



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΤΟΜΕΑΣ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ

Μαθηματικά Μοντέλα στην Οικολογία (Mathematical Models in Ecology)

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

ΔΗΜΗΤΡΙΟΥ Ι. ΚΑΛΟΓΗΡΟΥ

Επιβλέπουσα: Ευανθία Δούκα

Επίκουρη Καθηγήτρια Ε.Μ.Π.

Η σελίδα αυτή είναι σκόπιμα λευκή.

Δημήτριος Ι. Καλόγηρος

Διπλωματούχος Απόφοιτος Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών Ε.Μ.Π.

© 2021 – All rights reserved. Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.



Αντί προλόγου

Κι επιτέλους νομίζω πως τώρα πια κατάλαβα γιατί ο Προμηθέας (Πυρφόρος) έμελλε να είναι το κεντρικό πρόσωπο ως εμβληματικό σύμβολο του Ιδρύματος, όπου είχα την ευλογ(ο)-τυχ-ία να φοιτήσω όλα αυτά τα χρόνια.

Σύμφωνα με τον Αισχύλο, η ελπίδα είναι το δώρο του Προμηθέα προς τους ανθρώπους αντί να είναι κλεισμένη στο πιθάρι της Πανδώρας. Ο Αίσωπος από την άλλη, που έζησε μισό αιώνα πριν τον Αισχύλο, ήθελε τον Προμηθέα να μουσκεύει με δάκρυα τον πηλό ώστε να δημιουργήσει τον πρώτο άνθρωπο. Τον θεωρεί πλάστη του ανθρώπου και χαρακτηριστικά αναφέρει ότι “ο Δίας δημιούργησε τον ταύρο και ο Προμηθέας τον άνθρωπο”.

Ο Πλάτωνας θα υποστηρίξει πως ο Προμηθέας, για να προμηθ-εύσει τον άνθρωπο με όπλα για να προστατεύει τη ζωή του, κλέβει από τον Ήφαιστο τη φωτιά και από την Αθηνά τη γνώση των τεχνών και τα δίνει στους ανθρώπους. Από το Δία κλέβει ακόμα και την πολιτική τέχνη, που ο ίδιος την έκρυβε πάντα με επιμέλεια. Αυτό είναι που θα τον οδηγήσει και στην εξαιρετικά σκληρή τιμωρία στον Καύκασο, η οποία θα διαρκούσε χιλιάδες χρόνια αν δεν τον έσωζε ο Ηρακλής. Είναι επίσης εξαιρετικά ενδιαφέρον ότι οι Στωικοί θα συσχετίσουν το μύθο του Προμηθέα με την έννοια της πρόνοιας, ενώ ο Θεόφραστος θα θεωρήσει ότι η φωτιά που κλέβει ο Προμηθέας είναι η μυθική πρόιμη έκφραση των φιλοσοφικών αντιλήψεων για την αρχή της ζωής.

Τελικά, το μόνο σίγουρο είναι ότι ο Προμηθέας, ως μυθικό πρόσωπο-σύμβολο, “συμπυκνώνει τη δύναμη του πνεύματος που κινητοποιεί την ύλη ώστε να δράσει προς όφελός της, ολοκληρώνοντας έτσι τον προορισμό της”.

Θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές ευχαριστίες μου στην κυρία Ε. Δούκα, Επίκουρη Καθηγήτρια του Ε.Μ.Π., για όλη τη βοήθεια της και την ειλικρινή συμπαράστασή της.

Ευχαριστώ επίσης τα μέλη της εξεταστικής επιτροπής, τον κύριο Α. Χαραλαμπίδου, Καθηγητή του Ε.Μ.Π., και τον κύριο Α. Αρβανιτάκη, Επίκουρο Καθηγητή Ε.Μ.Π., για το ενδιαφέρον τους αλλά και τα χρήσιμα σχόλιά τους στη συγκεκριμένη εργασία.

Τέλος, παραφράζοντας (στοργικά εντός παρενθέσεως) τον Αλβέρτο Αϊνστάιν, “το να χαίρεσαι μαζί με την οικογένειά σου (Γιάννη, Ελένη, Εύη και Ιάσωνα) -και τους φίλους σου (Χάιντι, Άλεξ, Μαρία, Στέλλα, Μάγδα και Μαρία)- είναι σαν να βρίσκεσαι στο ομορφότερο μέρος του κόσμου”.

Δημήτρης Καλόγηρος

Contents

Extended Abstract in Greek.....	7
Abstract.....	16
1 Modelling the development of plant root systems	21
1.1 Understanding the importance of plant root systems.....	21
1.2 Density-based models: Mathematical models of root growth.....	22
1.2.1 RSA can be quantitatively described by a density-based model.....	22
1.2.2 Root growth is a dynamic phenomenon.....	22
1.2.3 Numerical solution of the model.....	27
2 Estimation of model parameters from experimental data	29
2.1 The root system of Brassica rapa.....	29
2.2 Model calibration.....	30
2.2.1 Centering experimental root data.....	30
2.3 From root line segments to continuous root maps: A computationally efficient method for estimating root density distribution functions from traced roots.....	32
2.3.1 Kernel-based density approach.....	32
2.3.2 Calculating the scaling factor by using the Cross Validation method ...	33
2.4 Hierarchical optimisation of model parameters.....	34
3 Results	37
3.1 V-fold cross validation works better than Leave-One-Out cross validation..	37
3.2 Effectiveness and efficiency of different minimisation algorithms in retrieving root growth parameters from simulated data.....	38
3.2.1 Estimation of Brassica rapa root growth parameters and sensitivity analysis.....	41
4 Conclusions	43
Bibliography	45

Εκτεταμένη Περίληψη

Η παραγωγή των καλλιεργειών στη σύγχρονη γεωργία στηρίζεται ουσιαστικά στο νερό και τα λιπάσματα (Boserup, 2005). Είναι, επομένως, κρίσιμο να υιοθετηθούν αποδοτικές πρακτικές διαχείρισης των καλλιεργειών ώστε να μεγιστοποιηθεί η αποδοτικότητά τους στην απορρόφηση ζωτικών συστατικών υπό τους εξής περιορισμούς: τη δραματική μείωση της καλλιεργήσιμης γης, τις περιορισμένες ποσότητες υδάτινων πόρων, την κλιματική αλλαγή (αλλαγές στις βροχοπτώσεις, αύξηση θερμοκρασίας) και τη βιώσιμη αγροτική παραγωγή (Lynch, 2011). Για να επιτευχθεί αυτός ο απώτερος σκοπός, είναι απαραίτητο να βελτιωθεί η κατανόηση των λειτουργικών μηχανισμών που διέπουν την ανάπτυξη των ριζών των φυτών. Επομένως, η ανάπτυξη μεθόδων παρατήρησης και χαρακτηρισμού (ποσοτική περιγραφή) των μοτίβων ανάπτυξης των ριζών είναι εξαιρετικά σημαντική. Σήμερα είναι πια δυνατή η εξαγωγή ποσοτικών χαρακτηριστικών της αρχιτεκτονικής των ριζικών συστημάτων με ημι-αυτοματοποιημένες μεθόδους συμπεριλαμβανομένων του αριθμού των ριζών, του συνολικού τους μήκους, του προσανατολισμού τους καθώς και της συνολικής περιοχής που καλύπτουν στο μέσο που διαβιούν (Le Bot *et al.*, 2010; Leitner *et al.*, 2014).

Παρόλο που πολλά σημεία τα οποία αφορούν στην ανάπτυξη των επιμέρους ριζών είναι επαρκώς μελετημένα και σε μεγάλο βαθμό κατανοητά, η λεπτομερής αναπαράσταση των διεργασιών ανάπτυξης όλων των ριζών αποκαλύπτει περίπλοκες γεωμετρίες του ριζικού συστήματος (Zhu *et al.*, 2011). Μολονότι οι παρατηρήσεις και οι μετρήσεις σχετικά με τις μορφολογίες του ριζικού συστήματος μπορούν να παράξουν γρήγορα

τεράστιες ποσότητες δεδομένων, οι τελευταίες συνήθως συνοψίζονται σε γενικές περιγραφές του ριζικού συστήματος όπως το συνολικό μήκος των ριζών, το μέγιστο βάθος που μπορούν να φτάσουν ή την κατανομή των τιμών της διαμέτρων των ριζών. Δυστυχώς όμως δεν εκτιμούν τις παραμέτρους που αφορούν στο μηχανισμό της ανάπτυξης των ριζών που θα μπορούσαν να ρίξουν φως στο πώς δημιουργούνται οι περίπλοκες αρχιτεκτονικές των ριζικών συστημάτων. Αυτό το κενό στο μετασχηματισμό των αρχικών φαινοτυπικών δεδομένων που είναι διαθέσιμα, σε μία μορφή απλών παραμέτρων που θα περιγράψουν με συνέπεια την επιμήκυνση των ριζών και τις διεργασίες που σχετίζονται με ανάπτυξη της αρχιτεκτονικής του ριζικού συστήματος παραμένει ένα σημαντικό πρόβλημα. Η εν λόγω αδυναμία περιορίζει εξαιρετικά την κατανόησή μας σχετικά με την ανάπτυξη του ριζικού συστήματος εμποδίζοντας γενετιστές και καλλιεργητές στις συντονισμένες προσπάθειές τους να αναπτύξουν νέες ποικιλίες καλλιεργειών με ιδεοτύπους ριζών που διαθέτουν βελτιωμένα συστήματα με σκοπό την επίτευξη του βέλτιστου οικονομικού επιπέδου στα πλαίσια πάντα αειφόρων αγροτικών πρακτικών.

Μαθηματικά μοντέλα θα μπορούσαν να αποτελέσουν μια εναλλακτική ώστε να αποσαφηνίσουμε την περίπλοκη διαδικασία της ανάπτυξης του ριζικού συστήματος και να εντοπίσουμε τις επιμέρους διεργασίες ανάπτυξης που αποτελούν τη βάση της σύνθετης αρχιτεκτονικής δομής των ριζικών συστημάτων. Πιο συγκεκριμένα, τα μοντέλα που για να περιγράψουν την αρχιτεκτονική δομή των ριζών των φυτών στηρίζονται σε συνεχείς συναρτήσεις πυκνότητας (στο εξής θα αναφέρονται ως density-based models) είναι πολλά υποσχόμενα, επειδή ακριβώς συγκεντρώνουν την

κατανομή των ριζών σε συναρτήσεις πυκνότητας περιγράφοντας με αυτόν τον τρόπο την ανάπτυξη των ριζών στο έδαφος. Αυτές οι συναρτήσεις πυκνότητας των ριζών που εξαρτώνται από το χώρο και το χρόνο μπορούν να οριστούν με τη βοήθεια εξισώσεων διατήρησης μάζας (Addiscott and Whitmore, 1987). Με αυτόν τον τρόπο μάλιστα διευκολύνονται οι σχετικές μελέτες και αντιπαραβολές ανάμεσα στα πειραματικά δεδομένα και τα αποτελέσματα των μοντέλων, αφού η συνάρτηση πυκνότητας μήκους των ριζών αποτελεί ένα άμεσο αποτέλεσμα που εξάγουν τα εν λόγω μαθηματικά μοντέλα. Αυτό με τη σειρά του καθιστά δυνατή την εκτίμηση από ένα εύρος πειραματικών δεδομένων εκείνων των παραμέτρων του μοντέλου που αντανακλούν και περιγράφουν ποσοτικά συγκεκριμένους βιολογικούς μηχανισμούς.

Η χρήση των προσανατολισμένων συνεχών συναρτήσεων κατανομής εμφανίστηκε πρόσφατα ως μία εναλλακτική στην προτυποποίηση τοπολογικών δομών (Dupuy *et al.*, 2005c). Ένα από τα βασικά πλεονέκτημα αυτής της προσέγγισης είναι η μαθηματική περιγραφή των αρχιτεκτονικών χαρακτηριστικών των ριζικών συστημάτων, συμπεριλαμβανομένου του προσανατολισμού των ριζών, μέσω συνεχών συναρτήσεων κατανομής καθιστώντας έτσι αχρείαστη την πιστή αναπαράσταση των επιμέρους ριζών. Τα εν λόγω μοντέλα αναπτύχθηκαν και αναλύθηκαν επίσης στη μελέτη των Bastian *et al.* (2008) ως ένας τρόπος να περιγραφεί η σχέση ανάμεσα στην κίνηση των επάκριων μεριστωμάτων και της δυναμικής (μεταβολής) της πυκνότητας μήκους των ριζών. Ένα γενικό πλαίσιο διατυπώθηκε μεταγενέστερα συνδυάζοντας την ανάπτυξη των επάκριων μεριστωμάτων με την έννοια των (προσανατολισμένων) συναρτήσεων πυκνότητας (Dupuy *et*

al., 2010b). Οι εξισώσεις διατήρησης μάζας σε αυτό το πλαίσιο είναι σαφώς περισσότερο συμβατές με την βιολογία των ριζικών συστημάτων δεδομένου ότι οι παράμετροι του μοντέλου σχετίζονται άμεσα με τις διεργασίες ανάπτυξης όπως την επιμήκυνση των ριζών και το ρυθμό εμφάνισης πλευρικών ριζών.

Η εργασία που παρουσιάζεται εδώ ερευνά τη δυναμική αυτής της προσέγγισης ως προς τη συμβολή αυτών των μοντέλων στην βελτίωση των καλλιεργειών καθώς και στην επιτάχυνση και βελτίωση της γενετικής ανάλυσης στο μέλλον. Πιο συγκεκριμένα, η εν λόγω εργασία εστιάζει στην ανάπτυξη προσανατολισμένων μοντέλων με βάση τις συναρτήσεις πυκνότητας, στην παραμετροποίησή τους καθώς και στην εφαρμογή τους σε πειραματικά δεδομένα που αφορούν τον φαινότυπο των ριζών.

Σημαντικά στοιχεία που χαρακτηρίζουν τη συγκεκριμένη εργασία αφορούν στη βελτιωμένη εφαρμογή μεθόδων αριθμητικής ανάλυσης που χρησιμοποιήθηκαν στη διακριτοποίηση των εξισώσεων του μοντέλου και αναφέρονται στη δυναμική της ανάπτυξης του ριζικού συστήματος. Επιπλέον, η συμπερίληψη χρονοϋστέρησης στις προσομοιώσεις του μοντέλου αντικατοπτρίζει το φαινόμενο που χαρακτηρίζει την ανάπτυξη των διακλαδώσεων των βασικών ριζών και παρατηρείται στην πράξη. Η ανάπτυξη απλών και καινοτόμων μεθόδων για την ανάλυση και κατανόηση της αρχιτεκτονικής του ριζικού συστήματος, όπως αυτή αποτυπώνεται στα πειραματικά δεδομένα που αφορούν στο φυτό *Brassica rapa*, επικεντρώνεται στη μετατροπή των διακριτών σημείων, με τις όποιες ασυνέχειες που παρατηρούνται στα πειραματικά δεδομένα, κατόπιν χαρτογράφησης του ριζικού συστήματος και ανάλυσης των εικόνων όπως αυτές συλλέγονται

κατά τη διάρκεια του πειράματος, σε συνεχείς συναρτήσεις. Έτσι καθίσταται δυνατή η σύγκριση και αντιπαραβολή με τα αποτελέσματα του μοντέλου. Επομένως, η συγκεκριμένη εργασία προτείνει μια γενικά εφαρμόσιμη τεχνική ανεξάρτητη του εκάστοτε συστήματος μελέτης φαινοτύπων ριζών που χρησιμοποιείται για τη συλλογή των πειραματικών δεδομένων.

Επιπροσθέτως, οι μαθηματικές προσομοιώσεις κάνουν χρήση μεθόδων για την εκτίμηση των παραμέτρων του μοντέλου που αφορούν σε ένα εύρος δεδομένων (πρωταρχικές και δευτερεύουσες ρίζες). Οι συγκεκριμένες μέθοδοι μάλιστα ερευνούν την πολυπλοκότητα και ποικιλία στα μοτίβα ανάπτυξης της αρχιτεκτονικής των ριζικών συστημάτων εκτιμώντας ποσοτικά εκείνα τα γνωρίσματα των ριζών που τα καθορίζουν. Μάλιστα, το εν λόγω ενοποιημένο πλαίσιο που παρουσιάζεται για την παραμετροποίηση του μοντέλου και την εκτίμηση των παραμέτρων του θα μπορούσε μελλοντικά να εφαρμοστεί σε ακόμη μεγαλύτερη συλλογή δεδομένων, αφού είναι εφαρμόσιμο σε ένα ευρύ σύνολο δεδομένων που ενδέχεται να αφορούν σε διάφορα πειραματικά μέσα και σχεδιασμούς. Επιπλέον, αποδεικνύεται ότι η φύση των δεδομένων που είναι διαθέσιμα για την εκτίμηση των παραμέτρων που χαρακτηρίζουν την ανάπτυξη του ριζικού συστήματος επηρεάζει άμεσα την ποιότητα των αποτελεσμάτων του μοντέλου μέσω του αριθμού των φυτών που χρησιμοποιούνται κάθε χρονική στιγμή στο κάθε πείραμα καθώς επίσης και του επιτρεπόμενου εύρους του συντελεστή κλίμακας (scaling factor) που χρησιμοποιείται στα δεδομένα και αποτελεί μία ιδιαίτερα σημαντική παράμετρο.

Το αντίστροφο πρόβλημα της εύρεσης των τιμών των παραμέτρων του μοντέλου από τα πειραματικά δεδομένα συνίσταται στην αποσαφήνιση των

κύριων παραγόντων αιτιώδους συνάφειας. Συνεπώς, η μεγαλύτερη δυσκολία έγκειται στην επιλογή της κατάλληλης μεθόδου βελτιστοποίησης και εύρεση εκείνων των ακροτάτων (εν προκειμένω ελαχίστων τιμών) της αντικειμενικής συνάρτησης που οδηγούν στον υπολογισμό των τιμών των παραμέτρων που όταν εισαχθούν στο μοντέλο θα παράξουν ορθές και εύχρηστες ποσοτικές πληροφορίες που α) θα διατηρούν το φυσικό τους περιεχόμενο και σημασία, ενώ β) θα προκύπτουν από μια διαδικασία παραμετροποίησης που θα είναι συμβατή με τα πειραματικά δεδομένα.

Το πλαίσιο που παρουσιάζεται σε αυτή την εργασία δύναται α) να εκτιμήσει τις παραμέτρους του μοντέλου μέσω της ελαχιστοποίησης μιας αντικειμενικής συνάρτησης με βιολογική σημασία και ερμηνεία, β) να παρέχει γνώση σχετικά με την αλληλεπίδραση των διαφορετικών μηχανισμών ανάπτυξης των ριζών και γ) να συμπεριλάβει στην ανάλυση τις αντίρροπες επιδράσεις ανάμεσα στην ακρίβεια, την καταλληλότητα, την πληρότητα και την πολυπλοκότητα της εκάστοτε μεθόδου βελτιστοποίησης (Kokash, 2005).

Το κύριο πλεονέκτημα της συγκεκριμένης μεθοδολογίας βελτιστοποίησης (preference-based procedure) ως προς την εφαρμογή του μοντέλου σε πειραματικά δεδομένα είναι ότι η χρησιμοποιούμενη αντικειμενική συνάρτηση οδηγεί σε ένα συγκεκριμένο σύνολο παραμέτρων κάθε φορά (σε αντίθεση με την ideal multi-objective procedure). Επιπλέον, ένας από τους βασικούς στόχους της προσέγγισης που παρουσιάζεται όσον αφορά στη βελτιστοποίηση των παραμέτρων του μοντέλου είναι να προτείνει ένα ενοποιημένο πλαίσιο για την εφαρμογή του μοντέλου σε ένα ευρύ σύνολο πειραματικών δεδομένων. Ωστόσο, κάθε αλλαγή στα διαθέσιμα πειραματικά

δεδομένα οδηγεί σε διαφορετική κάθε φορά αντικειμενική συνάρτηση. Συνεπώς, η επιλογή ενός αποδοτικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης που θα είναι εφαρμόσιμος σε διάφορα πειραματικά δεδομένα χωρίς την ανάγκη να μελετώνται κάθε φορά οι ιδιότητες της εκάστοτε αντικειμενικής συνάρτησης, όπως η διαφορισιμότητα και η κυρτότητα, είναι ύψιστης σημασίας. Αυτός είναι και ο κύριος λόγος που επιλέγονται η συγκεκριμένη συνάρτηση κόστους, όπως παρουσιάζεται σε αυτή την εργασία, το συγκεκριμένο πλαίσιο εκτίμησης των παραμέτρων και η μέθοδος βελτιστοποίησης Nelder-Mead, η οποία δεν εξαρτάται από τις παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης, αφού ικανοποιούν τον παραπάνω πρωταρχικό σκοπό.

Η Nelder-Mead είναι μία ευριστική μέθοδος βελτιστοποίησης που έχει χρησιμοποιηθεί αρκετά σε διάφορα προβλήματα βελτιστοποίησης στη χημεία, τη μηχανική και την ιατρική (Lagarias *et al.*, 1998). Χωρίς να απαιτεί χρήση περιορισμών ως προς τις δυνατές τιμές των παραμέτρων, η αναζήτηση ελαχίστου της αντικειμενικής συνάρτησης διατρέχει στο μέγιστο δυνατό τον παραμετρικό χώρο διευκολύνοντας κατά συνθήκη και την εύρεση ολικού ελαχίστου της αντικειμενικής συνάρτησης. Σε αυτή την εργασία, η αντικειμενική συνάρτηση θα μπορούσε να μελετηθεί επίσης και με στοχαστικές μεθόδους εύρεσης ολικών ακροτάτων όπως την basin hopping, την μετα-ευριστική αυτή μέθοδο, η οποία σε συνδυασμό με τη μέθοδο Nelder-Mead θα μπορούσε να συμβάλει στον αξιόπιστο και σχετικά γρήγορο εντοπισμό ολικών ακροτάτων της αντικειμενικής συνάρτησης (Stefanescu, 2007). Εξάλλου, ο εντοπισμός ολικών ακροτάτων είναι σημαντικός στο γενικό πρόβλημα βελτιστοποίησης καθώς σε συνδυασμό με την κατάλληλη ερμηνεία μπορεί να βοηθήσει στην επίλυση προβλημάτων που ενδέχεται να

παρουσιαστούν στην εκτίμηση των παραμέτρων που περιγράφουν το ρυθμό επιμήκυνσης των ριζών καθώς και το ρυθμό εμφάνισης διακλαδώσεων, όπου δύο διαφορετικοί συνδυασμοί αριθμητικών τιμών μπορούν να οδηγήσουν στην ίδια συνάρτηση κατανομής μήκους ριζών.

Η ανάπτυξη νέων τεχνολογιών που διευκολύνουν την ανάλυση μεγάλου αριθμού φαινοτύπων ριζών δημιουργεί νέες θεωρητικές και πρακτικές προκλήσεις που σχετίζονται με την ερμηνεία των πειραματικών δεδομένων και την εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων από αυτά. Έτσι, λοιπόν, απαιτείται η ανάπτυξη μαθηματικών μοντέλων που θα συμβάλουν στην καλύτερη κατανόηση και εξαγωγή χρήσιμων πληροφοριών από τα διαθέσιμα δεδομένα. Η συγκεκριμένη εργασία παρουσιάζει πώς τα εν λόγω μοντέλα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εκτίμηση των παραμέτρων που χαρακτηρίζουν την ανάπτυξη των ριζών ενώ στηρίζεται σε μια μηχανιστική προσέγγιση που είναι συμβατή με διάφορα πειραματικά δεδομένα, παραδείγματος χάριν εκείνα που ενδεχομένως προέρχονται από πειράματα στο έδαφος όπου μόνο τμήματα του ριζικού συστήματος είναι ορατά. Οι διάμετροι των ριζών θα μπορούσαν, επιπλέον, να χρησιμοποιηθούν ως ένας ακόμη τρόπος διαφοροποίησης μεταξύ των βασικών και των δευτερευόντων ριζών ακόμη και σε δυναμικά δεδομένα που περιλαμβάνουν περισσότερα από ένα χρονικά διαστήματα. Στο απώτερο μέλλον, τα συγκεκριμένα μοντέλα θα μπορούσαν να συμπεριλάβουν πληροφορίες σχετικά με τον γενότυπο αλλά και επιπλέον στοιχεία που αφορούν στη φυσιολογία των φυτών. Επίσης, η εφαρμογή του γενικευμένου μοντέλου σε πειραματικά δεδομένα στον τρισδιάστατο χώρο αποτελεί ένα ακόμη πρόσφορο πεδίο έρευνας.

Επιπλέον, η εξάρτηση των παραμέτρων από τον χώρο και τον χρόνο μπορεί να εφαρμοσθεί ώστε να βελτιωθεί ενδεχομένως η απόδοση του μοντέλου όπου κρίνεται σκόπιμο. Η μέθοδος των travelling wavelet θα μπορούσε επίσης να χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με τη χρήση βασικών συναρτήσεων όσον αφορά την αριθμητική επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων του μοντέλου (Basdevant *et al.*, 1990; Benhamidouche *et al.*, 1999), ενώ συνδυασμοί μεταξύ *in vivo* και *in silico* πειραμάτων στο μέλλον θα μπορούσε να αποδειχθεί επωφελής. Μια ακόμη πιο γενικευμένη παραλλαγή της μεθόδου θα μπορούσε δυνητικά να αναλύει ακόμη μεγαλύτερα πειραματικά δεδομένα για πιο αποδοτική και γρήγορη εκτίμηση των παραμέτρων του μοντέλου. Γίνεται πλέον όλο και πιο σαφές ότι όλες οι παραπάνω τεχνολογικές εξελίξεις θα διαδραματίσουν καθοριστικό ρόλο στην ικανότητά μας εν γένει να χρησιμοποιήσουμε μοντέλα στη φαινομική των φυτών και να βελτιώσουμε τις καλλιέργειες για πιο αποδοτικά αγροτικά συστήματα.

Abstract

Crop yield in modern agriculture relies substantially on water and fertilisers (Boserup, 2005). It is, therefore, crucial to adopt efficient crop management strategies in order to maximise the efficiency of crops to absorb vital resources under the following constraints: the shrinkage of arable land, the restricted amount of water resources, the climate change (uneven rainfall) and sustainable agriculture (Lynch, 2011). In order to achieve this overarching aim, it is essential to improve our understanding of the functional mechanisms of root growth. Therefore, the development of methods to observe and characterise root growth patterns is crucial. The bulk of research in root biology depends heavily on experimental data. The development of high throughput phenotyping facilities in combination with the advancement of the semi-automated image analysis software facilitate the generation of large amounts of root data. However, morphology and topology of root systems is usually outlined by the total root length, the maximum root depth or the range of root diameters without providing any quantitative information that enables the characterisation of the underlying functional mechanisms which give rise to complex root system architectures (RSAs) (Le Bot *et al.*, 2010; Leitner *et al.*, 2014). Therefore, valuable insights into the key growth parameters of root system development are essential for assisting root biologists and farmers in their efforts to identify the root phenotypes that are ideal for improved nutrient capture with the aim of efficiently maximising crop yield.

The density-based models presented in this dissertation are mathematical models that depict the structure of the root systems (geometry and topology) as continuous maps and quantitatively describe the main RSA

developmental mechanisms by incorporating them as parameters in the model equations. The spread of roots in the growing medium (soil, filter paper etc.) can be mathematically formulated by the conservation equation of continuous density distribution functions, which include the root angle, defined over space and time (Addiscott and Whitmore, 1987). Initially, Bastian et al. (2008) built up root apical growth models in order to formulate the dependence of the dynamic change in root length density on the root tip movement. Then, a more general approach integrating the concept of the root tip wavefront with the continuous density distribution functions was proposed by Dupuy *et al.* (2005c) and Dupuy et al. (2010b). This modelling approach is also suitable for juxtaposing real root length data and model results since root length density functions can be calculated directly through the model. Thus, the hereby suggested modelling framework can be employed in order to extract useful information from various datasets, irrespective of their format, in terms of model parameters that most importantly retain their biological significance and pertain to root growth functions such as the rate of root elongation and the rate at which laterals emanate from the mother root axes.

This work presents the basis of the mathematical density-based models of RSA as well as the integrated framework for using these models in order to extract biologically significant information on the key developmental mechanisms of RSA from the available experimental data. This dissertation explains why density-based models have the potential to facilitate, upscale and enhance the analysis of root datasets by providing useful tools and new insights into root biology and plant breeding.

The model presented in this work and its application to experimental data suggests that these innovative methods can be used for generating continuous RSA maps based on root density distributions from partially observed and/or discrete experimental data so that they can be directly compared with the model results. Thus, these methods are applicable to varied root data from various phenotyping facilities and also form the core of an integrated framework, for extracting information from data by estimating key root growth parameters and characterising the growth patterns by quantitatively describing the RSA developmental mechanisms. In addition, incorporating the time lag in the initiation of lateral roots with respect to the formation of the mother roots allows the model to describe RSA development more accurately. The enhanced implementation of the suitable numerical methods for solving the partial differential equations in the model leads to cost-efficient simulation of the dynamics of root growth.

The presented pipeline is applicable to data from a wide range of plant species, while the nature of the data available for extracting root growth parameters as well as the number of replicates taken at a specific time point influence the quality of the estimations of model parameters. In addition, the range of acceptable values of the scaling factor applied to root densities that are based on data is of major significance.

Regarding the model parameter estimation, the adequate assessment and selection of the most suitable optimisation algorithm is one of the main problems that needs to be properly addressed. As in any inverse problem, the main issue is the identification of this optimiser which can output these

parameter values that are biologically meaningful providing information based on real data consistently, robustly and accurately.

The employed optimisation approach incorporates all the necessary performance criteria, which retain the biological significance of the estimated model parameters, in the cost function. The presented framework takes into account the fact that the root growth parameters are inextricably linked with the reposition and reorientation of roots while considering the trade-off between optimality, accuracy, completeness and complexity of the employed optimisation method (Kokash, 2005). A preference-based procedure incorporated in the optimisation framework outputs a single set of optimal values for the estimated parameters. However, the versatility of an efficient optimisation algorithm that has the potential to work efficiently with various cost functions, which change with respect to the available root data, without constraints related to the differentiability and convexity of the cost function, is of paramount importance. Therefore, based on the analysis presented in this work, the employed optimiser of Nelder-Mead, which is derivative-free, as well as the proposed cost function proved to be adequate for the analysis.

Nelder-Mead is an efficient heuristic optimisation algorithm, popular for solving problems in chemistry, engineering and medicine (Lagarias *et al.*, 1998), which might also facilitate the investigation for global optima. It is worth mentioning that the cost function as formulated in this work can also be used with global non-linear optimisers (e.g. basin hopping). Calculation of global optima is important in this specific problem, because non-identical sets of optimal values of the later root elongation rate and the main root branching rate can generate identical root length density distribution maps.

The mechanistic and empirical approaches presented in this work have the potential to be applied to root data generated in various experimental set-ups. Root diameters and genotypic information can also be incorporated in the model. The potential of the density-based models presented here can be further investigated in future by validating them on experimental data from roots growing in three-dimensional space. In addition, the efficiency of the models could be enhanced by a) employing new methods for discretisation of the partial differential equations (e.g. the travelling wavelet method), b) implementing time- and space-dependence of model parameters and c) imposing constraints on the cost function regarding the distribution of root diameters. In general, the upscaling of high throughput phenotyping facilities and the improvement of *in vivo* and *in silico* experimentation will play a pivotal role in improving the models in plant phenomics and therefore expanding the capacity of crops through efficient crop management strategies in the realm of sustainable agriculture.

Chapter 1

Modelling the development of plant root systems

1.1 Understanding the importance of plant root systems

Plants are vital to our health, clothing, housing, energy and environmental quality. However, pollution, urbanisation, industrialisation as well as the shrinkage of arable land and water resources lead to the unprecedented limited availability of plant-based products. Therefore, crops need to be managed in such a way that they can still perform at maximum efficiency while making use of less water, nutrients and energy in soils that constantly become more infertile over time. In addition, it is estimated that crop production must double to meet growing demands for food (Tomlinson, 2013; White *et al.*, 2013).

However, the ability of plants to acquire vital resources such as nutrients and water depends substantially upon roots. As a consequence, gaining valuable insights into how root systems are formed, grow and develop over time and space is crucial for maximising crop yield. This study shows how mathematical modelling can play a pivotal role in sustainable agriculture and efficient crop management by targeting those traits that identify optimal phenotypes for abiotic stress.

Roots are organised in complex and highly organised branching structures, whose geometry as well as topology, and their functional mechanisms need to be adequately analysed and thoroughly understood. Relocation and reorientation of roots are responses to environmental cues and developmental signals. Roots move in the growing medium by increasing their length (root elongation) and growing downwards (gravitropism) or upwards (negative gravitropism). Roots can also bend horizontally (plagiotropism) or towards the initial direction of the root (exotropism) (Casimiro *et al.*, 2003; Pagès *et al.*, 2004; Bengough *et al.*, 2000).

1.2 Density-based models: Mathematical models of root growth

The architecture of the root structures is defined through their geometrical features such as the position, orientation and size of roots. Root system structures evolve constantly over space and time and as a result the generation of RSAs is a dynamic phenomenon whose functional mechanisms are yet to be understood.

1.2.1 The Root System Architecture (RSA) can be quantitatively described by a density-based model

Since root systems are organised in multiple levels of root branching hierarchy, the density distribution functions can be defined for the roots of each branching order i , with $i \in \mathbb{N}$. More precisely, the root tip density, the root length density and the root branching density for the roots of branching order i are real-valued multivariate functions denoted by $\rho_a^{(i)}, \rho_l^{(i)}, \rho_b^{(i)} : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^+$ defined in $L_x \times L_y \times L_\alpha \times L_t$, with $x \in L_x \subset \mathbb{R}, y \in L_y \subset \mathbb{R}^-, \alpha \in L_\alpha \subset \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}^+$ and $\alpha \in (-\pi, \pi]$. Hence, at any point t the total number of roots of branching order i is given by $\int_\Omega \rho_a^{(i)}(x, y, \alpha, t) dv$, the total length of roots is formulated as $\int_\Omega \rho_l^{(i)}(x, y, \alpha, t) dv$ and the total number of branching points is defined as $\int_\Omega \rho_b^{(i)}(x, y, \alpha, t) dv$ with $\Omega \subset L_x \times L_y \times L_\alpha$.

1.2.2 Root growth is a dynamic phenomenon

A mathematical model, adapted from previous work by Dupuy *et al.* (2010a), makes use of these density functions through partial differential equations (PDEs) in order to characterise the root system structure by estimating the root growth parameters. In an arbitrary volume Ω , with $\Omega \subset L_x \times L_y \times L_\alpha$, enclosed by a surface $\partial\Omega$, any change in the number of roots with time is due to two independent processes: the flow of the pre-existing roots through the boundary via root elongation and root gravitropism, as well as the emanation of new roots within the volume induced by root branching. In particular, the

change in the number $\int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv$ of tips of i -th order roots inside the volume Ω is due to root tip flow and, therefore, the total change in $\int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv$ can be evaluated after taking into account the number of roots that leave and enter the volume in total over the specified period dt . Thus, the rate of change in the number $\int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv$ of tips of i -th order roots in the volume Ω enclosed by the surface $\partial\Omega$ can be modelled by applying a conservation approach, i.e.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = - \int_{\partial\Omega} \rho_a^{(i)} \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} ds, \quad (1-1)$$

where $\rho_a^{(i)} \equiv \rho_a^{(i)}(\mathbf{X}, t)$ signifies the root tip density at the point $\mathbf{X} = (x, y, \alpha)$, $\hat{\mathbf{n}}$ is the unit normal vector to the surface area element ds and $\mathbf{U} \equiv \mathbf{U}^{(i)}(\mathbf{X}, t)$ denotes the velocity of the tips of i -th order roots. However, according to the divergence theorem (Stolze, 1978)

$$\int_{\partial\Omega} \rho_a^{(i)} \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}) dv. \quad (1-2)$$

By substituting the equation (1-2) into the equation (1-1), it follows that

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}) dv. \quad (1-3)$$

Root elongation and root gravitropism are both modelled through the velocity $\mathbf{U}^{(i)}(\mathbf{X}, t)$ of the root tip of a particular branching order i at any point $\mathbf{X}(x, y, \alpha)$, i.e.

$$\mathbf{U}^{(i)} = \left(\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt}, \frac{d\alpha}{dt} \right). \quad (1-4)$$

By definition, the change $dl^{(i)}$ in the length $l^{(i)}$ during the time interval dt divided by the duration of this time interval is the root elongation $e^{(i)}$, i.e.

$$e^{(i)} = \frac{dl^{(i)}}{dt}. \quad (1-5)$$

However, the rate of change dx and dy in the position x and y of the root tip can be expressed as follows:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{dl^{(i)}}{dt} \sin\alpha \quad (1-6)$$

and

$$\frac{dy}{dt} = \frac{dl^{(i)}}{dt} \cos\alpha, \quad (1-7)$$

respectively. By plugging the equation (1-5) into the equations (1-6) and (1-7) we get

$$\frac{dx}{dt} = e^{(i)} \sin \alpha \quad (1-8)$$

and

$$\frac{dy}{dt} = e^{(i)} \cos \alpha. \quad (1-9)$$

In addition, the gravitropic rate $\frac{d\alpha}{dt}$ for the roots of branching order i is defined as

$$\frac{d\alpha}{dt} = -g^{(i)} \alpha, \quad (1-10)$$

Solving the equation (1-10) (by separation of variables) yields

$$\alpha(t) \equiv \alpha = \alpha_0 \exp(-g^{(i)} t), t \geq t_0 \quad (1-11)$$

with α_0 the non-zero initial root angle (dimensionless) and $g^{(i)} \geq 0$ denoting the gravitropic parameter of roots, which generally grow downwards.

By substituting the equations (1-8), (1-9) and (1-10) into the equation (1-4), the velocity $\mathbf{U}^{(i)}$ can be equivalently written as

$$\mathbf{U}^{(i)} = (e^{(i)} \sin \alpha, e^{(i)} \cos \alpha, -g^{(i)} \alpha), \quad (1-12)$$

or

$$\mathbf{U}^{(i)} = e^{(i)} (\sin \alpha, \cos \alpha, \kappa), \quad (1-13)$$

with $\kappa = -\frac{g^{(i)} \alpha}{e^{(i)}}$ denoting the local curvature of the root (Dupuy, 2011).

The equation (1-13) shows the relationship between the independent parameters of the elongation rate and the gravitropic rate on the morphology of the root system reiterating that the shape of the root system is determined by the ratio between these two parameters.

Thus, the mathematical expression for the rate of change in the number of root tips due to root flow is given by:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} (e^{(i)} \sin \alpha, e^{(i)} \cos \alpha, -g^{(i)} \alpha)) dv. \quad (1-14)$$

The volumetric branching rate term $b^{(i)}$, with $i \geq 1$, is given by:

$$b^{(i)} = \frac{1}{2} \cdot b_r^{(i-1)} \cdot [\rho_a^{(i-1)}(x, y, \alpha + b_\alpha^{(i)}, t) + \rho_a^{(i-1)}(x, y, \alpha - b_\alpha^{(i)}, t)], \quad (1-15)$$

where $b_r^{(i-1)}$ denotes the branching rate of a root of branching order $i - 1$ indicating the total number of roots of order i created by branching of one root of order $i - 1$ per unit time dt , $b_\alpha^{(i)}$ is the branching angle at which lateral roots of order i emerge and the coefficient $\frac{1}{2}$ agrees with the model assumption that there are two equally likely possibilities for the branches to appear on the right-hand side or left-hand side of the mother root. Consequently, the rate of change in the number of root tips can be modelled as

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = \int_{\Omega} b^{(i)} dv. \quad (1-16)$$

Thus, the equations (1-3) and (1-16) yield the total rate of change in the number $\int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv$ of tips of roots of branching order i in the volume Ω , i.e.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}^{(i)}) dv + \int_{\Omega} b^{(i)} \cdot dv. \quad (1-17)$$

However, the volume Ω is independent of time. So,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_a^{(i)} dv = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} dv. \quad (1-18)$$

Plugging the equation (1-18) into the left-hand side of the equation (1-17) leads to

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} dv = - \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}^{(i)}) dv + \int_{\Omega} b^{(i)} dv. \quad (1-19)$$

Equivalently,

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}^{(i)}) - b^{(i)} \right) dv = 0. \quad (1-20)$$

So,

$$\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}^{(i)}) - b^{(i)} = 0, \quad (1-21)$$

or

$$\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_a^{(i)} \mathbf{U}^{(i)}) + b^{(i)}. \quad (1-22)$$

Alternatively,

$$\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\rho_a^{(i)} (e^{(i)} \sin \alpha, e^{(i)} \cos \alpha, -g^{(i)} \alpha) \right) + b^{(i)} \quad (1-23)$$

or

$$\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} = -\frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} e^{(i)} \sin \alpha \right)}{\partial x} - \frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} e^{(i)} \cos \alpha \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} g^{(i)} \alpha \right)}{\partial \alpha} + b^{(i)}. \quad (1-24)$$

Based on the equation (1-24), the root elongation rate e ($\text{cm} \cdot \text{d}^{-1}$), the gravitropic rate g (d^{-1}) and the volumetric branching rate b ($\text{cm}^{-2} \cdot \text{d}^{-1}$), are the main growth parameters that affect the root tip density ρ_a . Moreover, the model equation (1-24) can be further modified so that the main root growth parameters are time dependent, i.e.

$$\frac{\partial \rho_a^{(i)}}{\partial t} = -\frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} e^{(i)}(t) \sin \alpha \right)}{\partial x} - \frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} e^{(i)}(t) \cos \alpha \right)}{\partial y} + \frac{\partial \left(\rho_a^{(i)} g^{(i)}(t) \alpha \right)}{\partial \alpha} + b^{(i)}(t). \quad (1-25)$$

Furthermore, in order for the model to account for the time lag that is observed in the emergence of laterals with respect to the appearance of the corresponding mother roots, the equation (1-15) which describes the volumetric branching rate, needs to be adequately modified so that

$$b^{(i)} = \frac{b_r^{(i-1)} \left[\rho_a^{(i-1)} \left(x, y, \alpha + b_\alpha^{(i)}, t - T^{(i)} \right) + \rho_a^{(i-1)} \left(x, y, \alpha - b_\alpha^{(i)}, t - T^{(i)} \right) \right]}{2}, \quad (1-26)$$

for $t \geq T^{(i)}$, with the time lag calculated from the experimental data and denoted by $T^{(i)}$.

Regarding the initial root tip density distribution, this is fully incorporated from the experimental data so that

$$\rho_a^{(0)}(x, y, \alpha, t = t_0) = \hat{\rho}_a^{(0)}(x, y, \alpha), \quad (1-27)$$

where the function $\hat{\rho}_a^{(0)}(x, y, \alpha)$ denotes the data-based initial mother root tip density distribution function at the start of the experiment. The boundary conditions for the model simulations are given by

$$\rho_a^{(i)} \mathbf{U} \cdot \hat{\mathbf{n}} \Big|_{\partial B} = 0, \quad (1-28)$$

with $\hat{\mathbf{n}}$ signifying the unit normal vector and $B = L_x \times L_y \times L_\alpha$.

1.2.3 Numerical solution of the model

The PDE model is solved for the root tip density ρ_a numerically by applying the finite volume method (Heinen *et al.*, 2003; Leveque, 2002; Versteeg and Malalasekera, 2007). In order to solve the PDEs for the root tip density ρ_a , each coordinate was considered separately (dimensional splitting) and an upwind scheme, a first order method, with minmod flux limiter schemes, which are second order methods that improve the accuracy of the solutions, were applied.

According to the CFL Condition (Courant, Friedrichs and Lewy) (Leveque, 2002), which is not always sufficient for the convergence of the applied numerical method, a numerical method can be convergent only if its numerical domain of dependence contains the true domain of dependence of the PDE, at least in the limit as Δt and Δx go to zero, i.e.

$$|u_d| \cdot \frac{\Delta t}{\Delta d} \leq C, \text{ with } d = \{x, y, \alpha\} \text{ and } t \in [0, T], \quad (1-29)$$

where C is Courant number with $C \leq 1$.

Hence, for the growth parameters of the seminal roots when $d = x$, $|u_d| = e_x$ and the CFL condition yields

$$e_x \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq C, \quad (1-30)$$

or equivalently,

$$|e \sin \alpha| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq C \quad (1-31)$$

and finally

$$\Delta t \leq \frac{C \cdot \Delta x}{e}, \quad (1-32)$$

for ensuring stability of the dimensional sweep at each time increment.

However, given that $\Delta x = \Delta y$ in the model simulations, the CFL condition for the y axis gives

$$\Delta t \leq \frac{C \cdot \Delta y}{e} = \frac{C \cdot \Delta x}{e}. \quad (1-33)$$

Applying the CFL condition (1-29) to the third spatial dimension α yields

$$|u_\alpha| \cdot \frac{\Delta t}{\Delta \alpha} \leq C. \quad (1-34)$$

However, according to the equation (1-10),

$$u_\alpha = \frac{d\alpha}{dt} = -g \cdot \alpha. \quad (1-35)$$

So, substituting the equation (1-35) into (1-34) leads to

$$|-g \cdot \alpha| \cdot \frac{\Delta t}{\Delta \alpha} \leq C, \quad (1-36)$$

but since $|-g| = |g|$, then

$$|g| \cdot |\alpha| \cdot \frac{\Delta t}{\Delta \alpha} \leq C \quad (1-37)$$

or equivalently,

$$\Delta t \leq \frac{C \cdot \Delta \alpha}{|g| \cdot |\alpha|}. \quad (1-38)$$

However, as explained in section 1.2.1, $\alpha \in (-\pi, \pi]$ or $|\alpha| \leq \pi$, so

$$\Delta t \leq \frac{C \cdot \Delta \alpha}{|g| \cdot \pi}. \quad (1-39)$$

Therefore, equations (1-32), (1-33) and (1-39) lead to

$$0 \leq \Delta t \leq \min\left(\frac{C \cdot \Delta \alpha}{|g| \cdot \pi}, \frac{C \cdot \Delta x}{e}\right). \quad (1-40)$$

Chapter 2

Estimation of model parameters from experimental data

The main aim of this work is to investigate whether the mathematical model presented in Chapter 1 can be used to extract useful information from experimental data. Therefore, the model is fitted to available root image data derived from an experiment on *Brassica rapa* (*B. rapa*).

2.1 The root system of *Brassica rapa*

The root system of *Brassica rapa* (*B. rapa*) is made up of a single primary root as well as first-order laterals (Figure 2.1). A total of 89 seedlings were grown for 14 days after sowing on blue filter paper and images were taken every 2 days and analysed using the image analysis software SmartRoot (Lobet *et al.*, 2011b), although the framework presented in this work can be applied to datasets generated by other software for image analysis. Thus, the primary and lateral roots consisted of 22,290 and 196,055 line segments, respectively.



Figure 2.1 *The Brassica rapa* (*B. rapa*) root system. Image taken from Adu (2014).

2.2 Model calibration

For the roots of each branching order i , the discrepancy between the model-based density $(\rho_l^{(i)})$ and the data-based density distribution function $(\hat{\rho}_l^{(i)})$ were quantified through a cost function¹ $E^{(i)}$ defined as follows:

$$E^{(i)} = \int_V \hat{\rho}_l^{(i)2} (\rho_l^{(i)} - \hat{\rho}_l^{(i)})^2 dv + \left(\int_V (\rho_l^{(i)} - \hat{\rho}_l^{(i)}) dv \right)^2. \quad (2-1)$$

This cost function takes into account the local differences between the data-based root length density $\hat{\rho}_l^{(i)}$ and the model-based root length density $\rho_l^{(i)}$ through the first integral term $(\int_V \hat{\rho}_l^{(i)2} (\rho_l^{(i)} - \hat{\rho}_l^{(i)})^2 dv)$, while the second term $(\int_V (\rho_l^{(i)} - \hat{\rho}_l^{(i)}) dv)^2$ quantifies the differences in total root length density. It is worth noting that the first term reduces the dependency of the objective function on areas where root length density is relatively low.

The vector of optimal model parameters $\xi_{opt}^{(i)}$ contains these parameter values that minimise the difference between the model output and the experimental data, i.e.

$$\xi_{opt}^{(0)} := \operatorname{argmin}_{\xi^{(0)}} E^{(0)}(\xi^{(0)}), \quad (2-2)$$

$$\xi_{opt}^{(i)} := \operatorname{argmin}_{\xi^{(i)}} E^{(i)}(\xi_{opt}^{(0)}, \dots, \xi_{opt}^{(i-1)}, \xi^{(i)}), \quad 0 < i \leq n.$$

For the numerical simulations and the implementation of the optimisation method, the size of the domain $(0, L_x) \times (0, L_y) \times \left(-\frac{L_\alpha}{2}, \frac{L_\alpha}{2}\right)$ was derived from the experimental set-up with $L_x = 15$ (cm), $L_y = 22$ (cm), $L_\alpha = \frac{3\pi}{2}$ (rad) and the Courant-Friedrichs-Lewy number C , as defined in Chapter 1, was set equal to 0.5.

2.2.1 Centering experimental root data

Unfortunately, it is not always feasible to extract perfectly aligned root images throughout the duration of the experiment. However, it is essential for

¹ In this work, the terms “cost function”, “error function” and “objective function” are used interchangeably.

the consistency of the analysis and applicability of the method that the seed of any of the plants, whose data are to be processed, is located at a common position, the midpoint of the horizontal plane (Figure 2.2).



Figure 2.2 (A) Before the centering of root data with seeds positioned at different points along the top edge of the filter paper. (B) After the centering of data: All the seedlings are located at a common position, the midpoint of the horizontal plane.

Therefore, horizontal position x'_i and vertical position y'_i of the successive points of the traced root segments after the centering can be expressed with respect to the relevant coordinates x_i and y_i before the centering as follows:

$$x'_i = x_i - x_0 + \frac{L}{2} \quad (2-3)$$

and

$$y'_i = y_i - y_0, \quad (2-4)$$

with x_0 denoting the pre-centering horizontal position of the seed, L signifying the length of the horizontal axis and $(\frac{L}{2}, 0)$ describing the midpoint along the horizontal axis. For the post-centering horizontal position x'_0 of the seed for any plant, from the equation (2-3) follows that

$$x'_0 = x_0 - x_0 + \frac{L}{2} \quad (2-5)$$

or

$$x'_0 = \frac{L}{2}. \quad (2-6)$$

It is worth mentioning that since $\frac{L}{2} > 0$, the horizontal coordinates of the points which are located to the right of the position of the seed before the centering ($x_i - x_0 > 0$) are positive ($x'_i > 0$) following the centering, while

they are negative ($x'_i < 0$), for these points that before the centering are on the left hand side of the original position of the seed ($x_i - x_0 < 0$).

2.3 From root line segments to continuous root maps: A computationally efficient method for estimating root density distribution functions from traced roots

2.3.1 Kernel-based density approach

A kernel density-based method as depicted in Figure 2.3 can be employed to estimate root density functions from traced root data. This approach can be considered as a generalisation of the histograms from multidimensional datasets but with rigorous theoretical reasoning (Silverman, 1996; Scott and Sain, 2005) with the estimated density distribution functions provided by the sum of the kernel functions.

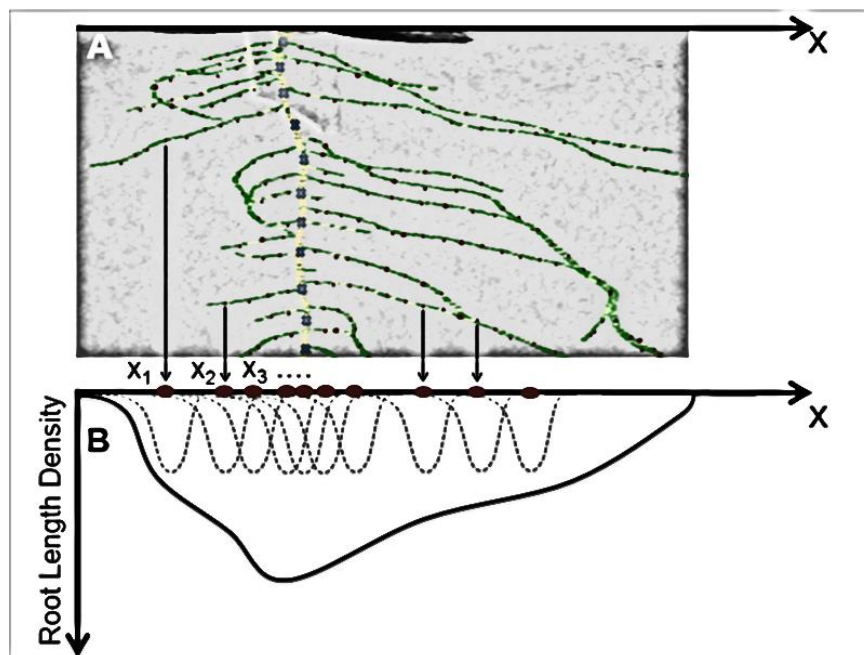


Figure 2.3 The kernel-based density method: (A) The midpoints of successive line segments on a traced primary root and laterals are denoted by blue X and red dots, respectively. (B) The total root length density is estimated as the sum of the classical Gaussian kernel functions whose centres x_i are the midpoints.

Therefore, the data-based root length density $\hat{\rho}_l(\mathbf{X})$ can be given by:

$$\hat{\rho}_i(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^m l_i V(\mathbf{X} - \mathbf{X}_i), \quad (2-7)$$

with $\mathbf{X} \in [0, L_x] \times [0, L_y] \times \left[-\frac{L_\alpha}{2}, \frac{L_\alpha}{2}\right]$ and \mathbf{X}_i denoting the location of the center of the i -th root segment of length l_i .

The classical Gaussian kernel V (cm^{-2}) is given by:

$$V(\mathbf{X}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^d |\boldsymbol{\Sigma}|}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{X}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X}\right), \quad (2-8)$$

with d signifying the number of dimensions and $\boldsymbol{\Sigma}$ denoting a non-zero diagonal matrix defined as:

$$\boldsymbol{\Sigma} = k^2 \begin{bmatrix} c_x^2 & 0 & 0 \\ 0 & c_y^2 & 0 \\ 0 & 0 & c_\alpha^2 \end{bmatrix}, \quad (2-9)$$

with the scaling factor k and normalisation factors c_x, c_y, c_α representing the spatial resolution and the varying spacing along the three independent and, therefore, uncorrelated dimensions x, y, α .

2.3.2 Calculating the scaling factor by using the Cross Validation method

Our main aim is to evaluate the optimal value k_{opt} of the scaling factor k of the kernel density function without underfitting or overfitting to the data with all the available observations depending on each other. For this reason, resampling techniques are needed and therefore the method of pseudo-log-likelihood cross validation is applied. More precisely, the Leave-One-Out cross-validation (CV_{LOO}) method is employed, where all the data points apart from one denoted by j are used to estimate the log likelihood at this specific point, i.e.

$$CV_{LOO}(k) = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n \log \left(\sum_{i \neq j} l_i V(\mathbf{X}_j - \mathbf{X}_i) \right), \quad (2-10)$$

with m signifying the total number of root segments under consideration. However, in order to be able to differentiate between roots whose total number is denoted by N , additional indexing is implemented to explicitly note which root the different root segment belong to, i.e.

$$CV_{\text{LoO}}(k) = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{0 < i \leq N \\ 0 < j \leq n_i}} \log \left(\sum_{\substack{0 < p \leq N \\ 0 < q \leq n_i, q \neq j \text{ for } p=i}} l_{pq} V(\mathbf{X}_{ij} - \mathbf{X}_{pq}) \right), \quad (2-11)$$

where \mathbf{X}_{ij} are the coordinates of the j -th root segment and l_{ij} its length and $\sum_{i=1}^N n_i = n$.

In addition, a V-fold cross-validation $CV_{\text{V-fold}}$ method (Geisser, 1975) with cross-validation function defined as follows:

$$CV_{\text{V-fold}}(k) = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{0 < i \leq N \\ 0 < j \leq n_i}} \log \left(\sum_{\substack{0 < p \leq N, p \neq i \\ 0 < q \leq n_i}} l_{pq} V(\mathbf{X}_{ij} - \mathbf{X}_{pq}) \right). \quad (2-12)$$

Therefore, the pseudo-log-likelihood, $CV = \log(\prod_{i=1}^n \hat{\rho}_l(\mathbf{X}_i))$, attains its maximum value at the optimal scaling factor k_{opt} maximises, i.e.

$$k_{opt} := \operatorname{argmax}_k CV(k) \quad (2-13)$$

2.4 Hierarchical optimisation of model parameters

Evaluating the optimal values of the model parameters is computationally intensive, but decoupling into optimisation sub-problems with respect to the relevant branching order allows the problem to remain computationally solvable.

In order to be able to assess different optimisation methods by using simulated data, a target root length density distribution function was first calculated based on user-defined values of model parameters. The optimisation methods that were initially assessed using simulated data were the Powell's method (Powell, 1964), the Conjugate-Gradient method which is based on a nonlinear conjugate gradient algorithm by Polak and Ribiere, a variant of the Fletcher-Reeves method presented in Nocedal and Wright (2006), the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno method (BFGS) ((Broyden, 1970; Fletcher, 1970; Goldfarb, 1970; Shanno, 1970) and the Nelder-Mead

method (Nelder and Mead, 1965). The Powell's method is a conjugate direction method where minimisations occur sequentially along each entry of the vector. Unfortunately, additional information regarding the optimal direction is needed and this proves to impact on the efficiency and convergence of the method. The Conjugate-Gradient method uses the gradient of the cost function. However, the cost function might be unknown or not well-conditioned and therefore the method is fraught with errors in the approximation of the gradient. On the other hand, the Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) method is a quasi-Newton algorithm. Although it generally does not require many function calls, the use of the gradient of the cost function which, when not known, needs to be estimated by first-order differences and the approximation of the Hessian matrix at each step negatively impact on the effectiveness, efficiency and cost of the method.

Interestingly, simplex-based optimisation techniques, such as Nelder-Mead, performed better than the rest of the methods. The Nelder-Mead algorithm consists in the generalisation of intervals and triangles to high-dimensional domains (simplex) which constantly adapt while efficiently spanning the parameter space (Olsson and Nelson, 1975). It works well with noisy cost functions and does not involve approximation of derivatives.

By taking into account these factors that could affect the optimisation such as the grid size, the initial condition and the total duration of the experiment, the optimisation algorithm runs on a set of possible model parameters in order to generate the root system and enable the model outputs to be juxtaposed with the target root system through a cost function. The optimisation procedure was iterated until convergence criteria were met (Figure 2.4).

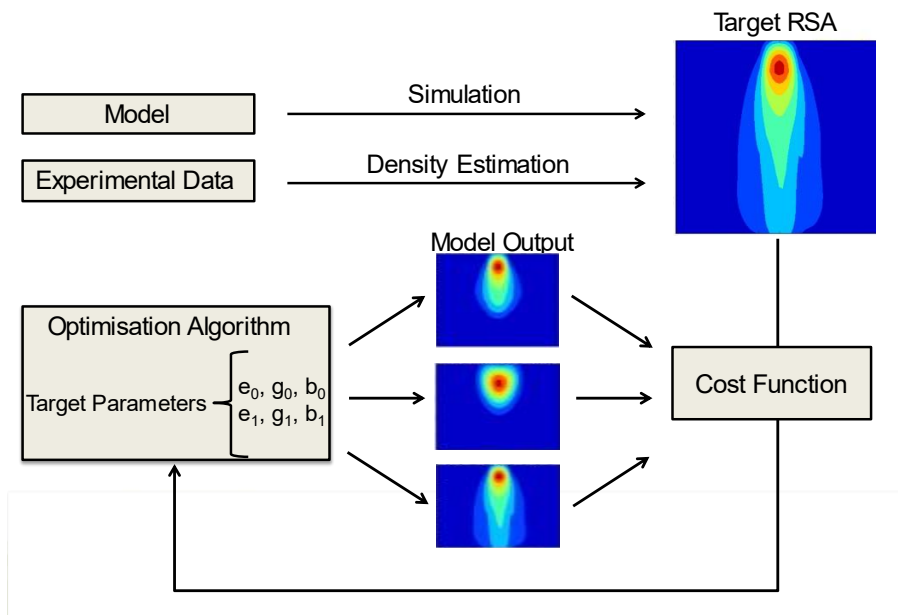


Figure 2.4 *Optimisation framework for estimating root growth parameters from simulated as well as real data..*

Chapter 3

Results

3.1 V-fold cross validation works better than Leave-One-Out cross validation

While the estimated total root length was 15.77 cm and 15.68 cm obtained by Leave-One-Out (LOO) and V-fold cross validation for the primary root and values of 106.45 cm and 105.56 cm for laterals and the data-based total root length for the primary and the laterals was 15.54 cm and 105.26 cm respectively, there were significant differences with the respect to the calculated values of the optimal scaling factor as well as the output root length density distribution maps. In particular, by applying the Leave-One-Out (LOO) cross validation method the optimal scaling factor k'_{opt} was 0.23 for primary and 0.21 for laterals and generated patchy root length density distributions (Figure 3.1 (A) and Figure 3.1 (B)). On the contrary, the optimal scaling factor k_{opt} was 0.9 for primary and 0.57 for laterals when employing the $CV_{V\text{-fold}}$ method (Figure 3.1(A) and figure 3.1 (C)).

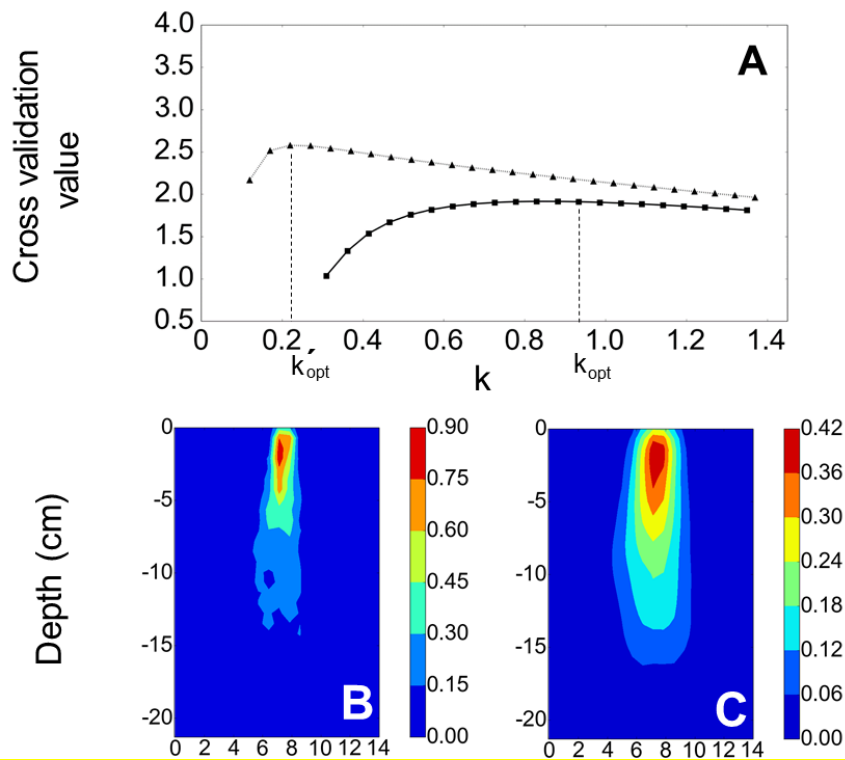


Figure 3.1 (A) Optimal scaling factor determined by the V-fold cross-validation method (solid) and the Leave-One-Out method (dashed). (B) Root length distribution map (cm^{-1}) for the optimal scaling factor k_{opt} derived by the Leave-One-Out method. (C) Root length distribution map (cm^{-1}) for the optimal scaling factor k_{opt} calculated by the Leave-One-Out method.

3.2 Effectiveness and efficiency of different minimisation algorithms in retrieving root growth parameters from simulated data

In this black-box optimisation problem, Nelder-Mead (simplex-based optimisation technique) performed better than Conjugate-Gradient or Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) (gradient-based methods), which were slower to converge towards optimal parameters (Figure 3.2). The Powell's conjugate direction method was not suitable and less effective for this problem mainly because it needed to determine the most suitable direction, which depends on the particular problem.

In general, experiments of longer duration improved the estimation of the parameters and optimisation methods only work for grid sizes greater than a specific threshold (Figure 3.2). A simulation grid of a little bigger size was required in order for the Powell's method, the Conjugate-Gradient and BFGS

method to converge to the expected value for the gravitropic rate of the mother roots. However, all the methods performed quite similarly when estimating the branching rate of mother roots in tandem with the elongation rate of laterals. However, the Conjugate-Gradient method always required more time to converge to the expected value of the model parameter regardless of the mesh size.

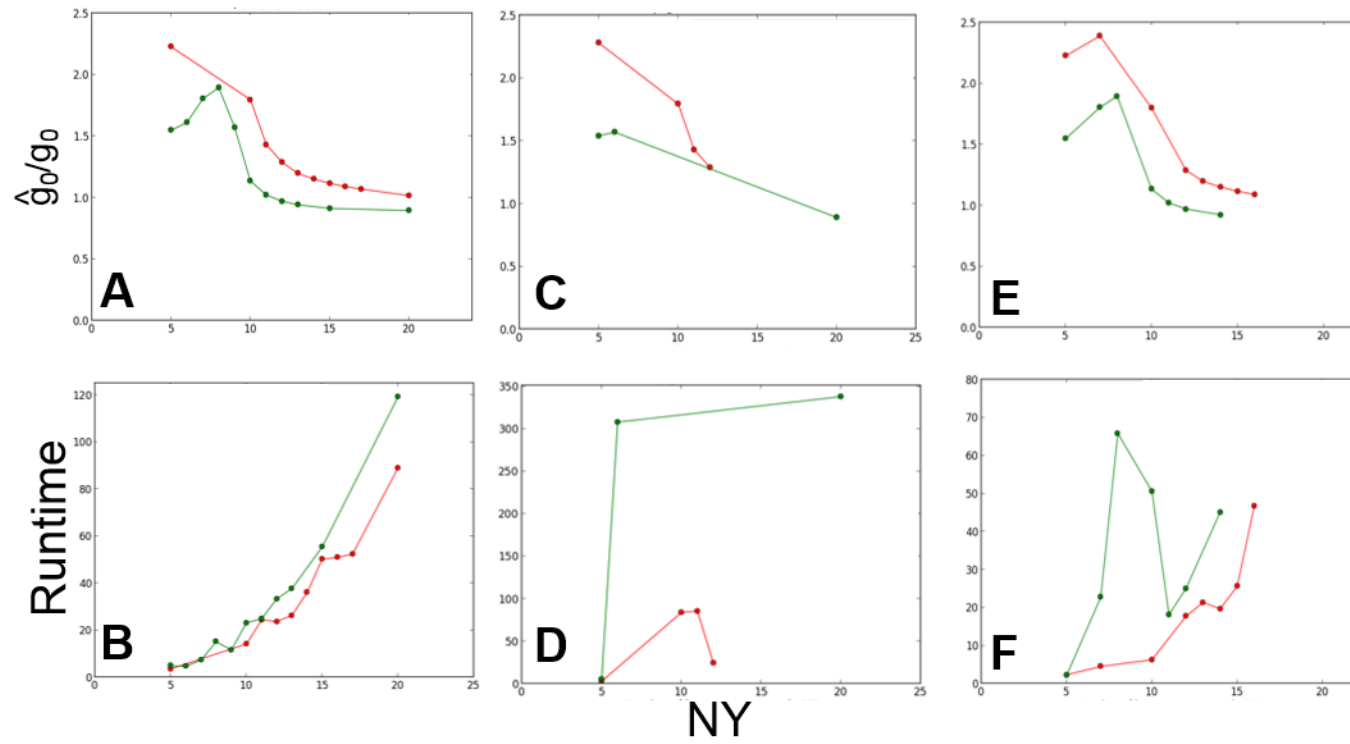


Figure 3.2 Optimisation of gravitropic rate for the main root using Powell's method, Conjugate-Gradient method and BFGS method respectively. (A, C and E) show the ratio $\frac{\hat{g}_0}{g_0}$ plotted against the number of grid elements (NY) for Powell's method, Conjugate-Gradient method and BFGS method respectively. Panel B, panel D and panel F show the runtime for each of the methods versus different number of grid elements. Duration of the simulated experiment refers to 15 days (red) and 25 days (green).

3.2.1 Estimation of Brassica rapa root growth parameters and sensitivity analysis

The model was fitted on 89 plants of *B. rapa* as described in Chapter 2 and the results are presented in Table 3.1 and Figure 3.3. All the algorithms were coded in Python (<http://www.scipy.org/>). In addition, a sensitivity analysis was performed based on a 1% increase in each of the values of the model parameters along with 95% confidence intervals (CI) with bootstrap sample size $N=100$, the coefficient of variation (CoV) as well as the ratio of the percentage change δE in the objective function E to the percentage change $\delta \xi$ in parameter ξ expressed through the Model Elasticity Value (MEV):

$$MEV := \frac{\frac{|\delta E|}{|E|}}{\frac{|\delta \xi|}{|\xi|}}. \quad (3-1)$$

Table 3.1 Sensitivity analysis: The model elasticity value (MEV), the 95% confidence interval (CI) as well as the coefficient of variation (CoV).

Parameter	Units	Estimate	MEV	SE	CI	CoV (%)
$e^{(0)}$	cm·d ⁻¹	1.24	0.947	0.0043	1.229 - 1.3	3.62
$g^{(0)}$	d ⁻¹	0.02	0.073	0.00043	0.019 - 0.021	2.17
$b_r^{(0)}$	d ⁻¹	2.94	0.996	0.027	2.927 - 2.948	0.77
$e^{(1)}$	cm·d ⁻¹	0.52	0.972	0.00053	0.513 - 0.527	1.19

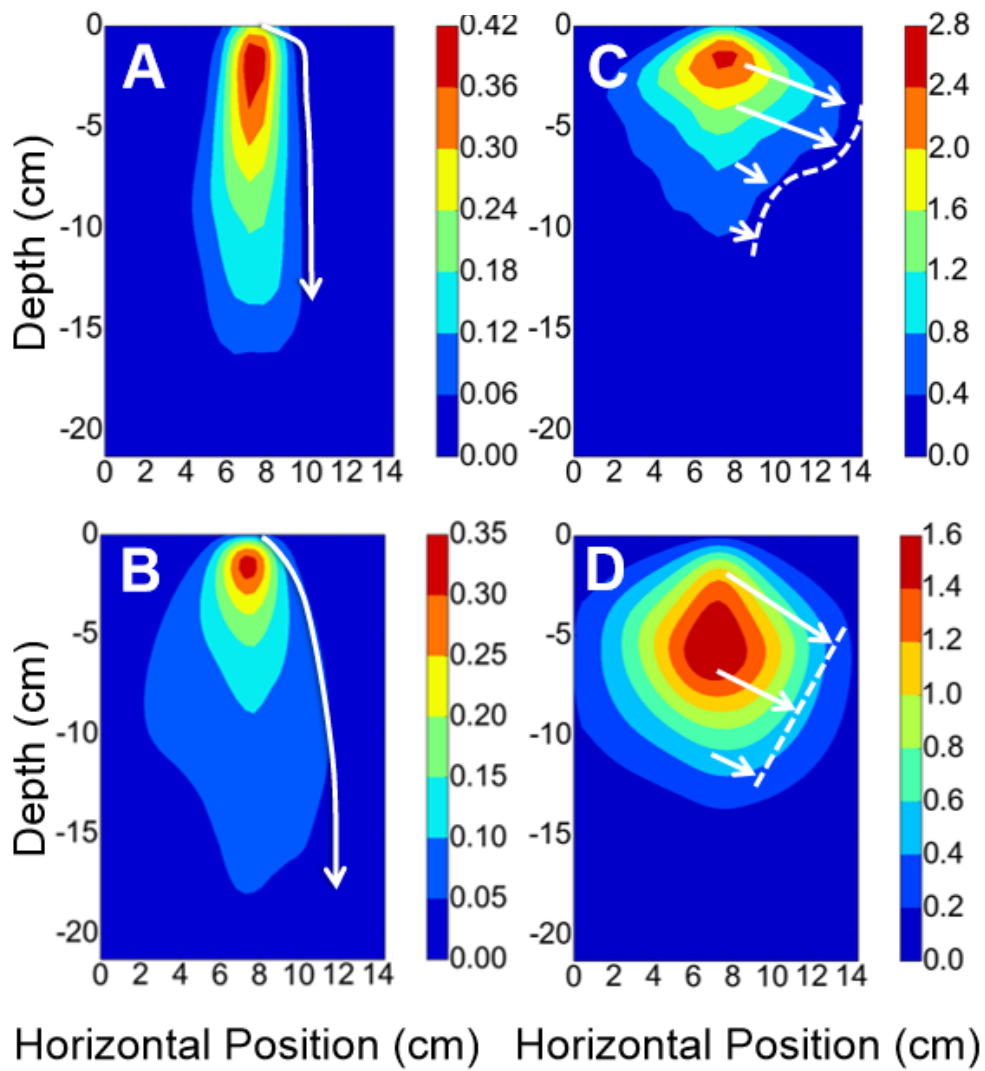


Figure 3.3 (A, B) Data-based and model-based root length density distribution (cm^{-1}) for the primary root. (C, D) Data-based and model-based root length density distribution (cm^{-1}) for the lateral roots.

Chapter 4

Conclusions

This work shows that partial differential equations can be used to model root growth while incorporating a sufficiently small number of biologically meaningful model parameters such as elongation rate, branching rate and gravitropism (Dupuy *et al.*, 2010a; Dupuy *et al.*, 2010b). These oriented density-based models of root growth describe the root growth dynamics through the linkage between the length density, tip density and branching density focusing on the geometry (root length density) and topology (root branching density, root tip density) of the complex and highly ordered branching structures of the roots systems.

In addition, the kernel-based method for estimating root density maps from traced root data proved to consist a generic approach independent of the experimental set-up and the software used to trace roots. It is worth noting that the employed approach takes into account the hierarchy of the branching structure of root systems and addresses the oriented density-based model parameter optimisation by dividing the main problem into solvable sub-problems. The elongation rate, the branching rate and the gravitropic rate are incorporated as model parameters that describe biological functional mechanisms thus facilitating the comparison with the relevant root features that can be measured in the experiments. Regarding the optimisation, the simplex-based method Nelder-Mead converged fast leading to efficient estimation of these values of the model parameters which minimise the cost function. However, it is important to point out that the specific properties which result in the outstanding performance of Nelder-Mead are not yet fully understood (Lagarias *et al.*, 1998).

This work provides an integrated framework for estimating root growth parameters from experimental traced root data. Density-based models allow for simulating RSA efficiently regardless of the number of primary and lateral roots observed in the experiments. In future, since the root system is modelled as a continuum through the density distribution functions, other

mechanical phenomena and interactions between roots and the environment can be implemented relatively easily.

Bibliography

- Addiscott TM, Whitmore AP.** 1987. Computer simulation of changes in soil mineral nitrogen and crop nitrogen during autumn, winter and spring. *The Journal of Agricultural Science* **109**, 141-157.
- Adu MO.** 2014. Variations in root system architecture and root growth dynamics of Brassica rapa genotypes using a new scanner-based phenotyping system, University of Nottingham, Nottingham.
- Adu MO, Chatot A, Wiesel L, Bennett MJ, Broadley MR, White PJ, Dupuy LX.** 2014a. A scanner system for high-resolution quantification of variation in root growth dynamics of Brassica rapa genotypes. *Journal of Experimental Botany*.
- Adu MO, Chatot A, Wiesel L, Bennett MJ, Broadley MR, White PJ, Dupuy LX.** 2014b. A scanner system for high-resolution quantification of variation in root growth dynamics of Brassica rapa genotypes. *Journal of Experimental Botany* **65**, 2039-2048.
- Adu MO, Yawson DO, Armah FA, Asare PA, Bennett MJ, Broadley MR, White PJ, Dupuy LX.** 2016. Effects of rooting media on root growth and morphology of Brassica rapa seedlings. *South African Journal of Plant and Soil*, 1-9.
- Atkinson D.** 2000. Root Characteristics: Why and What to Measure. In: Smit AL, Bengough AG, Engels C, van Noordwijk M, Pellerin S, van de Geijn SC, eds. *Root Methods: A Handbook*: Springer Berlin Heidelberg, 1-32.
- Atkinson D, Mackie-Dawson LA.** 2001. Root Growth: Methods of Measurement. In: Smith KA, Mullins CA, eds. *Soil and Environmental Analysis: Physical Methods*. New York: Marcel Dekker, 435-498.
- Atkinson JA, Wingen LU, Griffiths M, Pound MP, Gaju O, Foulkes MJ, Le Gouis J, Griffiths S, Bennett MJ, King J.** 2015. Phenotyping pipeline reveals major seedling root growth QTL in hexaploid wheat. *Journal of Experimental Botany*, erv006.
- Baldwin JP, Tinker PB, Marriott FH.** 1971. Measurement of length and distribution of onion roots in field and laboratory. *Journal of Applied Ecology*, 543-554.
- Basdevant C, Holschneider M, Parrier V.** 1990. Méthode des ondelettes mobiles. *C.R. Academie Sciences Paris* **310**, 647-652.
- Bastian P, Chavarría-Krauser A, Engwer C, Jäger W, Marnach S, Ptashnyk M.** 2008. Modelling in vitro growth of dense root networks. *Journal of Theoretical Biology* **254**, 99-109.
- Bengough AG, Bransby MF, Hans J, McKenna SJ, Roberts TJ, Valentine TA.** 2006. Root responses to soil physical conditions; growth dynamics from field to cell. *Journal of Experimental Botany* **57**, 437-447.
- Bengough AG, Castrignano A, Pagès L, van Noordwijk M.** 2000. Sampling Strategies, Scaling, and Statistics. In: Smit AL, Bengough AG, Engels C, van Noordwijk M, Pellerin S, van de Geijn SC, eds. *Root Methods: A Handbook*: Springer Berlin Heidelberg, 147-173.
- Bengough AG, Gordon DC, Al-Menaie H, Ellis RP, Allan D, Keith R, Thomas WTB, Forster BP.** 2004. Gel observation chamber for rapid screening of root traits in cereal seedlings. *Plant and Soil* **262**, 63-70.

- Benhamidouche N, Torrèsani B, Triay R.** 1999. The travelling wavelets approach to gravitational instability theory: one-dimensional wavelets. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* **302**, 807-820.
- Boserup E.** 2005. *The conditions of agricultural growth: The economics of agrarian change under population pressure*: Transaction Publishers.
- Broyden CG.** 1970. The Convergence of a Class of Double-rank Minimization Algorithms 1. General Considerations. *IMA Journal of Applied Mathematics* **6**, 76-90.
- Casimiro I, Beeckman T, Graham N, Bhalerao R, Zhang H, Casero P, Sandberg G, Bennett MJ.** 2003. Dissecting *Arabidopsis* lateral root development. *Trends in Plant Science* **8**, 165-171.
- Chloupek O, Forster BP, Thomas WT.** 2006. The effect of semi-dwarf genes on root system size in field-grown barley. *Theoretical and Applied Genetics* **112**, 779-786.
- Clark RT, MacCurdy RB, Jung JK, Shaff JE, McCouch SR, Aneshansley DJ, Kochian LV.** 2011. Three-dimensional root phenotyping with a novel imaging and software platform. *Plant Physiology* **156**, 455-465.
- de Dorlodot S, Forster B, Pagès L, Price A, Tuberoso R, Draye X.** 2007b. Root system architecture: opportunities and constraints for genetic improvement of crops. *Trends in Plant Science* **12**, 474-481.
- De Smet I.** 2012. Lateral root initiation: one step at a time. *New Phytologist* **193**, 867-873.
- De Smet I, Tetsumura T, De Rybel B, et al.** 2007. Auxin-dependent regulation of lateral root positioning in the basal meristem of *Arabidopsis*. *Development* **134**, 681-690.
- de Willigen P, Heinen M, Mollier A, Van Noordwijk M.** 2002. Two-dimensional growth of a root system modelled as a diffusion process. I. Analytical solutions. *Plant and Soil* **240**, 225-234.
- Draye X, Kim Y, Lobet G, Javaux M.** 2010. Model-assisted integration of physiological and environmental constraints affecting the dynamic and spatial patterns of root water uptake from soils. *Journal of Experimental Botany* **61**, 2145-2155.
- Drew M, Saker L.** 1975. Nutrient supply and the growth of the seminal root system in barley II. localized, compensatory increases in lateral root growth and rates of nitrate uptake when nitrate supply is restricted to only part of the root system. *J Exp Bot* **26**.
- Dunbabin V, Diggle A, Rengel Z, van Hugten R.** 2002. Modelling the interactions between water and nutrient uptake and root growth. *Plant and Soil* **239**, 19-38.
- Dupuy L, Fourcaud T, Stokes A.** 2005a. A numerical investigation into factors affecting the anchorage of roots in tension. *European Journal of Soil Science* **56**, 319-327.
- Dupuy L, Fourcaud T, Stokes A.** 2005b. A numerical investigation into the influence of soil type and root architecture on tree anchorage. *Plant and Soil* **278**, 119-134.
- Dupuy L, Fourcaud T, Stokes A, Danjon F.** 2005c. A density-based approach for the modelling of root architecture: application to Maritime pine (*Pinus pinaster* Ait.) root systems. *Journal of Theoretical Biology* **236**, 323-334.

- Dupuy L, Gregory PJ, Bengough AG.** 2010a. Root growth models: towards a new generation of continuous approaches. *Journal of Experimental Botany* **61**, 2131-2143.
- Dupuy L, Vignes M, McKenzie BM, White PJ.** 2010b. The dynamics of root meristem distribution in the soil. *Plant Cell and Environment* **33**, 358-369.
- Dupuy LX.** 2011. Modelling Root Systems Using Oriented Density Distributions. *AIP Conference Proceedings* **1389**, 726-729.
- Dupuy LX, Vignes M.** 2012. An algorithm for the simulation of the growth of root systems on deformable domains. *Journal of Theoretical Biology* **310**.
- Dupuy LX, Vignes M, McKenzie B, White P.** 2010c. The dynamics of root meristem distribution in soil. *Plant, Cell & Environment* **33**, 358-369.
- Fletcher R.** 1970. A new approach to variable metric algorithms. *The Computer Journal* **13**, 317-322.
- Fourcaud T, Zhang X, Stokes A, Lambers H, Koerner C.** 2008. Plant growth modelling and applications: The increasing importance of plant architecture in growth models. *Annals of Botany* **101**.
- Garré S, Pagès L, Laloy E, Javaux M, Vanderborght J, Vereecken H.** 2012. Parameterizing a dynamic architectural model of the root system of spring barley from minirhizotron data. *Vadose Zone Journal* **11**.
- Goldfarb D.** 1970. A family of variable-metric methods derived by variational means. *Mathematics of Computation* **24**, 23-26.
- Gregory PJ.** 2006. *Plant Roots: Growth, Activity and Interaction with Soils*. Oxford, UK: Blackwell Publishing Ltd.
- Guédon Y, Barthélémy D, Caraglio Y, Costes E.** 2001. Pattern Analysis in Branching and Axillary Flowering Sequences. *Journal of Theoretical Biology* **212**, 481-520.
- Hackett C, Rose D.** 1972. A model of the extension and branching of a seminal root of barley, and its use in studying relations between root dimensions. I. The model. *Australian Journal of Biological Sciences* **25**, 669-679.
- Heinen M, Mollier A, De Willigen P.** 2003. Growth of a root system described as diffusion. II. Numerical model and application. *Plant and Soil* **252**, 251-265.
- Kalogiros DI, Adu MO, White PJ, Broadley MR, Draye X, Ptashnyk M, Bengough AG, Dupuy LX.** 2016. Analysis of root growth from a phenotyping data set using a density-based model. *Journal of Experimental Botany* **67**, 1045-1058.
- Kokash N.** 2005. An introduction to heuristic algorithms. *Department of Informatics and Telecommunications*.
- Lagarias JC, Reeds JA, Wright MH, Wright PE.** 1998. Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions. *Siam Journal on Optimization* **9**, 112-147.
- Lajus D, Graham JH, Kozhara A.** 2003. Developmental instability and the stochastic component of total phenotypic variance. In: Polak M, ed. *Developmental instability: causes and consequences*. New York: Oxford University Press, 343-363.
- Lambers H, Shane MW, Cramer MD, Pearse SJ, Veneklaas EJ.** 2006. Root Structure and Functioning for Efficient Acquisition of Phosphorus:

- Matching Morphological and Physiological Traits. *Annals of Botany* **98**, 693-713.
- Le Bot J, Serra V, Fabre J, Draye X, Adamowicz S, Pages L.** 2010. DART: a software to analyse root system architecture and development from captured images. *Plant and Soil* **326**, 261-273.
- Leitner D, Felderer B, Vontobel P, Schnepf A.** 2014. Recovering root system traits using image analysis exemplified by two-dimensional neutron radiography images of lupine. *Plant Physiology* **164**, 24-35.
- Leitner D, Klepsch S, Ptashnyk M, Marchant A, Kirk GJD, Schnepf A, Roose T.** 2010. A dynamic model of nutrient uptake by root hairs. *New Phytologist* **185**, 792-802.
- Leveque RJ.** 2002. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Liang H, Hu K, Batchelor WD, Qi Z, Li B.** 2016. An integrated soil-crop system model for water and nitrogen management in North China. *Scientific Reports* **6**, 25755.
- Liao H, Rubio G, Yan X, Cao A, Brown KM, Lynch JP.** 2001. Effect of phosphorus availability on basal root shallowness in common bean. *Plant and Soil* **232**, 69-79.
- Lobet G, Pages L, Draye X.** 2011a. A novel image analysis toolbox enabling quantitative analysis of root system architecture. *Plant Physiol* **157**.
- Lobet G, Pagès L, Draye X.** 2011b. A novel image-analysis toolbox enabling quantitative analysis of root system architecture. *Plant Physiology* **157**, 29-39.
- López-Bucio J, Cruz-Ramírez A, Herrera-Estrella L.** 2003. The role of nutrient availability in regulating root architecture. *Current Opinion in Plant Biology* **6**, 280-287.
- Lynch JP.** 2011. Root Phenotypes for Enhanced Soil Exploration and Phosphorus Acquisition: Tools for Future Crops. *Plant Physiology* **156**, 1041-1049.
- Migault V.** 2015. Insertion of root morphogenesis in L-grass, a functional-structural plant model of forage grasses, Université de Poitiers.
- Nagel KA, Putz A, Gilmer F, Heinz K, Fischbach A, Pfeifer J, Faget M, Blossfeld S, Ernst M, Dimaki C.** 2012a. GROWSCREEN-Rhizo is a novel phenotyping robot enabling simultaneous measurements of root and shoot growth for plants grown in soil-filled rhizotrons. *Funct Plant Biol* **39**.
- Nagel KA, Putz A, Gilmer F, et al.** 2012b. GROWSCREEN-Rhizo is a novel phenotyping robot enabling simultaneous measurements of root and shoot growth for plants grown in soil-filled rhizotrons. *Functional Plant Biology* **39**, 891-904.
- Nelder JA, Mead R.** 1965. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal* **7**, 308-313.
- Nibau C, Gibbs DJ, Coates JC.** 2008. Branching out in new directions: the control of root architecture by lateral root formation. *New Phytol* **179**.
- Nielsen KL, Lynch JP, Weiss HN.** 1997. Fractal geometry of bean root systems: correlations between spatial and fractal dimension. *American Journal of Botany* **84**, 26-33.
- Nocedal J, Wright JS.** 2006. *Numerical Optimization*. New York: Springer-Verlag.
- Norby RJ, Jackson RB.** 2000. Root dynamics and global change: seeking an ecosystem perspective. *New Phytologist* **147**, 3-12.

- Olsson DM, Nelson LS.** 1975. The Nelder-Mead Simplex Procedure for Function Minimization. *Technometrics* **17**, 45-51.
- Pagès L, Jordan MO, Picard D.** 1989. A simulation model of the three-dimensional architecture of the maize root system. *Plant and Soil* **119**, 147-154.
- Pagès L, Vercambre G, Drouet JL, Lecompte F, Collet C, Le Bot J.** 2004. Root Typ: a generic model to depict and analyse the root system architecture. *Plant and Soil* **258**, 103-119.
- Powell MJD.** 1964. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *The Computer Journal* **7**, 155-162.
- Scott DW, Sain SR.** 2005. Multidimensional density estimation. In: Rao CR, Wegman EJ, Solka JL, eds. *Data Mining and Data Visualisation*: Elsevier, 229-261.
- Secchi S, Gassman PW, Jha M, Kurkalova L, Feng HH, Campbell T, Kling CL.** 2007. The cost of cleaner water: Assessing agricultural pollution reduction at the watershed scale. *Journal of Soil and Water Conservation* **62**, 10-21.
- Shanno DF.** 1970. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Mathematics of Computation* **24**, 647-656.
- Silverman B.** 1996. *Density Estimation for Statistics and Data Analysis*. London: Chapman & Hall.
- Stefanescu S.** 2007. Applying Nelder-Mead's Optimization Algorithm for Multiple Global Minima. *Romanian Journal of Economic Forecasting*, 97-103.
- Stolze CH.** 1978. A history of the divergence theorem. *Historia Mathematica* **5**, 437-442.
- Tomlinson I.** 2013. Doubling food production to feed the 9 billion: A critical perspective on a key discourse of food security in the UK. *Journal of Rural Studies* **29**, 81-90.
- United Nations D.o.E.a.S.A. PD.** 2013. World Population Prospects: The 2012 Revision, Key Finding and Advance Table. *ESA/P/WP*.
- Versteeg H, Malalasekera W.** 2007. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*: Prentice Hall.
- White PJ, George TS, Gregory PJ, Bengough AG, Hallett PD, McKenzie BM.** 2013. Matching roots to their environment. *Annals of Botany* **112**, 207-222.
- Zhu J, Ingram PA, Benfey PN, Elich T.** 2011. From lab to field, new approaches to phenotyping root system architecture. *Current Opinion in Plant Biology* **14**, 310-317.