

Математическая модель прогноза экологической безопасности источников воды*

Н.П. Коптев, докторант, канд. техн. наук¹

Ю.В. Сметанников**, профессор, д-р хим. наук¹

В.А. Зайцев, профессор, д-р техн. наук¹

Е.А. Лукашов, профессор, д-р техн. наук²

¹ Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

² Российский государственный университет туризма и сервиса

e-mail: smetyv@mail.ru

Ключевые слова:

водоисточники,
моделирование,
квазиравновесие,
метаболизм.

Предложены методы математического моделирования отдельных механизмов самоочищения водоемов, а также модели, учитывающие воздействие токсикантов на течение биологических процессов. Получены зависимости, отражающие характер реакции системы на внутренние и внешние факторы. Полученные результаты качественно верно описывают эволюцию системы «биомасса – ресурс», что позволяет при сопоставлении решений уравнений модели и экспериментальных данных провести расчет кинетических констант модели.

1. Введение в проблему

Процессы самоочищения водоемов помогают ликвидировать последствия поступления в них бытовых и производственных сточных вод. Изучение механизмов самоочищения, в том числе методами математического моделирования, позволяет выявить его составляющие, которые поддаются регулированию инженерными решениями [1, 2].

Для эффективного использования методов математического моделирования необходима их дальнейшая разработка по описанию отдельных сторон процессов [3–4], а также моделей, учитывающих воздействие токсикантов на течение биологических процессов [5–9].

Математическое моделирование широко используется для моделирования гидрологических, физико-химических, биохимических и микробиологических процессов в водоемах [10].

2. Математическая модель

Для каждого водоема устанавливается определенный уровень обмена веществ, определяемый на основании данных о массе организмов, продуцируемой

за определенный промежуток времени. На первом этапе биотического круговорота в водоеме накапливается некоторое количество первичной продукции органических веществ в процессе фотосинтеза и хемосинтеза. Количественными критериями этого процесса являются первичная продукция, эффективность утилизации солнечной энергии при фотосинтезе планктона и температура. Большое значение в процессах деструкции органических веществ имеет насыщение воды кислородом, чему способствует ветровое перемешивание. Из водоема организмами извлекаются многие соли и биогенные элементы: железо, кремний, минеральные формы соединений углерода, азота и фосфора. Биогены и поток энергии способствуют более полному усвоению организмами органических загрязнений [1].

Трофические цепи в биоценозах представляются комбинациями взаимодействий типа «ресурс — потребитель» [10]. В процессах микробиологического синтеза это процессы типа «субстрат — фермент» [11, 12]. При описании таких взаимодействий в математической экологии (процессы типа «хищник — жертва»

* Статья представлена член-корр. РАН, д-ром хим. наук, профессором Тарасовой Н.П.

** Во время подготовки статьи к публикации ушел из жизни проф. Сметанников Ю.В., это его последняя статья. Редакция выражает соболезнования родным, близким и коллегам Юрия Владимировича.

[13—15]) введены понятия удельной скорости прироста биомассы μ (размножение особей) и удельной скорости потребления субстрата j (также и потребление жертв хищниками). Считается, что удельные скорости описываются полуэмпирическими зависимостями, так как отсутствует строгая теория этих процессов [16]. Форма зависимостей часто обосновывается простейшими механизмами сложных биологических взаимодействий, например, по типу законов химической кинетики — закона действующих масс, с учетом конкретных особенностей [16, 17]. За критерий выбора этих зависимостей принимается соответствие результатам эксперимента и натурных наблюдений.

Удельные скорости определяются уравнениями:

$$\mu = \frac{1}{N} \frac{dN}{dt}, \quad (1)$$

$$\phi = \frac{1}{N} \frac{dS}{dt}, \quad (2)$$

где N — концентрация микроорганизмов (биомассы), S — концентрация субстрата. Между величинами μ и ϕ существует взаимосвязь, которая задается экономическим коэффициентом [18]:

$$\gamma = \frac{\mu}{\phi} = \frac{dN}{dS}. \quad (3)$$

Для стационарных режимов или при слабом изменении соотношения потоков коэффициент γ принимают постоянным ($\gamma = \text{const}$). Эта величина показывает долю субстрата, который расходуется на прирост биомассы (конструктивный метаболизм). Величина $1 - \gamma$ характеризует долю субстрата, расходующегося на обеспечение энергетических потребностей метаболизма. Физико-химические и микробиологические аспекты данного представления обобщены в [19].

В общем виде скорость потребления субстрата задается уравнением:

$$\frac{dS}{dt} = J(S) f(N), \quad (4)$$

где $J(S)$ — удельный поток субстрата, приходящийся на единичную поверхность контакта клеток со средой, $f(N)$ — удельная поверхность контакта, рассчитанная на единицу объема реактора. Из (2) и (4) следует, что удельная скорость потребления субстрата составит:

$$\phi = J(S) \frac{f(N)}{N}. \quad (5)$$

Для процесса с суспензией отдельных клеток примем:

$$f(N) = \sigma N, \quad (6)$$

где σ — средняя поверхность одной клетки. В этом случае:

$$\phi(S) = \sigma J(S). \quad (7)$$

Предположим, что выражения (4)–(7) справедливы для каждого субстрата многосубстратной системы.

В общем виде, при отсутствии равнодоступности в диффузионных процессах для целей технологии и проектирования принимают

$$f(N) = \sigma N^\beta, \quad (8)$$

где $\beta \leq 1$. Показатель β отражает наличие диффузионных ограничений в системе, поэтому зависит от геометрии зоны реакции (реактора, лабораторных и природных биоценозов) и гидродинамической обстановки.

Неоднозначность между поверхностью контакта «клетка — среда» и биомассой проявляется также при различии условий обитания, например, поверхностных и глубинных микроорганизмов. Относительные доли этих микроорганизмов определяются величинами

$$\frac{\lambda\Phi}{\Omega} \text{ и } 1 - \frac{\lambda\Phi}{\Omega}, \quad (9)$$

где λ — средняя толщина поверхностного слоя, Φ — суммарная поверхность биомассы, Ω — объем биомассы. В общем случае:

$$\Phi \propto N^\beta; \quad \Omega \propto N, \quad (10)$$

откуда:

$$\frac{\Phi}{\Omega} = \chi N^{\beta-1}. \quad (11)$$

Если принять за μ_F и μ_H соответственно удельные скорости роста на поверхности и на глубине, тогда удельная скорость роста биоценоза (сумма поверхностных и глубинных микроорганизмов) составит:

$$\mu = \frac{1}{N} \left(\frac{dN}{dt} \right) = \frac{\lambda\Phi}{\Omega} \mu_F + \left(1 - \frac{\lambda\Phi}{\Omega} \right) \mu_H. \quad (12)$$

Использование (11) дает:

$$\mu = \chi N^{\beta-1} \mu_F + \mu_H - \chi N^{\beta-1} \mu_H = \mu_H + \chi N^{\beta-1} (\mu_F - \mu_H). \quad (13)$$

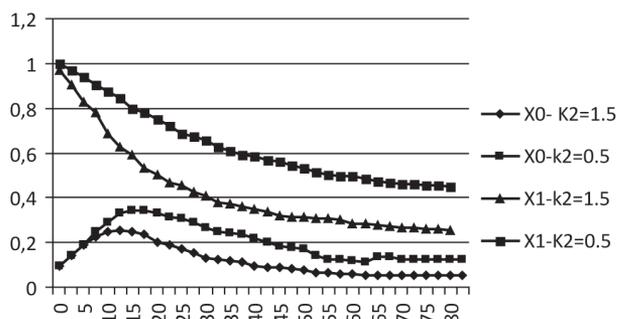


Рис. 1. Изменения кривых роста биомассы x_0 , потребления субстрата x_1 в зависимости от значений кинетической константы k_2 : $k_2 = 1,5$ и $k_2 = 0,5$ ($k_1 = 2,0$, $K_A = 2,0$; начальные условия: $x_0 = 0,1$; $x_1 = 0,99$).

Итак, в соответствии с общим понятием коэффициента (3) следует разделять потребности на энергетический и конструктивный метаболизм. Энергетический метаболизм фотоавтотрофных микроорганизмов покрывается за счет световой энергии, которую также можно рассматривать как ресурс. Однако на первом этапе, по-видимому, проще начать исследование с хемоорганотрофов.

Субстрат при росте биомассы у гетеротрофных организмов потребляется на конструктивный и энергетический метаболизм. Будем полагать, что существует некоторое соотношение между этими формами метаболизма, сводящееся к некоторой не вполне жесткой стехиометрии. Таким образом, взаимодействие двух объектов конструктивного и энергетического метаболизма можно представить в виде квазихимической реакции, результатом которой является прирост концентрации биомассы:



где A — компонент энергетического метаболизма, B — компонент конструктивного метаболизма, C — биомасса, концентрации которых обозначим соответственно x_2, x_1, x_0 . Для компонента энергетического метаболизма можно записать уравнение кинетики:

$$\frac{dx_2}{dt} = -k_{AB}x_2x_1 + k_Cx_0, \quad (15)$$

где k_{AB}, k_C — константы скорости прямой и обратной квазихимических реакций (15). Это уравнение показывает, что с ростом концентрации биомассы растут энергетические потребности микроорганизмов (конкуренция за пищевой ресурс), а также то, что с ростом концентрации пищевых ресурсов, потребляемых на конструктивный и энергетический метаболизм, энергетические потребности на добычу ресурса снижаются. В силу предполагаемой стехиометрии можем

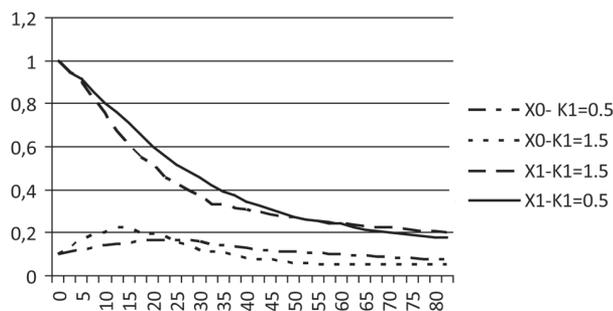


Рис. 2. Изменения кривых роста биомассы x_0 , потребления субстрата x_1 в зависимости от значений кинетической константы k_1 : $k_1 = 1,5$ и $k_1 = 0,5$ ($k_2 = 2,0$, $K_A = 2,0$, начальные условия: $x_0 = 0,1$; $x_1 = 0,99$).

полагать, что реализуется квазиравновесие между потреблением этих ресурсов. Тогда, хотя x_2 и будет меняться во времени, однако эти изменения будут происходить синхронно изменениям x_0 и x_1 , т.е. переменная x_2 не является независимой, а есть функция независимых переменных x_0 и x_1 :

$$x_2 = K_A \frac{x_0}{x_1}, \quad (16)$$

где $K_A = k_C/k_{AB}$.

В данной работе формулировка задач исследования зависимости потребляемого ресурса на метаболизм поддержания (x_2), от концентрации биомассы (x_0) и концентрации наличного ресурса (x_1) изменена по сравнению с задачами, рассмотренными в [4]. Здесь зависимость x_2 от x_0 и x_1 представлена не в виде дифференциального, а в виде алгебраического уравнения (16), которое отражает характер реакции системы на внутренние и внешние факторы. Предполагается, что ресурс, расходуемый на метаболизм поддержания, прямо пропорционален концентрации биомассы и обратно пропорционален концентрации субстрата (ресурса). Эта закономерность отражает ситуацию, когда при росте численности популяции энергетические затраты на потребление ресурса растут (например, на его поиск, который требует затрат времени и, соответственно, ресурса на этот период). В то же время при наличии большой концентрации ресурса эта зависимость должна сказываться в меньшей степени.

Система кинетических уравнений имеет вид:

$$\frac{dx_0}{dt} = k_1 \left(x_1 - K_A \frac{x_0}{x_1} \right) x_0; \quad \frac{dx_1}{dt} = -k_2 x_0 x_1. \quad (17)$$

Решения этой задачи в зависимости от значений кинетических констант проиллюстрированы на рис. 1, 2. Модель (17) имеет одну существенную особенность: она дает продолжительную стационарную

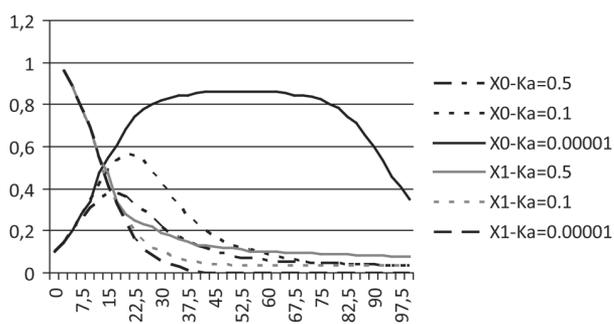


Рис. 3. Иллюстрация изменения кривых роста биомассы x_0 , потребления субстрата x_1 в зависимости от значений константы $K_A = 0,5; 0,1; 0,00001$ ($k_1 = 1,5, k_2 = 2,0$, начальные условия: $x_0 = 0,1; x_1 = 0,99; x_2 = 0,1$).

фазу, что явно видно на рис. 3. Уменьшение константы K_A приводит к увеличению длительности стационарной фазы. Это поведение вполне укладывается в логику системы, так как малые значения константы K_A означают, что, во-первых, микроорганизмы затрачивают мало ресурса на метаболизм поддержания; во-вторых, увеличение плотности популяции не сильно сказывается на потреблении ресурса на метаболизм поддержания, что означает малую «жесткость» внутривидовой конкуренции.

Выражение (17) предполагает квазиравновесие между ресурсами, потребляемыми на конструктивный и энергетический метаболизм в соответствии с квазихимической реакцией (14). Для проведения анализа уравнения (17) положим, что отношение констант k_1 / k_2 представляет собой экономический коэффициент γ . Тогда константа квазиравновесия K_A , отражающая долю ресурса, потребляемого на метаболизм поддержания (энергетический метаболизм), составит $1 - \gamma$, или $K_A = 1 - k_1 / k_2$.

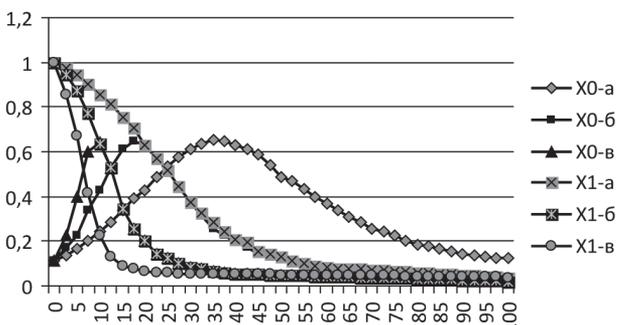


Рис. 5. Влияние изменения кинетических констант k_1 и k_2 и константы равновесия K_A на зависимость изменения концентрации биомассы и ресурса в модели (17) (начальные условия: $x_{0,A} = 0,1, x_{1,A} = 1,0$, значения констант: $K_A = 0,1$; (а) $k_1 = 0,9; k_2 = 1,0$; (б) $k_1 = 1,8; k_2 = 2,0$; (в) $k_1 = 3,6; k_2 = 4,0$).

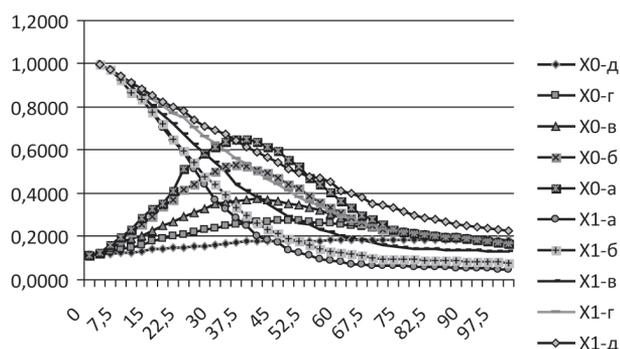


Рис. 4. Влияние изменения кинетической константы k_1 и константы равновесия K_A на зависимость изменения концентрации биомассы и ресурса в модели (17) (начальные условия: $x_{0,A} = 0,1, x_{1,A} = 1,0$; значения констант: $k_2 = 1,0$; (а) $k_1 = 0,9; K_A = 0,1$; (б) $k_1 = 0,8; K_A = 0,2$; (в) $k_1 = 0,6; K_A = 0,4$; (г) $k_1 = 0,4; K_A = 0,6$; (д) $k_1 = 0,2; K_A = 0,8$).

Анализ данного выражения при этих соотношениях констант показывает (рис. 4), что уменьшение константы k_1 с 0,9 до 0,2 и, соответственно, увеличение константы K_A с 0,1 до 0,8 при постоянном значении константы $k_2 = 1$ приводит к тому, что рост биомассы и ее отмирание замедляются. Также замедляется потребление субстрата.

При постоянном значении экономического коэффициента $\gamma = 0,9$ и параметра $1 - \gamma = 0,1$, но при пропорциональном увеличении констант k_1 и k_2 , соответственно, с 0,9 до 3,6 и с 1,0 до 4,0 скорость роста биомассы и потребления субстрата увеличиваются. Биомасса при больших значениях k_1 и k_2 отмирает из-за недостатка ресурса быстрее (рис. 5). Изменение масштаба показывает, что кривые роста и отмирания биомассы и потребления субстрата аналогичны. Таким образом, данное изменение кинетических констант модели говорит о подобных процессах, идущих с разными скоростями.

Расчеты показывают, что при уменьшении параметра $1 - \gamma$ одно и то же количество субстрата дает большую биомассу, т.е. увеличение экономического коэффициента γ увеличивает и прирост биомассы. Кроме того, отмирание биомассы при больших значениях γ начинается позднее, а на кривых фиксируется стационарная фаза. Продолжительность этой фазы прямо пропорциональна значению экономического коэффициента и обратно пропорциональна доле субстрата, потребляемого на эндогенный метаболизм.

Та же закономерность проявляется и при других начальных условиях, но при том же соотношении кинетических констант. Кроме того, малое значение начальной концентрации биомассы $x_{0,A} = 0,001$ приводит к тому, что модель фиксирует наличие лаг-фазы — начальной фазы замедленного роста.

3. Заключение

Таким образом, предварительный анализ выражения (17) показал, что оно качественно верно представляет эволюцию системы «биомасса — ресурс»,

а дальнейший анализ может заключаться в расчетах кинетических констант модели сопоставлением решений уравнений модели и экспериментальных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. Синельников В.Е. Механизм самоочищения водоемов (Охрана окружающей среды). — М.: Стройиздат, 1980.
2. Вавилин В.А. Нелинейные модели биологической очистки и процессов самоочищения в реках. — М.: Наука, 1983. — С. 158.
3. Ламари К.М. Математические модели кинетики биотрансформации органических веществ сточных вод коммунального хозяйства: дис. ... канд. техн. наук. — М.: МГУС, 2004.
4. Лукашев Е.А., Ламари К.М. Квазихимические уравнения микробиологической кинетики. 2. Вывод и обоснование уравнения ингибирования высокими концентрациями субстрата // Теоретические и прикладные проблемы сервиса. — 2004. — № 1 (10). — С. 20–28.
5. Еришов Ю.А. Теория цепного роста и ингибирования биологических популяций химическими агентами // Доклады РАН. — 1997. — Т. 352. — № 5. — С. 1–4.
6. Еришов Ю.А. Термодинамика квазиравновесий в биологических системах. — М.: ВИНТИ, 1983.
7. Еришов Ю.А. Экоотоксикологические модели и прогнозирование токсических воздействий на биосистемы // Труды конф. «Математика, компьютер, образование». — Дубна, 1996. — С. 132–137.
8. Еришов Ю.А., Плетнева Т.В., Глуценко Н.Н., Подстанничий С.В. Фармакокинетика эндогенных веществ в биообъектах // Химико-фармацевтический журнал. — 1993. — № 8. — С. 3–5.
9. Еришов Ю.А., Есменская Н.Б., Плетнева Т.В. Оценка токсического действия некоторых лекарственных препаратов серебра на культуре инфузорий *Paramecium caudatum* // Химико-фармацевтический журнал. — 1995. — № 11. — С. 6, 7.
10. Первушин Ю.В., Бобров О.Г. Математическое моделирование систем и процессов биологической очистки стоков // Обзорная информация. — № 2 (93). — М.: НИИТЭХИМ, 1990.
11. Бирюков В.В., Кантере В.М. Оптимизация периодических процессов микробиологического синтеза. — М.: Наука, 1985.
12. Перт С.Д. Основы культивирования микроорганизмов и клеток. — М.: Мир, 1978.
13. Свирежев Ю.М. Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. — М.: Наука, 1987.
14. Абросов Н.С., Боголюбов А.Г. Экологические и генетические закономерности сосуществования видов. — Новосибирск: Наука, 1988.
15. Базыкин А.Д. Математическая биофизика взаимодействующих популяций. — М.: Наука, 1985.
16. Айзатуллин Т.А., Шамардина И.П. Математическое моделирование экосистем континентальных водотоков и водоемов // Итоги науки и техники. Общая экология, биоценология, гидробиология. — М.: ВИНТИ, 1980. — Т. 5. — С. 154–228.
17. Галицкий В.В., Тюрюканов А.Н. О методологических предпосылках моделирования в биогеоценологии // Моделирование биогеоценологических процессов. — М.: Наука, 1981. — С. 29–47.
18. Бейли Дж., Оллис Д. Основы биохимической инженерии. — М.: Мир, 1989. — Т. 1, 2.
19. Минкевич И.Г., Ерошин В.К. Закономерности внутриклеточного материально-энергетического баланса роста микроорганизмов // Успехи современной биологии. — 1976. — Т. 82. — № 1. — С. 103–116.

Mathematical Forecasting Model of Water Sources' Ecological Safety

N.P. Koptev, Ph.D. of Engineering, Candidate for a Doctor's Degree, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

Yu.V. Smetannikov, Doctor of Chemistry, Professor, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

V.A. Zaitsev, Doctor of Engineering, Professor, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia

E.A. Lukashov, Doctor of Engineering, Professor, Russian State University of Tourism and Service

Mathematical modeling techniques of self-cleaning separate mechanisms, and also the models, which consider the impact of toxicants on the course of biological processes are offered. The functions reflecting a system reaction nature on internal and external factors are received.

The obtained results qualitatively correctly describe the "biomass – resource" system evolution, which allows during comparison of model equations' solutions and experimental data to calculate the kinetic constants of model.

Keywords: water sources, modeling, quasi-equilibrium, metabolism.