

Bakterijų dinamikos kompiuterinis modeliavimas

Pranas Katauskis, Vladas Skakauskas

Vilniaus Universitetas, Matematikos ir informatikos fakultetas

Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

E. paštas: pranas.katauskis@mif.vu.lt; vladas.skakauskas@maf.vu.lt

Santrauka. Nagrinėjama netiesinių diferencialinių lygčių sistema, kuri aprašo deguonimi mintančių bakterijų dinamiką atvira inde. Uždavinys sprendžiamas baigtinių skirtumų metodu. Analizuojami skaitiniai sprendiniai, gaunami taikant skirtingus skaičiavimo būdus, kai deguonies koncentracijos reikšmės sekliame sluoksnyje mažesnės už leistiną ribinę reikšmę.

Raktiniai žodžiai: kompiuterinis modeliavimas, sekclus sluoksnis, stacionarus sprendinys.

Orui atviruose induose, užpildytuose deguonimi mintančių bakterijų ir vandens mišiniu, vyksta biokonvekcija. Laikysime, kad bakterijos yra tos pačios kaip [3]. Šios bakterijos vartoja deguonį ir juda aukštesnės deguonies koncentracijos kryptimi. Deguonis nuo atviro paviršiaus skverbiasi žemyn. Bakterijos migruoja link atviro paviršiaus, kur deguonies koncentracija aukščiausia. Viršuje susiformavusios mikroorganizmų sankaupos yra nestabilios, jos grimzta žemyn didesniu greičiu negu gali sukelti sunkio jėga, po to vėl plaukia link deguonies šaltinio. Deguonimi mintančių bakterijų biokonvekcija tiriama eksperimentiškai, taip pat sudaromi ir nagrinėjami šio proceso matematiniai modeliai. Paskutiniųjų dviejų dešimtmečių darbų, skirtų mikroorganizmų biokonvekcijos matematiniam modeliavimui, apžvalga pateikta [2]. Kai bakterijų grimzdimo žemyn dėl sunkio jėgos greitis laikomas mažu, palyginus su jų plaukimo greičiu, tai oksitaksinių bakterijų dinamikai modeliuoti naudojamas Keller–Segel [4] modelis. Tiriama, kad vanduo yra nejudantis, o mikroorganizmų kilimo aukštyn greitis proporcingas deguonies gradientui. Tikslesniuose modeliuose bakterijų ir deguonies koncentracijų kitimo lygtys sprendžiamos kartu su skysčio dinamikos lygtimis [1, 3, 5]. [3] darbe tirtas stacionarių sprendinių stabilumas. [1, 5] straipsniuose nagrinėjama oksitaksinių mikroorganizmų biokonvekcija ir termo-biokonvekcija porėtuose medžiagose, kai indas šildomas iš apačios. Šiame darbe modeliuojama deguonimi mintančių bakterijų dinamika, kai bakterijų judėjimo greitis priklauso ne tik nuo deguonies gradiento, bet ir nuo sunkio bei pasipriešinimo jėgos. Sprendžiami stacionarus ir dinaminis uždaviniai. Aprašyti du dinaminio uždavinio sprendimo metodai sekliame sluoksnyje. Gaunami sprendiniai palyginami su stacionariu nagrinėjamo uždavinio sprendiniu.

1 Matematinis modelis. Stacionarus sprendinys

Nagrinėjama deguonimi mintančių mikroorganizmų dinamika nejudančiame ir nespūdziame skystyje. Laikoma, kad jėga, leidžianti bakterijų ląstelėms judėti link skysčio

paviršiaus yra lygiagreti ir proporcinga deguonies gradientui ∇D , pasipriešinimo jėga proporcinga ląstelių judėjimo greičiui v , bakterijos grimzta žemyn veikiamos sunkio jėgos. Vienmačiu atveju deguonies koncentracijai D , bakterijų ląstelių koncentracijai B ir jų judėjimo greičiui v užrašomos lygtys

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial t} &= \kappa_1 \frac{\partial^2 D}{\partial x^2} - \kappa_2 B, \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa_3 \frac{\partial B}{\partial x} - Bv \right), \\ B \frac{\partial v}{\partial t} &= -B\bar{g} - \kappa_4 v + \kappa_5 \frac{\partial D}{\partial x} \end{aligned}$$

visiems $0 < x < h, t > 0$. Reikalaujama, kad funkcijos tenkintų kraštines ir pradines sąlygas

$$\begin{aligned} D|_{x=h} &= D_0, & \left. \frac{\partial D}{\partial x} \right|_{x=0} &= 0, \\ \left(Bv - \kappa_3 \frac{\partial B}{\partial x} \right) \Big|_{x=0;h} &= 0, \\ D(0, x) &= D_0, & B(0, x) &= B_0, & v(0, x) &= v_0. \end{aligned}$$

Laikoma, kad x ašis nukreipta vertikaliai aukštyn, $x = 0$ indo apačioje, $x = h$ sluoksnio viršuje. κ_1 ir κ_3 yra deguonies ir bakterijų difuzijos koeficientai, κ_2 – bakterijų deguonies vartojimo norma, $\kappa_5 \partial D / \partial x$ yra bakterijų kilimo aukštyn dėl deguonies koncentracijos skirtumo greitis, \bar{g} – laisvo kritimo pagreitis vandenyje. Bendru atveju vietoj konstantų $\kappa_2, \kappa_3, \kappa_4, \kappa_5$ imamos funkcijos, priklausančios nuo deguonies koncentracijos. Pažymėkime D_{\min} mažiausią deguonies koncentraciją, kuriai esant bakterijos yra aktyvios. Įvedę naujus kintamuosius $\tilde{t} = (\kappa_3/h^2)t, \tilde{x} = x/h, c = (D - D_{\min})/(D_0 - D_{\min}), b = B/B_0, \tilde{v} = v/v_0$, praleidę "–", gauname uždavinį, užrašytą bedimensiais kintamaisiais:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial \tilde{t}} &= \delta \left(\frac{\partial^2 c}{\partial \tilde{x}^2} - \beta b \right), \\ \frac{\partial b}{\partial \tilde{t}} &= \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left(\frac{\partial b}{\partial \tilde{x}} - \gamma b \tilde{v} \right), \\ b \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{t}} &= \frac{a_3}{\gamma} \left(-a_1 b - \gamma \tilde{v} + a_2 \frac{\partial c}{\partial \tilde{x}} \right), \quad 0 < \tilde{x} < 1, \tilde{t} > 0, \end{aligned} \tag{1}$$

su kraštinėmis ir pradinėmis sąlygomis

$$\begin{aligned} c|_{\tilde{x}=1} &= 1, & \left. \frac{\partial c}{\partial \tilde{x}} \right|_{\tilde{x}=0} &= 0, \\ \left(\frac{\partial b}{\partial \tilde{x}} - \gamma b \tilde{v} \right) \Big|_{\tilde{x}=0;1} &= 0, \\ c(0, \tilde{x}) &= 1, & b(0, \tilde{x}) &= 1, & \tilde{v}(0, \tilde{x}) &= 1. \end{aligned} \tag{2}$$

(1), (2) uždavinio konstantos apskaičiuojamos taip: $\delta = \kappa_1/\kappa_3, \gamma = v_0 h/\kappa_3, \beta = \kappa_2 h^2 B_0/(\kappa_1(D_0 - D_{\min}))$, $a_1 = \gamma \bar{g} B_0/(\kappa_4 v_0)$, $a_2 = \kappa_5(D_0 - D_{\min})/(\kappa_4 v_0 h)$, $a_3 = \kappa_4 h^2/(\kappa_3 B_0)$.

Integruodami (1₂) srityje $[0, t] \times [0, 1]$ ir atsižvelgdami į (2), gauname, kad funkcija $b(t, x)$ visiems t tenkina sąlygą

$$\int_0^1 b(t, x) dx = 1. \quad (3)$$

Uždavinys (1), (2) skirtingai sprendžiamas priklausomai nuo to ar deguonies koncentracijos minimumas D_{\min} pasiekiamas kokiame nors sluoksnio taške ar ne. Sluoksnis vadinamas sekliu, kai $c > 0$ ir $|\nabla c| > 0$ visame sluoksnyje. Gilaus sluoksnio atveju bakterijos aktyvios tik iki tam tikro gylio, t.y. $c > 0$, $|\nabla c| > 0$, kai $x > x_r$, ir $c = 0$, $|\nabla c| = 0$, kai $x \leq x_r$. Šiame darbe nagrinėsime seklaus sluoksnio atvejį.

Iš (1)–(3) stacionariu atveju gauname uždavinį:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 c}{dx^2} &= \beta b, \\ \frac{db}{dx} &= \gamma v b, \quad 0 < x < 1, \\ v &= \frac{1}{\gamma} \left(-a_1 b + a_2 \frac{dc}{dx} \right), \\ c(1) &= 1, \quad \left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=0} = 0, \\ \int_0^1 b(x) dx &= 1. \end{aligned} \quad (4)$$

Irodoma, kad $c(x) \geq 0$, visiems $0 \leq x \leq 1$, kai β tenkina sąlygą

$$\beta \leq \beta_r = \int_0^1 \frac{dy}{f(y)}. \quad (5)$$

Funkcija f apibrėžiama formule

$$f(y) = \left(f(0) + \frac{a_2}{a_1^2} \right) e^{-a_1 y} + \frac{a_2}{a_1} y - \frac{a_2}{a_1^2}. \quad (6)$$

Be to, $c(0) = 0$, kai $\beta = \beta_r$, ir $c(0) > 0$, $0 < x \leq 1$, kai $\beta < \beta_r$. Kadangi β proporcingas h^2 , tai β_r apibrėžia didžiausią gylį, kai sluoksnį galima laikyti sekliu. Dydis $f(0)$ yra šaknis lygties:

$$\int_0^1 \frac{y dy}{f(y, f(0))} = 1.$$

Funkcijai $b(x)$ gauta išraiška

$$b(x) = g(c') = \left(b(0) + \frac{a_2 \beta}{a_1^2} \right) e^{-a_1 c' / \beta} + \frac{a_2 c'}{a_1} - \frac{a_2 \beta}{a_1^2}, \quad c' = \frac{dc}{dx}.$$

Funkcija $c(x)$ apskaičiuojama išsprendus uždavinį

$$\begin{cases} c'' = \beta g(c'), \\ c'(0) = 0, \quad c(1) = 1. \end{cases}$$

Apytiksliam uždavinio (1), (2) sprendiniui surasti naudojama konservatyvi neišreikštinė skirtuminė schema. Antros eilės dalinės išvestinės x atžvilgiu aproksimuojamos aukštesniajame laiko sluoksnyje, kiti nariai pakeičiami skirtuminiais atitikmenimis žemesniame sluoksnyje.

Sprendžiant stacionarų uždavinį (4), kai $\beta > \beta_r$, funkcija $c(x)$ yra neneigiama visiems $0 < x \leq 1$. Kai β_r pakankamai mažas, dinaminio uždavinio (1), (2) funkcija $c(t, x)$ taip pat yra teigiama visiems $0 \leq x \leq 1$, kai $\beta < \beta_r$. Atskiru atveju, kai $\beta = \beta_r$, gauname $c(t, x) > 0$, $0 < x \leq 1$, ir $c(t, 0) = 0$. Didinant β_r pastebėta, kad $c(t, x)$ tampa neigiama, kai $0 < x < 1$, tiek skaičiuojant su $\beta = \beta_r$, tiek imant didesnes $\beta < \beta_r$ reikšmes. Tai reiškia, kad deguonies koncentracija tam tikrame gylyje pasidaro mažesnė už D_{\min} . Modeliuoti du (1), (2) uždavinio sprendimo būdai: (I) leidžiama funkcijai $c(t, x)$ įgyti neigiamas reikšmes; (II) funkcija $c(t, x)$ gali įgyti tik teigiamas reikšmes. Kiekviename diskretaus tinklo taške tikrinamas $c(t, x)$ ženklas. Kai $c(t, x)$ tampa neigiama, (1₁) lygtyje imama $\beta = 0$. Skaitinių eksperimentų metu buvo analizuojamas funkcijų $b(t, x)$ ir $c(t, x)$ elgesys, skaičiuojant vienu ir kitu būdu, ir tikrinama ar gauti sprendiniai laikui bėgant artėja prie stacionaraus (4) uždavinio sprendinio, apskaičiuoto toms pačioms parametru reikšmėms.

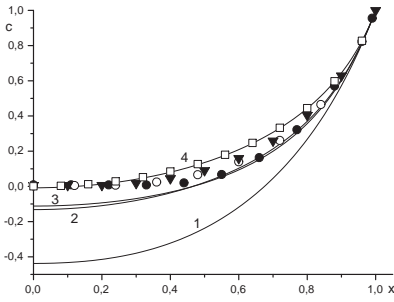
2 Rezultatai

Kompiuterinis nagrinėjamo uždavinio modeliavimas buvo atliekamas imant tokias konstantų reikšmes: $\delta = 8$, $\gamma = 450$, $a_3 = 1; 2; 5$ ir keičiant parametru a_1 , a_2 reikšmes. Kitiems parametrams esant fiksuotiems, dydis β_r yra a_1 , a_2 funkcija. Taip pat analizuota kaip sprendinių elgesys priklauso nuo bakterijų deguonies naudojimo normos $\beta < \beta_r$, kai visi kiti parametrai fiksuoti.

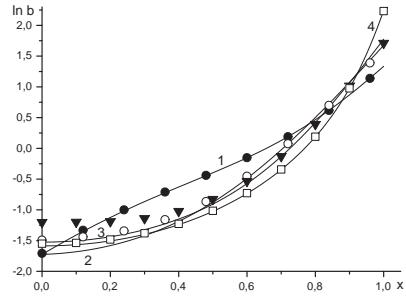
Kai $a_1 = 0,1$, $a_2 = 1$, (5), (6) uždavinio sprendinys yra $\beta_r = 2,3$. Skaitiniai eksperimentai, taikant (I) metodą, rodo, kad kraštinio uždavinio (1), (2) funkcija $c(t, x)$ yra neneigiama visiems $0 \leq x \leq 1$ ir $t > 0$, skaičiuojant su bet kokia β reikšme, tenkinančia sąlygą $1 < \beta < 2,3$. Toks pat rezultatas gaunamas, kai $a_1 = 0,01$, $a_2 = 1$. Didėjant a_2 reikšmei, auga ribinė deguonies vartojimo norma β_r . Kai $a_1 = 0,1$ ir $a_2 = 4$, turime $\beta_r = 5,1$. Spręsdami (1), (2) uždavinį su įvairiomis β reikšmėmis iš intervalo (0; 5,1), nustatome, kad funkcija $c(t, x)$ teigiama visiems t ir x , kai $1 < \beta < 3,55$. Didesnėms reikšmėms, $3,55 \leq \beta \leq 5,1$, funkcija $c(t, x)$ įgyja neigiamas reikšmes mažiems t ir x , t.y. praėjus nedaug laiko nuo proceso pradžios prie indo dugno. Ta pati neigiamų deguonies funkcijos reikšmių problema kyla naudojant Keller–Segel modelį. Neigiamų reikšmių modulis didėja, augant β . Laikui bėgant, deguonies koncentracija arti dugno sparčiai auga ir viršija reikšmę D_{\min} . Skaičiuojant kitu būdu, deguonies koncentracijai neleidžiama nukristi žemiau D_{\min} ribos. Kai $c(t, x_r) < 0$, visiems $0 < x < x_r$ (1₁) lygtyje imama $\beta = 0$.

Skaičiavimų rezultatus, kai $a_1 = 0,1$, $a_2 = 4$, $a_3 = 1$, $\delta = 8$, $\gamma = 450$, matome 1–6 pav.

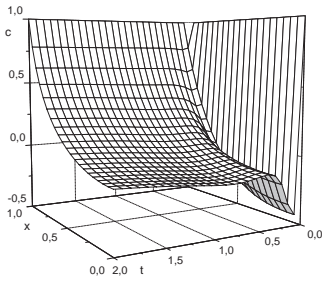
1 pav. nubrėžtos funkcijos $c(t, x)$, o 2 pav. funkcijos $\ln b(t, x)$ kreivės keturiais laiko momentais ($\beta = \beta_r = 5,1$), kai sprendiniai surasti naudojant I ir II schemą. Mažiams t ir x sprendinių skirtumai akivaizdūs, tačiau laikui bėgant skirtumai praktiškai išnyksta (4 kreivė). 3 ir 4 pav. nubrėžti funkcijų $c(t, x)$ ir $b(t, x)$ grafikai, panaudojant duomenis, gautus I metodu. Matome, kad deguonies koncentracija mažesnė už D_{\min} tik trumpą laiką.



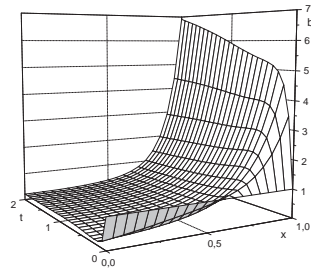
1 pav. Funkcijos $c(t, x)$ kreivės, kai taikytas I metodas (ištininė linija) ir II metodas (simboliai). Laiko t reikšmės: 0,1 – kreivės 1 ir ●, 0,5 – 2 ir ○, 1 – 3 ir ▼, 10 – 4 ir □.



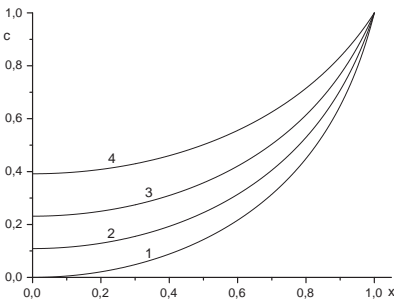
2 pav. Funkcijos $b(t, x)$ kreivės, kai taikytas I metodas (ištininė linija) ir II metodas (simboliai). Laiko t reikšmės: 0,1 – kreivės 1 ir ●, 0,5 – 2 ir ○, 1 – 3 ir ▼, 10 – 4 ir □.



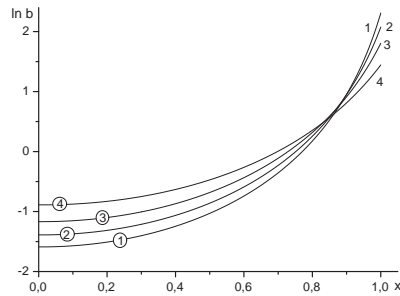
3 pav. Funkcijos $c(t, x)$ grafikas, kai taikomas I metodas.



4 pav. Funkcijos $b(t, x)$ grafikas, kai taikomas I metodas.



5 pav. Funkcijos $c(x)$ kreivės: 1 – $\beta = 5$, 2 – $\beta = 4$, 3 – $\beta = 3$, 4 – $\beta = 2$.



6 pav. Funkcijos $b(x)$ kreivės: 1 – $\beta = 5$, 2 – $\beta = 4$, 3 – $\beta = 3$, 4 – $\beta = 2$.

5 ir 6 pav. matyti parametro $\beta \leq \beta_r$ įtaka stacionaraus uždavinio (4) sprendiniui.

3 Išvados

Nagrinėtas netiesinis kraštinis uždavinys, aprašantis deguonimi mintančių ir judančių link deguonies šaltinio bakterijų judėjimą. Sudarant matematinį modelį, atsižvelgiama į sunkio ir pasipriešinimo jėgas. Spřesti stacionarus ir dinaminis uždaviniai seklaus sluoksnio atveju. Analiziškai įrodyta, kad stacionariu atveju deguonies funkcija sekliame sluoksnyje yra neneigiama. Skaitiniai eksperimentai parodė, kad didesnioms parametro β reikšmėms dinaminio uždavinio deguonies funkcija įgyja neigiamas reikšmes. Taikyti du skirtingi skaičiavimo metodai. Nustatyta, kad sprendiniai, gaunami taikant šios metodus, žymiau skiriasi proceso pradžioje. Laikui bėgant, abiem metodais surasti sprendiniai artėja prie to paties stacionaraus sprendinio.

Literatūra

- [1] S.M. Becker, A.V. Kuznetsov and A.A. Avramenko. Numerical solution of a falling bioconvection plume in a porous medium. *Fluid Dyn. Res.*, **37**(5):323–339, 2004.
- [2] N.A. Hill and T.J. Pedley. Bioconvection. *Fluid Dyn. Res.*, **37**:1–20, 2005.
- [3] A.J. Hillesdon and T.J. Pedley. Bioconvection in suspensions of oxytactic bacteria: linear theory. *Fluid Mech.*, **324**:223–259, 1996.
- [4] E.F. Keller and L.A. Segel. Models for chemotaxis. *J. Theor. Biol.*, **30**:235–248, 1971.
- [5] A.V. Kuznetsov. Investigation of the onset of thermo-bioconvection in a suspension of oxytactic microorganisms in a shallow fluid layer heated from below. *Theoret. Comput. Fluid Dynam.*, **19**:287–299, 2005.

SUMMARY

Computer modelling of a bacteria dynamics

P. Katauskis, V. Skakauskas

The system of partial differential equations, describing the dynamics of the oxygen consuming bacteria in a chamber with an open top, is investigated. The finite difference method is used for solving the problem. Solutions of two different numerical schemes are compared and analyzed when values of oxygen concentration become negative in the case of a shallow layer.

Keywords: computer simulation, shallow layer, steady-state solution.