Н.А. Васильева, Ж.Г. Ингтем, Д.А. Силаев

НЕЛИНЕЙНАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РОСТА МИКРООРГАНИЗМОВ В ПОЧВЕННОЙ СРЕДЕ

Введение

Важное место в вопросе устойчивости биосферы занимает почвенный покров Земли. Биологические процессы, в частности в почве, обладают нелинейной динамикой и создают сложную самоорганизованную систему [1]-[4]. Большинство моделей почвы локальны и сфокусированы либо только на взаимодействии между живыми организмами, либо только между органическими веществами, и при этом абиотические факторы (температура, влажность, пористость структуры) учитываются только как независимые параметры, задаваемые эмпирическими функциями. Структуру порового пространства почвы, являющегося одновременно и результатом и фактором оптимальной жизнедеятельности микроорганизмов и функционирования почвенного покрова в целом, как правило, учитывают только линейно введением эмпирического коэффициента диффузии и влагопроводности, либо при моделировании используют готовую структуру, полученную на основе томографических снимков [5]. Механизм самоорганизации в почве объясняется в основном на качественном уровне, и поэтому попытки ее математического описания представляют интерес.

Предлагаемая математическая модель представляет собой распределенную динамическую систему, содержащую компоненты живой, органической и неорганической природы, связанные основными известными обратными связями (дающими сильную нелинейность системы), позволяющую имитировать различные режимы почвы, с учетом возможности экспериментального измерения переменных и параметров.

Описание модели

Считая, что почвенный агрегат обладает сферической симметрией, рассмотрим динамическую модель почвенной среды на отрезке. Переменными в модели являются: общее количество микроорганизмов (B), количества двух органических субстратов их питания (M_1 и M_2), два важных абиотических фактора - объем пор (E) и доля объема пор, занятая водой (W), два основных газа - кислород (O и углекислый газ (C). Суммарное количество вещества в системе (N), суммарная влажность (w) и суммарный объем всех пор (ϵ) являются параметрами и считаются заданными (в общем случае, могут быть произвольной функцией координаты и времени, далее, рассмотрим частный случай когда N, w, ϵ - константы). Органическое вещество будем различать по сродству к воде: гидрофильное/смачиваемое водой (M_1), нейтральное (M_2 и B) и гидрофобное/отталкивающее воду ($N - M_1 - M_2 - B$).

Рассмотрим уравнение для биомассы микроорганизмов (В):

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_B \left| \frac{\partial B}{\partial x} \right| \frac{\partial B}{\partial x} \right) + (k_1 O + k_2) W M_1 B + k_2 M_2 W (1 - O) B e^{-(k_1 O + k_2) W M_1 / r} - r B \quad (1)$$

Локально скорость роста микроорганизмов пропорциональна влажности (W) и содержанию кислорода (O). Рост микроорганизмов возможен как в аэробных, так и в анаэробных условиях, соответственно с коэффициентами k_1 (в присутствии кислорода) и k_2 (в отсутствии кислорода).

Для роста потребляются субстраты M_1 и M_2 . Гидрофильный субстрат M_1 потребляется как в аэробных, так и в анаэробных условиях, и является основным источником питания в кислородной среде. Субстрат M_2 , считается более труднодоступным и потребляется только в условиях недостатка M_1 (показатель экспоненты равен единице, если скорость роста на субстрате M_1 становится равной скорости дыхания (г), будем считать это состояние критическим для переключения на субстрат M_2). M_2 является основным источником роста в бескислородной среде.

Потеря биомассы с углекислым газом за счет дыхания (поток углерода в виде углекислого газа) протекает с коэффициентом r. Нелокальные изменения происходят за счет диффузии. Нелинейная зависимость коэффициента диффузии вида $D(x, u) = D_0 \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$ моделирует диффузию в вязкой пористой почвенной среде.

Уравнение для гидрофильного субстрата (M_1):

$$\frac{\partial M_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{M_1} \left| \frac{\partial M_1}{\partial x} \right| \frac{\partial M_1}{\partial x} \right) - (k_1 O + k_2) W M_1 B - k_5 (1 - O) \times \\ \times (1 - W) M_1 + (k_3 B + k_4) (OW M_1 M_2 - k_6 (1 - O) (1 - W) M_1)$$
(2)

Изменение количества M_1 также зависит от диффузии и потребления его микроорганизмами согласно уравнению (1). Учитывается абиотический (без участия микроорганизмов) переход в гидрофобное вещество с коэффициентом k_5 (например, в сухих и бескислородных условиях). Источником M_1 является автокаталитическое окисление M_2 (при участии самого M_1). Этот процесс также может происходить с участием и без участия микроорганизмов, соответственно, с коэффициентами k_3 и k_4 . Переход гидрофильного M_1 в нейтральное M_2 (восстановление) также может происходит биотически и абиотически с коэффициентом k_6 , пропорционально (1 - O)(1 - W), т.е. существенно в сухих и/или бескислородных условиях.

Уравнение для нейтрального субстрата (*M*₂):

$$\frac{\partial M_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{M_2} \left| \frac{\partial M_2}{\partial x} \right| \frac{\partial M_2}{\partial x} \right) - k_2 M_2 W (1 - O) B e^{-(k_1 O + k_2) W M_1/r} - (k_3 B + k_4) (OW M_1 M_2 - (1 - O) (1 - W) M_1) + k_s M_1 OW (N - B - M_1 - M_2 - k_c C)$$
(3)

Изменение M_2 зависит от диффузии, потребления его микроорганизмами согласно (1), за счет биотического (k_3) и абиотического (k_4) автокаталитического перехода M_2 в M_1 путем окисления и восстановления M_1 в M_2 согласно (2). Источником M_2 с интенсивностью k_s является гидрофобное вещество ($N - M_1 - M_2 - B$). Источник является сложной функцией координаты и времени от всех зависимых переменных.

Уравнение для содержания кислорода (О) имеет вид:

$$\frac{\partial O}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_O \left| \frac{\partial O}{\partial x} \right| \frac{\partial O}{\partial x} \right) - k_1 OWBM_1 \tag{4}$$

Его количество изменяется за счет диффузии и потребления кислорода микроорганизмами согласно уравнению (1).

Углекислый газ (*C*) образуется в результате дыхания микроорганизмов:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = rB \tag{5}$$

Поскольку количество углерода углекислого газа является одним из наиболее часто экспериментально наблюдаемых макроскопических величин, далее нас будет интересовать изменение интеграла С. Для простоты, далее, будем считать, что он не влияет на остальные переменные и полностью возвращается в систему если $k_c = 0$ и полно-

стью удаляется из системы, если $k_c = 1$ в выражении для источника в уравнении (3).

Рассмотрим уравнение для воды (W):

Локально количество воды (Wa) изменяется в сумме пропорционально количеству гидрофильного вещества, пропорционально количеству гидрофобного вещества с отрицательным знаком и обратно пропорционально объему поры.

$$a = 1 + k_w M_1 - k_w (N - B - M_1 - M_2)/N + 1/E$$
(6)

где W_a получается перенормировкой на интеграл воды после расчета локальных изменений количества воды, таким образом, что задаваемый интегральный параметр w остается постоянным. Интеграл для воды задается в диапазоне значений объема пор ($0 < w < \epsilon$).

$$W_a = \frac{aw}{\int_0^l a \, dl} \tag{7}$$

В уравнениях используется относительная влажность (W).

$$W = Wa/E \tag{8}$$

Начальное распределение пор (E)и суммарный объем пор (ϵ) заданы. Локально, объем поры с момента заполнения водой (Wa = E) считается равным объему воды в ней ($E \equiv Wa$). Изменение объема заполненной водой поры алгоритмически передается в ближайшую незаполненную водой пору. Если размер поры становится больше некоторого значения, соответственно физическим моделям почвенной среды, ее можно считать воздухоносной и задавать в ней постоянное значение кислорода. Но для простоты анализа численного эксперимента, этот режим включаться не будет.

Будем считать, что все константы зависят от температуры по закону Аррениуса для скорости химических реакций, кроме независящего от температуры k_6 .

Характерные размеры задачи и размерности

За единицу длины примем длину отрезка моделирования (l), за единицу времени - среднее время жизни микроорганизмов 1/r. В единицах концентрации измеряются N, B, M_1, M_2, O, k_6 . За единицу концентрации органических веществ примем общее количества вещества N. Размерность концентрации [C], кислород и вода взяты в долях единицы. Коэффициенты r, k_5 имеют размерность $[T^{-1}]$, k_1,k_2,k_4,k_s - $[C^{-1}T^{-1}]$, k_3 - $[C^{-2}T^{-1}]$, k_6 - [C], k_w - безразмерный. Коэффициент диффузии имеет рамерность $[L^2T^{-1}]$, единица измерения коэффициента диффузии: l^2r . Результаты модели предствлены со следующими нормированными величинами коэффициентов: $D_1=2\,10^{-6}, D_2=5\,10^{-5}, D_3=2\,10^{-6}, D_4=5\,10^{-4}\,k_1=20, k_2=10, k_3=60, k_4=1, k_5=1, k_6=0.1, k_w=1, k_s=10$.

Модель взаимодействий сводится к системе нелинейных параболических уравнений типа реакция-диффузия. Линеаризуем вектор алгебраических членов дифференциальных уравнений и сформулируем начально-краевую задачу в векторном виде. Для функций u_1, u_2, u_3, u_5 , зададим однородные краевые условия второго рода на обоих концах отрезка, что соответствует отсутствию потоков B, M_1, M_2, C через границы. Для функции u_4 установим постоянное значение в начале отрезка, что соответствует в модели постоянной концентрации атмосферного кислорода (O) на поверхности, и, также как и для остальных функций, нулевое значение производной на конце отрезка. В начальный момент времени все функции заданы вектором u_0 . В частности, далее рассматривается случай равномерного начального распределения для всех функций.

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \right) + J \mathbf{u}, \\ \mathbf{u} |_{t=0, i \neq 4} = \mathbf{u}_{0}, u_{4} |_{x=0} = 1, \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} |_{x=l} = 0, \frac{\partial u_{i}}{\partial x} |_{x=0, i \neq 4} = 0, \end{cases}$$
(9)

где D - диагональная матрица коэффициентов диффузии, J - матрица Якоби.

Метод

Задача решена численно разностным методом второго порядка [6]. На отрезке задана равномерная сетка с N узлами, в которых вектор-функция принимает значение $y_i, i = 0..N$. Краевые условия второго рода аппроксимируем со вторым порядком точности. Применяем неявную тета-схему:

$$\frac{y_{i}^{n+1} - y_{i}^{n}}{\tau} = \theta \phi(y_{i}^{n+1}) + (1 - \theta)\phi(y_{i}^{n}) + \frac{D \theta}{h} \left(\left| \frac{y_{i+1}^{n+1} - y_{i}^{n+1}}{h} \right| \frac{y_{i+1}^{n+1} - y_{i}^{n+1}}{h} - \left| \frac{y_{i}^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{h} \right| \frac{y_{i}^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{h} \right) + \frac{D (1 - \theta)}{h} \left(\left| \frac{y_{i+1}^{n} - y_{i}^{n}}{h} \right| \frac{y_{i+1}^{n} - y_{i}^{n}}{h} - \left| \frac{y_{i}^{n} - y_{i-1}^{n}}{h} \right| \frac{y_{i}^{n} - y_{i-1}^{n}}{h} \right) \right)$$

$$(10)$$

Значение вектор-функции на новом слое, y_i^{n+1} , ищем путем итераций методом матричной прогонки. Пусть \check{y}_i^{n+1} равно значению функции на предыдущей итерации, тогда получим:

$$A\delta_{i-1} - C\delta_i + B\delta_{i+1} = -F \tag{11}$$

где

$$A = 2\gamma \theta |\check{y}_{i}^{n+1} - \check{y}_{i-1}^{n+1}|$$

$$B = 2\gamma \theta |\check{y}_{i+1}^{n+1} - \check{y}_{i}^{n+1}|$$

$$C = \frac{1}{\tau} - \theta J(\check{y}_{i}^{n+1}) + A + B$$

$$F = B(\check{y}_{i+1}^{n+1} - \check{y}_{i}^{n+1}) - A(\check{y}_{i}^{n+1} - \check{y}_{i-1}^{n+1}) +$$

$$+ \gamma (1 - \theta)(|y_{i+1}^{n} - y_{i}^{n}|(y_{i+1}^{n} - y_{i}^{n}) - |y_{i}^{n} - y_{i-1}^{n}|(y_{i}^{n} - y_{i-1}^{n})) +$$

$$+ \theta \phi(\check{y}_{i}^{n+1}) + (1 - \theta)\phi(y_{i}^{n}) - \frac{\check{y}_{i}^{n+1} - y_{i}^{n}}{\tau}$$
(12)

Этот итерационный процесс сходится квадратично.

Численное интегрирование выполнено с контролем точности и автоматическим выбором шага по правилу Рунге. Ошибка на каждом слое вычислялась по норме C. При шаге по пространству h = 0.01 ошибка результата на каждом шаге не превышает заданной точности $h^2 = 10^{-4}$, суммарная ошибка интегрирования не превышает порядка 10^{-2} . Соответственно, на сетке 100 узлов максимальная величина и = 100 и относительная ошибка результатов вычислений не превышает 10^{-4} , соответствуя схеме второго порядка точности по h.

В таблице (1) приведена статистика абсолютных ошибок для всех компонент вектор-функции. Показаны номера слоев и узлов с максимальными абсолютными ошибками и суммарные ошибки интегрирования.

Таблица 1. Сводная таблица ошибок вычислений: ¹ - линейная, ² - нелинейная дифузия. Общее количество слоев по времени n = 17212 и n = 29030, соответственно

Перем.	№ узла / №	макс.	№ узла / №	макс.
	слоя ¹	суммарная	слоя ²	суммарная
		абс.ошибка 1		абс.ошибка 2
u_1	39 / 5086	-0.0015	3 / 15960	-0.0149
u_2	2 / 435	-0.0028	2 / 14234	-0.0048
u_3	4 / 1796	0.0026	2 / 10634	0.0178
u_4	2 / 14824	-0.0035	2 / 6409	-0.0184
u_5	5 / 14247	-0.0012	12 / 4885	-0.0034
u	u ₄ : 2 / 14824	0.0035	$u_4: 2 / 6409$	0.0184

Результаты

Энергия внешнего воздействия в рассматриваемой системе задается краевыми условиями в виде постоянного значения пятой компоненты (О) вектор-функции **u** на одной из границ, имеющей значение концентрации кислорода на поверхности.

Учитывая что автоколебания являются незатухающие колебания в диссипативной динамической системе с нелинейной обратной связью, поддерживающиеся за счёт энергии постоянного, то есть непериодического внешнего воздействия, а также что автоколебания отличаются от вынужденных колебаний тем, что их частота определяется внутренними свойствами самой системы, чтобы попасть в область автоколебаний в изучаемой системе уравнений, коэффициенты решаемой системы были предварительно оценены путем аналитического исследования особой точки в упрощенной стационарной локальной системе размерности 2 (только для компонент М1, М2 абиотическая система). Коэффициенты были вычислены из условий на собственные значения для бифуркация Адронова-Хопфа (бифуркации рождения цикла). Далее, путем плавного введения (с малым параметром) остальных переменных и, отслеживая сохранение автоколебательного режима, численно были получены итоговые значения коэффициентов для автоколебательного режима полной динамической распределенной системы.

Далее проведем сравнение всех результатов для двух случаев,

с линейной и нелинейной диффузией. Все графики получены со следующими значениями параметров: $\epsilon = 0.35, w = 0.3$, при начальных условиях с равномерными распределениями: $u_0 = (B = 0.08, M_1 = 0.1, M_2 = 0.24, O = 0.8)$

В изучаемой системе возникают автоколебательные структуры как во времени, так и в пространстве изначально однородных распределений для всех функций.

Рассмотрим образующиеся пространственные структуры, соответствующие некоторым временным сериям. На рисунках (1) - (2) приведены результаты численного интегрирования в произвольно выбранные моменты времени: t = 203, 514, 1766, 2757, 4000 в варианте с линейной диффузией и t = 111, 504, 1604, 2508, 3000 в варианте с нелинейной диффузией. Поскольку, как показано, величина В имеет во времени пульсирующий характер, моменты времени для наглядности были выбраны так, что В не равно нулю.

В обоих случаях пространственная неоднородность на отрезке имеет вид накладывающихся волн. На всех графиках диапазон шкалы соответствует максимальной амплитуде произошедших колебаний.

Заметно, что образование пространственной структуры E (распределения пор по размеру) имеет разный вид и протяженность в случаях линейной и нелинейной диффузии. Линейная диффузия влияет на величину E со временем на всем отрезке, поскольку диффузия О в отсутствие его поглощения (в интервалах времени затухания колебаний) распространяется неограниченно. Это через некоторое время вызывает новый всплеск B и расширение зоны активности.

Нелинейная диффузия О наряду с незатухающими колебаниями, создает зону покоя, незатрагиваемую автоколебаниями. Сохранение этой зоны возможно, поскольку протяженность зоны диффузии О слабо зависит от величины коэффициента диффузии (тестировано три порядка величины коэффициента). Результат согласуется с представлениями о формировании зоны анабиоза с потенциальной возможностью сохранения в ней органического вещества в почвенном агрегате [7].

При моделировании процессов переноса веществ путем диффузии важен характерный размер задачи. В рассматриваемой модели безразмерный коэффициент диффузии кислорода порядка 10^{-4} соответствует коэффициенту диффузии кислорода в свободной воде порядка 1 см²/сут, что соответствует характерному размеру задачи - 1 м. Диффузия в связанной воде, в капиллярах пористых сред

снижается на несколько порядков, тогда физической величине коэффициента диффузии порядка 10^{-4} см²/сут будет соответствовать характерный размер линейной задачи - 1 см. На таком масштабе уже сильно меняются свойства воды и введение нелинейной зависимости коэффициента диффузии при моделировании становится необходимо.

Таким образом, результаты моделирования с линейной и нелинейной диффузиями могут отображать процессы, протекающие на разных масштабах.

Множество состояний динамической системы образует фазовое пространство, каждому состоянию в нем отвечает точка, а эволюция изображается (фазовыми) траекториями. Каждому значению пространственной координаты соответствует определенный фазовый портрет. Поскольку нас интересует описание поведения сложной системы как целого (результата множества микроскопических состояний), то рассмотрим статистический фазовый портрет макроскопических состояний, т.е. для которого фазовыми координатами являются интегралы функций на отрезке в каждый момент времени.

Общий вид наблюдаемых автоколебаний хорошо представлен в проекции статистического фазового портрета на двумерные подпространства $(B M_1)$, $(B M_2)$ и $(M_1 M_2)$ (Рис. (3)). Видно, что амплитуда колебаний при нелинейной диффузии ниже, а частота колебаний значительно выше, о чем можно судить по заполненности фазового портрета.

Учитывая что аттрактор есть компактное подмножество фазового пространства динамической системы, все траектории из некоторой окрестности которого стремятся к нему при времени, стремящемся к бесконечности, что аттрактором может являться притягивающая неподвижная точка, периодическая траектория или некоторая ограниченная область с неустойчивыми траекториями внутри, можно предполагать существование некоторого аттрактора (возможно с большим периодом или нерегулярного), в области притяжения которого состояние системы устойчиво и имеет автоколебательный режим. Видно, что при переходе от линейной диффузии к нелинейной размеры аттрактора уменьшаются, а сложность его увеличивается.

Как правило, в системах с таким поведением выявляют бифуркационный параметр, при изменении которого наблюдается переход от устойчивых периодических решений к апериодическому режиму через каскады бифуркаций (качественных перестроек системы с возникновением нового режима поведения) [8],[9]. Полученный в настоящей работе сложный автоколебательный режим, вероятно, является одной из стадий такого перехода. Его подробное исследование является очень важным для понимания поведения сложной динамической системы, но не являлось целью настоящей работы. Основными бифуркационными параметрами в исследуемой системе являются: общее количество вещества (N), соотношение констант диффузии $(D_{M1}/D_{M2}/D_O)$.

Поскольку модель подразумевает сферическую симметричность почвенного агрегата, то особый интерес представляет статистический фазовый портрет макроскопического поведения для интегралов функций по объему (со сдвигом фаз). Но в настоящий момент он не рассмотрен.

Заключение

Описана модель взаимодействия нескольких важных факторов живой, органической и неорганической природы, которая демонстрирует сложный автоколебательный режим устойчивых нерегулярных динамических структур, в частности самоорганизацию структуры порового пространства (среды обитания). Сравнение динамических структур показало приложимость задачи с нелинейной диффузией к описанию проблем микробиологии и физики почв. В задаче с нелинейной диффузией структуры устойчивее и сложнее (по частоте и плотности спектра амплитуд колебаний), что качественно ближе к наблюдаемому в природе. При этом, нелинейная диффузия создает зону в пространстве, незатрагиваемую автоколебаниями, что позволяет моделировать механизм сохранения органического вещества в бескислородных микрозонах.











Рис. 3. Статистические фазовые портреты: линейная диффузия (слева), нелинейная диффузия (справа)

Литература

- 1. Самарский А.А. и др. Квазилинейное уравнение теплопроводности с источником: обострение, локализация, симметрия, точные решения, асимптотики, структуры // Итоги науки и техники. 1987.
- 2. Young I.M., Crawford J.W Interactions and self-organization in the soilmicrobe complex // Science. 2004. T. 304. C. 1634–1637.

- 3. Т.В. Карамышева Н.А. Магницкий Переход к диффузионному хаосу в одной модели экологической системы // Дифференциальные уравнения. 2012. Т. 48. С. 1501–1506.
- 4. *Molz F., Faybishenko B.* Increasing evidence for chaotic dynamics in soil-plant-atmosphere system: a motivation for future research // Procedia Environmental Sciences. 2013. T. 19. C. 681–690.
- 5. *Doanh Nguyen-Ngoc et al.* Modeling microbial decomposition in real 3D soil structures using partial differential equations // International Journal of Geosciences. 2013. T. 4. C. 15–26.
- 6. Савенкова Н.П. и др. Численные методы в математическом моделировании / под ред. Гулин А.В. Кузьмин Р.Н. Аргамакмедиа, 2014.
- 7. *Н.А. Васильева и др.* Амфифильные свойства гумусовых веществ и микробиологическая активность в агрегатах чернозема. // Вестник Московского Университета. 2005. Т. 174. С. 18–21.
- 8. Н.А. Магницкий Теория динамического хаоса / под ред. Синергетика: от прошлого к будущему. Едиториал УРСС, 2011.
- 9. Ю.А. Данилов Лекции по нелинейной динамике / под ред. Синергетика: от прошлого к будущему. Либроком, УРСС, 2013.