

УДК 004.942:579.244

Клименкова Л.В., Скичко А.С.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА АНАБЕНЫ В СРЕДЕ С ИЗБЫТОЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ИОНОВ ЦИНКА****Клименкова Любовь Владимировна**, студентка 4 курса бакалавриата факультета информационных технологий и управления;**Скичко Алексей Сергеевич**, к.т.н., доцент, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов, e-mail: olf\_1@list.ru;Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия  
125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20*Метаболизм живых организмов существенно зависит от состава окружающей среды и присутствия в ней загрязняющих веществ. Настоящая работа посвящена математическому моделированию роста цианобактерии анабены в среде с избыточным содержанием ионов цинка, способствующих образованию реактивных форм кислорода в клетках и их последующей гибели. В модели выявлен параметр, являющийся функцией концентрации ионов цинка. Получено уравнение регрессии, описывающее эту функцию. Проведен поиск констант модели. Рассчитана критическая концентрация ионов цинка, не вызывающая отмирание культуры.***Ключевые слова:** анабена, ионы цинка, математическая модель, уравнение Ферхюльста, уравнение регрессии.**MATHEMATICAL MODELING OF THE GROWTH OF ANABAENA IN A MEDIUM WITH AN EXCESS CONTENT OF ZINC IONS**

Klimenkova L.V., Skichko A.S.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

*Metabolism of living organisms essentially depends on the environment and on pollutions in it. This work deals with mathematical modeling of the growth of anabaena in a medium with an excess content of zinc ions which promote the formation of reactive oxygen species in cells and their subsequent death. In the model, the parameter depending on the concentration of zinc ions was identified. The regression equation describing this function was obtained. The model constants were determined. The critical zinc ion concentration that does not cause a culture dying was calculated.***Keywords:** anabaena, zinc ions, mathematical model, Verhulst equation, regression equation.

Данная работа сосредоточена на исследовании влияния среды с избыточным содержанием ионов цинка на рост анабены. Актуальность темы заключается в том, что рассматриваемое вещество активно используется в различных областях промышленности, включая текстильную, горнодобывающую, металлургическую. Но продукты, в которые входит цинк, не всегда используются полностью. Таким образом, остаются отходы, которые сбрасываются в водные экосистемы, попадают в почву, что наносит вред биосфере Земли.

Ионы данного тяжелого металла негативно влияют на рассматриваемую культуру. С увеличением концентрации  $Zn^{2+}$  в клетках увеличивается синтез реактивных форм кислорода (РФК), вызывающих у анабены физиологический стресс [1]. РФК быстро атакует все виды биомолекул, такие как нуклеиновые кислоты, белки, липиды и аминокислоты, что приводит к гибели водоросли. При достаточно высокой концентрации внутриклеточный РФК вызывает разрыв клеток и попадает в среду [2].

Кинетика роста анабены в условиях избыточного содержания ионов цинка подробно исследована в работе [1]. Поскольку цинк является микроэлементом и его ионы входят в состав сбалансированной питательной среды, под избыточным содержанием  $Zn^{2+}$  в данной работе

понимается именно его дополнительное количество, сверх того, что в питательной среде. Значительного ингибирования культуры не наблюдается при концентрациях  $Zn^{2+}$  ниже 0,3 мг/л, в то время как биомасса анабены заметно уменьшается с увеличением концентрации  $Zn^{2+}$  от 0,5 до 1,0 мг/л. Более высокая начальная концентрация ионов цинка значительно снижает количество клеток.

В связи с ограниченностью имеющихся экспериментальных данных (отсутствие кинетических кривых по потреблению клетками ключевых субстратов), наиболее простым вариантом решения задачи построения математической модели изучаемого процесса является уравнение Ферхюльста:

$$\frac{dx}{dt} = x \left( r - \frac{r}{K} x \right), (1)$$

где  $x$  – биомасса анабены, измеренная в единицах оптической плотности (е.о.п.);  $t$  – время, ч;  $r$  – удельная скорость роста культуры, 1/ч;  $K$  – коэффициент, отвечающий за отмирание культуры, е.о.п.

Уравнение (1) показывает равновесие между ростом и гибелью клеток. Первое слагаемое в скобках отвечает за рост анабены, второе – за её отмирание.

Расчёт осуществлялся в программе Excel. Для расчёта использовалась явная разностная схема Эйлера.

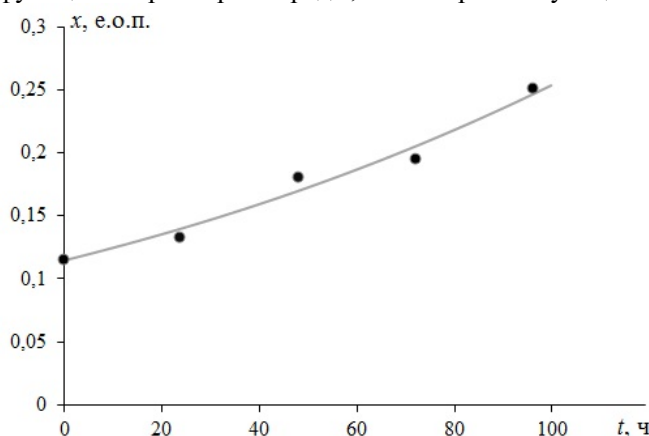
На первом этапе разработки математической модели были найдены константы уравнения (1), соответствующие росту анабены в среде без загрязнителя:  $r = 0,00905 \text{ ч}^{-1}$ ;  $K = 1,7 \text{ е.о.п.}$  Подбор данных констант осуществлялся таким образом, чтобы критерий квадратичного рассогласования между экспериментальными данными и значениями, полученными с помощью математической модели, был минимальным:

$$R = \sum \frac{(x_{\text{эксп}} - x_{\text{расч}})^2}{x_{\text{эксп}}^2} \rightarrow \min, \quad (2)$$

где  $x_{\text{эксп}}$  – экспериментальное значение биомассы анабены в конкретный момент времени, е.о.п.;

$x_{\text{расч}}$  – рассчитанное значение биомассы анабены в этот же момент времени, е.о.п.

Далее требовалось доработать математическую модель с целью описания роста культуры в средах с различными избыточными концентрациями ионов цинка. Удельная скорость роста анабены  $r$  – функция параметров среды, благоприятствующих



росту клеток. Поскольку состав среды в исследовании [1] был сбалансированным, то было принято допущение, что найденное значение  $r$  должно оставаться постоянным вне зависимости от изменения концентрации ионов цинка в среде. Но коэффициент отмирания  $K$  должен зависеть от количества  $\text{Zn}^{2+}$ .

Такой подход оказался удачным лишь для низких концентраций ионов цинка, не более 0,3 мг/л (рис.1). Распространить его на случай более высоких концентраций  $\text{Zn}^{2+}$  оказалось невозможным, так как даже при высоких концентрациях  $\text{Zn}^{2+}$  в среде в первые сутки происходит рост анабены, а негативное воздействие ионов цинка на клетки сказывается позже, с некоторым запаздыванием во времени, соответствующем периоду образования РФК и разрушению ими жизненно важных биомолекул. Т.е. кривая роста имеет экстремум (рис. 1), описать который уравнение Ферхюльста не способно. Оно описывает либо рост культуры при  $K > x$ , либо её отмирание при  $K < x$ . Следовательно, использование уравнение Ферхюльста для описания данного процесса возможно только в том случае, если значение коэффициента  $K$  будет изменяться в ходе процесса.

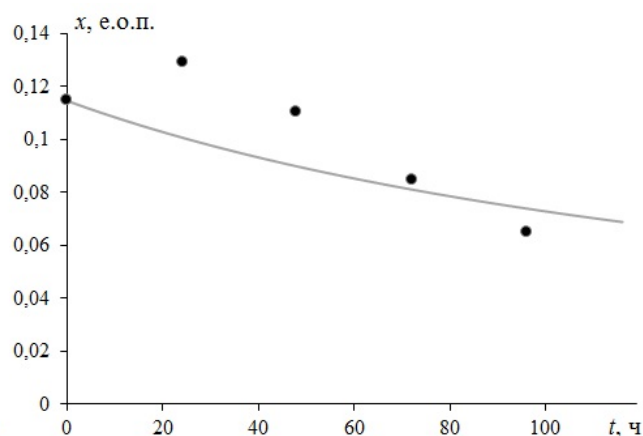


Рис.1. Расчёт кривых роста анабены по уравнению (1) при концентрациях  $\text{Zn}^{2+}$  0,1 мг/л (слева) и 0,5 мг/л (справа)

Действительно, на образование РФК требуется некоторое время, на протяжении которого клетки могут нормально расти, но в последующем их ростовые свойства неизменно ухудшаются [1]. Это означает, что уравнение Ферхюльста необходимо дополнить уравнением, описывающим уменьшение коэффициента  $K$  во времени от значения  $K_0 = 1,7 \text{ е.о.п.}$ , соответствующего культуре, растущей в благополучных условиях, до некоторого значения  $K^*$ , зависящего от концентрации ионов цинка в среде. Согласно качественной теории дифференциальных уравнений это должно быть уравнение, «забывающее» начальные условия и описывающее тенденцию стремления изучаемой величины к стационарному значению (иначе говоря, имеющее неподвижную точку типа «устойчивый узел»). Таким образом, уравнение для изменения коэффициента  $K$  должно иметь вид:

$$\frac{dK}{dt} = -\nu(K - K^*), \quad (3)$$

где  $\nu$  – удельная скорость изменения коэффициента  $K$ , 1/ч.

Уравнение (3) должно быть дополнено начальным условием:

$$K(t=0) = K_0 = 1,7 \text{ е.о.п.} \quad (4)$$

Проведя интегрирование уравнения (3) с учётом начального условия (4), получим алгебраическое уравнение, удобное для расчётов:

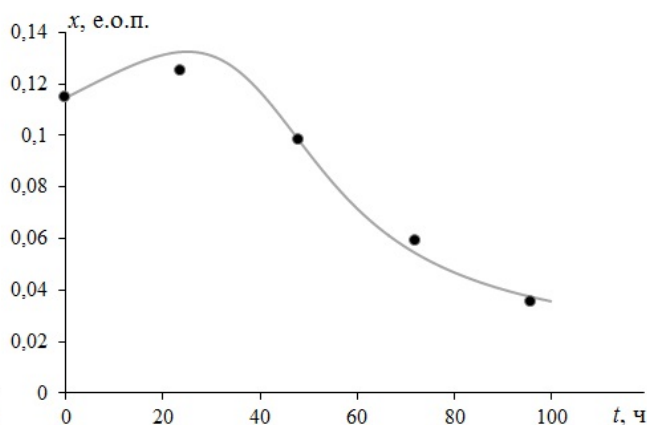
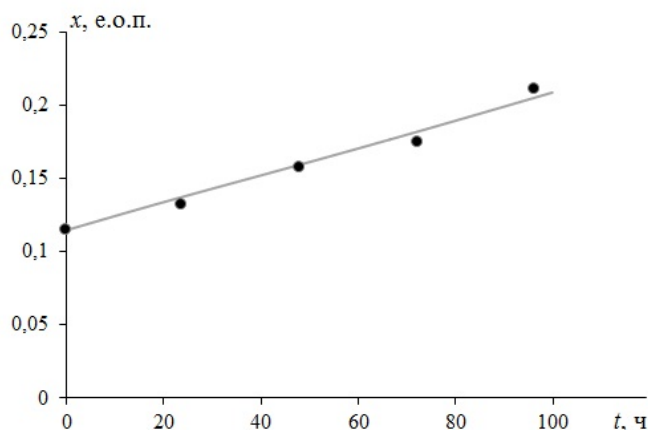
$$K = (K_0 - K^*)e^{-\nu t} + K^*. \quad (5)$$

В таблице 1 приведены результаты поиска значений констант уравнения (5). При этом значение  $\nu$  удалось подобрать таким образом, чтобы оно не зависело от концентрации ионов цинка ( $Z$ ) в среде.

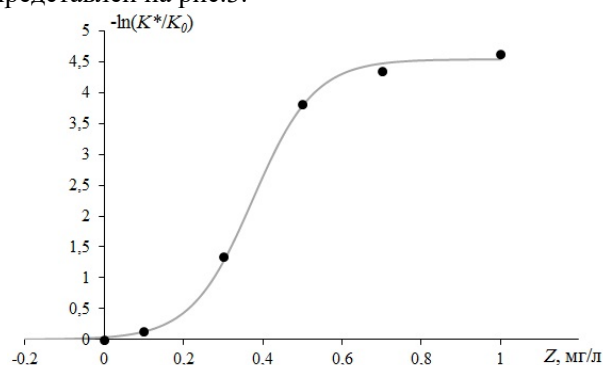
На рис.2 приведены примеры расчёта кривых роста анабены с учётом формулы (5) и данных таблицы 1.

Таблица 1. Зависимость значений констант уравнения (5) от концентрации  $Zn^{2+}$ 

Z, мг/л	$K^*$ , е.о.п.	$\nu$ , ч <sup>-1</sup>
0	1,700	0,107
0,1	1,440	
0,3	0,430	
0,5	0,036	
0,7	0,021	
1,0	0,016	

Рис.2. Расчёт кривых роста анабены по уравнениям (1) и (5) при концентрациях  $Zn^{2+}$  0,3 мг/л (слева) и 1,0 мг/л (справа)

Далее необходимо было подобрать уравнение регрессии для описания зависимости  $K^*$  от концентрации ионов цинка (таблица 1). Классические зависимости (полиномиальная, степенная, показательная, логарифмическая, гиперболическая, экспоненциальная) не дали удовлетворительных результатов. Поскольку полученные значения  $K^*$  отличались на два порядка, было принято решение прологарифмировать их. Причём данное преобразование будет более удобным, если поместить в нуль точку, соответствующую отсутствию избытка ионов цинка, т.е. взять логарифм от отношения ( $K^*/K_0$ ), а также избежать отрицательных чисел, учитывая, что  $K^* \leq K_0$ . Таким образом, итоговое преобразование имело вид:  $-\ln(K^*/K_0)$ . Результат логарифмирования представлен на рис.3.

Рис.3. Зависимость  $-\ln(K^*/K_0)$  от концентрации  $Zn^{2+}$  (Z)

Видно, что полученная зависимость имеет вид возрастающей S-кривой, которую можно описать при помощи интегрированной формы уравнения Ферхюльста с тремя константами. Таким образом, искомое уравнение регрессии имеет вид:

$$K^* = 1,7 \exp\left(-\frac{\alpha \cdot \exp(\beta Z)}{\gamma + \exp(\beta Z)}\right), \quad (6)$$

где  $Z$  – концентрация ионов цинка, мг/л;  
 $\alpha = 4,54$ ;  $\beta = 12,88$ ;  $\gamma = 125$ .

На основе полученной математической модели была определена критическая концентрация ионов цинка, при которой скорости роста и отмирания анабены с течением времени становятся одинаковыми: 0,39 мг/л.

#### Список литературы

1. Tang Y., Li S., Qiao J., Wang H., Li L. Synergistic effects of nano-sized titanium dioxide and zinc on the photosynthetic capacity and survival of *Anabaena* sp. // Int. J. Mol. Sci. 2013. V. 14, № 7. P. 14395-14407.
2. Choudhary M., Jetley U.K., Khan M.A., Zutshi S., Fatma T. Effect of heavy metal stress on proline, malondialdehyde, and superoxide dismutase activity in the cyanobacterium *Spirulina platensis* S5 // Ecotoxicol. Environ. Safety. 2007. V. 66, № 2. P. 204-209.