

Математическая модель замкнутой микрэкосистемы «одноклеточная водоросль – гетеротрофная бактерия»

Зализняк В.Е., Золотов О.А.

Сибирский федеральный университет, Институт математики и фундаментальной информатики, Красноярск, Россия

Аннотация. В работе предлагается модель замкнутой микрэкосистемы «одноклеточная водоросль – гетеротрофная бактерия». Математическая модель формулируется в виде задачи Коши для системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Для построения модели последовательно использовался закон минимума Либиха, как для описания скорости роста биомассы элементов микрэкосистемы, так и для описания скорости отмирания клеток водоросли и бактерии. Для описания удельной скорости потребления биогенных элементов водорослью и бактерией использовалась функция Эндрюса (ингибирование избытком субстрата). Предполагается, что удельная скорость отмирания клеток водоросли и бактерии увеличивается при уменьшении концентрации субстрата. Предполагается, что биогенными элементами являются углерод и азот и они присутствуют в системе в двух формах: минеральной (CO_2 , NO_2 , NO_3 , NH_4) и биологической (белки, жиры, углеводы). Модель изменения концентраций компонентов микрэкосистемы строится при следующих предположениях:

- 1) процесс потребления углерода и азота клетками водоросли и гетеротрофной бактерии происходит независимо;
- 2) стехиометрические коэффициенты для клеток водоросли и гетеротрофной бактерии не изменяются в процессе развития микрэкосистемы;
- 3) кислород выделяемый клетками водоросли при фотосинтезе полностью покрывает потребности водоросли и бактерии в кислороде.

Для верификации модели использовались экспериментальные данные для микрэкосистем *Chlorella vulgaris* – *Pseudomonas* sp. и *Scenedesmus obliquus* – *Pseudomonas* sp. Эти системы были исследованы в лабораторных условиях и были получены значения концентраций элементов микрэкосистем в стационарных состояниях. Параметры функций удельной скорости потребления биогенных элементов были получены из экспериментальных данных о кинетике роста для водорослей и бактерии. Вычисленные с использованием предложенной модели концентрации биомассы биоценоза в стационарном состоянии хорошо согласуются с данными эксперимента.

Ключевые слова: математическое моделирование биологических сообществ, замкнутая экосистема, одноклеточная водоросль, гетеротрофная бактерия, *Chlorella vulgaris*, *Scenedesmus obliquus*, *Pseudomonas* sp.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

x – концентрация биомассы модельных клеток водоросли, г/л

y – концентрация биомассы модельных клеток гетеротрофной бактерии, г/л

μ_x , μ_y – удельные скорости роста биомассы (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$\mu_{x,\max}$, $\mu_{y,\max}$ – максимальные удельные скорости роста биомассы (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

d_x , d_y – удельные скорости отмирания клеток (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$d_{x,\min}$, $d_{y,\min}$ – удельные генетически запрограммированные скорости отмирания клеток (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$d_{x,\max}$, $d_{y,\max}$ – удельные скорости отмирания клеток при отсутствии питания (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$q_x^{(c)}$, $q_y^{(c)}$ – удельные скорости потребления углерода (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$q_x^{(n)}$, $q_y^{(n)}$ – удельные скорости потребления азота (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$q_{x,\max}^{(c)}$, $q_{y,\max}^{(c)}$ – максимальные удельные скорости потребления углерода (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$q_{x,\max}^{(n)}$, $q_{y,\max}^{(n)}$ – максимальные удельные скорости потребления азота (водоросль, гетеротрофная бактерия), 1/ч

$C_{\max}^{(x)}$, $C_{\max}^{(y)}$ – концентрации углерода, при которых достигаются максимальные удельные скорости потребления углерода (водоросль, гетеротрофная бактерия), г/л

$N_{\max}^{(x)}$, $N_{\max}^{(y)}$ – аналогично для концентраций азота

γ_{xc} , γ_{xn} – относительные содержания С и N в модельной клетке водоросли (стехиометрические коэффициенты)

γ_{yc} , γ_{yn} – аналогично для гетеротрофной бактерии (стехиометрические коэффициенты)

C_m , N_m – концентрации минеральных форм углерода (CO_2) и азота (NO_2 , NO_3 , NH_4) в водной среде, г/л

C_b , N_b – концентрации биологических форм углерода и азота (белки, жиры, углеводы) в водной среде, г/л

e – эффективность продуцирования клеток гетеротрофной бактерии (доля потреблённой массы С и N идущей на рост биомассы клеток)

ВВЕДЕНИЕ

Замкнутая экосистема представляет собой самоподдерживающуюся (за счёт притока энергии извне), саморазвивающуюся, длительно существующую живую систему. В настоящее время математическое моделирование экосистем представляет большой научный и практический интерес. Одной из главных причин, делающей это направление исследований актуальным, является необходимость оценки последствий антропогенного влияния на природные экосистемы, а также разработка способов восстановления экосистем, разрушенных в результате такого влияния. Другой актуальной задачей математического моделирования в экологии является создание замкнутых экологических систем жизнеобеспечения. Решение этих задач неосуществимо без прогноза поведения реальных систем на основе их моделей. Отработку принципов построения математических моделей замкнутых экосистем можно проводить на замкнутых микроэкосистемах (МЭС), включающих малое количество биологических видов (чаще всего одноклеточных) и обладающих относительно высокой скоростью круговорота веществ. Замкнутые МЭС являются удобным инструментом исследования экологии микроорганизмов. Также они могут быть использованы для изучения влияния различных факторов на экосистемы, таких как температура, освещённость, радиация, различные химические агенты.

Для изучения динамики развития экосистем часто применяется модели на основе дифференциальных уравнений. В работе [1] рассматривалась модель замкнутой

экосистемы с двумя трофическими уровнями: продуцентами и консументами. Модель строилась при следующих предположениях:

- 1) продуценты лимитированы одним биогенным элементом, по которому система замкнута;
- 2) для описания скорости потребления продуцентов консументами использовалась трофическая функция вида Моно;
- 3) скорости роста биомассы продуцентов пропорциональна концентрации биогенного элемента;
- 4) редуценты отсутствуют, и вся отмирающая биомасса сразу же становится пригодной для питания продуцентов;
- 5) естественная гибель продуцентов не учитывалась.

В рамках этой модели при помощи численного анализа исследовалась устойчивость замкнутой экосистемы в зависимости от числа видов.

В работе [2] представлена модель экосистемы с двумя продуцентами и одним консументом. Модель строилась при следующих предположениях:

- 1) продуценты потребляют два биогенных элемента;
- 2) для описания скорости потребления продуцентов консументами использовалась трофическая функция вида Моно;
- 3) для описания скорости роста биомассы продуцентов и консумента использовалась функция вида Моно;
- 4) естественная гибель продуцентов не учитывалась.

В рамках этой модели были получены аналитически условия замкнутости экосистемы в стационарном состоянии.

В работе [3] рассматривались модели различных замкнутых экосистем. В частности, была рассмотрена система, состоящая из одного автотрофа (продуцент) и одного гетеротрофа (редуцент). Эта модель строилась при следующих предположениях:

- 1) продуцент и редуцент потребляют два биогенных элемента;
- 2) для описания скорости роста биомассы продуцента и редуцента использовалась функция, представляющая собой произведение функций Моно для каждого биогенного элемента;
- 3) скорость отмирания продуцента зависит от концентрации биогенных элементов;
- 4) скорость отмирания редуцента зависит от некоторого энергетического параметра, который описывает концентрацию АТФ в клетках редуцента.

Были получены параметрические портреты этой системы в координатах удельных скоростей роста продуцента и редуцента. Все параметрические портреты показывают наличие широкой области существования устойчивых стационарных решений.

Закон минимума Либиха – один из фундаментальных законов в экологии. Согласно этому закону удельная скорость роста популяции в любой произвольно заданный момент времени контролируется одним наиболее критичным (или лимитирующим) фактором. Ограниченное количество биогенных элементов, доступных любой природной экосистеме, приводит к тому, что рано или поздно наименее доступный элемент становится фактором, лимитирующим рост всей экосистемы. Следует отметить, что при построении рассмотренных выше моделей закон минимума Либиха не использовался.

В работе предлагается модель замкнутой микроэкосистемы «одноклеточная водоросль – гетеротрофная бактерия». При построении модели последовательно использовался закон минимума Либиха, как для описания скорости роста биомассы элементов МЭС, так и для описания скорости отмирания клеток водоросли и бактерии. Для описания удельной скорости потребления биогенных элементов водорослью и бактерией использовалась функция Эндрюса (ингибирование избытком субстрата). Заметим, что, по нашему мнению, именно функция Эндрюса должна применяться при моделировании замкнутых экосистем, поскольку она учитывает ингибирование

скорости роста высокими концентрациями биогена, что обычно маловероятно в естественных экосистемах, но весьма вероятно в искусственных.

МОДЕЛЬНЫЕ КЛЕТКИ И СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ

Сухое вещество клеток водоросли состоит из белков, липидов, углеводов и минеральных веществ. В сухом веществе бактерии содержатся белки, липиды, углеводы, РНК, ДНК и минеральные вещества. Таким образом, основными химическими элементами, составляющими клетки водоросли и бактерии, являются углерод, азот, водород, кислород и фосфор.

Введём модельные клетки, которые содержат только углерод и азот (основные биогенные элементы). Стехиометрические коэффициенты для модельных клеток водоросли и гетеротрофной бактерии определяются из заданного отношения массы углерода к массе азота в клетке:

$$\begin{aligned} \frac{\gamma_{sc}}{\gamma_{sn}} & - \text{задано}, \\ \gamma_{sc} + \gamma_{sn} & = 1, \\ s & = (x, y). \end{aligned}$$

Масса модельной клетки связана с сухой массой реальной клетки соотношением

$$m_a = r \cdot m_c, \quad (1)$$

где коэффициент $r < 1$ определяется из отношения массы углерода и азота к сухой массе клетки.

ФИЗИЧЕСКИЕ ФАКТОРЫ, ВЛИЯЮЩИЕ НА РОСТ ПОПУЛЯЦИЙ

Самый важный для роста клеток водоросли фактор – освещённость. Он будет описываться множителем – функцией $f_1(I)$ со свойствами

$$\begin{aligned} f_1(I_{\text{opt}}) & = 1, \quad f_1(0) = 0, \\ \frac{df_1}{dI}(I) & < 0, \quad I > I_{\text{opt}}, \end{aligned}$$

где I_{opt} – оптимальная освещённость (Вт/м^2). Часто в качестве $f_1(I)$ выбирают функцию $g(\alpha_I, I/I_{\text{opt}})$ (см. (2)).

Температура биомассы T также влияет на рост водоросли и бактерий. Влияние температуры будет описываться функцией $f_{2,s}(T)$ со свойствами:

$$\begin{aligned} f_{2,s}(T_{s,\text{opt}}) & = 1, \\ f_{2,s}(T) & = 0, \quad T \leq T_{s,\text{min}}, \\ f_{2,s}(T) & = 0, \quad T \geq T_{s,\text{max}}, \end{aligned}$$

где ненулевая скорость роста наблюдается в интервале температур $[T_{s,\text{min}}, T_{s,\text{max}}]$ и $T_{s,\text{opt}}$ – оптимальное значение температуры при котором наблюдается максимальный рост биомассы.

Рост биомассы водоросли и бактерий возможен при определённых параметрах pH среды. Влияние pH в первом приближении описывается функцией $f_{3,s}(\text{pH})$ со свойствами

$$f_{3,s}(\text{pH}) = 1, \quad \text{pH}_{s,\text{min}} \leq \text{pH} \leq \text{pH}_{s,\text{max}},$$

$$f_{3,s}(pH) = 0, pH < pH_{s,\min},$$

$$f_{3,s}(pH) = 0, pH > pH_{s,\max}.$$

СКОРОСТЬ ПОТРЕБЛЕНИЯ БИОГЕНОВ И СКОРОСТЬ РОСТА БИОМАССЫ

Скорость потребления биогенных элементов (С и N) водорослью и гетеротрофной бактерией задаётся в виде (модифицированная модель Эндрюса [4]):

$$q_s^{(b)} = q_{s,\max}^{(b)} \frac{b^*}{\alpha_{sb} + (1 - 2\alpha_{sb})b^* + \alpha_{sb}(b^*)^2} = q_{s,\max}^{(b)} \cdot g(\alpha_{sb}, b), \quad (2)$$

$$b^* = \frac{b}{b_{\max}^{(s)}}, s = (x, y), b = (C, N).$$

Таким образом, имеется четыре функции. При этом, если концентрация биогена превышает величину $b_{\max}^{(s)}$, то скорость потребления уменьшается, что и наблюдается в экспериментах (эффект ингибирования). При малых значениях параметра α функция $g(\alpha, b^*)$ близка к трофической функции вида Моно. В этом случае часто приводится значение константы полунасыщения $b_{1/2}^{(s)}$ ($g(\alpha, b_{1/2}^{(s)}/b_{\max}^{(s)}) = 1/2$). Тогда

$$b_{\max}^{(s)} = \frac{2\alpha \cdot b_{1/2}^{(s)}}{2\alpha + (1 - \sqrt{1 + 4\alpha})}.$$

Характерный вид функций $g(\alpha, b^*)$ показан на рисунке 1.

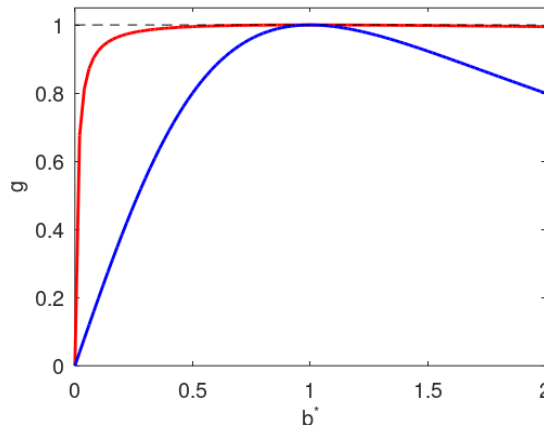


Рис. 1. Функция $g(\alpha, b^*)$ при $\alpha = 0.01$ (красная линия) и $\alpha = 0.5$ (синяя линия).

Предполагается, что система находится при оптимальной освещённости и pH, и осуществляется автотрофный тип питания для клеток водоросли, т.е., в процессе фотосинтеза клетки водоросли потребляют углерод в минеральной форме (CO_2). Также предполагается, что при этом клетки водоросли потребляют азот в минеральной форме. Скорость роста популяции хлореллы задаётся исходя из закона Либиха, т.е., ограничивается либо концентрацией углерода, либо концентрацией азота

$$\mu_x(C_m, N_m) = f_{2,x}(T) \cdot \min \left[\left(1 + \frac{\gamma_{xn}}{\gamma_{xc}} \right) q_x^{(c)}(C_m), \left(1 + \frac{\gamma_{xc}}{\gamma_{xn}} \right) q_x^{(n)}(N_m) \right].$$

Предполагается, что

$$\mu_x(C_{\max}^{(x)}, N_{\max}^{(x)}) = f_{2,x}(T) \cdot \mu_{x,\max} = f_{2,x}(T) (\gamma_{xc} \cdot \mu_{x,\max} + \gamma_{xn} \cdot \mu_{x,\max}) = f_{2,x}(T) (q_{x,\max}^{(c)} + q_{x,\max}^{(n)}).$$

Откуда можно определить $q_{x,\max}^{(c)}$ и $q_{x,\max}^{(n)}$:

$$q_{x,\max}^{(c)} = \gamma_{xc} \cdot \mu_{x,\max}, \quad q_{x,\max}^{(n)} = \gamma_{xn} \cdot \mu_{x,\max}.$$

Тогда

$$\mu_x(C_m, N_m) = f_{2,x}(T) \cdot \mu_{x,\max} \min(g(\alpha_{xc}, C_m), g(\alpha_{xn}, N_m)).$$

Для роста популяции гетеротрофные бактерии поглощают растворённое и нерастворённое органическое вещество и могут утилизировать органическое вещество клеток водоросли. Гетеротрофные бактерии также являются редуцентами, которые завершают распад органических соединений отмерших клеток до простых неорганических веществ – воды, CO₂, соединений азота, и т.д. Гетеротрофные бактерии в результате разложения органических веществ получают материал и энергию для размножения, а также энергию для дыхания и движения. Для описания баланса между потребностью воссоздания структурного материала клетки и её энергетическими потребностями используется параметр e – доля потреблённой массы субстрата идущей на рост биомассы клеток. Остальная потреблённая масса субстрата идёт на получение энергии.

Скорость роста биомассы гетеротрофных бактерий задаётся исходя из закона Либиха, т.е., ограничивается либо концентрацией биологического углерода, либо концентрацией биологического азота

$$\mu_y(C_b, N_b) = e \cdot f_{2,y}(T) \cdot \min \left[\left(1 + \frac{\gamma_{yn}}{\gamma_{yc}} \right) q_y^{(c)}(C_b + \gamma_{xc}x), \left(1 + \frac{\gamma_{yc}}{\gamma_{yn}} \right) q_y^{(n)}(N_b + \gamma_{xn}x) \right].$$

Предполагается, что

$$\mu_y(C_{\max}^{(y)}, N_{\max}^{(y)}) = f_{2,y}(T) \cdot \mu_{y,\max} = f_{2,y}(T) (\gamma_{yc} \cdot \mu_{y,\max} + \gamma_{yn} \cdot \mu_{y,\max}) = e \cdot f_{2,y}(T) (q_{y,\max}^{(c)} + q_{y,\max}^{(n)}).$$

Откуда можно определить $q_{y,\max}^{(c)}$ и $q_{y,\max}^{(n)}$:

$$q_{y,\max}^{(c)} = \frac{1}{e} \gamma_{yc} \cdot \mu_{y,\max}, \quad q_{y,\max}^{(n)} = \frac{1}{e} \gamma_{yn} \cdot \mu_{y,\max}.$$

Тогда

$$\mu_y(C_b, N_b) = f_{2,y}(T) \cdot \mu_{y,\max} \min(g(\alpha_{yc}, C_b), g(\alpha_{yn}, N_b)).$$

СКОРОСТЬ ОТМИРАНИЯ

Предполагается, что скорость отмирания клеток водоросли и гетеротрофных бактерий зависит от концентрации биогенных элементов (C и N) [5, 6] и задаётся в виде

$$d_s(C, N) = d_{s,\min} \begin{cases} 1, & C^* \geq 1, N^* \geq 1 \\ \delta_s \cdot \max \left(\frac{1}{1 + (\delta_s - 1)C^*}, \frac{1}{1 + (\delta_s - 1)N^*} \right), & C^* < 1, N^* < 1 \end{cases}$$

$$C^* = \frac{C}{C_{\max}}, N^* = \frac{N}{N_{\max}}, \delta_s = \frac{d_{s,\max}}{d_{s,\min}}, s = (x, y).$$

Здесь также используется закон Либиха, согласно которому самое сильное воздействие на систему оказывает тот фактор, значение которого наиболее отклонилось от оптимального значения.

МОДЕЛЬ МИКРОЭКОСИСТЕМЫ

Модель изменения концентраций компонентов МЭС строится при следующих предположениях:

- 1) процесс потребления углерода и азота клетками водоросли и гетеротрофной бактерии происходит независимо,
- 2) стехиометрические коэффициенты для клеток водоросли и гетеротрофной бактерии не изменяются в процессе развития МЭС,
- 3) кислород выделяемый клетками водоросли при фотосинтезе полностью покрывает потребности водоросли и бактерии в кислороде.

Изменение концентрации модельных клеток водоросли зависит от скорости роста, скорости отмирания и скорости утилизации клеток водоросли клетками гетеротрофной бактерии:

$$\frac{dx}{dt} = (\mu_x(C_m, N_m) - d_x(C_m, N_m))x - q_1(C_b, N_b, x)y, \quad (3)$$

где q_1 – скорости утилизации клеток водоросли клетками гетеротрофной бактерии. Изменение концентрации модельных клеток гетеротрофной бактерии зависит от скорости роста и скорости отмирания:

$$\frac{dy}{dt} = (\mu_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x) - d_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x))y. \quad (4)$$

В процессе роста клетки водоросли выделяют в воду часть органического вещества, образованного при фотосинтезе [7]. Это согласуется с предположением 2). Клетки гетеротрофной бактерии потребляют белки, жиры и углеводы, находящиеся в водной среде. Также учитывается биологическое вещество мёртвых клеток. Тогда изменение концентрации биологического углерода и азота в водной среде описывается следующими уравнениями

$$\begin{aligned} \frac{dC_b}{dt} = & (q_x^{(c)}(C_m) - \gamma_{xc}\mu_x(C_m, N_m) + \gamma_{xc}d_x(C_m, N_m))x + \\ & + (-q_2(C_b, N_b, x) + \gamma_{yc}d_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x))y, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_b}{dt} = & (q_x^{(n)}(N_m) - \gamma_{xn}\mu_x(C_m, N_m) + \gamma_{xn}d_x(C_m, N_m))x + \\ & + (-q_3(C_b, N_b, x) + \gamma_{yn}d_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x))y, \end{aligned} \quad (6)$$

где q_2, q_3 – скорости потребления углерода и азота из водной среды клетками гетеротрофной бактерии. Клетки водоросли потребляют углерод и азот в минеральной форме. Бактерии разлагают оставшееся после роста популяции органические вещества до простых неорганических веществ. Тогда изменение концентрации минерального углерода и азота в водной среде описывается следующими уравнениями:

$$\frac{dC_m}{dt} = -q_x^{(c)}(C_m)x + (q_y^{(c)}(C_b + \gamma_{xc}x) - \gamma_{yc}\mu_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x))y, \quad (7)$$

$$\frac{d N_m}{d t} = -q_x^{(n)}(N_m)x + \left(q_y^{(n)}(N_b + \gamma_{xn}x) - \gamma_{yn}\mu_y(C_b + \gamma_{xc}x, N_b + \gamma_{xn}x) \right) y. \quad (8)$$

Скорость q_1 определяется из закона Либиха и отношения концентрации углерода и азота клеток водоросли к общей массе органического углерода и азота

$$q_1(C_b, N_b, x) = \min \left(\frac{\gamma_{xc}x}{C_b + \gamma_{xc}x} q_y^{(c)}(C_b + \gamma_{xc}x), \frac{\gamma_{xn}x}{N_b + \gamma_{xn}x} q_y^{(n)}(N_b + \gamma_{xn}x) \right).$$

Для определения q_2 и q_3 используется условие замкнутости МЭС

$$\gamma_{xc}x + \gamma_{yc}y + C_b + C_m = C_0 = \text{const},$$

$$\gamma_{xn}x + \gamma_{yn}y + N_b + N_m = N_0 = \text{const}$$

или

$$\frac{d}{d t}(\gamma_{xc}x + \gamma_{yc}y + C_b + C_m) = 0,$$

$$\frac{d}{d t}(\gamma_{xn}x + \gamma_{yn}y + N_b + N_m) = 0.$$

Используя условие замкнутости и (3)–(8), получим

$$q_2(C_b, N_b, x) = q_y^{(c)}(C_b + \gamma_{xc}x) - \gamma_{xc}q_1(C_b, N_b, x), \quad (10)$$

$$q_3(C_b, N_b, x) = q_y^{(n)}(N_b + \gamma_{xn}x) - \gamma_{xn}q_1(C_b, N_b, x).$$

Подставляя (9), (10) в (3), (5) и (6), получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений, которую можно записать в виде

$$\frac{d s}{d t} = f(s), \quad (11)$$

$$s = (x, y, C_b, C_m, N_b, N_m)^T, \quad f(s) = (f_1(s), \dots, f_6(s))^T.$$

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ МИКРОЭКОСИСТЕМЫ *Chlorella vulgaris* – *Pseudomonas* sp.

Экспериментальное исследование стационарных состояний различных замкнутых микроэкосистем представлено в работах [8, 9]. В том числе, рассматривалась МЭС, состоящая из водоросли *Chlorella* 219 и гетеротрофных бактерий *Pseudomonas*. Биоценоз помещали в люминостат с круглосуточным освещением при температуре 28–30° С. Определялись концентрации биомассы живых клеток хлореллы, клеток бактерии *Pseudomonas* sp., отмерших клеток хлореллы и концентрация детрита.

Рассмотрим поведение МЭС, состоящей из водоросли *Chlorella vulgaris* и гетеротрофных бактерий *Pseudomonas* sp., которое описывается системой уравнений (11). Предполагается, что система находится при оптимальной освещённости и pH ($f_1(I) = 1$, $f_{3,x}(\text{pH}) = 1$, $f_{3,y}(\text{pH}) = 1$) при температуре 29°С. Параметры $T_{s,\min}$, $T_{s,\max}$ и $T_{s,\text{opt}}$ для хлореллы и *Pseudomonas* sp. приведены в таблице 1.

Таблица 1. Характерные температуры

	$T_{s,\min}$, °C	$T_{s,\max}$, °C	$T_{s,\text{opt}}$, °C
<i>Chlorella vulgaris</i>	4	38	25 [10]
<i>Pseudomonas</i> sp.	4	42	34 [11]

Функция $f_{2,x}(T)$ для хлореллы имеет вид

$$f_{2,x}(T) = 1.1 \cdot \left(T^* - \frac{T_{x,\min}}{T_{x,\text{opt}}} \right) \left(\frac{T_{x,\max}}{T_{x,\text{opt}}} - T^* \right) \exp(0.733 \cdot T^*), \quad (12)$$

$$T^* = \frac{T}{T_{x,\text{opt}}}.$$

Функция $f_{2,y}(T)$ для *Pseudomonas* . имеет вид

$$f_{2,y}(T) = 0.867 \cdot \left(T^* - \frac{T_{y,\min}}{T_{y,\text{opt}}} \right) \left(\frac{T_{y,\max}}{T_{y,\text{opt}}} - T^* \right) \exp(0.992 \cdot T^*),$$

$$T^* = \frac{T}{T_{y,\text{opt}}}.$$

Графики этих функций показаны на рисунке 2.

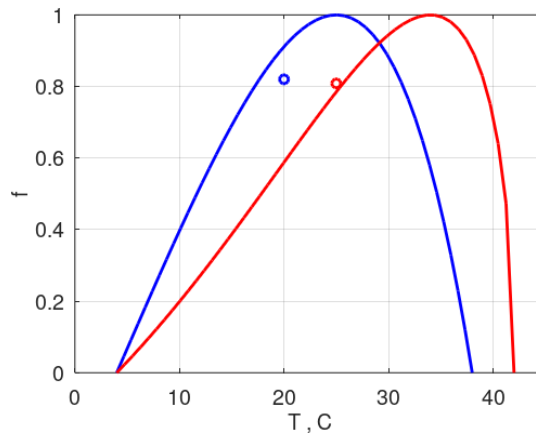


Рис. 2. Температурные факторы для хлореллы (синяя линия) и *Pseudomonas* sp. (красная линия). Данные для температур отличных от оптимальных показаны кружками [10, 11].

Задаётся, что отношение C/N в сухом веществе клеток хлореллы равно 10, что соответствует среднему отношению C/N в клетках микроводорослей [12]. Отношение C/N для бактерии задаётся равным 3.75. Это значение было определено для бактерии *Pseudomonas putida* [13]. Стехиометрические коэффициенты и коэффициент r для компонентов МЭС представлены в таблице 2.

Таблица 2. Стехиометрические коэффициенты и коэффициент r

	γ_c	γ_n	r
<i>Chlorella vulgaris</i>	0.909	0.091	0.5 [14]
<i>Pseudomonas</i> sp.	0.7895	0.2105	0.58 [13]
<i>Scenedesmus obliquus</i>	0.909	0.091	0.44 [14]

Значения параметров функций скоростей потребления биогенов и функций скоростей отмирания для *Chlorella vulgaris* и *Pseudomonas* sp. представлены в таблице 3. Они были получены на основе экспериментальных данных по кинетике роста водоросли и бактерии.

Начальные условия для системы уравнений (11):

$$s = (x, y, C_b, C_m, N_b, N_m) \Big|_{t=0} = (0.0217, 0.00145, 0.09, 0.001, 0.01, 0.001).$$

Они определялись из приближенного решения системы уравнений $f(s) = 0$. Для численного решения системы уравнений (11) использовалась схема Рунге – Кутты четвертого порядка. Было получено следующее стационарное решение

$$s^a = (x, y, C_b, C_m, N_b, N_m) \Big|_{t \rightarrow \infty} = (x^a, y^a, C_b^a, C_m^a, N_b^a, N_m^a) = (0.0247, 0.0065, 0.091, 0.0002, 0.0027, 0.0005).$$

Таблица 3. Параметры функции скорости потребления биогенов и функции скорости отмирания для *Chlorella vulgaris* и *Pseudomonas* sp.

Параметр	<i>Chlorella vulgaris</i>	<i>Pseudomonas</i> sp.
$\mu_{\max}$, 1/ч	0.13 [15]	0.3176 [17]
α_{xc}	0.13 ^a	—
α_{xn}	0.07 ^a	—
$C_{\max}$, г/л	0.009 ^a	0.06 ^b
$N_{\max}$, г/л	0.025 ^a	0.115 ^c
α_{yc}	—	0.51 ^b
α_{yn}	—	0.125 ^c
$d_{\min}$, 1/ч	0.0026 [15]	0.004 [19]
δ	10	14
e	—	0.5 [20]

^a параметры рассчитаны на основе данных [16]

^b параметры рассчитаны на основе данных для *P. putida* и *P. aeruginosa* [17]

^c параметры рассчитаны на основе данных для *P. putida* [18]

Динамика концентраций компонентов МЭС показаны на рисунках 3–5.

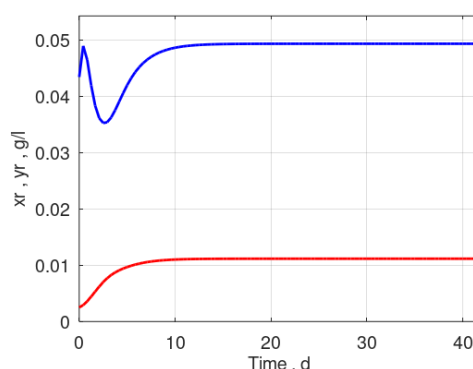


Рис. 3. Зависимость концентрации биомассы реальных клеток от времени (синяя линия – *Chlorella vulgaris*, красная линия – *Pseudomonas*); $x_r = x/r_x$, $y_r = y/r_y$.

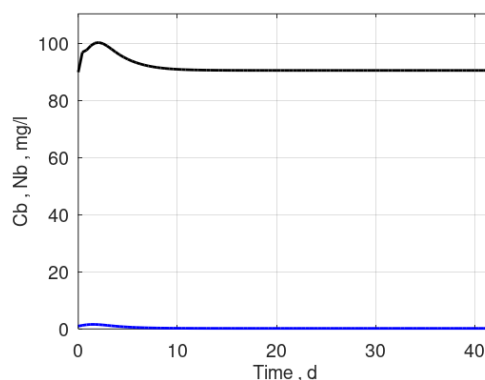


Рис. 4. Зависимость концентраций биологических форм углерода (чёрная линия) и азота (синяя линия) от времени.

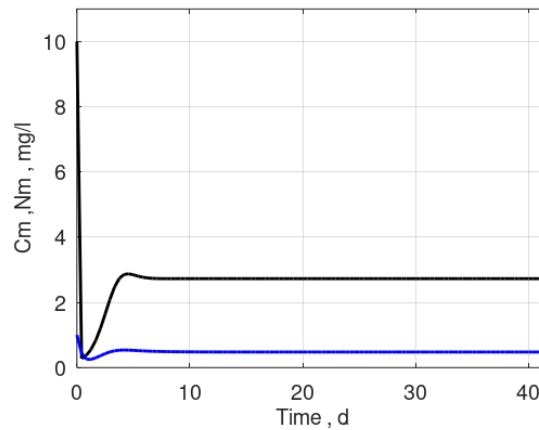


Рис. 5. Зависимость концентраций минеральных форм углерода (чёрная линия) и азота (синяя линия) от времени.

Непосредственно концентрация биологических форм углерода и азота C_b и N_b не определялась в эксперименте. Определялась концентрация биомассы отмерших клеток хлореллы (0.12 г/л) и концентрация детрита (0.12 г/л). Предполагается, что живые и отмершие клетки хлореллы имеют одинаковый химический состав и детрит содержит 35–50 % углерода 1–4 % азота. Тогда можно получить оценку параметров C_b и N_b для эксперимента. Вычисленные параметры МЭС в сравнении с экспериментальными данными представлены в таблице 4.

Таблица 4. Стационарное состояние замкнутой МЭС *Chlorella* – *Pseudomonas* sp.

Параметр	Модель	Эксперимент [8, 9]
x_r , г/л	0.049	0.05
y_r , г/л	0.011	0.015
C_b , г/л	0.091	0.097 – 0.115 ^a
N_b , г/л	0.0002	0.007 – 0.01 ^a

^a оценка

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ МИКРОЭКОСИСТЕМЫ *Scenedesmus obliquus* – *Pseudomonas* sp.

Также исследовалась замкнутая микроэкосистема состоящая из водоросли *Scenedesmus obliquus* и гетеротрофных бактерий *Pseudomonas* sp. Рассмотрим модель поведения этой МЭС на основе системы уравнений (11). Предполагается, что система находится при оптимальной освещённости и pH ($f_1(I) = 1$, $f_{3,x}(pH) = 1$, $f_{3,y}(pH) = 1$) при температуре 29°C. Функция $f_{2,x}(T)$ задаётся в виде (12) и параметры $T_{s,min}$, $T_{s,max}$ и $T_{s,opt}$ такие же как для хлореллы. Определялись концентрации живых клеток водоросли, клеток бактерии *Pseudomonas* sp., концентрация биомассы отмерших клеток водоросли и концентрация детрита.

Задаётся, что отношение C/N в сухом веществе клеток сценедесмуса равно 10. Стехиометрические коэффициенты и коэффициент r для водоросли сценедесмус представлены в таблице 2. Значения параметров функции скоростей потребления биогенов и функции скорости отмирания для *Scenedesmus obliquus* представлены в таблице 5. Они были получены на основе экспериментальных данных по кинетике роста водоросли.

Таблица 5. Параметры функции скорости потребления биогенов и функции скорости отмирания для *Scenedesmus obliquus*

Параметр	<i>Scenedesmus obliquus</i>
$\mu_{\max}$, 1/ч	0.058 [21]
α_{xc}	0.01
α_{xp}	0.01
$C_{\max}$, г/л	0.005 ^a
$N_{\max}$, г/л	0.016 ^b
$d_{\min}$, 1/ч	0.0036
δ	14

^a параметры рассчитаны на основе данных для *Scenedesmus* sp. [22]

^b параметры рассчитаны на основе данных для *Scenedesmus* sp. [21]

Начальные условия для системы уравнений (11):

$$s = (x, y, C_b, C_m, N_b, N_m) \Big|_{t=0} = (0.0002, 0.0001, 0.02, 0.0025, 0.001, 0.0003).$$

Наблюдается осциллирующее решение, медленно приближающееся к стационарному состоянию. Динамика концентраций компонентов МЭС показаны на рисунках 6–8.

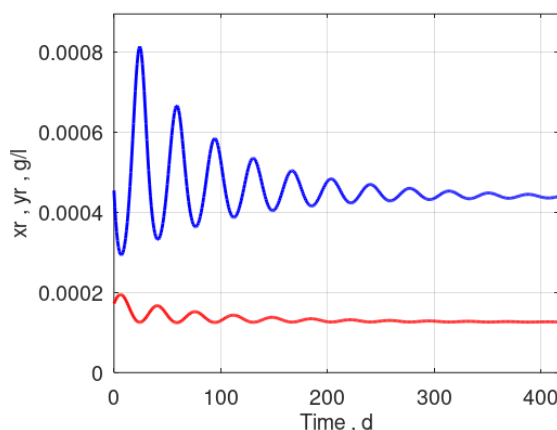


Рис. 6. Зависимость концентрации биомассы реальных клеток от времени (синяя линия – *Scenedesmus obliquus*, красная линия – *Pseudomonas*); $x_r = x/r_x$, $y_r = y/r_y$.

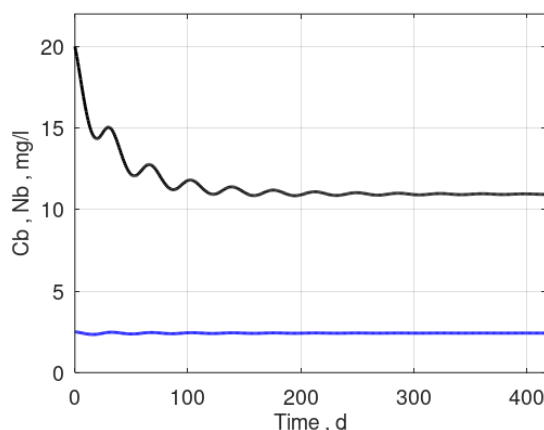


Рис. 7. Зависимость концентраций биологических форм углерода (чёрная линия) и азота (синяя линия) от времени.

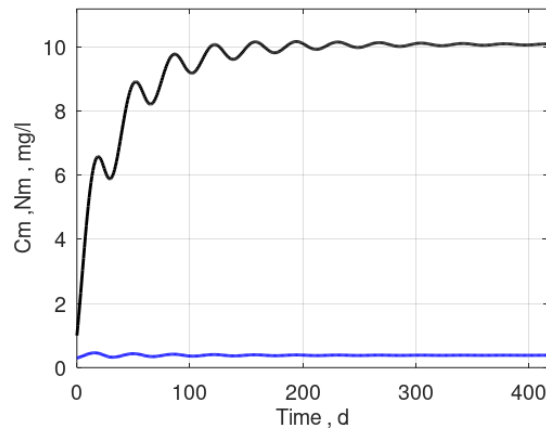


Рис. 8. Зависимость концентраций минеральных форм углерода (чёрная линия) и азота (синяя линия) от времени.

В этом эксперименте была определена концентрация биомассы отмерших клеток водоросли (0.14 г/л) и детрит не наблюдался. В стационарном состоянии наблюдалась малая концентрация биомассы биоценоза и данные о концентрации биомассы не приводились. При этом были приведены данные о концентрации клеток водоросли и бактерии. Зная концентрацию биомассы и массу клетки, можно вычислить концентрацию клеток элемента МЭС:

$$K_s = \frac{S_r}{m_s}, s = (x, y).$$

Средняя масса бактерии *Pseudomonas* $m_y = 2.2 \cdot 10^{-12}$ г была получена из данных предыдущего эксперимента. Среднюю массу клетки водоросли *Scenedesmus obliquus* можно определить из соотношения [23]

$$m_c = 0.162 \cdot V^{0.91},$$

где V – объём клетки (мкм³), m_c – сухая масса клетки (10⁻¹² г). Средний объём клетки водоросли равен 100 мкм³ [24]. Тогда средняя масса клетки водоросли равна $m_x = 1.1 \cdot 10^{-11}$ г.

Вычисленные параметры МЭС в сравнении с экспериментальными данными представлены в таблице 6.

Таблица 6. Стационарное состояние замкнутой МЭС *Scenedesmus* – *Pseudomonas* sp.

Параметр	Модель	Эксперимент [9]
K_x , 10 ⁷ клеток/л	4	6.0
K_y , 10 ⁷ клеток/л	5.7	5.0
C_b , г/л	0.011	0.056 ^a
N_b , г/л	0.002	0.006 ^a

^a оценка

ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предлагается модель замкнутой микроэкосистемы «одноклеточная водоросль – гетеротрофная бактерия». Для построения модели последовательно использовался закон минимума Либиха, как для описания скорости роста биомассы элементов микроэкосистемы, так и для описания скорости отмирания клеток водоросли и бактерии. Для описания удельной скорости потребления биогенных элементов

водорослью и бактерией предполагалась взаимная независимость скоростей поглощения биогенных элементов и использовалась функция Эндрюса (ингибирование избытком субстрата). Параметры функции удельной скорости потребления биогенных элементов были получены из экспериментальных данных о кинетике роста для водорослей и бактерии.

В работе приводятся результаты моделирования стационарных состояний микросистем *Chlorella vulgaris* – *Pseudomonas* sp. и *Scenedesmus obliquus* – *Pseudomonas* sp., которые ранее были исследованы экспериментально в лабораторных условиях. Следует отметить, что некоторые параметры эксперимента не были определены, в частности:

- 1) точное значение освещённости не известно;
- 2) химический состав водорослей (зависит от культивирования) и бактерии не определялся, поэтому в модели были использованы некоторые усреднённые характеристики;
- 3) конкретный вид бактерий рода *Pseudomonas* не был определён.

Тем не менее, в целом, вычисленные с использованием предложенной модели концентрации биомассы биоценоза в стационарном состоянии хорошо согласуются с данными эксперимента. Предложенная модель может служить основой для построения моделей более разнообразных экосистем, состоящих из различных одноклеточных водорослей, бактерий и простейших.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Салтыков М.Ю., Барцев С.И., Ланкин Ю.П. Зависимость устойчивости моделей замкнутых экосистем от числа видов. *Journal of Siberian Federal University. Biology*. 2011. Т.4. №2. С. 197–208.
2. Saltykov M.Yu., Bartsev S.I., Lankin Yu.P. Stability of closed ecology life support systems (CELSS) models as dependent upon the properties of metabolism of the described species. *Advances in Space Research*. 2012. V. 49. P. 223–229. doi: [10.1016/j.asr.2011.10.002](https://doi.org/10.1016/j.asr.2011.10.002)
3. Bartsev S., Degermendzhi A. The evolutionary mechanism of formation of biosphere closure. *Mathematics*. 2023. V. 11. P. 3218. doi: [10.3390/math11143218](https://doi.org/10.3390/math11143218)
4. Andrews J.F. A mathematical model for the continuous culture of microorganisms utilizing inhibitory substrates. *Biotechnology and Bioengineering*. 1968. V. 10. P. 707–723.
5. Takano S., Pawlowska B.J., Gudelj I., Yomo T., Tsuru S. Density-dependent recycling promotes the long-term survival of bacterial populations during periods of starvation. *mBio*. 2017. V. 8. № 1. Article No. e02336–16. doi: [10.1128/mbio.02336-16](https://doi.org/10.1128/mbio.02336-16)
6. Zelenev V.V., van Bruggen A.H.C., Semenov A.M. “BACWAVE” a spatial–temporal model for traveling waves of bacterial populations in response to a moving carbon source in soil. *Microbial Ecology*. 2000. V. 40. P. 260–272. doi: [10.1007/s002480000029](https://doi.org/10.1007/s002480000029)
7. Hulatt C.J., Thomas D.N. Dissolved organic matter (DOM) in microalgal photobioreactors: A potential loss in solar energy conversion? *Bioresource Technology*. 2010. V. 101. № 22. P. 8690–8697. doi: [10.1016/j.biortech.2010.06.086](https://doi.org/10.1016/j.biortech.2010.06.086)
8. Ковров Б.Г., Фиштейн Г.Н. Распределение биомассы в синтетических замкнутых микробиоценозах в зависимости от видовой структуры. *Известия СО АН СССР. Сер. биологическая*. 1980. Т. 1. № 5. С. 35–40.
9. Фиштейн Г.Н. *Видовая структура замкнутых микросистем*. М.: ВИНТИ, 1981. № 374-деп.
10. Josephine A., Kumar T.S., Surendran B., Rajakumar S., Kirubakaran R., Dharani G. Evaluating the effect of various environmental factors on the growth of the marine

- microalgae *Chlorella vulgaris*. *Frontiers in Marine Science*. 2022. V. 9. Article No. 954622. doi: [10.3389/fmars.2022.954622](https://doi.org/10.3389/fmars.2022.954622)
11. Maier R.M. Bacterial Growth. In: *Environmental Microbiology*. Ed.: Maier R.M., Pepper I.L., Gerba C.P. Academic Press, 2009. P. 37–54.
 12. Baird M.E., Middleton J.H. On relating physical limits to the carbon: nitrogen ratio of unicellular algae and benthic plants. *Journal of Marine Systems*. 2004. V. 49. P. 169–175. doi: [10.1016/j.jmarsys.2003.10.007](https://doi.org/10.1016/j.jmarsys.2003.10.007)
 13. Rosser H.R.Jr. Elemental composition of *Pseudomonas putida* under copper stress. Doctoral Dissertations. 1979. URL: <https://scholars.unh.edu/dissertation/1258/> (accessed 18.03.2024).
 14. Halder P., Azad A.K. Recent trends and challenges of algal biofuel conversion technologies. In: *Advanced Biofuels: Applications, Technologies and Environmental Sustainability*. Ed.: Azad A.K., Rasul M. Woodhead Publishing, 2019. P. 167–179. (Woodhead publishing series in energy).
 15. Kuhfuß F., Gassenmeier V., Deppe S., Ifrim G., Rodríguez T. H., Frahm B. View on a mechanistic model of *Chlorella vulgaris* in incubated shake flasks. *Bioprocess and Biosystems Engineering*. 2022. V. 45. P. 15–30. doi: [10.1007/s00449-021-02627-2](https://doi.org/10.1007/s00449-021-02627-2)
 16. Lee E., Zhang Q. Integrated co-limitation kinetic model for microalgae growth in anaerobically digested municipal sludge centrate. *Algal Research*. 2016. V. 18. P. 15–24. doi: [10.1016/j.algal.2016.05.019](https://doi.org/10.1016/j.algal.2016.05.019)
 17. Kim D.-J., Choi J.-W., Choi N.-C., Mahendran B., Lee C.-E. Modeling of growth kinetics for *Pseudomonas* spp. during benzene degradation. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 2005. V. 69. P. 456–462. doi: [10.1007/s00253-005-1997-z](https://doi.org/10.1007/s00253-005-1997-z)
 18. Annuar M.S.M., Tan I.K.P., Ibrahim S., Ramachandran K.B. Ammonium uptake and growth kinetics of *Pseudomonas putida* PGA1. *Asia Pacific Journal of Molecular Biology and Biotechnology*. 2006. V. 14. № 1. P. 1–10.
 19. Shoemaker W.R., Jones S.E., Muscarella M.E., Behringer M.G., Lehmkuhl B.K., Lennon J.T. Microbial population dynamics and evolution outcomes under extreme energy limitation. *PNAS*. 2021. V. 118. № 33. Article No. e2101691118. doi: [10.1073/pnas.2101691118](https://doi.org/10.1073/pnas.2101691118)
 20. Seto M., Noda M. Growth rate, biomass production and carbon balance of *Pseudomonas aeruginosa* at pH extremes in a carbon-limited medium. *Jap. J. Limnol.* 1982. V. 43. № 4. P. 263–271.
 21. Kim H.-W., Park S., Rittmann B.E. Multi-component kinetics for the growth of the cyanobacterium *Synechocystis* sp. PCC6803. *Environ. Eng. Res.* 2015. V. 20. № 4. P. 347–355. doi: [10.4491/eer.2015.033](https://doi.org/10.4491/eer.2015.033)
 22. Ketheesan B., Nirmalakhandan N. Modeling microalgal growth in an airlift-driven raceway reactor. *Bioresource Technology*. 2013. V. 136. P. 689–696. doi: [10.1016/j.biortech.2013.02.028](https://doi.org/10.1016/j.biortech.2013.02.028)
 23. Norland S., Heldal M., Tুমyr O. On the relation between dry matter and volume of bacteria. *Microbial Ecology*. 1987. V. 13. P. 95–101.
 24. Li M., Gao L., Lin L. Specific growth rate, colonial morphology and extracellular polysaccharides (EPS) content of *Scenedesmus obliquus* grown under different levels of light limitation. *Ann. Limnol. - Int. J. Lim.* 2015. V. 51. P. 329–334. doi: [10.1051/limn/2015033](https://doi.org/10.1051/limn/2015033)

Рукопись поступила в редакцию 13.01.2024, переработанный вариант поступил 28.03.2024.
Дата опубликования 03.04.2024.

===== MATHEMATICAL MODELING =====

Mathematical Model of Closed Microecosystem “Algae – Heterotrophic Bacteria”

Zalizniak V.E., Zolotov O.A.

*Siberian Federal University, Institute Of Mathematics and Computer Science, Krasnoyarsk,
Russia*

Abstract. Model of closed microecosystem “algae - heterotrophic bacteria” is proposed in this paper. Mathematical model is the Cauchy problem for system of nonlinear ordinary differential equations. To develop the model the Liebig’s law of the minimum is consistently used for both specific rate of biomass growth and specific death rate of algae and bacteria cells. To describe the specific rate of substrate utilization by algae and bacteria the Andrew’s model (substrate inhibition) is used. It is assumed that specific death rate of algae and bacteria cells increases with decreasing substrate concentration. It is also assumed that carbon and nitrogen are main biogenic elements, and in the system they are in the form of mineral substrate (CO_2 , NO_2 , NO_3 , NH_4) and biological substrate (proteins, lipids and carbohydrates). Mathematical model describing time variations in concentration of elements of microecosystem is formulated under the following assumptions: 1) stoichiometric coefficients of algae and bacteria cells are constant in the development of microecosystem; 2) utilization of carbon and nitrogen by algae and bacteria occurs independently; 3) oxygen produced by algae cells during photosynthesis completely covers the demand for oxygen for algae and bacteria cells. To verify the proposed model experimental data for microecosystems «*Clorella vulgaris* – *Pseudomonas* sp.» и «*Scenedesmus obliquus* – *Pseudomonas* sp.» are used. These systems were studied in laboratory conditions, and concentrations of elements of microecosystems in stationary state were obtained. Parameters of functions describing specific rate of utilization of biogenic elements were derived from experimental data for growth kinetics of algae and bacteria. Concentration of the biomass in stationary state obtained with the use of the proposed model is in reasonable agreement with experimental data.

Key words: *mathematical modelling of ecosystems, closed ecosystem, algae, heterotrophic bacteria, Clorella vulgaris, Scenedesmus obliquus, Pseudomonas sp.*