

BOLESŁAW TABIŚ, SZYMON SKONECZNY*

MODELOWANIE STRUKTURY BIOFILMU PRZY UŻYCIU AUTOMATU KOMÓRKOWEGO

MODELING OF BIOFILM STRUCTURE USING CELLULAR AUTOMATON

Streszczenie

Opracowano automat komórkowy do symulacji procesu mikrobiologicznego w biofilmie. Wykazano, że zaproponowany algorytm daje możliwość uzyskania różnych struktur biofilmu w zależności od warunków procesowych.

Słowa kluczowe: biofilm, automaty komórkowe, modelowanie matematyczne

Abstract

Cellular automaton model has been elaborated for simulation microbial process in a biofilm. It was shown that the proposed algorithm gives possibility to obtain various structures of microbial biofilms, depending on operating conditions.

Keywords: biofilm, cellular automata, mathematical modeling

* Prof. dr hab. inż. Bolesław Tabiś, mgr inż. Szymon Skoneczny, Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Politechnika Krakowska.

Oznaczenia

H	– liczba wierszy sieci komórek
W	– liczba kolumn sieci komórek
P_e	– prawdopodobieństwo zużycia substratu
P_d	– prawdopodobieństwo dyfuzji substratu
D_A	– współczynnik dyfuzji substratu A w wodzie
Δx	– rozmiar elementu siatki
Δt	– krok czasowy symulacji

1. Wstęp

Biofilm, zwany też błoną mikrobiologiczną, to wieloskładnikowa struktura, zawierająca głównie wodę, komórki mikroorganizmów i zewnątrzkomórkowe polimery (ang. *EPS*), utworzona na podłożu stałym. Biofilm jest substancją złożoną zarówno pod względem składu, morfologii jak i procesów w niej zachodzących.

Biofilmy występują powszechnie w różnych środowiskach wodnych, a praktyka technologiczna wykazuje, że tworzenie biofilmu może towarzyszyć prawie każdemu procesowi mikrobiologicznemu. Biofilmy występują w: rurociągach doprowadzających wodę pitną, urządzeniach sanitarnych, a także w systemach niezwiązanych z technologią oczyszczania wody, takich jak np. sprzęt medyczny.

Obecność niektórych biofilmów jest niepożądana, stąd część prac badawczych poświęcona jest ich usuwaniu i unieszkodliwianiu. Przykłady takich biofilmów omówiono w pracy [1]. Poruszono tam problem wpływu biocydów na rozwój patogenicznych mikroorganizmów. Pożyteczne biofilmy, wykazujące zdolność biodegradacji toksycznych związków, uczestniczą w oczyszczaniu gleb, wód gruntowych, jezior oraz rzek. W bioreaktorach do biodegradacji celowo stosuje się biofilmy ze względu na ich korzystny wpływ na efektywność procesu oraz odporność na wymywanie mikroorganizmów z aparatu.



Rys. 1. Dwie struktury biofilmu powstałe w odmiennych warunkach: a) biofilm gładki (niskie stężenia substratów, duża szybkość ścinania), b) struktura nieregularna (wysokie stężenia substratów, mała szybkość ścinania)

Fig. 1. Two biofilm structures formed at various conditions: a) smooth biofilm (low concentrations of substrates, high shear rate), b) irregular structure (high concentrations of substrates, low shear rate)

Struktura biofilmu zmienia się w zależności od warunków hydrodynamicznych panujących w aparacie, stężenia substratu (rys. 1) oraz gatunku mikroorganizmów. Cechy morfologiczne biofilmu (grubość, gęstość oraz kształt powierzchni) w znacznym stopniu wpływają na wymianę masy w bioreaktorze [2, 3].

Opracowany w ramach niniejszego artykułu model oparty na idei automatów komórkowych symuluje strukturę biofilmu zawierającego jeden gatunek mikroorganizmów dla procesu o kinetyce jednosubstratowej. Kod numeryczny, obejmujący blisko 600 wierszy, utworzono w języku C++.

2. Idea automatów komórkowych

Automat komórkowy to zbiór D -wymiarowej siatki komórek i reguły rządzącej stanem komórek w chwili $t + 1$, gdy dany jest stan w chwili t . Działanie automatu komórkowego można zapisać następująco:

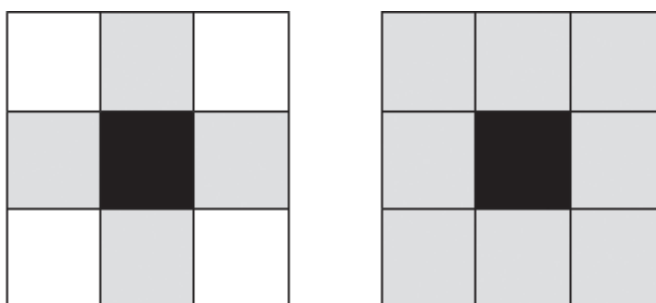
$$s(t+1) = F[s(t), \Omega(t)] \quad (1)$$

gdzie:

- s – wektor stanu,
- Ω – zbiór komórek z sąsiedztwa danej komórki o stanie $s(t)$,
- F – wspomniana reguła, czyli operator odwzorowań stanu $s(t)$ w stan $s(t + 1)$.

Jeżeli reguła F jest funkcją zależną od zmiennej losowej, to wówczas mamy do czynienia z automatem probabilistycznym. W przeciwnym wypadku jest to automat deterministyczny.

Dla sieci dwuwymiarowej z kwadratowymi komórkami (czyli takiej, jakiej użyto w tym modelu) stosuje się sąsiedztwo von Neumanna bądź Moore'a (rys. 2).



Rys. 2. Po lewej stronie sąsiedztwo von Neumanna oraz po prawej sąsiedztwo Moore'a

Fig. 2. On the left side von Neumann's neighborhood and on the right side Moore's neighborhood

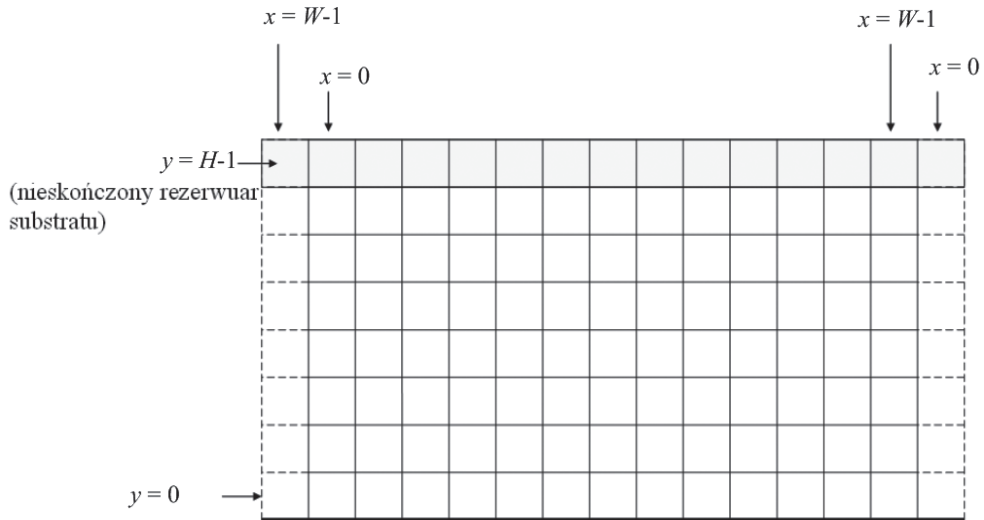
Wyczerpujący opis automatów komórkowych można znaleźć w obszerniejszych opracowaniach dotyczących tej tematyki [4, 5].

3. Opis algorytmu

3.1. Konstrukcja sieci

W opracowanym modelu wzrostu biofilmu użyto sieci dwuwymiarowej (rys. 3), która posiada W elementów na osi x oraz H elementów na osi y . Warunki brzegowe są następujące:

- Komórki sieci w wierszu $y = 0$ przylegają do nieprzepuszczalnego podłoża, niemożliwe jest zatem przekroczenie tej granicy zarówno przez komórki mikroorganizmów, jak i przez substrat;
- Komórki sieci w wierszu $y = H - 1$ stanowią nieskończony rezerwuár substratu, w którym jego stężenie jest utrzymane na stałym poziomie;
- Sieć komórek posiada okresowe warunki brzegowe w kierunku osi x . Dzięki temu sąsiedztwo komórek znajdujących się w granicznych kolumnach nie odbiega od sąsiedztwa komórek wewnętrznych.



Rys. 3. Struktura sieci

Fig. 3. Grid structure

3.2. Zbiór stanów oraz reguły przejścia

Stan każdej komórki danej sieci może przyjmować wartości 0, 1, 2, 3, co odpowiada komórce wypełnionej: wodą, mikroorganizmami, mikroorganizmami pożywionymi substratem w ilości połowy koniecznej do podziału i substratem.

W algorytmie przyjęto następujące reguły:

- Komórka sieci w stanie 1 przechodzi do stanu 2 z prawdopodobieństwem P_e , jeżeli w sąsiedztwie komórki sieci znajduje się komórka w stanie 3, a odpowiednia komórka w stanie 3 przechodzi do stanu 0 (*konsumpcja substratu*).

- Komórka sieci w stanie 2 przechodzi do stanu 1 z prawdopodobieństwem P_e , jeżeli w sąsiedztwie komórki sieci znajduje się komórka w stanie 3, a odpowiednia komórka w stanie 3 przechodzi do stanu 1 (*konsumpcja substratu i wzrost biomasy*).
- Komórka sieci w stanie 3 wykonuje losowe ruchy po sieci z prawdopodobieństwem P_d (*dyfuzja substratu*).

Dla danego współczynnika dyfuzji i wybranego rozmiaru elementu tablicy Δx krok Δt wyznaczony został z zależności (2):

$$D_A = \frac{(\Delta x)^2}{4\Delta t} \quad (2)$$

We wcześniejszym opracowaniu [6] przedstawione zostało porównanie wyników otrzymanych przy użyciu algorytmu ruchów losowych z rozwiązaniem analitycznym.

Wartość prawdopodobieństwa P_e można określić na podstawie rozumowania przedstawionego w pracy Pizarro i współautorów [7]. Wykazano silny wpływ wartości prawdopodobieństwa P_e na strukturę powstałego biofilmu.

0	3	3	3	0
0	1	3	1	0
1	1	1	1	1

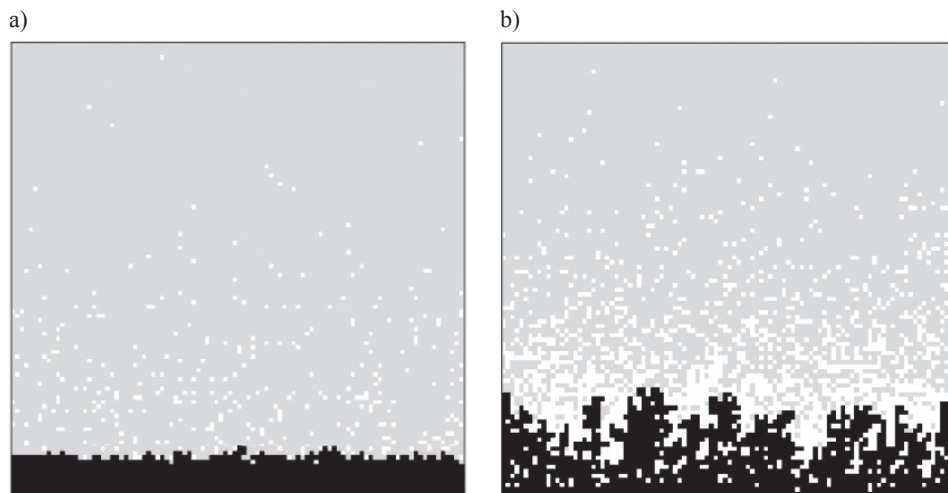
Rys. 4. Fragment sieci automatu komórkowego; centralna komórka znajduje się w sąsiedztwach trzech komórek reprezentujących mikroorganizmy

Fig. 4. Part of a grid; central cell is in neighborhoods of three cells representing microorganisms

Reguły są wykonywane asynchronicznie, ponieważ synchroniczne wykonywanie reguł mogłoby prowadzić do sprzeczności interpretacyjnych [8], np. gdy komórka automatu reprezentująca substrat jest jednocześnie sąsiadem więcej niż jednej komórki sieci reprezentującej mikroorganizmy. Przykład takiej sytuacji został przedstawiony na rys. 4. Komórka reprezentująca substrat mogłaby zmienić swój stan więcej niż raz w iteracji. Interpretacją takiego przejścia byłoby zużycie pewnej ilości substratu kilkukrotnie. Byłoby to niezgodne z prawem zachowania masy.

4. Wyniki symulacji

Rysunek 5 przedstawia wyniki symulacji dla różnych wartości stosunku P_d/P_e ($P_d/P_e = 200$ na rysunku a, natomiast $P_d/P_e = 20$ na rysunku b). Otrzymano dwie struktury – strukturę gładką (rys. 5a) oraz nieregularną (rys. 5b).



Rys. 5. Wyniki symulacji: kolor biały – woda (stan 0), kolor czarny – mikroorganizmy (stan 1 i 2), kolor szary – substrat (stan 3)

Fig. 5. Results of simulation: white color – water (state 0), black color – microorganisms (state 1 and 2), grey color – substrate (state 3)

5. Wnioski

Przedstawiono model wzrostu biofilmu oparty na automatach komórkowych. Model opisuje przypadek biofilmu z jednym gatunkiem mikroorganizmów i z jednym substratem limitującym.

Opracowany model wykorzystany będzie w dalszych badaniach teoretycznych pozwalających na głębsze zrozumienie procesów zachodzących w biofilmie. Planowane jest uwzględnienie innych istotnych czynników, takich jak grubość warstwy granicznej i zrywanie biofilmu, a także zastosowanie ilościowego opisu porowatości struktury do określenia przestrzennych rozkładów jego gęstości i współczynników dyfuzji reagentów.

Literatura

- [1] Stewart P.S., Hamilton M.A., Goldstein B.R., Schneider B.T., *Modeling biocide action against biofilms*, Biotechnology and Bioengineering, 49, 1996, 445-455.
- [2] Hermanowicz W.S., *A simple 2D biofilm model yields a variety of morphological features*, Mathematical Biosciences, 169, 2001, 1-14.
- [3] Bishop P.L., Zhang T.C., Fu Y.-C., *Effects of biofilm structure, microbial distributions and mass transport on biodegradation process*, Water Science and Technology, 31, 1995, 143-152.
- [4] Wolfram S. (ed.), *Theory and application of cellular automata*, Word Publishing Co., 1986.

- [5] Toffoli T., Margolus N., *Cellular automata machines: A new environment for modeling*, MIT Press, Cambridge 1988.
- [6] Skoneczny S., *Symulacja procesu mikrobiologicznego w biofilmie bakteryjnym techniką automatów komórkowych*, praca inżynierska, Akademia Górniczo-Hutnicza, Kraków 2013.
- [7] Pizarro G.E., Griffeath D., Noguera D.R., *Quantitative cellular automaton model for biofilms*, Journal of Environmental Engineering, **127**, 2001, 782-789.
- [8] Kier L.B., *Cellular Automata Modeling of Chemical Systems*, Springer, rozdz. 2, 2005.