seguito sono descritti i principali elementi presenti in modelli costruiti secondo questo approccio.

Variabili

Le variabili in un modello dinamico possono essere classificate come variabili di stato, di tasso, ausiliarie e di guida.

Le variabili di stato sono variabili che definiscono lo stato di un sistema ad un determinato punto nel tempo. Esempi di variabili di stato sono quantità come la biomassa, il carbonio disponibile, il contenuto d'acqua nel suolo, il numero di insetti di una popolazione ecc. Il valore di queste variabili dovrebbe essere teoricamente misurabile in qualsiasi momento; idealmente queste variabili dovrebbero essere facilmente misurabili nel sistema reale, facilitando la calibrazione e validazione del modello. Queste variabili richiedono di essere inizialmente definite prima dell'esecuzione della simulazione.

Le variabili di tasso sono associate alle variabili di stato per determinare il loro tasso di cambiamento come funzione del tempo e come risultato di qualche specifico processo. Esse rappresentano il flusso di materia o energia tra le variabili di stato, da una sorgente ad una variabile di stato, o da una variabile di stato ad un punto di accumulo. Queste variabili non possono essere misurate istantaneamente, ma solo su un incremento di tempo. Esempi di questo tipo di variabili possono essere il tasso di fotosintesi, il tasso di traspirazione, il tasso di decadimento ecc. Il valore delle variabili di tasso dipende dalle variabili di stato, dalle variabili di guida e da quelle ausiliarie, dai parametri e dalle costanti del sistema in relazione ai particolari processi fisici, chimici e biologici che richiedono una definizione in termini matematici. Nell'approccio delle variabili di stato, le variabili di tasso non sono dipendenti tra loro. Ogni variabile di tasso è quindi calcolata indipendentemente dalle altre variabili di tasso. Per esempio, il tasso di crescita di una pianta è connesso strettamente con il tasso di fotosintesi, ma nell'approccio della variabile di stato è il risultato di operazioni simultanee per due processi indipendenti. La fotosintesi contribuisce ad aumentare le riserve e questa quantità è una delle variabili di stato che influenza il tasso di crescita.

Le variabili ausiliarie sono quantità che cambiano con il tempo, ma la cui definizione non rappresenta necessariamente il comportamento del sistema. Possono essere definite perché utili in quanto possono rappresentare una quantità da comparare con dati rilevati sul sistema reale, oppure perché rappresentano un passo intermedio nei calcoli che aiuta a comprendere il funzionamento del sistema.

Le variabili guida sono anche note come funzioni condizionanti e rappresentano fattori al di fuori del sistema che agiscono ai confini dello stesso condizionandone il comportamento. Nei modelli

biologici, esempi tipici di variabili guida è dato dalle variabili che descrivono le condizioni ambientali (temperatura, radiazione, vento ecc.) e che cambiano continuamente con il tempo.

Parametri e costanti

I parametri e le costanti sono quantità che non cambiano nel tempo in un modello dinamico. In pratica, parametri e costanti non sono differenti in rapporto al tipo di effetto che hanno sul modello. Sono comunque differenziati in quanto per costante si intende una quantità il cui valore è stato accuratamente determinato e che si ritiene non debba cambiare quali che siano le condizioni in cui opera il sistema. Esempi sono il numero di secondi in un giorno, la costante gravitazionale, ecc. I parametri sono invece quelle quantità che sono mantenute costanti durante l'esecuzione della simulazione, ma che possono cambiare in una successiva simulazione per meglio interpretare, per esempio, le condizioni in cui il sistema agisce, o per tenere conto delle diversità genetiche del materiale oggetto della simulazione. Esempi di parametri possono essere la riserva massima di carboidrati, il numero di semi per spiga di un cereale, la distanza potenziale di volo di un predatore ed altro. Il valore dei parametri è in genere incerto, ma è atteso che esso vari in un ambito ragionevolmente piccolo. L'aggiustamento del valore dei parametri nell'intervallo atteso è un'operazione chiamata calibrazione, che ha lo scopo di adattare i risultati della simulazione ai dati rilevati sperimentalmente, quando il valore dei parametri nelle condizioni studiate è scarsa o nella.

Modelli concettuali e diagrammi relazionali

Prima di realizzare un modello dinamico di simulazione, il ricercatore deve sviluppare un modello concettuale del sistema d'interesse. Questo modello integra tra loro la comprensione delle componenti del sistema in studio da parte dei ricercatori che lo sviluppano, definendo le relazioni tra queste componenti.

I modelli concettuali sono in genere esplicitati attraverso diagrammi relazionali i quali riassumono le relazioni e gli elementi più importanti del modello, semplificano la definizione delle equazioni di tasso e di stato, e facilitano infine la comunicazione con altri. Un sommario di convenzioni comunemente utilizzate nel costruire questi diagrammi, utilizzata per rappresentare modelli di impianti industriali, è quella proposta da Forrester nel 1961 e riportata in fig. 1. I diagrammi relazionali possono non essere molto utili nei modelli più semplici, ma sono indispensabili nei sistemi più complessi. Coloro che sono interessati nello sviluppare modelli di simulazione al computer dovrebbero sviluppare modelli concettuali e diagrammi relazionali prima di cominciare a codificare il programma nel computer.

I modelli concettuali e i diagrammi relazionali sono nella loro essenza qualitativi, e sono quindi solo un passo intermedio verso la quantificazione del sistema dinamico, obiettivo di maggior interesse per i ricercatori. La simulazione dinamica è un'insieme di tecniche sviluppate per realizzare questa quantificazione.

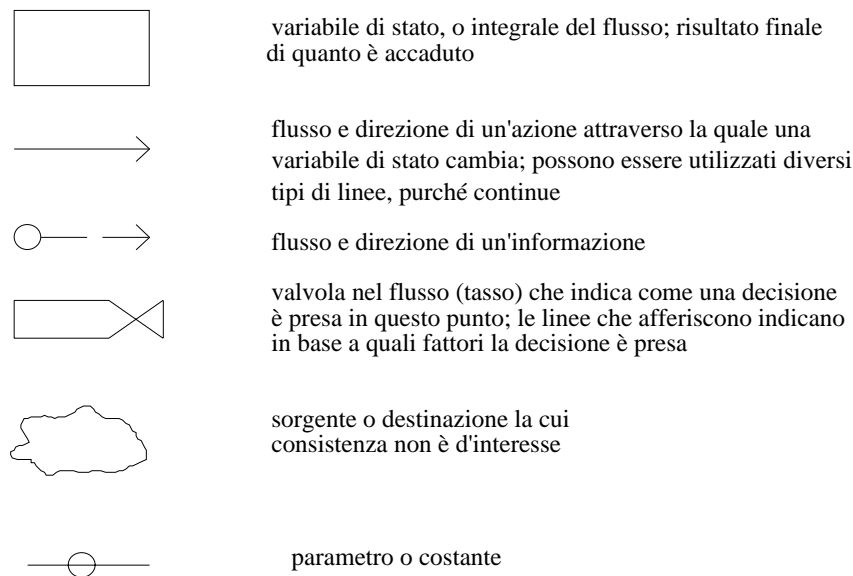


Figura 2.1 Simboli convenzionali per diagrammi relazionali

Equazioni differenziali e finite

Nei modelli di simulazione dinamica la modifica delle variabili di stato è descritta da equazioni differenziali, che sono basate sulla derivata della variabile di stato rispetto al tempo. La derivata è una espressione matematica del tasso di variazione della variabile di stato S_i :

$$\frac{dS_i}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} [(S_i(t + \Delta t) - S_i(t)) / \Delta t] \quad [2.1]$$

Le equazioni differenziali nelle simulazioni dinamiche sono espresse in termini di alcune (o tutte) le variabili di stato (S), variabili guida (D), parametri (P) e costanti (C) inclusi nel modello:

$$\frac{dS_i}{dt} = f(S_1, S_2, \dots, S_n, D_1, D_2, \dots, D_n, P, C) \quad [2.2]$$

La funzione a destra nell'equazione [2.2] consiste generalmente in diversi termini, ognuno dei quali è un processo che avviene con un determinato tasso. Come esempio, consideriamo un'equazione differenziale rappresentante il tasso di variazione della riserva di carbonio in una pianta:

$$\frac{dC}{dt} = P_g \frac{(C_{\max} - C)}{C_{\max}} - B - R \quad [2.3]$$

dove C è la riserva di carbonio, P_g è il tasso cui avviene la fotosintesi, C_{\max} è la massima dimensione della riserva di carbonio, B è il tasso di produzione di biomassa, ed R è il tasso cui

avviene la respirazione. Le variabili di stato sono dipendenti, a turno, dalle variabili di stato o di guida, dai parametri e dalle costanti.

Le equazioni differenziali descrivono la dinamica di un sistema continuamente nel tempo. Se il tempo totale (fatto pari ad 1) è diviso in unità discrete Δt , il valore della variabile di stato al tempo $t+\Delta t$ può essere rappresentato come segue:

$$S_i(t + \Delta t) = S_i(t) + f_i(t) * \Delta t \quad [2.4]$$

dove $f_i(t)$ è il tasso di variazione al tempo t . L'uso di questo tipo di equazioni permette di risolvere equazioni differenziali complesse, come discusso nel prossimo paragrafo.

Integrazione di equazioni differenziali

Per determinare il valore delle variabili di stato al tempo t , l'equazione che descrive il mutamento della variabile deve essere integrata rispetto al tempo. Per semplici equazioni differenziali questa integrazione può essere fatta analiticamente.

Per esempio, l'equazione differenziale

$$\frac{dC}{dt} = kC \quad [2.5]$$

ha la soluzione analitica:

$$C(t) = C_0 * e^{[k*(t-t_0)]} \quad [2.6]$$

L'equazione [2.6] permette di determinare il valore di C a qualsiasi intervallo dal tempo iniziale t_0 , nel quale $C=C_0$. Tuttavia, data la complessità dei sistemi colturali, l'integrazione analitica delle equazioni differenziali che li descrivono è raramente possibile, oppure lo è per intervalli limitati, facendo diventare la rappresentazione del sistema troppo irrealistica o ristretta perché possa avere una qualche utilità. Per questo motivo in genere si preferisce esprimere le equazioni differenziali come equazioni finite tipo quella illustrata in [2.4].

L'integrazione numerica di equazioni finite si ottiene con calcoli ricorsivi. Considerando per esempio l'equazione riportata in [2.4], il calcolo parte con un valore iniziale di $S_i(t)=S_0$ a $t=t_0$. Utilizzando il tasso di variazione, l'incremento in valore assoluto di S_i nell'intervallo Δt può essere determinato; aggiungendo ad esso S_0 si può prevedere il valore di $S_i(t+\Delta t)$. Nel passo successivo, $S_i(t)$ assume il valore definito per $S_i(t+\Delta t)$ nel passo precedente, e la procedura appena descritta è ripetuta fintantoché il periodo stabilito per la simulazione è coperto.

Metodi comuni per l'integrazione numerica di equazioni numeriche includono i metodi di Eulero, trapezoidale e di Runge-Kutta di secondo e quarto ordine. Molti di questi metodi sono basati su una espansione della funzione $S_i(t)$ secondo una serie di Taylor, per la quale una derivata dS/dt deve esistere nel periodo d'interesse. Questa espansione può essere espressa come:

$$S(t + \Delta t) = S(t) + \frac{dS(t)}{dt} \Delta t + \dots + \frac{d^m S(t)}{dt^m} \frac{\Delta t^m}{m!} \quad [2.7]$$

dove m è un intero maggiore di 0. Se $m=1$, l'espansione si riduce a:

$$S(t + \Delta t) = S(t) + \frac{dS(t)}{dt} \Delta t + \xi \quad [2.8]$$

dove ξ è un termine d'errore uguale a $\frac{d^2 S(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \dots + \frac{d^m S(t)}{dt^m} \frac{\Delta t^m}{m!}$, usualmente chiamato errore di troncamento. Considerando che $f_i(t) = \frac{dS}{dt}$, e considerando trascurabile il termine d'errore, l'equazione [2.8] si riduce all'equazione [2.4], che è l'equazione differenza finita associata al metodo di Eulero. Considerando che i termini d'errore di grado elevato sono trascurabili, l'errore d'integrazione nel metodo di Eulero (si ricordi che il tempo totale è fatto pari a 1) è dell'ordine di $(\Delta t)^2$. Un'esempio dei risultati ottenibili con il metodo di Eulero è rappresentato nella figura 2.

L'errore dell'approssimazione numerica cresce con il tempo; può essere tuttavia ridotto se l'intervallo di integrazione Δt viene ridotto, in quanto l'errore è proporzionale a Δt^2 . Nell'equazione 2.7, se m è uguale a due, si ottiene una serie di Taylor di secondo ordine:

$$S(t + \Delta t) = S(t) + \frac{dS(t)}{dt} \Delta t + \frac{d^2 S(t)}{dt^2} \frac{\Delta t^2}{2} + \xi \quad [2.9]$$

dove l'errore si riduce a $\frac{d^3 S(t)}{dt^3} \Delta t^3 + \dots + \frac{d^m S(t)}{dt^m} \frac{\Delta t^m}{m!}$.

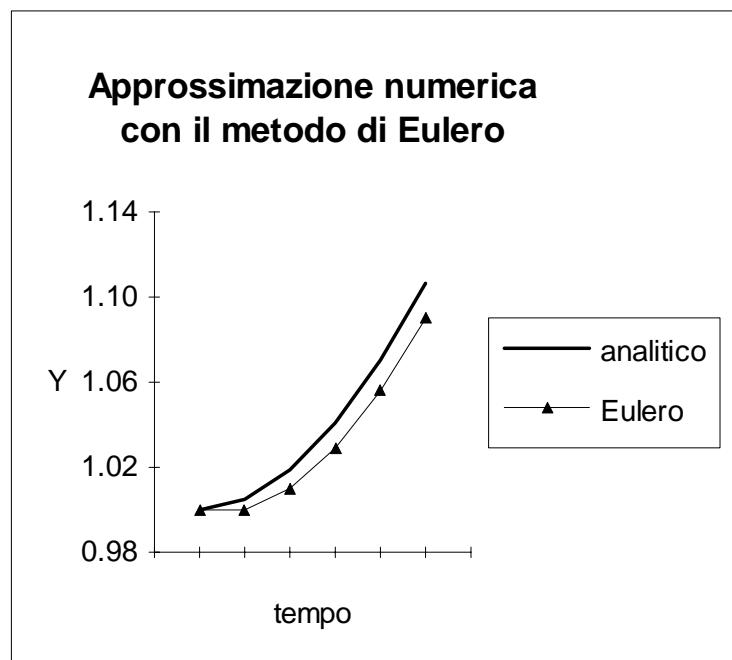


Figura 2.2 Risultati di un'approssimazione numerica ottenuta con il metodo di Eulero.

Considerando che

$$\frac{d^2 S(t)}{dt^2} \Delta t^2 \cong \left[\frac{dS(t+\Delta t)}{dt} - \frac{dS(t)}{dt} \right] / \Delta t \quad [2.10]$$

e considerando che $\frac{dS(t)}{dt} \Delta t$ è il tasso di cambiamento $F(t)$, e valutando trascurabile l'errore, l'equazione [2.9] può essere riscritta come:

$$S(t+\Delta t) = S(t) + F(t)\Delta t + \left[\frac{F(t+\Delta t) - F(t)}{\Delta t} \right] \frac{\Delta^2 t}{2} \quad [2.11]$$

Arrangiando nuovamente i termini si ottiene l'equazione successiva, usualmente definita come metodo trapezoidale:

$$S(t+\Delta t) = S(t) + \frac{[F(t+\Delta t) + F(t)]\Delta t}{2} \quad [2.12]$$

È importante rilevare come la differenza tra il metodo trapezoidale e quello di Eulero consiste nel fatto che il primo utilizza la media delle due pendenze agli estremi dell'intervallo d'integrazione come tasso medio. Dal momento che gli errori di troncamento con il metodo trapezoidale sono nell'ordine di $(\Delta t)^3$, l'accuratezza è maggiore di quella del metodo di Eulero.

Metodi in cui la serie di Taylor è di quart'ordine, come quello di Runge-Kutta hanno un'accuratezza maggiore, con errori di livello $(\Delta t)^5$. Questi metodi richiedono il calcolo delle derivate prime in diversi punti dell'intervallo d'integrazione, per cui la loro implementazione in un programma è molto più complessa. Spesso comunque gli algoritmi relativi sono disponibili svolti in linguaggi di programmazione in testi moderni di analisi numerica, cui il lettore dovrà fare riferimento.

L'intervallo di integrazione

L'intervallo d'integrazione può essere definito come $(b-a)/n$, dove b ed a sono rispettivamente il tempo finale ed iniziale del periodo d'integrazione, ed n è il numero di intervalli. Come illustrato nel paragrafo precedente, l'intervallo di integrazione è critico in rapporto all'accuratezza dell'integrazione. I migliori risultati sono ottenuti, in linea di principio, quando l'intervallo si approssima a zero, mentre gli errori di troncamento aumentano quando l'intervallo di integrazione è più lungo. Tuttavia, il tempo richiesto per i calcoli aumenta considerevolmente all'accorciarsi dell'intervallo di integrazione; inoltre, dal momento che la precisione nell'operare calcoli è, in un computer, limitata da un numero massimo di cifre decimali, quando l'intervallo di integrazione è molto breve aumentano gli errori di arrotondamento. L'andamento degli errori di troncamento e di arrotondamento è riportato in figura 2.3. Come conseguenza, l'intervallo ideale è la soluzione di compromesso tra i fattori citati.

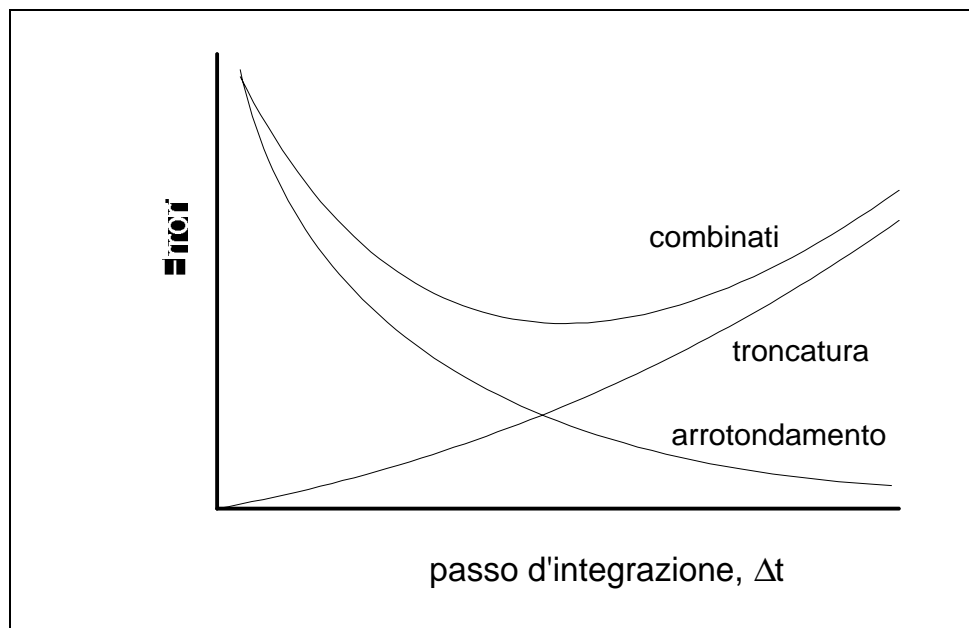


Figura 2.3 Errori dovuti alla troncatura e all'arrotondamento nell'integrazione numerica effettuata al computer.

Integrazioni numeriche stabili ed accurate richiedono che la variazione delle variabili di stato sia piccola nell'intervallo di integrazione. Una regola comunemente accettata è che Δt non sia maggiore da un quarto ad un quinto del più piccolo coefficiente temporale del sistema. Il coefficiente temporale di un processo è dato dal reciproco del tasso caratteristico di variazione. Ad esempio, se il tasso relativo di crescita di un organismo è 0.25 g g^{-1} , il coefficiente temporale è $1/0.25=4$ giorni; l'intervallo d'integrazione dovrebbe quindi essere tra 0.8 e 1 giorno. Se il contenuto d'acqua del suolo può cambiare di 30 mm senza comportare alcun effetto sulla pianta, e se un tasso tipico di evapotraspirazione è 5 mm g^{-1} , il coefficiente temporale può essere stimato come $30/5=6$ giorni; l'intervallo d'integrazione dovrebbe quindi variare tra 1.2 e 1.5 giorni.

I processi importanti nel definire la crescita di una pianta possono completarsi in tempi di millisecondi per reazioni a livello molecolare o di giorni o settimane per processi a livello di organo, creando quindi problemi nel definire l'intervallo d'integrazione appropriato. Questo problema è stato discusso da Penning de Vries e van Laar (1982). Tassi di crescita tipici come 0.25 kg d^{-1} si traducono in intervalli d'integrazione di un giorno, quindi 150 passi d'integrazione permettono di simulare un ciclo di crescita di 150 giorni. Tuttavia, processi determinati da variabili guida come quelle meteorologiche (temperatura, radiazione ecc.) presentano fluttuazioni che sono meglio rappresentate da passi d'integrazione di un'ora, facendo quindi diventare $24 \cdot 150=3600$ i passi d'integrazione necessari per simulare il ciclo di cui si accennava. Se nell'ambito di un modello per coltura si desidera introdurre un maggior dettaglio, come ad esempio se si vuol incorporare la risposta al contenuto d'acqua relativo di crescita e attività stomatica, l'intervallo d'integrazione dovrebbe essere ancor più breve. Questi processi reagiscono a variazioni di pochi punti percentuali nel contenuto d'acqua delle piante, per esempio del 4%. Se il contenuto d'acqua di una coltura è 5 kg m^{-2} e il tasso di traspirazione è 0.5 kg m^{-2}

ora⁻¹, il coefficiente temporale relativo ad un cambiamento del contenuto idrico del 4% è uguale a $0.04 \cdot 5 \text{ kg m}^{-2} / 0.5 \text{ kg m}^{-2} \text{ ora}^{-1} = 0.4$ ore. L'intervallo di integrazione richiesto è quindi da 0.08 a 0.1 ore. Il numero di passi d'integrazione richiesti per simulare un ciclo di 150 giorni diventa quindi $10 \cdot 24 \cdot 150 = 36000$, numero che rende certamente non pratico quest'intervallo d'integrazione per molti modelli per colture.

Il problema di intervalli d'integrazione di diversa ampiezza in diversi livelli di organizzazione può essere risolto con tre approcci differenti. Il primo è semplicemente quello di integrare con l'intervallo più breve tutti i processi, aumentando il tempo richiesto senza peraltro guadagnare molto in termini di precisione relativamente ai processi che permetterebbero Δt più lunghi. Un secondo approccio può essere quello di avere tempi variabili, ma può causare confusione nella definizione dei codici del modello. Una terza possibilità, che può trovare applicazione in molti casi, è quello di calcolare, per la variabile di stato che richiede l'intervallo d'integrazione più breve, il suo valore d'equilibrio durante l'intervallo d'integrazione del resto del modello. Nell'esempio che viene di seguito illustrato, assumiamo che il contenuto d'acqua della pianta è lo stesso dell'ora precedente e quindi l'apertura stomatica, il tasso di traspirazione dalle foglie e l'assorbimento di acqua dalle radici viene calcolato con questo valore. Se il tasso calcolato differisce, il contenuto d'acqua della pianta è aggiustato iterativamente intanto che i due tassi diventano pressoché uguali. Questo equilibrio nel contenuto d'acqua della pianta è quindi usato anche per il calcolo di tutte le altre variabili di tasso che richiedono questa informazione, diventando inoltre la prima stima per il passo successivo. Le tecniche iterative saranno brevemente discusse oltre in questo capitolo.

Integrazione con effetti ricorsivi

Gli effetti ricorsivi, in inglese feedback loops o closed loops, sono caratteristiche strutturali di un sistema nel quale il valore di una variabile di stato produce effetti sulla variabile di tasso, il che produce a sua volta un effetto sulla variabile di stato. Questi effetti ricorsivi possono essere negativi o positivi. Quando l'effetto è positivo il flusso incrementa il valore della variabile di stato e viceversa, così che le due variabili incrementano continuamente il loro valore finché non si giunge ad una limitazione imposta dal sistema. Questo tipo di feedback produce uno scostamento da un valore di riferimento (spesso attività zero), generando un equilibrio instabile, il che permette al sistema vivente simulato di evolversi. Gli effetti ricorsivi negativi tendono invece a mantenere uno *status quo*, resistendo alle pressioni dall'esterno e riportando il sistema ad una data condizione d'equilibrio. Nonostante il continuo cambiamento delle condizioni ambientali, gli organismi viventi sono capaci, in notevole misura, di mantenere costanti le loro condizioni interne. Per mantenere questa stabilità, gli organismi viventi fanno riferimento ad una determinata condizione e comparano ad essa le condizioni attuali, rispondendo con mutamenti che tendono appunto a riportare le condizioni interne a quelle ottimali. Questo processo, che permette la sopravvivenza, è essenzialmente un feedback negativo.

Integrazione con discontinuità

Metodi d'integrazione di secondo ordine o di ordine superiore richiedono la valutazione della derivata prima più di una volta durante l'intervallo d'integrazione. Ciò facilita l'occorrenza di problemi con le variabili guida, che in genere non sono disponibili come variabili continue ma piuttosto come medie in un intervallo temporale. Quando un intervallo copre un punto di discontinuità, l'errore nel metodo d'integrazione può essere notevole. A causa di questo problema, nello sviluppare modelli di simulazione nei quali sono presenti un gran numero di

variabili guida, è comune esprimere tutte le variabili guida in rapporto ad un intervallo d'integrazione comune, e quindi usare questo intervallo come Δt nel metodo di Eulero.

Tecniche iterative

Come anticipato, le tecniche iterative sono utili nel definire il valore di variabili di stato il cui coefficiente temporale è più piccolo dell'intervallo d'integrazione del modello. L'obiettivo dell'iterazione è quello di trovare un valore per la variabile di stato che soddisfi il bilancio tra flusso in entrata, flusso in uscita e variazione della variabile di stato in presenza di un effetto negativo ricorsivo che controlla il tasso di variazione. Per illustrare questo concetto, consideriamo il problema di determinare lo stato del contenuto idrico della pianta, qui rappresentato dal potenziale idrico della foglia (ψ_f), ad un tempo t . Questa variabile ha un coefficiente temporale molto piccolo, per cui è necessario determinare un valori che bilanci il prelievo di acqua della pianta (U) e la sua traspirazione (T), per ogni passo d'integrazione. Una stima di U può essere ottenuta dalla seguente equazione:

$$U = (\psi_s - \psi_f) / R \quad [2.13]$$

dove ψ_s è il potenziale idrico dello strato di suolo interessato dalle radici ed R è la resistenza della pianta al flusso del liquido. La traspirazione della pianta è una funzione sia di fattori meteorologici, che saranno discussi nei prossimi capitoli, sia della resistenza stomatica (r_s) caratteristica della specie in esame. Quindi, assumendo gli altri fattori costanti durante l'intervallo di integrazione, la traspirazione (T) può essere espressa come funzione della sola r_s ; useremo la notazione $T(r_s)$ per indicare questa dipendenza. Dal momento che deve essere rispettata la condizione $U=T$, l'equazione [2.13] può essere scritta come:

$$\psi_f = \psi_s - T(r_s)R \quad [2.14]$$

Una ulteriore complicazione è data dal fatto che r_s non ha una dipendenza lineare da ψ_f , sicché l'equazione [2.13] può essere riscritta come:

$$\psi_f = \psi_s - T(\psi_f)R \quad [2.15]$$

L'equazione [2.15] non è quindi lineare, con ψ_f che appare sia nel termine di sinistra sia in quello di destra dell'equazione. Dal momento che non è semplice risolvere l'equazione rispetto a ψ_f , si può individuare una soluzione numerica che risolva iterativamente l'equazione [2.15]. In particolare si determina il valore di ψ_f che eguagli a zero il termine a sinistra nell'equazione [2.16], introducendo un errore accettabile:

$$\psi_s - T(\psi_f)R - \psi_f = 0 \quad [2.16]$$

Durante l'intervallo d'integrazione ψ_s viene mantenuto costante e definito attraverso l'iterazione che definisce prima ψ_f , quindi U ed infine ψ_s . Il valore di partenza di ψ_s è quello del passo d'integrazione precedente.

Esistono diverse procedure numeriche per determinare gli zeri di funzioni continue, tra i quali quello della bisettrice e quello di Newton sono tra i più utilizzati. La descrizione di questi ed altri metodi non sarà trattata in queste note; può essere esaminata in testi di metodi numerici.