

В. В. ВОДОПЬЯНОВ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧИСЛЕННОСТИ МИКРООРГАНИЗМОВ И БИОДЕГРАДАЦИИ НЕФТИ В ПОЧВЕ

Построена математическая модель динамики изменения численности микроорганизмов в нефтезагрязненной почве и процессов биодеградации нефти. Показано хорошее согласование полученной модели с экспериментальными данными. *Математическая модель; нефтезагрязненная почва; микроорганизмы; биодеградация нефти*

ВВЕДЕНИЕ

Почва является сложной биологической системой, находящейся в динамическом равновесии. Нарушение этого равновесия зачастую связано с промышленной деятельностью человека. В настоящее время самыми распространенными загрязнителями окружающей среды являются нефть и ее производные: попадая в почву, они нарушают экологическое равновесие биоты. В первую очередь токсическое действие нефтепродукты оказывают на сложившийся в почве комплекс микроорганизмов. Как указывает Н. С. Паников [1], математическим моделям поведения микроорганизмов в почве не уделялось должного внимания, что связано со сложностью процессов, протекающих в почве, и невозможностью, в связи с этим, описать их достаточно простыми математическими моделями. Систематические исследования по математическому моделированию микробиологических процессов в почве проведены Н. С. Паниковым. Итоги этих исследований обобщены в монографии [2]. В ней проведен тщательный анализ развития математического моделирования кинетики микроорганизмов и приведены результаты комплексных исследований по построению математических моделей, описывающих кинетику роста микроорганизмов в различных условиях. Показано, что при переходе к реальным природным системам полученные математические модели, выражая общие закономерности, требуют существенного изменения.

1. СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА

Рассмотрение моделей динамики разложения загрязнителя и изменения численности микроорганизмов показывает, что, в основном, они строятся по схеме обобщения математических моделей кинетики потребления субстрата и роста биомассы микроорганизмов [2]. Анализ моделей динамики разложения загрязнителей, внесенных в почву, показывает [2-4], что они слишком упрощены и не могут адекватно описывать процессы, протекающие в нефтезагрязненной почве. При этом они не приспособлены к описанию динамики изменения численности микроорганизмов в нефтезагрязненной почве.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В последние годы в качестве моделей изучались системы уравнений, учитывающие процессы диффузии как поллютантов, так и микроорганизмов. Рассматриваются системы вида [5]:

$$\begin{cases} mS \frac{\partial C}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm q_1 \frac{\partial C}{\partial x} - \beta J(M, C) \\ \frac{\partial M}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 M}{\partial x^2} \pm q_2 \frac{\partial M}{\partial x} + J(M, C) - f(M) \end{cases} \quad (1)$$

где C – концентрация поллютанта;
 M – концентрация биомассы микроорганизмов;
 t – время;
 x – направление оси диффузии;
 D – эффективные коэффициенты диффузии загрязнителя и биомассы;
 q – конвективный поток субстанции;
 β – количество поллютанта, разлагаемое 1-м граммом биомассы микроорганизмов;

m – пористость почвы;

S – влагонасыщенность почвы.

Как показано в ряде работ (см., например, [6]) система (1) достаточно хорошо описывает диффузионные процессы загрязнителя. Вместе с тем вопрос о функциях $J(M, C)$ и $f(M)$ практически не изучался. В качестве $J(M, C)$ часто брали двухчленное уравнение Моно:

$$J(M, C) = \mu \frac{C}{K_1 + C} \cdot \frac{M}{K_2 + M}, \quad (2)$$

а в качестве $f(M)$ – линейную функцию.

С учетом того, что в модельных опытах почва, как правило, перемешивается, при разработке модели мы не учитывали уравнения, описывающие процессы распространения и фильтрации нефти в почве, концентрация нефти в изучаемом слое предполагалась постоянной по глубине. В этом случае система дифференциальных уравнений приобретает вид:

$$\begin{cases} mS \frac{\partial C}{\partial t} = -\beta J(M, C) \\ \frac{\partial M}{\partial t} = J(M, C) - f(M) \end{cases} \quad (3)$$

и проблема отыскания функций $J(M, C)$, $f(M)$ приобретает первостепенное значение. Отметим также, что предположение о постоянстве концентрации нефти по профилю почвы имеет актуальность и в связи с тем, что микробиологические процессы рассматриваются в течение длительного срока, когда процессы диффузии нефти уже в основном завершены и не играют большой роли.

в первые 3 сут. после загрязнения около половины микроорганизмов при высоких дозах загрязнения);

2) неодинаковая реакция разных групп микроорганизмов на различные концентрации нефти в почве (отмирание в одном случае, и рост в другом).

Необходимо также учитывать закономерности в общей динамике изменения численности микроорганизмов. Анализ многочисленных исследований показывает, что процесс изменения биомассы микроорганизмов в нефтезагрязненной почве имеет пять стадий (рис. 1): взрывообразного отмирания, адаптации, линейного и экспоненциального роста, стабилизации. Вполне естественно, что продолжительность стадий и их уровней зависит от рассматриваемого типа микроорганизмов и концентрации загрязнения.

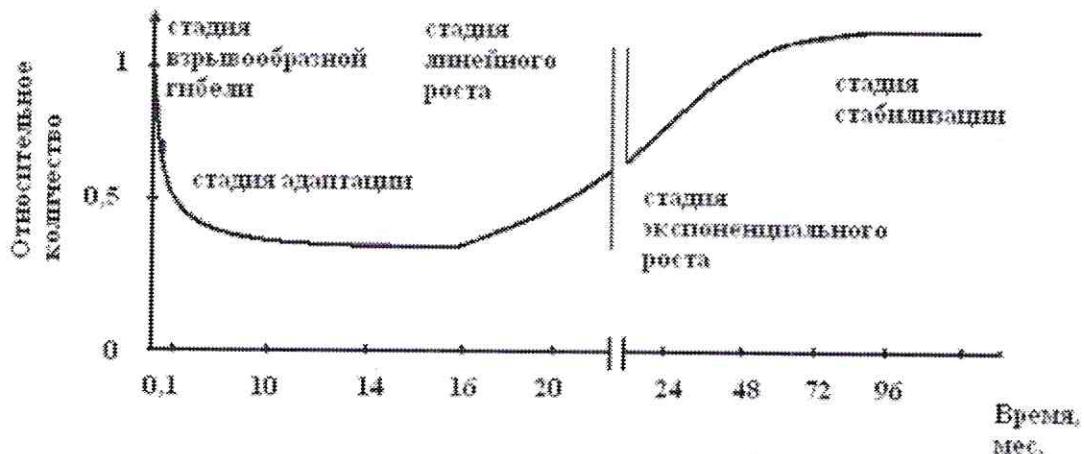


Рис.1. Динамика изменения численности микроорганизмов в почве, загрязненной высокими дозами нефти

3. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

В течение ряда лет нами проводилось математическое моделирование процессов изменения численности микроорганизмов и биодеградации нефти в почве [7-11]¹. В результате этих исследований был установлен ряд принципиальных моментов как для динамики численности микроорганизмов, так и для процессов биодеградации нефти в почве.

Математическая модель развития микроорганизмов в нефтезагрязненной почве должна учитывать два установленных многими исследователями фактора [9, 12]:

1) взрывообразное отмирание микроорганизмов в начальный период загрязнения нефтью (отмирание

нителя. Стадия взрывообразного отмирания при низких концентрациях поллютанта может вообще отсутствовать, а стадия стабилизации практически никогда не совпадает с уровнем численности микроорганизмов в незагрязненной почве и в течение еще многих лет идет сближение этих уровней.

В наших работах была также подтверждена концепция этапности деградации нефти в почве [13]. На основании результатов была построена двухкомпонентная математическая модель разложения нефти в почве и сделаны следующие выводы:

1) около 25% нефти в почве разлагается без участия микрофлоры почвы, такая же часть нефти разлагается в почве за счет микрофлоры, существовавшей в почве до внесения нефти. Оставшаяся часть нефти разлагается в почве за счет микрофлоры, которая сохраняется и развивается в нефтезагрязненной почве, что подчеркивает важность развития естественных микроорганизмов в нефтезагрязненной почве и необходимость активизации их метаболической деятельности за счет внесения различных биостимуляторов.

2) в первый год после загрязнения микрофлора, продолжающая функционировать в почве, не оказывает существенного влияния на интенсивность раз-

¹ При математическом моделировании биологических процессов, протекающих в нефтезагрязненных почвах, использовались данные, полученные в результате многолетних экспериментов профессором кафедры биохимии и биотехнологии Башкирского государственного университета, доктором биологических наук Н. А. Киреевой и ее учениками. Достаточно полно эти данные отражены в монографии [11].

ложении нефти. В дальнейшем роль микроорганизмов в разложении нефти возрастает, становясь постепенно основным фактором разложения нефти.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На основании сформулированных принципов перейдем к построению модели. Представим модель в виде системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{dM(t)}{dt} = J_1(M, C) \\ \frac{dC_1(t)}{dt} = J_2(M, C) \\ \frac{dC_2(t)}{dt} = J_3(M, C) \\ C(t) = C_1(t) + C_2(t) \end{cases}, \quad (4)$$

где $C(t)$ – концентрация нефти;

$C_1(t)$ – концентрация части нефти, разлагаемой под воздействием биологических факторов почвы;

$C_2(t)$ – концентрация части нефти, разлагаемой под воздействием физико-химических факторов

$M(t)$ – концентрация биомассы микроорганизмов;

t – время, в мес.

При отыскании функции $J_1(M, C)$ используем аддитивный учет действия трех факторов. Первое слагаемое учитывает взрывообразный характер гибели микроорганизмов в течении 3-х дней после загрязнения:

$$-\frac{\tau M(t)C(t)}{(t+0,9)^4}. \quad (5)$$

Вид этой функции был экспериментально определен в работе [9] и показал хорошее согласование экспериментальных данных с расчетом. Данная функция в уравнении отвечала за взрывообразное отмирание микроорганизмов в течении 3 дней после загрязнения. При $t > 0,1$ влияние этого слагаемого на динамику численности микроорганизмов было несущественным.

Второе слагаемое учитывает гибель микроорганизмов в зависимости от концентрации нефти и биомассы микроорганизмов в виде произведения логистической функции для микроорганизмов и функции Моно для нефти:

$$-\beta \frac{M(t)(M_0 - M(t))(C(t) - \gamma)}{(K_1 + M(t))(K_2 + C(t))}, \quad (6)$$

где M_0 – концентрация биомассы микроорганизмов в начальный момент. Константа γ определяла уровень загрязнения, ниже которого нефть выступала стимулятором почвенной микробиоты.

Наконец, третье слагаемое описывало логистический рост биомассы микроорганизмов:

$$\alpha \frac{M(t)(M_0 - M(t))}{K_1 + M(t)}. \quad (7)$$

При этом было сделано допущение, что первоначальная концентрация биомассы микроорганизмов M_0 установилась после достаточно длительного времени функционирования микробиоты и является уровнем насыщения для данной экологической ниши.

Функцию $J_2(M, C)$ представляли в виде суммы двух слагаемых. Первое из них учитывало установленный ранее факт зависимости скорости разложения нефти в почве от первоначальной концентрации микроорганизмов в почве:

$$-\lambda M_0 C_1(t). \quad (8)$$

Второе слагаемое искалось как произведение двух функций Моно:

$$-\mu \frac{M(t)}{K_1 + M(t)} \cdot \frac{C_1(t)}{K_2 + C_1(t)}. \quad (9)$$

Данное слагаемое отвечало за фактор влияния сохранившихся микроорганизмов на скорость разложения нефти: коэффициент μ определяет скорость биодеградации нефти (коэффициент биодеградации).

Последняя функция задавалась с учетом простого разложения нефти под действием физико-химических факторов: $J_3(M, C) = -\delta C_2(t)$.

Таким образом, с учетом вышесказанного, математическая модель динамики численности микроорганизмов и разложения нефти в почве записывалась в виде следующей системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dM(t)}{dt} = M(t) \times \left(\alpha \frac{M_0 - M(t)}{K_1 + M(t)} - \right. \\ \left. - \beta \frac{(M_0 - M(t))(C(t) - \gamma)}{(K_1 + M(t))(K_2 + C(t))} - \frac{\tau C(t)}{(t+0,9)^4} \right) \\ \frac{dC_1(t)}{dt} = -C_1(t) \times \left(\lambda M_0 + \right. \\ \left. + \mu \frac{M(t)}{K_1 + M(t)} \cdot \frac{C_1(t)}{K_2 + C_1(t)} \right) \\ \frac{dC_2(t)}{dt} = -\sigma C_2(t) \\ C(t) = C_1(t) + C_2(t) \end{cases} \quad (10)$$

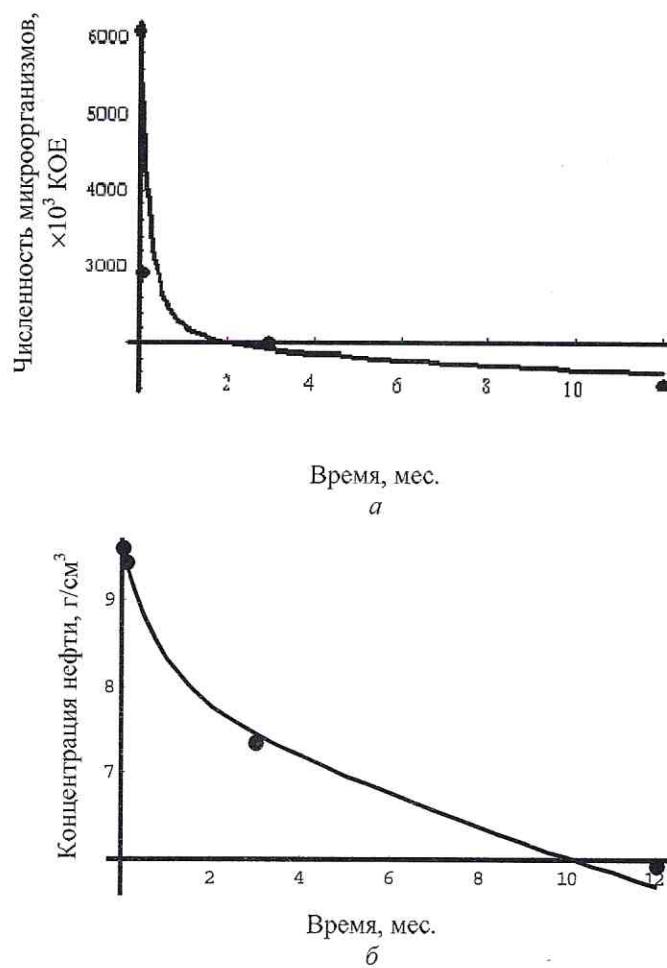


Рис. 2. Динамика изменения численности микроорганизмов в нефтезагрязненной почве (*а*) и биодеградации нефти (*б*): точками отмечены экспериментальные результаты, кривые рассчитаны по математической модели (10). Значения коэффициентов: $\alpha = 0,015$; $\beta = 0,28$; $\delta = 1,13$; $\lambda M_0 = 0,017$; $\sigma = 0,78$; $\mu = 0,5$; $\tau = 2,4$; $\gamma = 2$; $K_1 = 1$; $K_2 = 50$

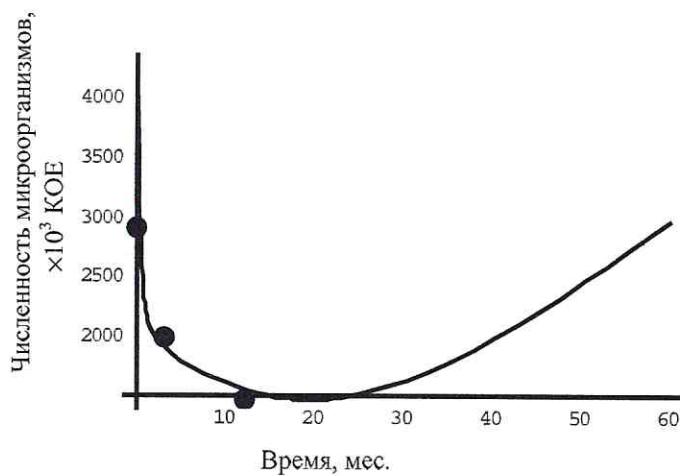


Рис.3. Изменение численности микроорганизмов, рассчитанное по математической модели (10) (прогноз на 5 лет)

Начальные условия задавались следующим образом: $M(0) = M_0$, $C(0) = C_0$, $C_1(0) = \sigma C_0$, $C_2(0) = (1 - \sigma)C_0$. Коэффициент σ определял часть нефти, разлагаемую с помощью только биологических факторов. Система дифференциальных уравнений (10) учитывала все отмеченные выше моменты как в функционировании микробиоты в почве, так и разложении нефти. Для отыскания коэффициентов системы (10) использовались данные экспериментов, использованные в работах [7-11], при этом коэффициенты подбирались с учетом ранее полученных оценок так, $\sigma = 0,78$, $\delta = 1,13$ и т. д., что соответствовало значениям сходных коэффициентов в ранее рассматриваемых математических моделях.

При численном решении системы использовали пакет Mathematica.

В результате было получено решение, которое хорошо согласовывалось с экспериментальными данными (рис. 2).

Расчет, проведенный по математической модели (10) в качестве прогноза на 5 лет, показал (рис. 3), что и в этом случае модель отражает поведение микробиоты почвы при длительном загрязнении нефтью почвы.

Присутствие в первом уравнении логистических сомножителей показывает, что через определенное время рост численности микроорганизмов замедляется и произойдет ее стабилизация на определенном уровне.

5. ПРИЛОЖЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для описания управления процессом биодеградации нефти в почве при внесении биопрепараторов, содержащих различные комплексы углеводородразлагающих микроорганизмов, может быть применена система уравнений

$$\begin{cases} \frac{dM(t)}{dt} = M(t) \times \left(\alpha \frac{(M_0 - M(t))}{K_1 + M(t)} - \right. \\ \left. - \beta \frac{(M_0 - M(t))(C(t) - \gamma)}{(K_1 + M(t))(K_2 + C(t))} - \frac{\tau C(t)}{(t + 0,9)^4} + U(t) \right) \\ \frac{dC_1(t)}{dt} = -C_1(t) \times (\lambda M_0 + \\ + \mu \frac{M(t)}{K_1 + M(t)} \cdot \frac{C_1(t)}{K_2 + C_1(t)}) \\ \frac{dC_2(t)}{dt} = -\sigma C_2(t) \\ C(t) = C_1(t) + C_2(t) \end{cases} \quad (11)$$

где $U(t)$ – управляющее воздействие на почвенную микробиоту. Однако введение управляющей функции как слагаемого в первом уравнении системы (11) оказывается недостаточным, что показывают расчеты на ЭВМ и сравнение с фактическими данными. При биодеградации меняется структура комплекса микроорганизмов в почве: вносятся углеводородраз-

лагающие микроорганизмы, численность которых в аборигенном комплексе микроорганизмов незначительна.

Увеличение биомассы углеводородразлагающих микроорганизмов приводит к существенному ускорению биодеградации нефти. Учесть это ускорение возможно введением управляющего воздействия на коэффициент биодеградации нефти μ , и для моделирования процессов управления биологической деградации нефти наиболее приспособлена система дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dM(t)}{dt} = M(t) \times \left(\alpha \frac{(M_0 - M(t))}{K_1 + M(t)} - \right. \\ \left. - \beta \frac{(M_0 - M(t))(C(t) - \gamma)}{(K_1 + M(t))(K_2 + C(t))} - \frac{\tau C(t)}{(t + 0,9)^4} + U(t) \right) \\ \frac{dC_1(t)}{dt} = -C_1(t) \times (\lambda M_0 + \\ + \mu \frac{M(t)}{K_1 + M(t)} \cdot \frac{C_1(t)}{K_2 + C_1(t)}) \\ \frac{dC_2(t)}{dt} = -\sigma C_2(t) \\ C(t) = C_1(t) + C_2(t) \end{cases} \quad (12)$$

ВЫВОДЫ

Таким образом, построенная математическая модель (10) адекватно с биологической точки зрения описывает динамику изменения численности микроорганизмов в нефтезагрязненной почве и процессы биодеградации нефти, дает хорошее совпадение с экспериментальными данными.

Из модели вытекает, что фактически единственным способом ускорения биодеградации нефти в почве является стимулирование аборигенной микробиоты либо за счет стимулирующих добавок, либо внесением углеводородусваивающей ассоциации микроорганизмов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Паников, Н. С. Математическое моделирование роста микроорганизмов в почве / Н. С. Паников // Научн. докл. высш. шк. Биологические науки. 1988. № 12. С. 58–66.
- Паников, Н. С. Кинетика роста микроорганизмов / Н. С. Паников. М. : Наука, 1991. 311 с.
- Гиммельфарб, А. А. Динамическая теория биологических популяций / А. А. Гиммельфарб, Л. Р. Гинзбург, Р. А. Полуэктов, Ю. А. Пых, В. А. Ратнер. М. : Наука, 1974. 456 с.
- Петросян, Л. А. Математические модели в экологии / Л. А. Петросян, В. В. Захаров. СПб. : Изд-во СПБГУ, 1997. 256 с.

5. Смагин, А. В. Режимы функционирования динамики биокосных систем / А. В. Смагин // Почвоведение. 1999. № 12. С. 1433–1447.
6. Шеин, Е. В. Перенос микроорганизмов в почве: физико-химический подход и математическое описание / Е. В. Шеин, Л. М. Полянская, Б. А. Девин // Почвоведение. 2002. № 5. С. 564–573.
7. Водопьянов, В. В. Моделирование биодеградации нефти в почве микроорганизмами / В. В. Водопьянов, Н. А. Киреева, Т. С. Онегова, Н. В. Жданова // Нефтяное хозяйство. 2002. № 12. С. 128–130.
8. Киреева, Н. А. Математическое моделирование биодеградации нефти в почве / Н. А. Киреева, В. В. Водопьянов // Биотехнология. 1996. № 8. С. 55–59.
9. Киреева, Н. А. Математическое моделирование микробиологических процессов в нефтезагрязненных почвах / Н. А. Киреева, В. В. Водопьянов // Почвоведение. 1996. № 10. С. 1222–1226.
10. Киреева, Н. А. Математическое моделирование процессов разложения нефти в почве / Н. А. Киреева, В. В. Водопьянов // Башкирский химический журнал. 1996. Т. 3, вып. 5–6. С. 68–69.
11. Киреева, Н. А. Биологическая активность нефтезагрязненных почв / Н. А. Киреева, В. В. Водопьянов, А. М. Миахаева. Уфа : Гилем, 2001. 356 с.
12. Исмаилов, Н. М. Нефтяное загрязнение и биологическая активность почв / Н. М. Исмаилов // Добыча полезных ископаемых и геохимия природных экосистем. М. : Наука, 1982. С. 227–235.
13. Пиковский, Ю. И. Природные и техногенные потоки углеводородов в окружающей среде / Ю. И. Пиковский. М. : МГУ, 1993. 207 с.