

УДК 504:519.8

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БИОДЕГРАДАЦИИ НЕФТИ В РИЗОСФЕРЕ РАСТЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИФFUЗИИ

В. В. Водопьянов¹, Л. Л. Водопьянова²

¹vodop@yandex.ru, ²vodop@yandex.ru

ФГБОУ ВПО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (УГАТУ)

Поступила в редакцию 22 апреля 2014 г.

Аннотация. Рассматривается математическая модель биodeградации нефти в ризосфере растений с учетом диффузионных процессов. Численными расчетами показывается, что предложенная математическая модель адекватно описывает протекающие в почве процессы.

Ключевые слова: математическая модель; биodeградация нефти в ризосфере; хемотаксис; диффузионные процессы.

В работе [1] рассмотрена следующая точечная модель численности микроорганизмов и биodeградации нефти, учитывающая дополнительный рост питательного субстрата в ризосфере растений (1), где $C(t)$ – количество оставшихся в почве нефтепродуктов в момент времени t в виде: $C(t) = C_1(t) + C_2(t)$; $C_1(t)$ – составляющая нефти, которая может быть разложена за счет биodeградации микроорганизмами в ризосфере растений; $C_2(t)$ – составляющая нефти, которая может быть разложена под воздействием физико-химических факторов (проникновение нефти в глубину почвы, испарение легких фракций, вымывание, окис-

ление и фотохимическое разложение нефти), а также за счет поглощения корневой системой; $M(t)$ – численность микроорганизмов; $Y(t)$ – численность УОМ; $S(t)$ – плотность питательных веществ, выделяемых растениями в ризосфере; $F(t)$ – функция фитотоксичности; t – время, в мес.

Численные расчеты по модели (1) показали, что она достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными. Вместе с тем были отмечены не случайные отклонения от экспериментальных данных.

(1)

Причиной этих отклонений на наш взгляд является то, что в ризосфере растений при достаточно быстрой деструкции нефти важную роль начинают играть процессы диффузия и конвекции, возникающие в первую очередь за счет корневой системы растений.

Диффузионные процессы оказывают влияние как на нефтяное загрязнение, так и сопровождают деятельность микробиоты почвы (хемотаксис). Хемотаксис – это процесс, при котором микроорганизмы меняют свое состояние движения, реагируя на присутствие химического вещества, стремясь в химически благоприятную среду и избегая неблагоприятной среды. Важную роль хемотаксиса микроорганизмов при биоремедиации загрязненных почв отмечалась в многих работах (см. обзор в работе [2]). Способность быстро обнаружить цель (молекулу загрязняющего вещества) и атаковать ее (деградировать эту молекулу) дает преимущества микроорганизмам-деструкторам. А некоторые микроорганизмы научились не просто распознавать наличие загрязнителя, но и осуществлять целенаправленный поиск ростового субстрата (рис.1).

Впервые математически явление хемотаксиса было описано в работе А. Н. Колмогорова, И. Г. Петровского, Н. С. Пискунова [3]. В дальнейшем это явление изучалось в работах Патлак [4], Келлера и Сигала [5] и др. Отметим, что в работе [5] рассматривалась система

уравнений, учитывающая хемотаксис микроорганизмов. В дальнейшем подобные системы получили название моделей Келлера–Сигала (см., напр., [6]).

Отметим, что существуют работы, посвященные поведению различных загрязнителей в почве. Так в работе [7] рассматривались математические модели переноса и разложения пестицидов в почве. Однако в отличие от нефти, динамика деградация пестицидов и других загрязнителей в почве имеет существенно другой характер.

При всем обилии моделей, описывающих разложение нефти с помощью микроорганизмов, при изучении литературы на соответствующую тематику не было обнаружено моделей адекватно описывающих ризодеградацию. Так как этот механизм весьма важен в экологическом плане, встает вопрос о построении моделей, описывающих данный процесс.

Рассмотрим одно растение (корень растения) в загрязнённой почве. При этом сделаем допущение, что корень представим в виде вертикального стержня. Систему отсчёта свяжем с корнем и рассмотрим вертикальное сечение плоскости, в которой находится корень. Введем двумерную декартову систему координат таким образом, чтобы корень совпал с осью OY

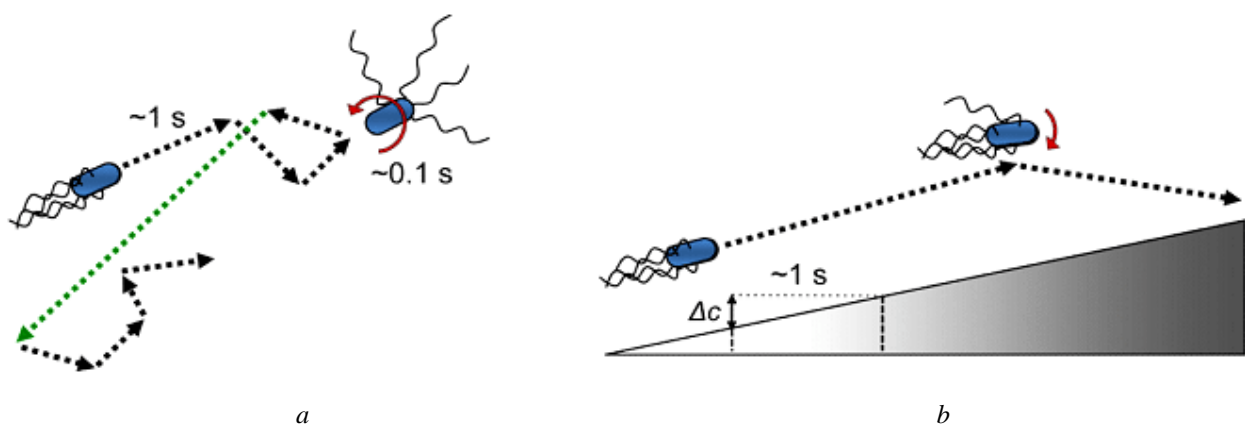


Рис. 1. Стратегия бактериального хемотаксиса:

- a* – перемещение в отсутствии градиента аттрактанта. Движение клетки в однородной среде более хаотично. Вращение жгутика против часовой стрелки периодически сменяется вращением по часовой стрелке, что переориентирует бактериальную клетку в пространстве. Такое «блуждание» является частью эффективной стратегии поиска ростового субстрата;
- b* — хемотаксис в градиенте концентрации субстрата. Когда в среде появляется субстрат, вращение жгутика чаще происходит по часовой стрелке (и реже — против часовой), что придает движению бактериальной клетки направленность. Чем выше концентрация аттрактанта, тем активнее к нему движется бактериальная клетка (рис. взят из [9])

Сделаем предположение об однородности среды по вертикали и рассмотрим одномерную диффузию нефти и микроорганизмов к корню на правой полуоси (рис. 2).

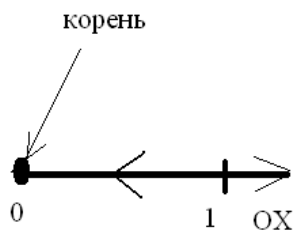


Рис. 2

Тогда законно применить второй закон Фика для нефти и микроорганизмов. Внесем в рассмотренную выше систему (1) диффузионные составляющие. Полученная система (2) описывает изменение концентрации нефти и численность микроорганизмов с учётом диффузии нефти и микроорганизмов.

Введём также граничные условия:

$X(t,0) = X_M \cdot S(t) + X_0$, – зависимость численности микроорганизмов от выделения субстрата, где X_M – емкость ниши, X_0 – начальное количество микроорганизмов;

$Y(t,0) = Y_M \cdot S(t) + Y_0$, – зависимость численности УОМ от выделения субстрата, где Y_M – емкость ниши, Y_0 – начальное количество УОМ;

$\frac{\partial X(t,1)}{\partial x} = 0$ – условие непроницаемости на

границе;

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 C_1(t,0)}{\partial x^2} = 0, \\ \frac{\partial^2 C_2(t,0)}{\partial x^2} = 0, \\ \frac{\partial^2 C_3(t,0)}{\partial x^2} = 0 \end{cases}$$

– условие гладкости.

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial X(t,x)}{\partial t} &= X(t,x) \cdot \left[\frac{Z_{xc} \cdot (X_0 S(t) + S_0 - X(t,x))}{K_{xx} + X(t,x)} - \frac{Z_{xc} \cdot (X_0 S(t) + S_0 - X(t,x)) \cdot (C(t,x) - \gamma)}{(K_{xx} + X(t,x)) \cdot (K_{xc} + C(t,x))} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\tau}{(t/30 + 0.9)^4} + \frac{K_1 \cdot X(t,x) \cdot S(t,x)}{S(t,x) + K_2} \right] + v D_x \frac{\partial^2 X(t,x)}{\partial x^2}; \\ \frac{\partial Y(t,x)}{\partial t} &= Y(t,x) \left[v(C(t,x) + S(t)) - \eta \frac{Y(t,x)}{Y(t,x) + K_{yy}} \right] + v D_y \frac{\partial^2 Y(t,x)}{\partial x^2}; \\ \frac{\partial C_1(t,x)}{\partial t} &= -C_1(t,x) \cdot \left[\lambda \cdot (X_0 S(t) + S_0) + \frac{C(t,x)}{K_{xc} + C(t,x)} \left(\mu_1 \cdot \frac{X(t,x)}{K_{xx} + X(t,x)} + \mu_2 Y(t,x) \right) \right] + \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x} \left(v D_1 x \frac{\partial C_1(t,x)}{\partial x} \right) - v_1 \frac{\partial C_1(t,x)}{\partial x}; \\ \frac{\partial C_2(t,x)}{\partial t} &= -C_2(t,x) \cdot \alpha_2 + \frac{\partial}{\partial x} \left(v D_2 x \frac{\partial C_2(t,x)}{\partial x} \right) - v_2 \frac{\partial C_2(t,x)}{\partial x}; \\ \frac{\partial C_3(t,x)}{\partial t} &= -C_3(t,x) \cdot S(t) \alpha_3 + \frac{\partial}{\partial x} \left(v D_3 x \frac{\partial C_3(t,x)}{\partial x} \right) - v_3 \frac{\partial C_3(t,x)}{\partial x}; \\ S(t) &= \alpha_s \cdot \sin \left(\frac{2\pi t}{140} \right) \cdot \left(\frac{\text{sgn}(140-t)}{2} + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{1}{F(t)+1}; \\ F(t) &= F_0 \exp \left[-\alpha S_0 \left[\frac{k\lambda}{\mu} (e^{-\lambda t} - 1) + \left(1 - \frac{k}{\mu} \right) \delta (e^{-\delta t} - 1) \right] \right]. \end{aligned} \right. \quad (2)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial C_1(t,1)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial C_2(t,1)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial C_3(t,1)}{\partial x} = 0 \end{cases}$$

– условие непроницаемости на границе.

Начальные условия:

$$C_1(0, x) = C_{10},$$

$$C_2(0, x) = C_{20},$$

$$C_3(0, x) = C_{30},$$

$$X(0, x) = X_0 \cdot S(0) + X_0,$$

$$Y(0, x) = Y_0 \cdot S(0) + Y_0.$$

Для проверки адекватности построенных моделей реальным биологическим процессам были проведены численные эксперименты при различных начальных условиях, что отвечало различным дозам загрязнения. Значения коэффициентов диффузии подбирались методом вариации:

$$v_1 = v_2 = v_3 = v_{D1} = v_{D2} = v_{D3} = 0.01,$$

$$v_{Dx} = v_{Dy} = 0.05,$$

а остальные – были взяты из модели (1).

Была создана программа в математическом пакете Maple, решение производилось встроенной схемой подсчета пакета. Численные расчеты показали хорошую согласованность с экспериментальными данными.

На основании данных, полученных при моделировании, было установлено, что снижение концентрации нефти в точке пропорционально расстоянию от этой точки до ризосферы (рис. 3). Ввиду отсутствия распределенных по пространству практических данных, для проверки адекватности модели использовались усредненные данные из работы [8]

Из расчетов также видно (рис. 4), что скорость увеличения численности микроорганизмов на период роста корня больше в точках, находящихся ближе к корню. С биологической точки зрения это объясняется тем, что субстрат, выделяемый корнем, стимулирует увеличение численности микроорганизмов. Под влиянием диффузии, микроорганизмы распределяются в прикорневой зоне, убывая в зависимости от расстояния.

Однако воздействие на растение нефтяного загрязнения приводит к деградации корневой системы растения. В этот период корень оказывает токсическое воздействие на микроорганизмы, находящиеся вблизи него. Вследствие чего,

наблюдается обратная картина диффузии: численность микроорганизмов становится меньше в непосредственной близости от корня.

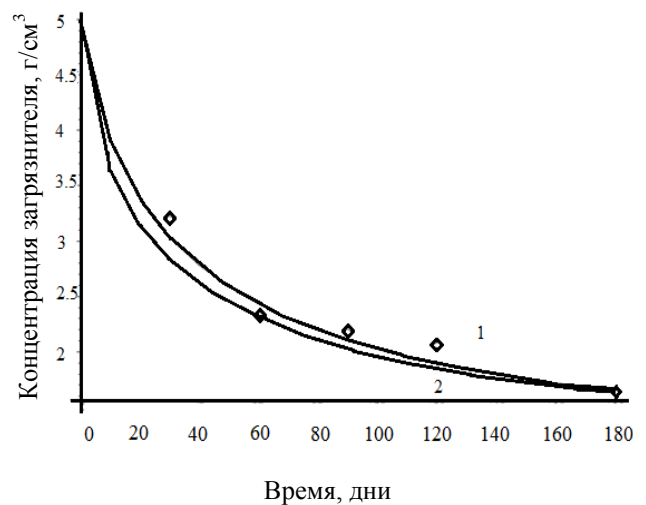


Рис. 3. Концентрация нефти в ризосфере растения на расстоянии от растения 1 м (1) и 0,1 м (2)

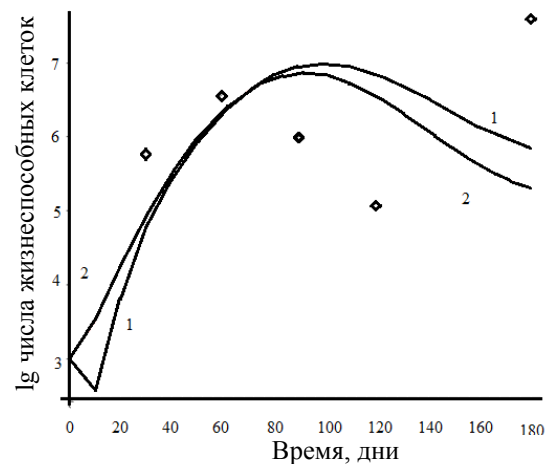


Рис. 4. Численность микроорганизмов в ризосфере растения при начальном загрязнении нефти 5% на расстоянии от растения 1 м (1) и 0,1 м (2)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Водопьянов В. В., Гузаиров М. Б., Киреева Н. А. Математическое моделирование процессов в антропогенно нарушенных почвенных биосистемах. М.: Машиностроение, 2010. 232 с. [V. V. Vodopyanov, M. B. Guzairov, and N. A. Kireeva, *Mathematical modeling of processes in anthropogenically disturbed soil biosystems*, (in Russian). Moscow: Mashinostroenie, 2010.]
2. Pandey G., Jain R. K. R. K. "Bacterial chemotaxis toward environmental pollutants: role in bioremediation," *Applied and Environmental Microbiology*, pp. 5789-5795, Dec. 2002.

3. **Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С.** Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюлл. МГУ. 1937. Т. 1, № 6. С. 1-26. [A. N. Kolmogorov, I. G. Petrovsky, and N. S. Piskunov, "Investigation of diffusion coupled with an increase in the amount of substance and its application to a biological problem," (in Russian), in *Bulletin of MSU*, vol. 1, no. 6, pp. 1-6, 1937.]
4. **Patlak C. S.** "Random walk with persistence and external bias," *Bull. Math. Biophys*, no. 15, pp. 311-338, 1953.
5. **Keller E. F., Segel L. A.** "Model for chemotaxis," *J. Theor. Biol*, vol. 30, pp. 225-234, 1971.
6. **Fatkullin I.** "A study of blow-ups in the Keller–Segel model of chemotaxis," *Nonlinearity*, vol. 26, pp. 81-94, 2013.
7. **Полуэктов Р. А [и др.]** Моделирование почвенных процессов в агроэкосистемах. СПб.: Изд-во СПб. ун-та, 2002. 148 с. [R. A. Poluektov, *et al.*, *Simulation of soil processes in agro-ecosystems*, (in Russian). SPb: Izd-vo SPbU, 2002.]
8. **Шамаева А. А.** Исследование процессов биоремедиации почв и объектов, загрязненных нефтяными углеводородами: автореф. дис. канд. биол. наук. Уфа, 2007. 13 с. [A. A. Shamaeva, *Examination of processes and soil bioremediation of sites contaminated with petroleum hydrocarbons*, (in Russian), avtoreferat dis. cand. biological sciences. Ufa, 2007.]
9. **Sourjik V., Wingreen N. S.** "Responding to chemical gradients: bacterial chemotaxis," *Curr. Opin. Cell. Biol*, vol. 24, pp. 262-268, 2012.

ОБ АВТОРАХ

ВОДОПЬЯНОВ Владимир Васильевич, проф. каф. математики. Дипл. мат. (Казанск. гос. ун-т, 1972). Д-р техн. наук по мат. моделированию (УГАТУ, 2008). Иссл. в обл. мат. моделей в антропогенно нарушенных биосистемах.

ВОДОПЬЯНОВА Лия Лизмовна, асп. каф. выч. техн. и защиты информации. Дипл. инж.-мат. (УГАТУ, 2009), м-р прикл. мат. и информатики (УГАТУ, 2011). Готовит дис. об анализе мат. моделей антропогенно нарушенных биосистем.

METADATA

About authors:

VODOPYANOV, Vladimir Vasil'evich, Prof., Dept. of Mathematics. Dipl. Mathematician (Kazan State Univ., 1972), Dr. of Tech. Sci. (UGATU, 2008).

VODOPYANOVA, Liya Lizmovna, graduate student Dept. of Computer Engineering and Information Protection, Dipl. Engineering & mathematics (USATU, 2009). Master of Applied Mathematics & Computer Science (UGATU, 2011). Prepares dis. on the analysis of the math. models of anthropogenically disturbed biosystems.