



16-20 октября 2017, ЭкоМатМод, Пущино

Многомасштабное моделирование пространственных паттернов динамических режимов конкуренции микроорганизмов в почве

Васильева Н.А.^{1*}, Зайцева М.Ф.², Винтер А.М.², Владимиров А.А.^{1,3}

¹Почвенный институт им. В.В. Докучаева, Междисциплинарная лаборатория
математического моделирования почвенных систем, Москва, Россия

²Университет Осло, Центр экологического и эволюционного синтеза, Осло,
Норвегия

³Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

TerMARisk

Multidisciplinary approach to anticipate critical regime shifts in ecosystems -
deriving management guidance for terrestrial and marine systems at risk

Поскольку микроорганизмы в почве способны менять свойства своего окружения, то если реализуется сложная самоорганизация микроорганизмов в структуры, которые существуют достаточно долго, то оставляемый ими след в процессе жизнедеятельности может быть механизмом, отвечающим за формирование физической структуры почвы на разных пространственно-временных масштабах.

Цель выявить механизмы стабилизации ПОВ через описание длительной динамики ПОВ микроскопической моделью

Линия развития модели:

- Микромасштаб:
 - Введение процессов трансформации ПОВ в виде системы реакция-диффузия
 - Симуляция потока гетеротрофного дыхания почвы
- Агрегатный уровень:
 - Введение градиента кислорода
 - Введение обратной связи с физическими свойствами среды (влажность, кислород, размером пор)
 - Параметризация модели лабораторными данными инкубации почвы в сериях температуры и влажности
 - Оценка чувствительности лабильного и стабильного ПОВ к температуре и влажности
- Почвенный горизонт:
 - Введение физических фракций, зависимости скоростей разложения ПОВ от содержания орг.С во фракции
 - эффект агрегации в виде функции от содержания легкой фракции почвы
 - Параметризация на декадных временных сериях данных длительных экспериментов
 - Тестирование механизма стабилизации
 - Климатические сценарии и смены типа землепользования
- План масштабирования на уровень профиля, поля (100-200 га) и хозяйства

Экспериментальная станция, Версаль (42 parcel)



Dystric Eutrocept (деланки 26, 32, 42) – бесменный пар

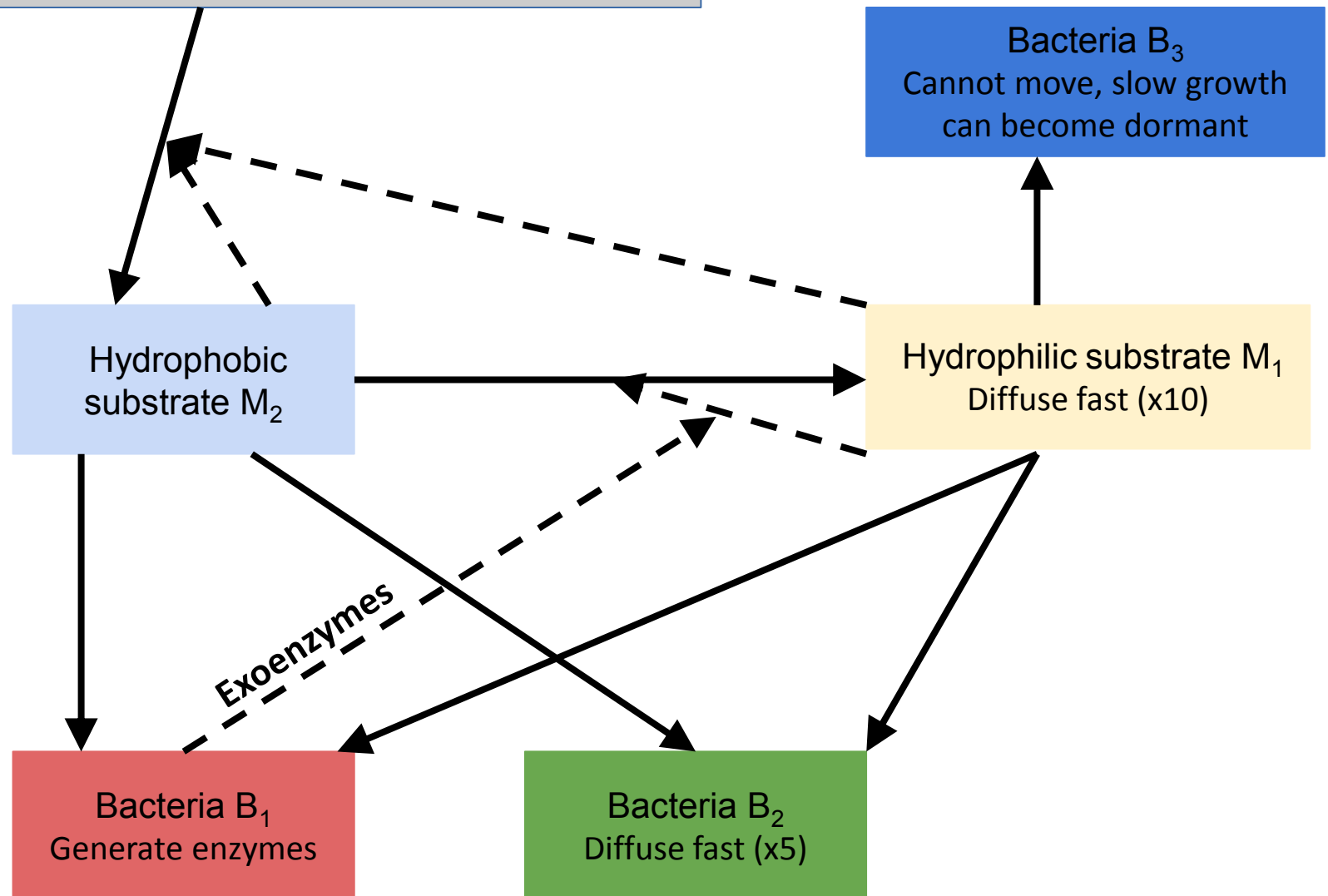
I. Микромоделъ

Схема модели

Residual soil organic matter (source).

$$S = C - M_1 - M_2 - B_1 - B_2 - B_3$$

Solid arrows show organic Matter transformation,
dashed arrows – catalysis



Формулировка

Модель имеет вид системы уравнений реакция-диффузия

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D\Delta \mathbf{u} + \phi(\mathbf{u})$$

Где $\mathbf{u}$ вектор переменных состояния, D – диагональная матрица коэф. диффузии

$$\phi_{B_1} = k_1 M_1 B_1 + k_2 B_1 M_2 e^{-k_1 M_1 / k_r} - k_r B_1$$

$$\phi_{B_2} = k_1 M_1 B_2 + k_2 B_2 M_2 e^{-k_1 M_1 / k_r} - k_r B_2$$

$$\phi_{B_3} = k_5 M_1 B_3 - k_{r3} B_3^2$$

$$\phi_{M_1} = (k_3 B_1 + k_4) M_1 M_2 - k_1 M_1 (B_1 + B_2) - k_5 M_1 B_3$$

$$\phi_{M_2} = k_s M_1 M_2 S - (k_3 B_1 + k_4) M_1 M_2 - k_2 (B_1 + B_2) M_2 e^{-k_1 M_1 / k_r}$$

Переключение на M_2
При недостатке M_1

$$S = C - B_1 - B_2 - B_3 - M_1 - M_2$$

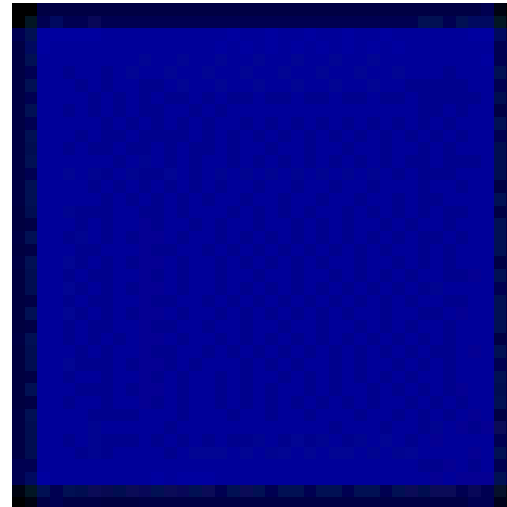
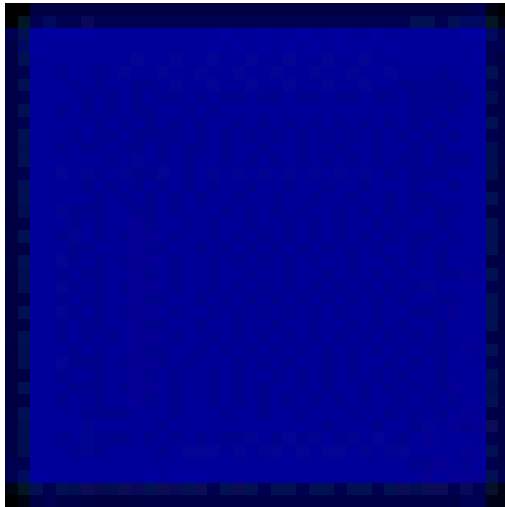
где C общее содержание органического углерода, которое является бифуркационным параметром в модели

Система решалась на двуметной сетке с нулевыми потоками на границах

Свойства микромоделей

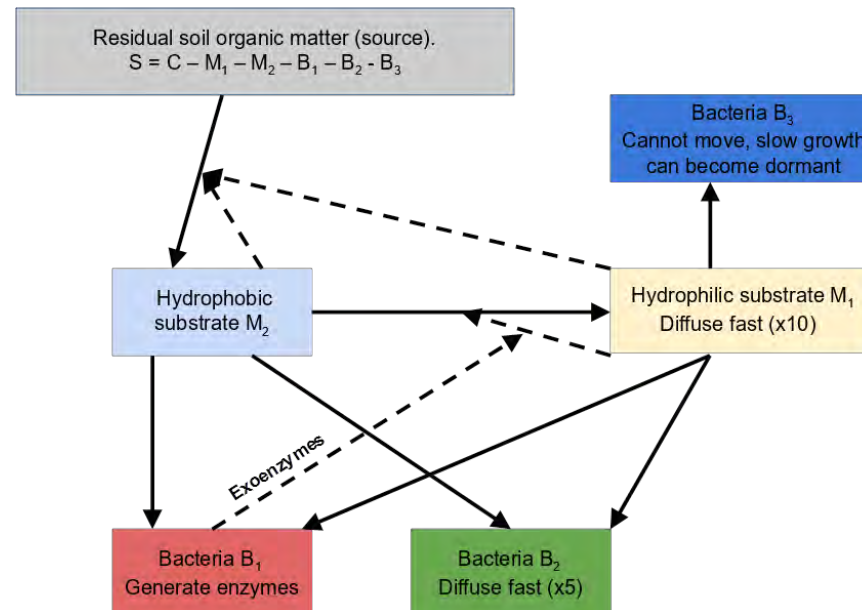
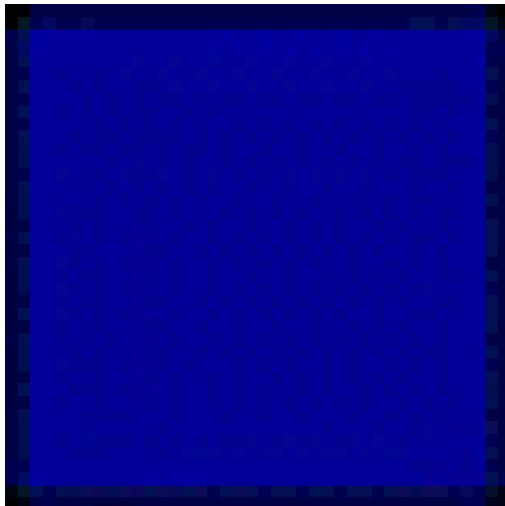
- Цикл углерода:
 - закрытый (источник=сток)
 - открытый (с выходом CO_2 и поступлением растительных остатков)
- Кислород, вода, температура:
 - постоянны
 - Распределение в результате градиента (от поверхности агрегата или поверхности почвенного профиля)
- Aggregate structure:
 - отсутствует
 - Сферически-симметричный агрегат (эластичные поры, размер зависит от смачиваемости ПОВ в них и радиуса)
 - На основе состава физических (грануло-денсиметрических) фракций (физическая окклюзия и эффект адсорбции на минеральной матрице и пирогеом углероде)

Пространственно-временные паттерны конкуренции



В зависимости от значений параметра появляются разные режимы. Показаны три режима при:

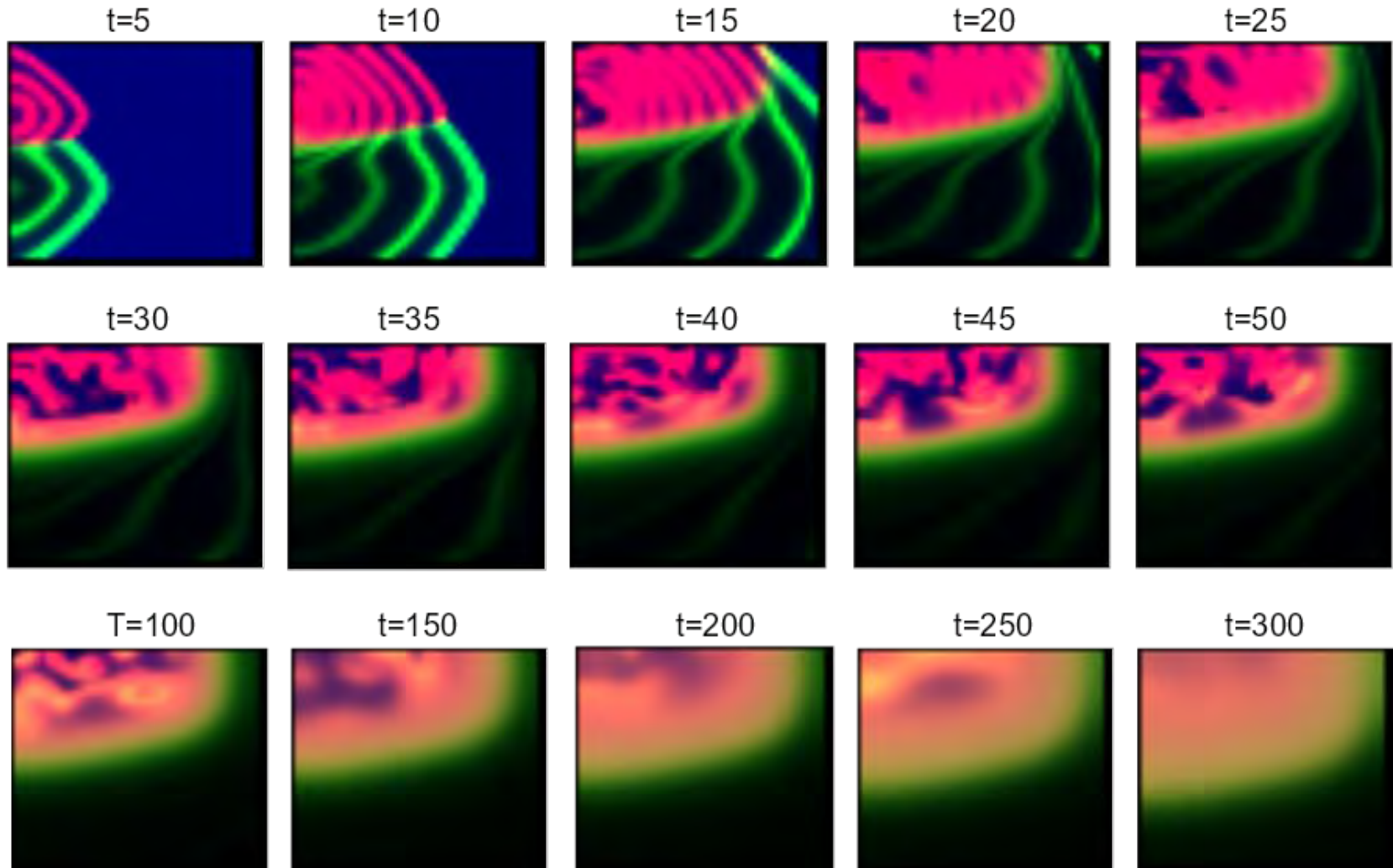
- Коэффициенты не зависят от координат
- Малое возмущение
- k_4 скорость абиотического превращения $M_2 \rightarrow M_1$



1. B_1, B_3 растут (скорость $M_2 \rightarrow M_1$ $k_4=0$)
2. Все типы бактерий формируют паттерны
3. B_1 и B_2 переживают на фоне B_3 ($k_4=0$)

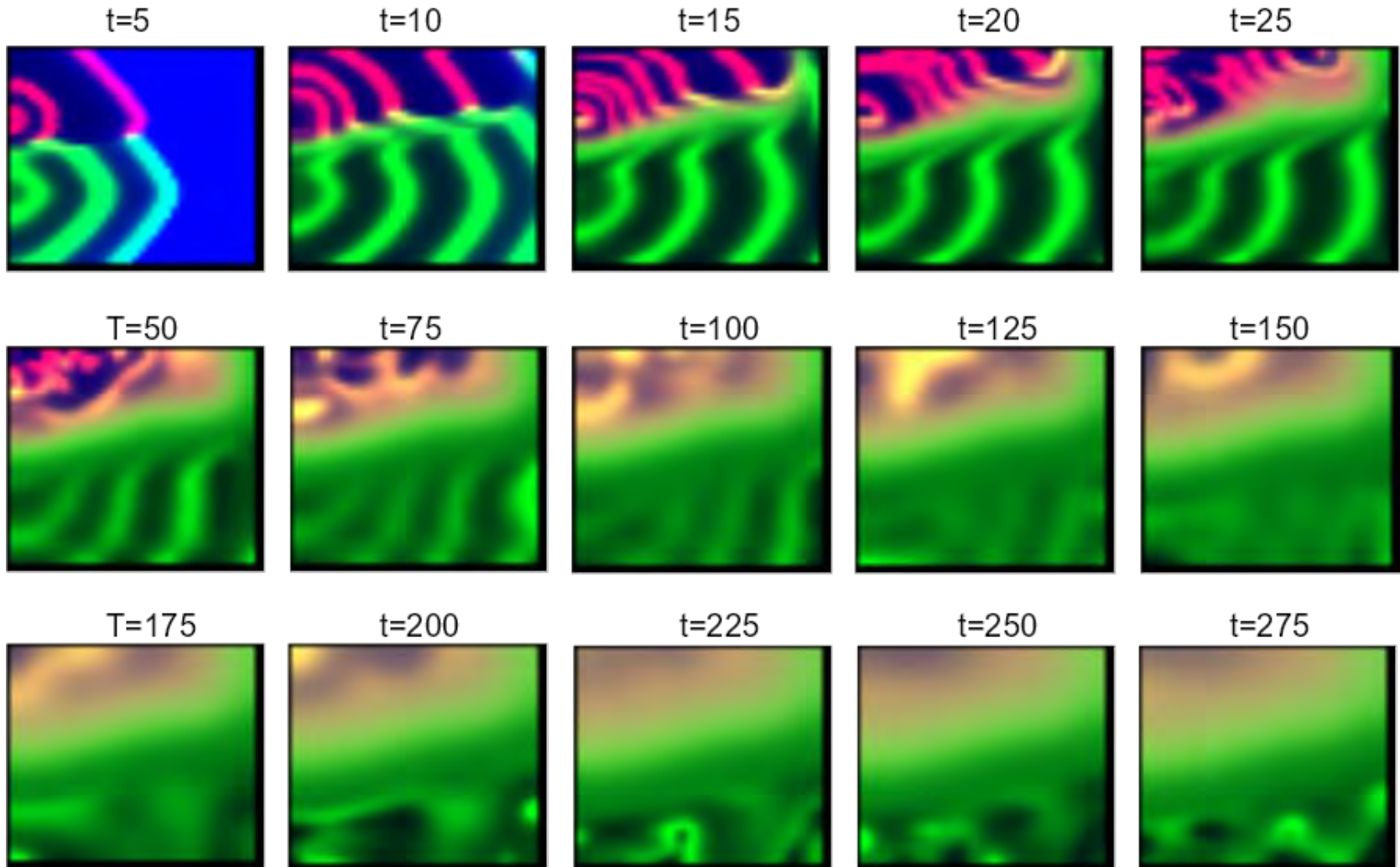
Пространственно-временные паттерны

B1, B3 растут внутри. B2 – стационарной границей снаружи (скорость перехода M2 -> M1 без экзоферментов: $k_4=0$)



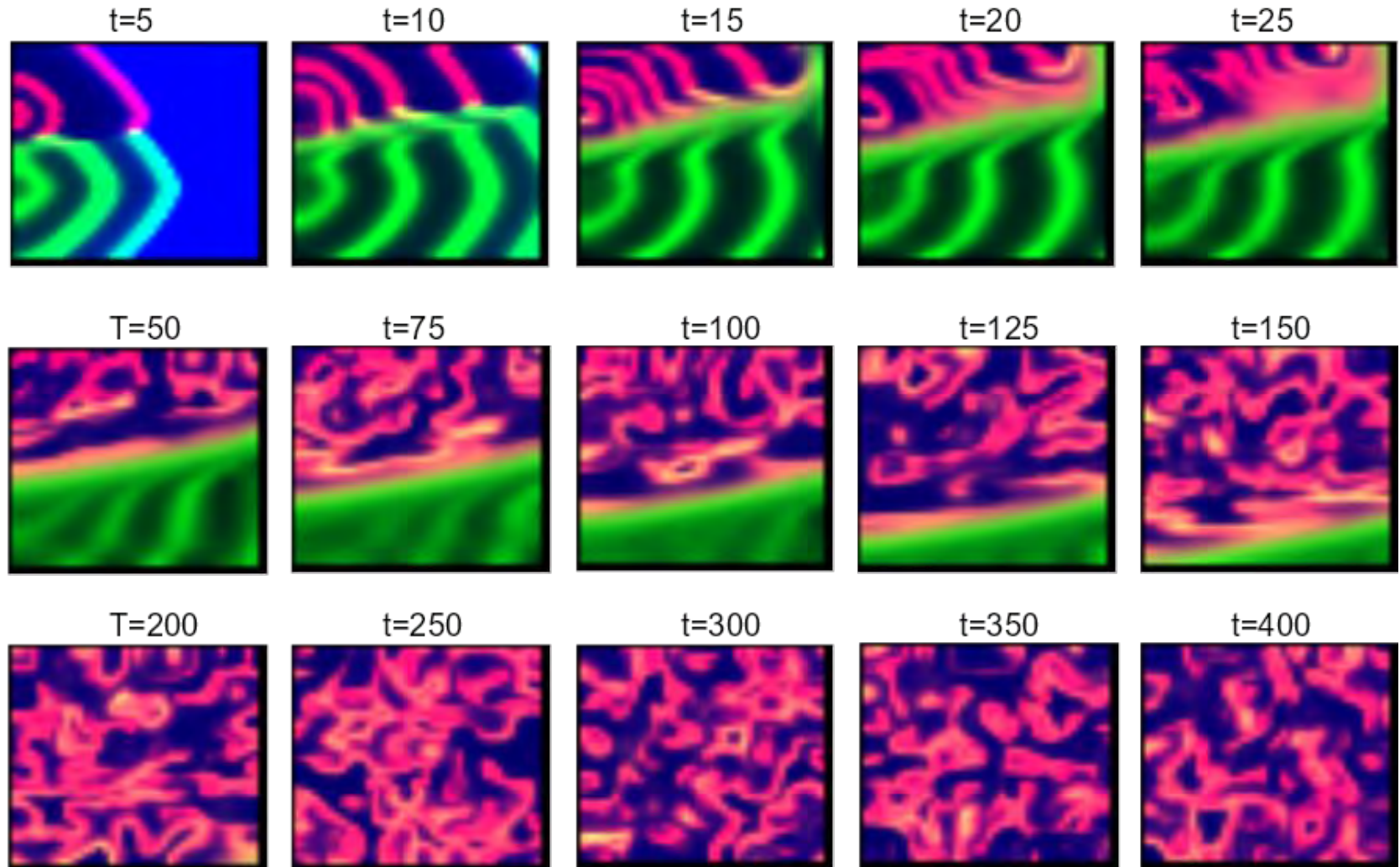
Пространственно-временные паттерны

Все типы бактерий осциллируют, B2 формирует волны снаружи ($k_4=0.26$)

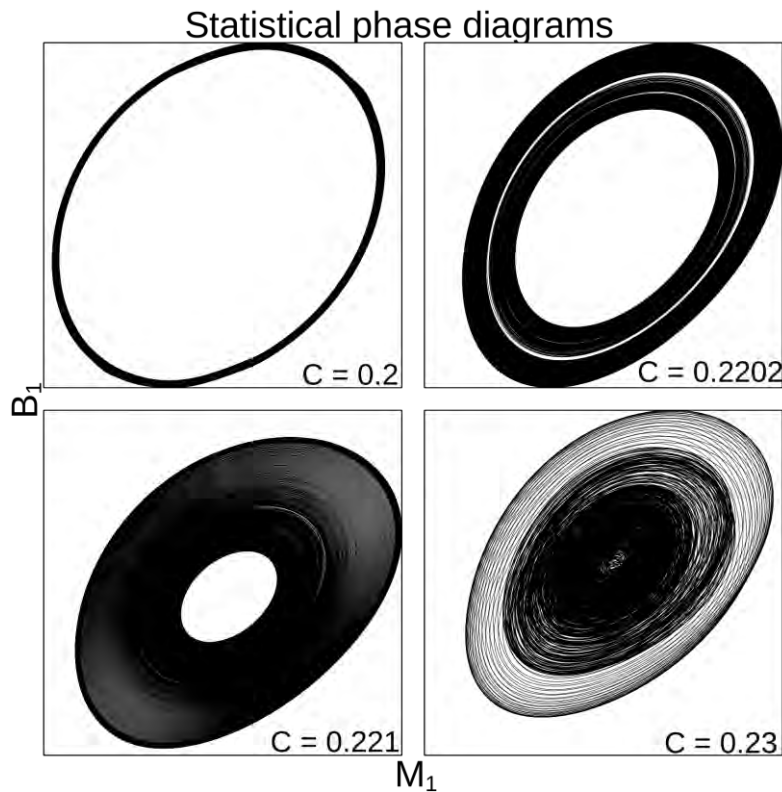


Пространственно-временные паттерны

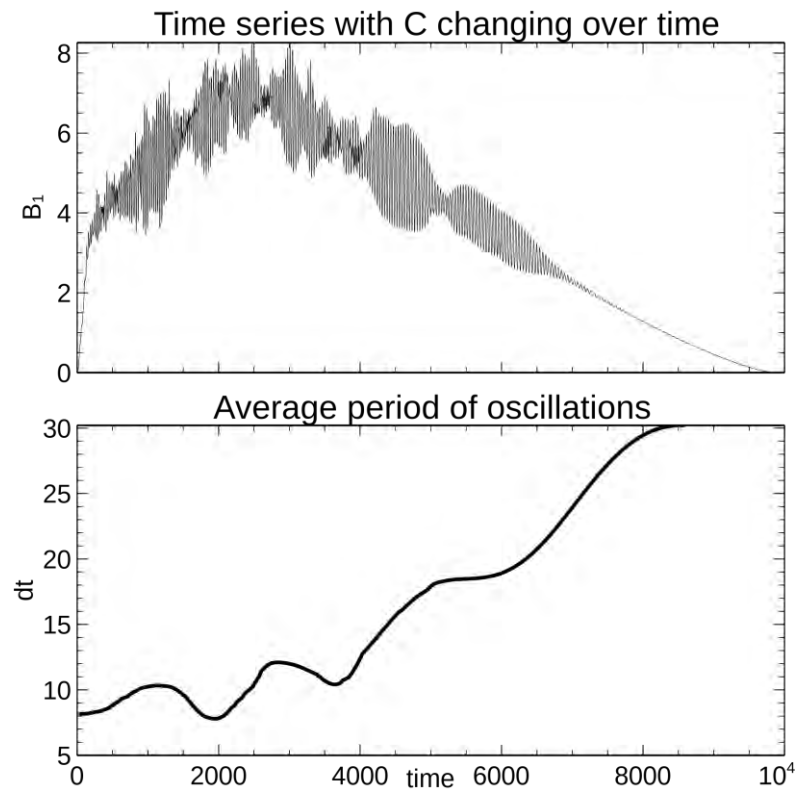
- В1 и В2 перемешаны и осциллируют на фоне В3 ($k_4=0.25$)



Фазовые диаграммы и временные серии



Фазовые диаграммы общего количества бактерий B_1 и субстрата M_1 при разных величинах общего содержания орг. углерода.



Временная серия общего количества B_1 с медленным изменением параметра C от 0.3 до 0.175 (вверху), и средний период осцилляций (critical slowing down).

- Получаем динамические режимы в нелинейной системе на различных временных масштабах
- Эта модель может быть применена для моделирования ризосферных границ микробного роста, эффекта экзоферментов и формирования паттерна агрегации почвенных частиц.

Модель агрегата: параметризация
лабораторными экспериментами по
дыханию почвы

Свойства модели агрегата

- Цикл углерода:
 - закрытый (источник=сток)
 - открытый (с выходом CO_2 и поступлением растительных остатков)
- Кислород, вода, температура:
 - постоянны
 - Распределение в результате градиента (от поверхности агрегата или поверхности почвенного профиля)
- Aggregate structure:
 - отсутствует
 - Сферически-симметричный агрегат (эластичные поры, размер зависит от смачиваемости ПОВ в них и радиуса поры)
 - На основе состава физических (грануло-денсиметрических) фракций (физическая окклюзия и эффект адсорбции на минеральной матрице и пирогеом углероде)

Физические свойства в модели микробного роста

- Влияние температуры на все реакции по Аррениусу
- Концентрации влажности и кислорода введены линейно в виде множителей к константам скоростей всех реакции для прямой или обратной зависимости процесса (W , O или $(1-W)$, $(1-O)$) приводя в итоге к общему нелинейному эффекту

Biochemical cycle equations

$$\phi_{B1} = E_{M1B1} + E_{M2B1} - rB_1$$

$$\phi_{B2} = E_{M1B2} + E_{M2B2} - rB_2$$

$$\phi_{B3} = E_{M1B3} - rB_3$$

$$\phi_{M1} = -E_{M1B1} - E_{M1B2} - E_{M1B3} + E_{M1M2} - k_5(1 - W)(1 - O)M_1$$

$$\phi_{M2} = -E_{M2B1} - E_{M2B2} - E_{M1M2} + k_5M_1M_2WO(-k_cC - B_1 - B_2 - B_3 - M_1 - M_2 + N)$$

$$\phi_O = -OW(k_1B_1 + k'_1B_2 + k''_1B_3)M_1$$

$$\phi_C = (rB_1 + rB_2 + r'B_3)O$$

where

$$E_{M1B1} = (k_1O + k_2)WM_1B_1$$

$$E_{M2B1} = k_{22}M_2W(1 - O)\exp(-(k_1O + k_{22})WM_1/r)B_1$$

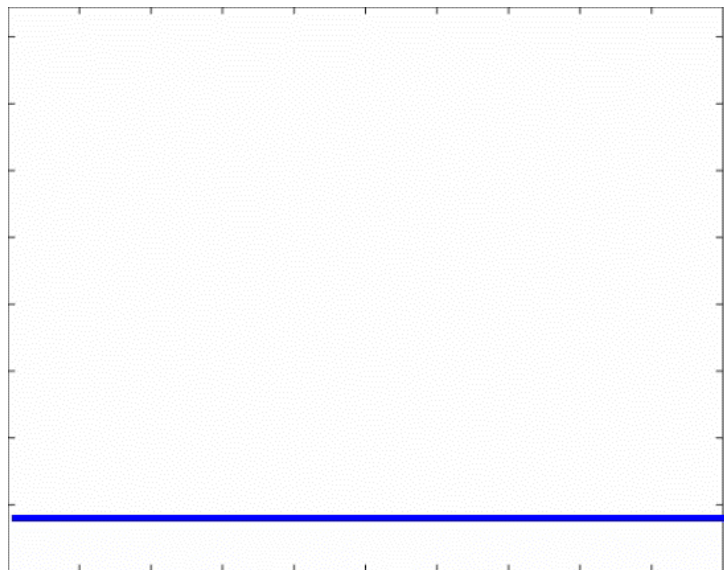
$$E_{M1B2} = (k'_1O + k'_2)WM_1B_2$$

$$E_{M2B2} = k_{22}M_2W(1 - O)\exp(-(k'_1O + k_{22})WM_1/r)B_2$$

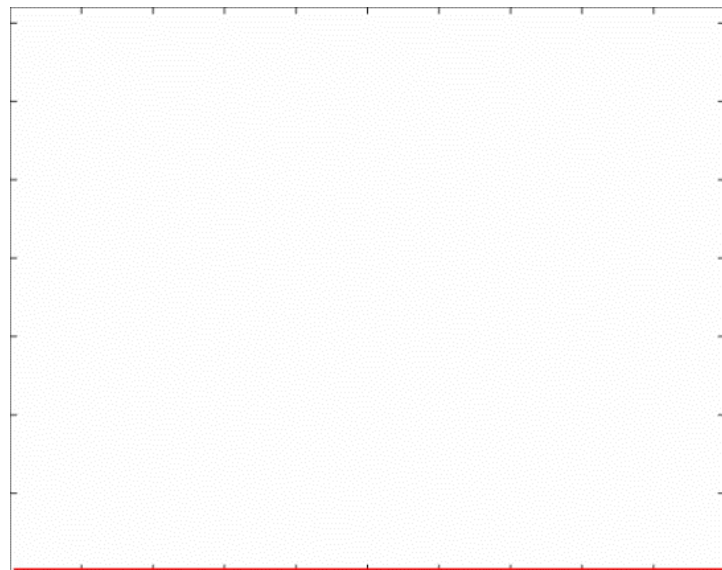
$$E_{M1B3} = k''_1OWM_1B_3$$

$$E_{M1M2} = (k_3B + k_4)(OWM_1M_2 - k_6(1 - O)(1 - W)M_1)$$

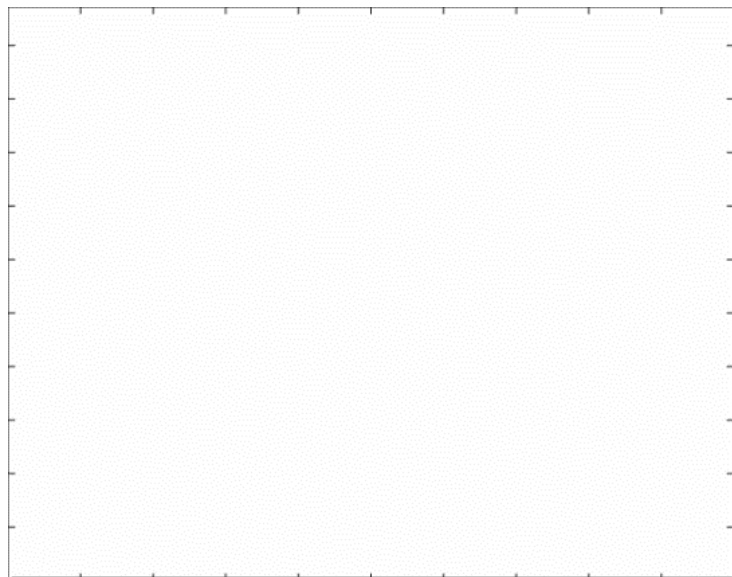
Bac



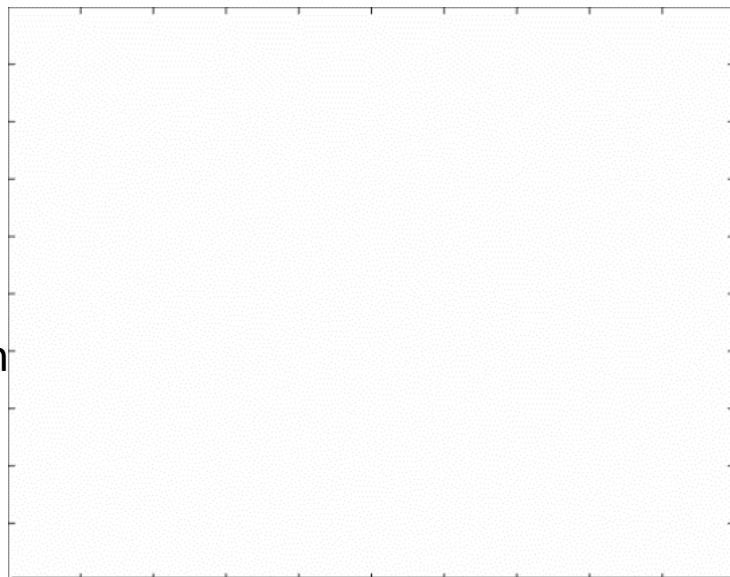
M2



Pores



Oxygen

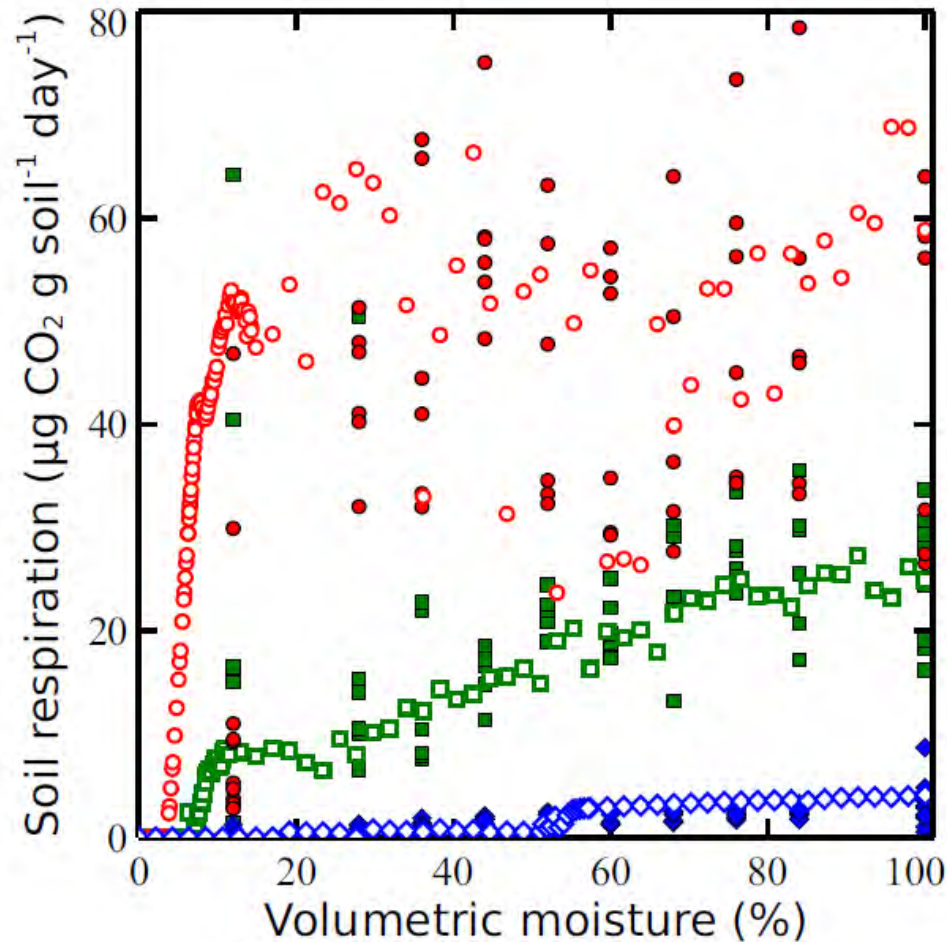


Moisture dependence of soil respiration

Temperature series: 5 °C (blue), 20 °C (green), 35 °C (red)

Filled symbols – experimental data, empty symbols – simulations

Parametrization coefficients: $E_{M1} = 41 \text{ kJ/mol}$, $E_{M2} = 108 \text{ kJ/mol}$



Model
formulation
Soil
respiration

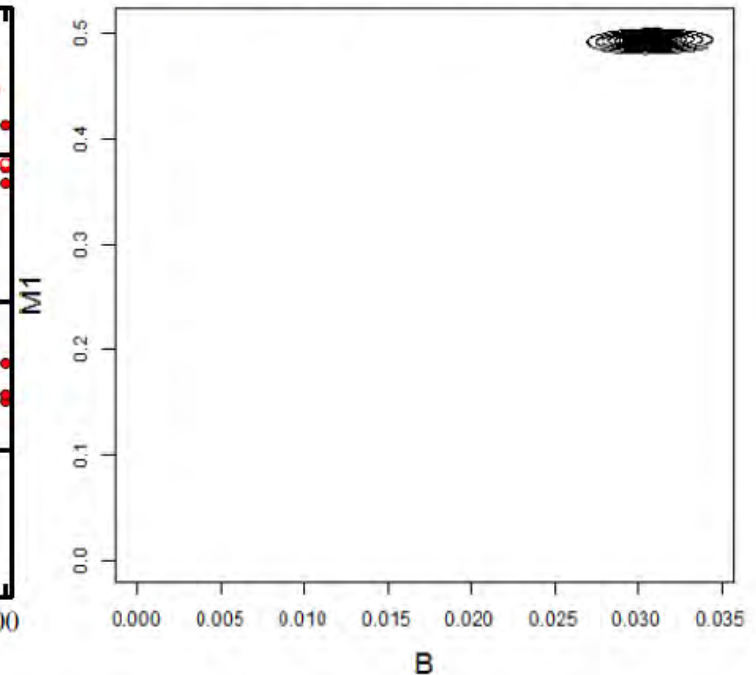
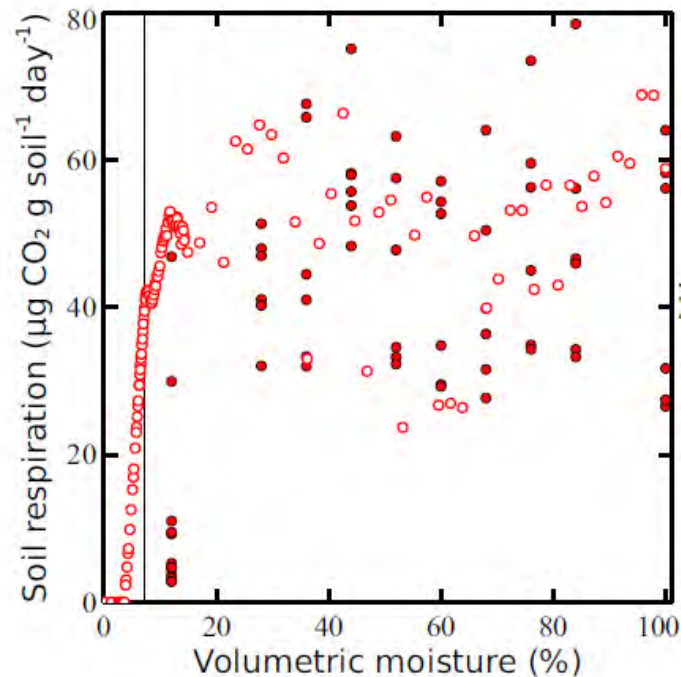
Comparison
with
experiment
Complex
system
behavior,
Auto-
oscillations,
Bifurcations
cascade
with soil
moisture

Fungi and
diffusive
bacteria
Moving
bacteria

Period doubling route to chaos

Focus

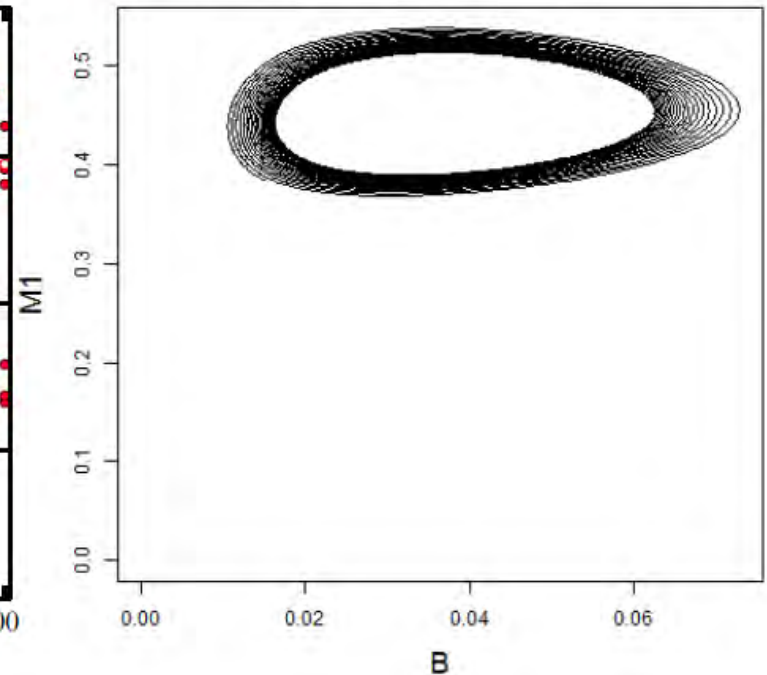
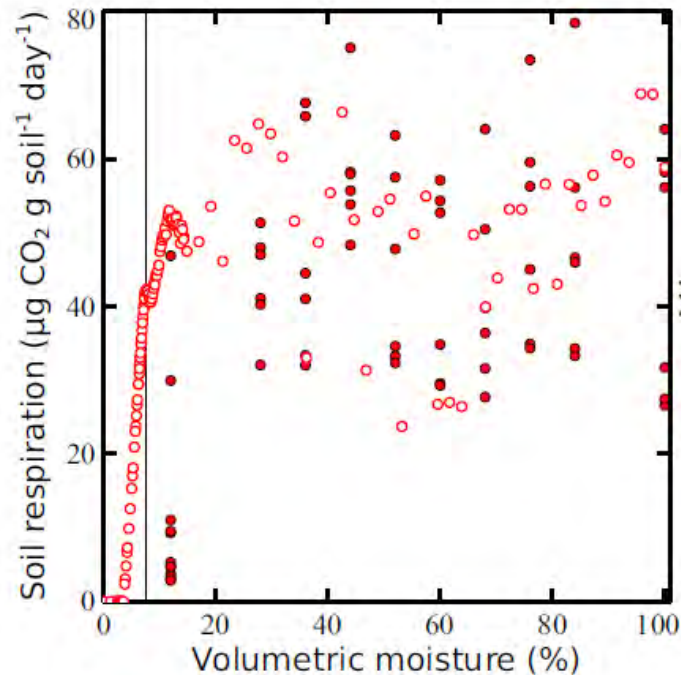
Phase diagram at moisture 7.1 vol.%



Period doubling route to chaos

Hopf-bifurcation. Cycle emergence

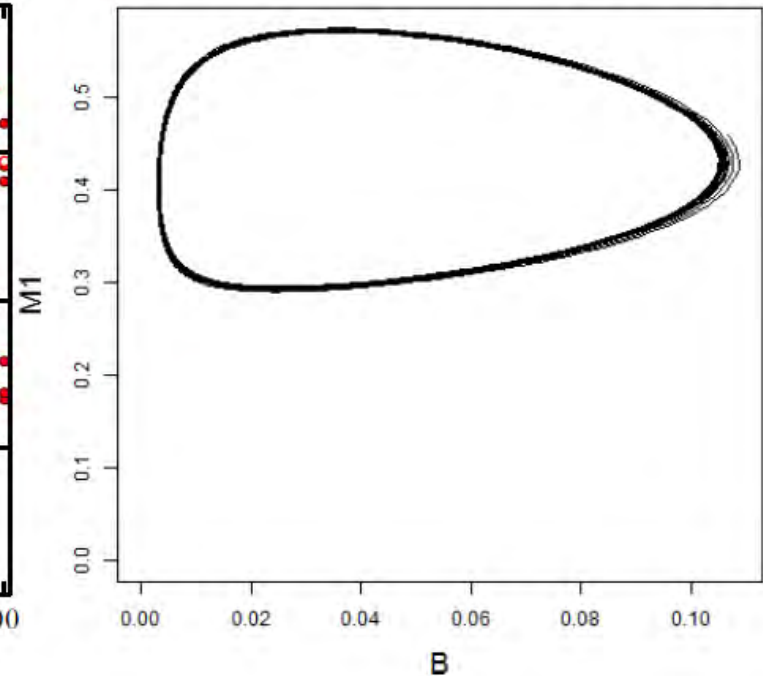
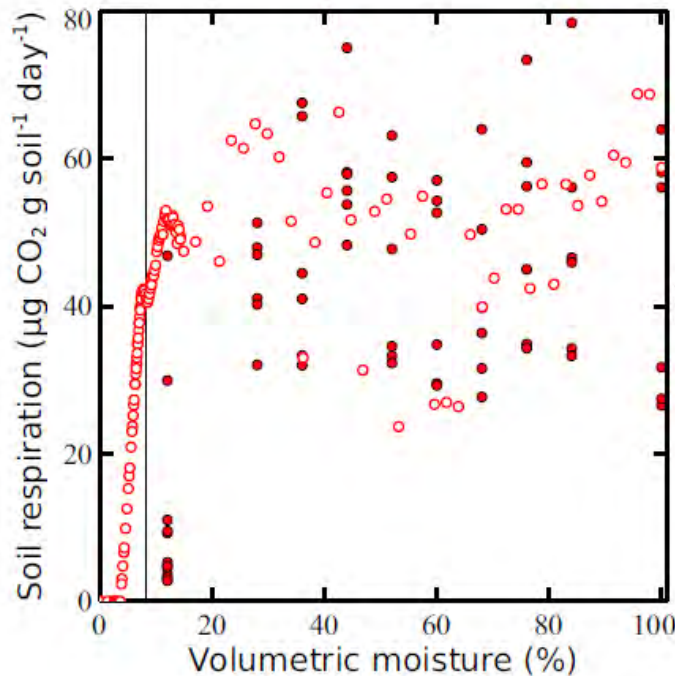
Phase diagram at moisture 7.7 vol.%



Period doubling route to chaos

Cycle

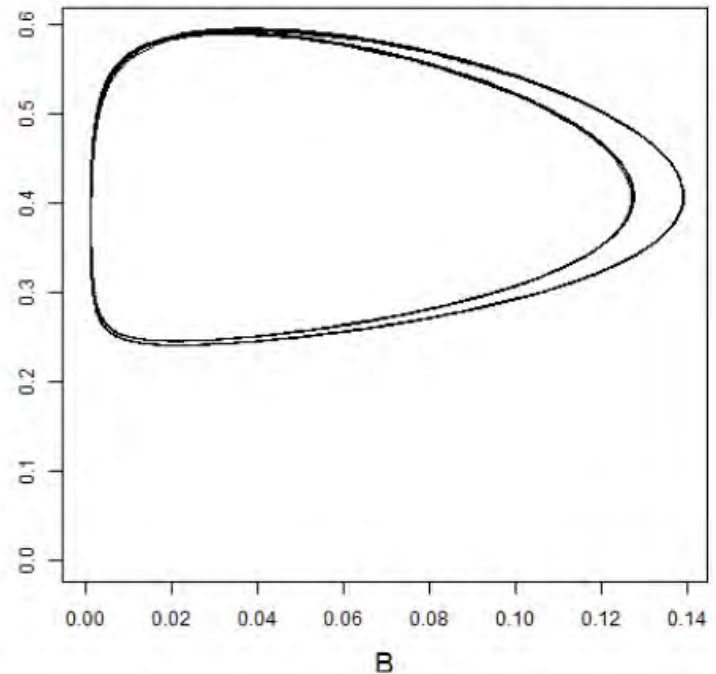
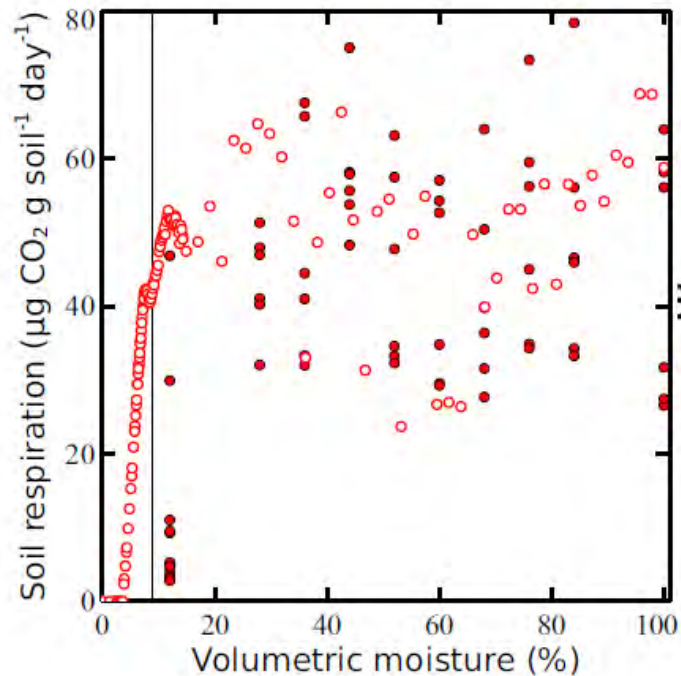
Phase diagram at moisture 8.2 vol. %



Period doubling route to chaos

Double-period cycle

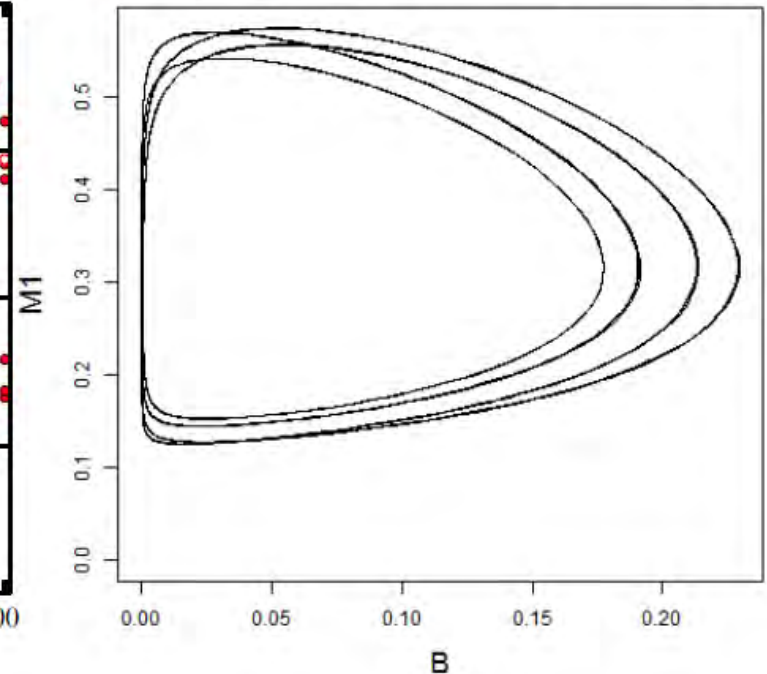
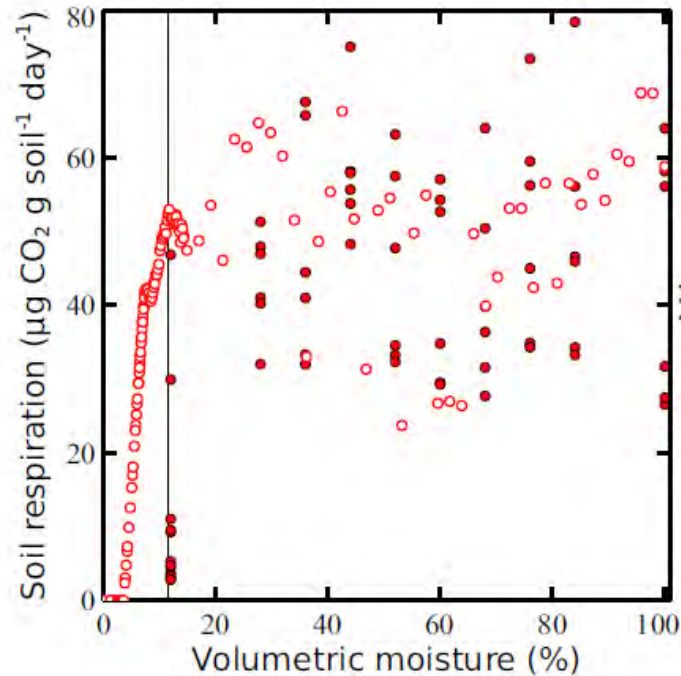
Phase diagram at moisture 8.8 vol. %



Period doubling route to chaos

Quadruple-period cycle

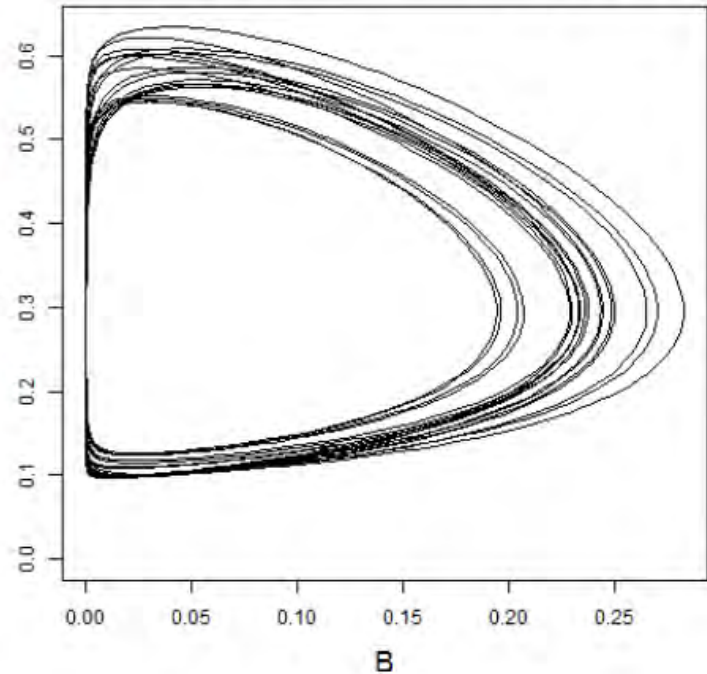
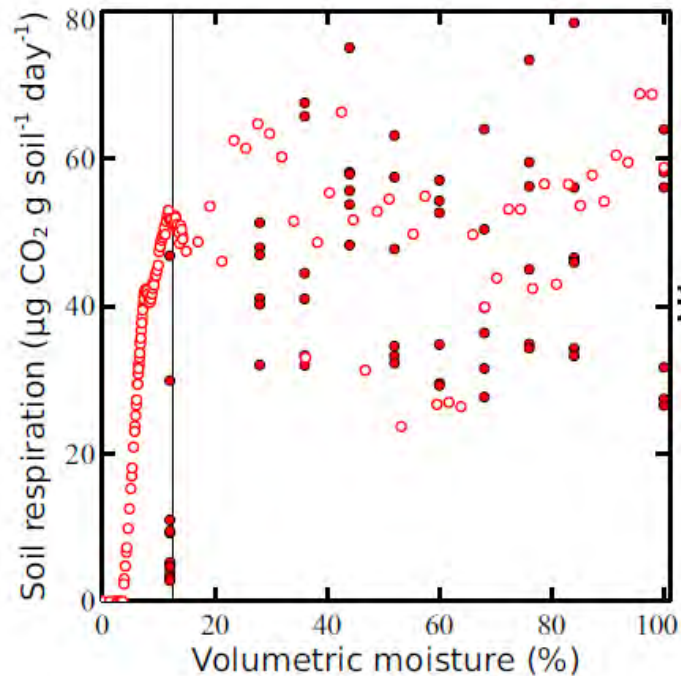
Phase diagram at moisture 11.5 vol. %



Period doubling route to chaos

Multiple-period cycle

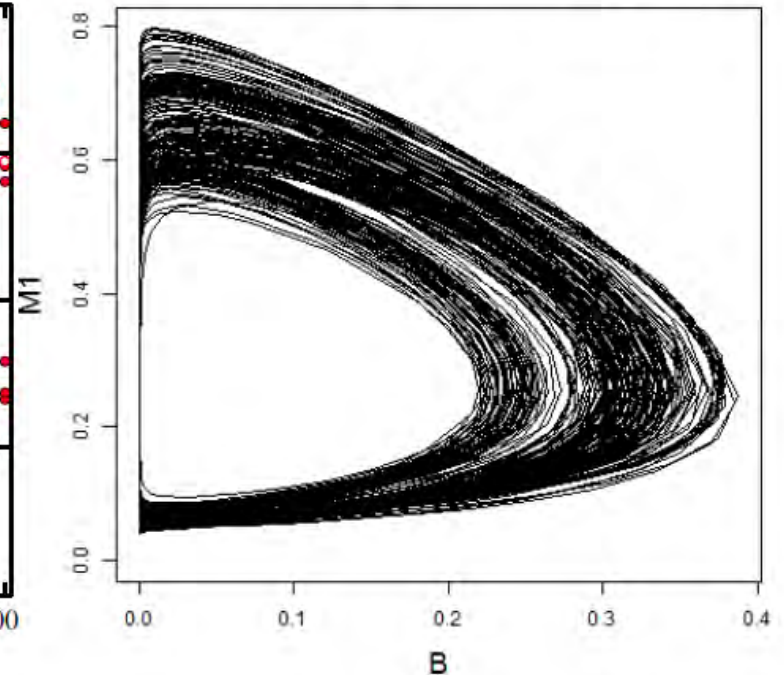
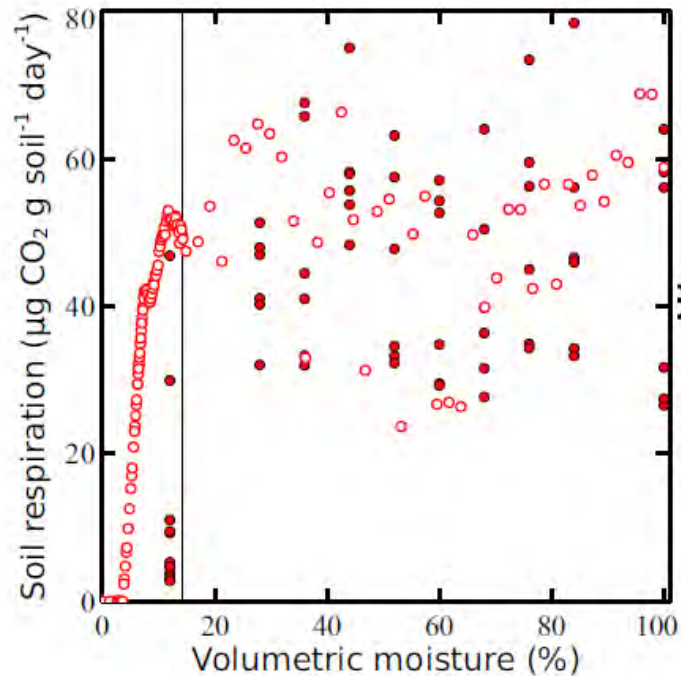
Phase diagram at moisture 12.5 vol. %



Period doubling route to chaos

Irregular attractor

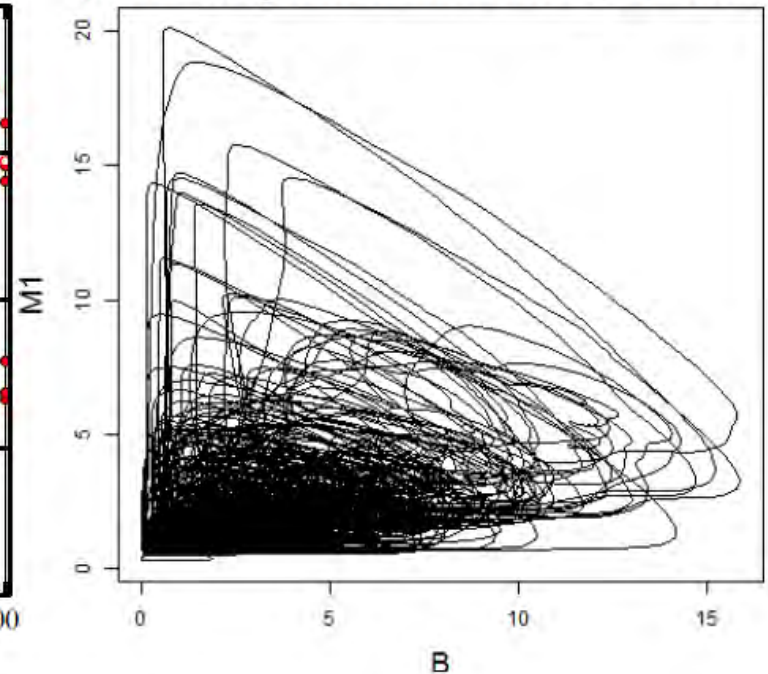
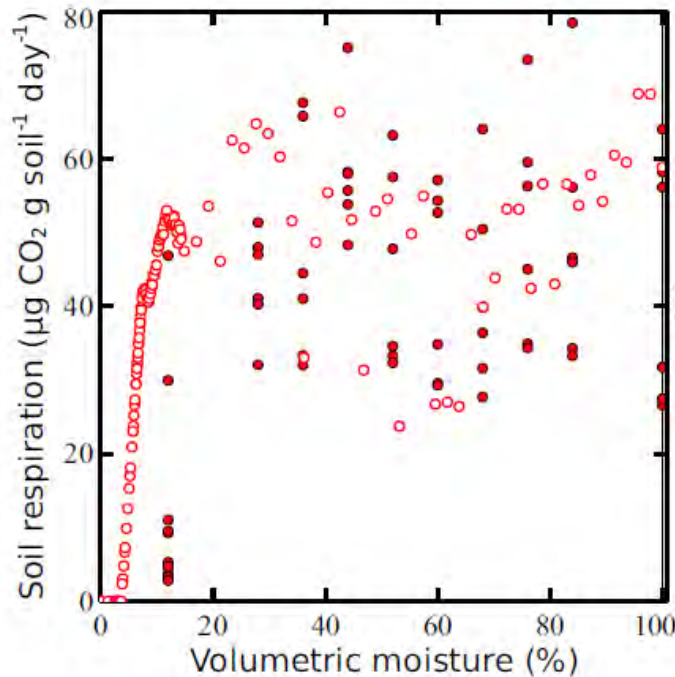
Phase diagram at moisture 14.3vol.%



Period doubling route to chaos

Irregular attractor averaged along aggregate radius

Statistical
phase diagram at moisture 100 vol.%



Выводы

Описание почвенного гетеротрофного дыхания микроскопической моделью позволяет получить информацию о чувствительности ПОВ к T и влажности для последующего моделирования на уровне почвенного профиля:

а) чувствительность к T лабильного/стабильного ПОВ по энергии активации E_1 , E_2 (для M_1 , M_2)

б) вид зависимости скоростей разложения к влажности переносится далее в самой структуре модели

Спасибо за внимание!