

MODELITZACIÓ I SIMULACIÓ DISCRETA DE SISTEMES BIOLÒGICS: PROCESSOS DE TRANSFORMACIÓ DEL CARBONI I EL NITROGEN EN EL SÒL

A. Centelles, P. Martín i J. Sabaté. Departament d'Agronomia

A. Gras. Departament de Produccions Agràries

M. Ginovart. Departament d'Enginyeria Agrària

D. López. Departament d'Indústries

Escola Superior d'Agricultura de Barcelona

Resum

La simulació discreta permet implementar amb relativa facilitat diversos models biològics. Aquesta és una alternativa versàtil i potent a l'ús de sistemes d'equacions diferencials.

En aquest treball es descriuen de forma breu les característiques de la metodologia de la simulació discreta i es discuteixen els avantatges i inconvenients d'aquesta forma d'analitzar el sistema enfront dels mètodes continus. També s'avaluen les possibilitats d'utilitzar aquesta metodologia per l'estudi del comportament del carboni i el nitrogen en el sòl, juntament amb el control de l'activitat microbiana.

Es presenta un primer model de sòl que té en consideració diferents formes químiques de carboni i nitrogen, i la presència de dos grups de bacteris (els amonificadors i els nitrificadors). Utilitzant l'ordinador és possible estudiar i controlar simultàniament un nombre molt important de variables: carboni i nitrogen en el sòl en les diferents formes químiques, relació C/N, biomassa microbiana... Utilitzant el model proposat i mitjançant la simulació discreta, es discuteixen els resultats obtinguts per a aquestes evolucions temporals. Els resultats simulats són coherents i comparables amb els resultats experimentals. Es valoren les perspectives de treballar en l'aplicació d'aquesta metodologia de simulació discreta al sòl.

Mots clau

Simulació discreta, model, sòl, carboni, nitrogen

Resumen

La simulación discreta permite implementar con relativa facilidad diversos modelos biológicos. Ésta es una alternativa versátil y potente al uso de sistemas de ecuaciones diferenciales.

En este trabajo se describen de forma breve las características de esta metodología de simulación discreta y se discuten las ventajas y los inconvenientes de esta forma de analizar el sistema, frente a las de los métodos continuos. También se valoran las posibilidades de utilizar esta metodología para el estudio del comportamiento del carbono y del nitrógeno en el suelo, conjuntamente con el control de la actividad microbiana.

Se presenta un primer modelo de suelo que tiene en consideración diferentes formas químicas de carbono y nitrógeno y la presencia de dos grupos de bacterias (las amonificadoras y las nitrificadoras). Utilizando el ordenador es posible estudiar y controlar simultáneamente un número muy importante de variables: carbono y nitrógeno en el suelo en las distintas formas químicas, relación C/N, biomasa microbiana... Utilizando el modelo propuesto y mediante la simulación discreta se discuten los resultados obtenidos para estas evoluciones temporales. Los resultados simulados son coherentes y comparables con los resultados experimentales. Se valoran las perspectivas de trabajar en la aplicación de esta metodología de simulación discreta al suelo.

Palabras clave

Simulación discreta, modelo, suelo, carbono, nitrógeno

Abstract

The discrete simulation allows the implementation of diverse biological models with relative ease. This is a powerful and versatile alternative to the use of systems of differential equations.

In this work, the characteristics of the methodology of discrete simulation are briefly described, and the advantages and disadvantages of this way of analysing the system are compared with those of continuous methods. Also the possibilities of using this methodology for the study of carbon and nitrogen behaviour in soil together with the control of microorganisms activity have been evaluated.

A first model of soil is presented, taking into consideration the various chemical compounds of carbon and nitrogen, and the presence of two groups of bacteria (amonifiers and nitrifiers). With the use of the computer it is possible to control simultaneously a very important number of variables: carbon and nitrogen in the soil in several chemical compounds, C/N ratios, microbial biomass and so on. Using the proposed model and by means of discrete simulation, the obtained results of these temporal evolutions are discussed. The simulation results are coherent and comparable with the experimental results. The perspectives of working with the application of discrete simulation methodology to soil are evaluated.

Key words

Discreet simulation, model, soil, carbon, nitrogen

Introducció

El sòl és el suport mecànic i la font de la major part de nutrients per a la vida vegetal. Això és la causa de la seva gran importància ecològica i de la seva transcendència per a les societats humanes. Químicament i biològica, el sòl és enormement complex i divers; això dificulta molt la comprensió del seu comportament. Tot i així, la millora progressiva del coneixement de les característiques i propietats del sòl ha estat fonamental en la millora de la producció d'aliments. El repte de perfeccionar la comprensió sobre el funcionament del sòl i, com a conseqüència d'això, millorar-ne l'ús és, encara avui, molt important. Cal entendre millor el comportament del sòl per poder progressar en la seva conservació i per poder optimitzar la seva explotació, ambdós objectius tant quantitativament com qualitativament.

En física, en química, en enginyeria, l'ús de models ha estat cabdal per poder percebre el funcionament dels sistemes. L'ús de models, sovint formulats amb l'ajut de llenguatge matemàtic, ha permès fer abstraccions i prediccions; alhora, la seva anàlisi ha estat el punt de partida per a la realització de nous models que progressivament han millorat la comprensió del nostre món. En biologia i en agricultura la complexitat dels seus sistemes ha fet difícil la utilització de models matemàtics. Malgrat que en les revistes científiques i tècniques abunden models en llenguatge matemàtic per estudiar sistemes biològics, la seva transcendència pràctica està molt lluny de la que s'ha assolit en altres branques de la ciència i la tècnica. La complexitat dels sistemes vius fa difícil utilitzar els recursos més clàssics de les matemàtiques, com ara les equacions diferencials. Alhora, la dificultat de comprensió de la major part de models per a molts dels potencials usuaris (biòlegs, tècnics...) ha restringit encara més el seu ús. Per altra part, els sistemes biològics són sistemes discrets, formats per individus, per cèl·lules, per molècules... Probablement, les matemàtiques fonamentades en mètodes continus no són el millor recurs per estudiar-los.

La simulació discreta, i l'ús de models adaptats a aquesta metodologia de simulació, és una eina alternativa als models matemàtics fonamentats en equacions diferencials. Presenta importants avantatges: 1) permet formular models més propers als sistemes reals, ja que es pot modelar cada un dels elements del sistema de forma independentment, i 2)

és més fàcilment comprensible per persones que no utilitzen normalment les matemàtiques. Actualment, el seu ús és generalitzat en tots els vessants de la biologia, des de la simulació en bioquímica fins a la simulació de sistemes ecològics. La simulació discreta té, però, dos inconvenients importants respecte als mètodes clàssics: 1) no permet fer anàlisis algèbriques que determinin o identifiquin les diferents formes de comportament, 2) no és possible trobar les constants utilitzades ajustant el comportament dels models a resultats experimentals mitjançant tècniques d'optimització matemàtica. Els diferents tipus de comportament s'han de reconèixer mitjançant la realització successiva de simulacions, variant progressivament els paràmetres que puguin ser transcendents. Aquesta dificultat gradualment va perdent importància gràcies a la possibilitat d'utilitzar amb facilitat ordinadors més potents i més versàtils. Obtenir els valors dels paràmetres en els models propis de la simulació discreta és un treball difícil, però alhora el significat físic, químic o biològic dels paràmetres és molt més clar que en els mètodes fonamentats en sistemes d'equacions contínues. Globalment, la metodologia fonamentada en la simulació discreta és molt més versàtil i potent que els mètodes continus.

La metodologia de la simulació discreta es basa en (LÓPEZ *et al.*, 1991; GINOVART, 1997):

1. Modelitzar el comportament de cada element del sistema.
2. Modelitzar les relacions que existeixen entre els diferents tipus d'elements.
3. Estudiar, mitjançant l'ordinador, el comportament de tots els elements que actuen conjuntament.

A l'Escola Superior d'Agricultura de Barcelona i al Departament de Física i Enginyeria Nuclear (Universitat Politècnica de Catalunya) s'han desenvolupat diversos treballs per aplicar la simulació discreta a diferents sistemes biològics: cultius bacterians, llevats, fongs filamentosos, ecologia teòrica, truita irisada... (ANTON, 1996; BERMÚDEZ, 1989; CENTELLES i MARTÍN, 1997; GINOVART, 1997; GINOVART *et al.*, 1991; GINOVART *et al.*, 1992; GIRÓ *et al.*, 1985, 1986; IBÁÑEZ i VAQUERO, 1995; IBÁÑEZ *et al.*, 1996; LÓPEZ, 1992; LÓPEZ *et al.*, 1991; PARDINILLA, 1995; SOLÉ i VALLS, 1992; SOLÉ *et al.*, 1992 a,b,c,d; VALLS, 1986; VERDAGUER, 1995; WAGENSBERG *et al.*, 1988; XIFRÉ, 1992; XIFRÉ *et al.*, 1994). Aquí presentem una de les darreres aplicacions: l'estudi dels sòls. El primer objectiu d'aquest treball és avaluar les possibilitats de la metodologia de la simulació discreta per a l'estudi dels sòls;

així doncs, el model utilitzat és tan sols una primera aproximació a futurs models que s'hauran de desenvolupar.

El sòl és un sistema molt complex i poc definit. En el sòl hi podem trobar nombrosos elements químics i en formes moleculars molt diverses, hi podem trobar múltiples espècies de microorganismes, una rica fauna... Tots els elements del sòl es troben en diferents proporcions, en funció de les condicions ambientals i també en funció del temps. Existeixen múltiples processos, i de diferent naturalesa, que donen lloc a la transformació dels components del sòl. Pretendre formular un model que serveixi per estudiar de forma exhaustiva el comportament d'aquest sistema és una tasca impossible. Cal, per tant, fer una abstracció important sobre el comportament del sistema estudiat per poder formular models simplificats. Malgrat la necessària simplicitat, els models que es poden formular per ser utilitzats en la simulació discreta són considerablement més complexos que els models continus. En els models continus s'acostuma a estudiar, de forma integrada, pocs aspectes diferents del comportament del sistema. Alguns dels models que podem trobar a la bibliografia es troben classificats en la taula 1 en funció del seu objectiu d'estudi.

El model que proposem en aquest treball se centra, fonamentalment, en l'estudi de les transformacions del carboni i del nitrogen com a conseqüència de l'activitat microbiana. Es pretén estudiar simultàniament: 1) la mineralització i immobilització de carboni, 2) la mineralització, nitrificació i immobilització de nitrogen, i 3) l'activitat

microbiana. En aquest primer model no s'inclouen: 1) les condicions físiques del sòl (textura, temperatura, potencial hídric, profunditat...), 2) algunes condicions químiques importants (pH, salinitat, composició química de la fase sòlida, de la fase líquida i de la fase gasosa), i 3) algunes condicions biològiques transcendents (presència d'arrels, fauna, etc.). En models posteriors, progressivament, es podran anar incloent alguns d'aquests factors.

Model

Discretització de l'espai i el temps

Considerem un espai tridimensional dividit en cel·les, tal com s'esquematitza en la figura 1. Imaginem, doncs, un fragment de sòl reticulat. Per a cada cel·la, o posició de l'espai, controlarem un nombre important de característiques. No s'ha determinat l'equivalència física de les dimensions de l'espai simulat.

El temps serà considerat a intervals. Cada interval l'anomenem «pas de temps». No s'ha determinat l'equivalència amb el temps real.

Paràmetres químics controlats a cada posició de l'espai

Per a cada posició de l'espai controlarem la quantitat de carboni i nitrogen en diferents formes químiques (taula 2).

Taula 1. Classificació d'alguns dels models sobre el comportament del sòl trobats a la bibliografia dels darrers anys en funció del seu objectiu d'estudi

<i>Objectiu d'estudi del model</i>	<i>Referència</i>
Immobilització de N	HUWE i TOTSCHÉ, 1995; NORTON i FIRESTONE, 1996; RECOUS <i>et al.</i> , 1995; WILLIGEN, 1991
Mineralització de N	BOSATTA i AGREN, 1996; DENDOOVEN <i>et al.</i> 1995; NORTON i FIRESTONE, 1996; DE NEVE i HOFMAN, 1996; GRANT <i>et al.</i> , 1993a,b; HUWE i TOTSCHÉ, 1995; NORTON i FIRESTONE, 1996; RECOUS <i>et al.</i> , 1995; ROBERSTON <i>et al.</i> , 1988; WHITMORE, 1996a; WILLIGEN, 1991
Nitrificació	BURNS <i>et al.</i> , 1995; GRANT, 1994; MALHI i MCGILL, 1982; NORTON i FIRESTONE, 1996; RECOUS <i>et al.</i> , 1995; STARK i FIRESTONE, 1995; WILLIGEN, 1991; YAMAGUCHI <i>et al.</i> , 1996
Desnitrificació	BURNS <i>et al.</i> , 1995; HUWE i TOTSCHÉ, 1995; WILLIGEN, 1991
Mineralització de C	GRANT <i>et al.</i> , 1993a,b; RECOUS <i>et al.</i> , 1995; ROBERSTON <i>et al.</i> , 1988; SALLI i PANSU, 1993; WHITMORE, 1996a,b
Activitat microbiana	ARMSTRONG i PROSER, 1988; SCOTT <i>et al.</i> , 1995; STARK i FIRESTONE, 1995; WHITMORE, 1996a; YAMAGUCHI <i>et al.</i> , 1996

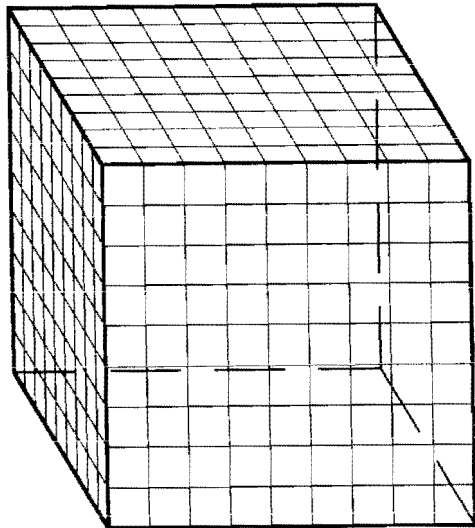


Figura 1. L'espai del model es considera discretitzat. Imaginem un espai cúbic tridimensional dividit en cel·les. El nombre de cel·les d'una aresta es determinarà en cada simulació

Considerem que les substàncies resistents es troben associades a formes sòlides o insolubles, i, per tant, la seva posició a l'espai la considerarem fixa en tota l'evolució temporal.

La resta de substàncies (C_L , N_L , CO_2 , $N-NH_4^+$,

$N-NO_3^-$), considerem que es troben en dissolució i, per tant, es poden desplaçar d'una posició de l'espai a una altra per difusió, obeint a la llei de Fick (JOU, 1985).

Les quantitats de cada substància presents inicialment en el sistema es consideren, de forma aproximada, distribuïdes homogèniament per les cel·les de l'espai. S'utilitzarà una variable aleatòria uniforme per fer aquesta distribució.

Es considera que en el medi es disposa, en excés, d'oxigen i d'altres substàncies que siguin requeriments per al creixement bacterià.

Flux de substàncies resistents a làbils

En cada pas de temps considerarem que una fracció de les substàncies resistents (C_R , N_R) es transforma en làbil. D'aquesta manera, hi haurà un flux decreixent al llarg del temps com a conseqüència de considerar un sistema sense incorporació de noves substàncies resistents. Aquest flux ha de tenir un valor baix. Es pretén simular de forma molt simple el procés de transformació de les substàncies resistents, procés molt complex on intervien microfauna, microorganismes i fenòmens físics i químics.

Taula 2. Formes de carboni i nitrogen controlades en cada posició de l'espai

Substància	
Carboni orgànic resistent (C_R)	Considerem el carboni i el nitrogen associats a molècules de degradació lenta (humus...). Considerem que són formes químiques complexes no directament utilitzables per la biomassa microbiana controlada.
Nitrogen orgànic resistent (N_R)	
Carboni orgànic làbil (C_L)	Formes de carboni i nitrogen directament utilitzables per la biomassa microbiana (sucres senzills, aminoàcids...). Formes solubles en aigua.
Nitrogen orgànic làbil (N_L)	
Carboni en forma de CO_2	Diòxid de carboni present en el sòl.
Nitrogen amoniacal ($N-NH_4^+$)	Formes de nitrogen mineral presents en el medi com a conseqüència de l'activitat microbiana. No considerem el nitrogen en forma de nitrit, atès que considerem que aquest compost es transforma ràpidament en nitrat.
Nitrogen nítric ($N-NO_3^-$)	

Taula 3. Paràmetres controlats en cada tipus de cèl·lula bacteriana. Una unitat de massa correspon a a_1 unitats de carboni i una unitat de nitrogen

	Posició	Massa	Cicle cel·lular	Substàncies a l'interior de la cèl·lula				
				CL	NL	CO_2	$N-NH_4^+$	$N-NO_3^-$
Bacteris amonificadors	•	•	•	•	•	–	•	•
Bacteris nitrificadors	•	•	•	–	–	•	•	•

Taula 4. Reaccions que intervenen en el metabolisme de cada tipus de bacteri. Les constants de les reaccions a_i es determinen amb criteris bioquímics i energètics. En les reaccions no s'indiquen els elements químics que no es controlen en el model, com ara l'oxigen. C_L , carboni làbil; N_L , nitrogen làbil; ΔH_i , entalpia de la reacció

Reaccions per a la producció d'energia

Bacteris amonificadors Reacció 1: $1 C_L \rightarrow 1 CO_2 + \Delta H_1$

Reacció 2: $1 N_L \rightarrow 1 N-NH_4^+ + \Delta H_2$

Reacció 3: $1 \text{ unitat de biomassa} \rightarrow a_1 CO_2 + 1 N-NH_4^+ + \Delta H_3$

Bacteris nitrificadors Reacció 4: $N-NH_4^+ \rightarrow N-NO_3^- + \Delta H_4$

Reaccions per a la producció de biomassa

Bacteris amonificadors Reacció 5: $(a_1 + a_2) C_L + N_L \rightarrow 1 \text{ unitat de biomassa } (a_1 C, 1 N) + a_2 CO_2 + \Delta H_5$

Reacció 6: $(a_1 + a_3) C_L + N-NH_4^+ \rightarrow 1 \text{ unitat de biomassa } (a_1 C, 1 N) + a_3 CO_2 + \Delta H_6$

Reacció 7: $(a_1 + a_4) C_L + N-NO_3^- \rightarrow 1 \text{ unitat de biomassa } (a_1 C, 1 N) + a_4 CO_2 + \Delta H_7$

Bacteris nitrificadors Reacció 8: $a_5 N-NH_4^+ + a_1 CO_2 \rightarrow (a_5 - 1) N-NO_3^- + 1 \text{ unitat de biomassa } (a_1 C, 1 N) + \Delta H_8$

Model de cèl·lula bacteriana

En el model es consideren dos tipus de cèl·lules: els bacteris amonificadors i els bacteris nitrificadors.

Es controlarà cada una de les cèl·lules bacterianes del sistema. Un bacteri situat en una determinada posició, el podem imaginar situat al si d'una distribució aleatòria de partícules (figura 2). Aquestes seran de naturalesa diferent (C_L , N_L , CO_2 , $N-NH_4^+$, $N-NO_3^-$) i seran les fonts d'energia i matèria per a la cèl·lula. Imposarem que en un pas de temps pugui entrar (o sortir) per transport passiu una fracció de les partícules que hi hagi dins d'un radi a l'entorn de la cèl·lula, fins a un valor màxim. Aquest flux de partícules es veurà afectat per una component aleatòria. Controlarem les quantitats de cada tipus de partícules a l'interior del bacteri (taula 3). En cada pas de temps, la cèl·lula utilitzarà les substàncies que puguin ser font d'energia per realitzar el manteniment cel·lular i per portar a terme la resta de reaccions metabòliques, com ara la producció de nova biomassa (taula 4). La quantitat de partícules per al manteniment cel·lular serà proporcional a la massa de la cèl·lula.

El control del cicle cel·lular es realitza d'una forma senzilla. Transcorregut un nombre fix de passos de temps després que la cèl·lula assolixi una determinada massa, se'n produeix la duplicació. El valor d'aquesta massa llindar es veu afectat per una variable aleatòria. Malgrat la simplicitat d'aquest model de cicle cel·lular, el seu comportament és co-

herent amb els coneixements experimentals (KÉPÈS, 1986), i permet que la distribució de masses dels cultius sigui talment com les distribucions experimentals (WAGENSBERG *et al.*, 1988).

Considerem que les quantitats de carboni i nitrogen incorporades a la biomassa tenen un quocient constant a_1 . Així, una unitat de biomassa és equivalent a a_1 partícules de carboni i una partícula de nitrogen. Si en un pas de temps un bacteri no

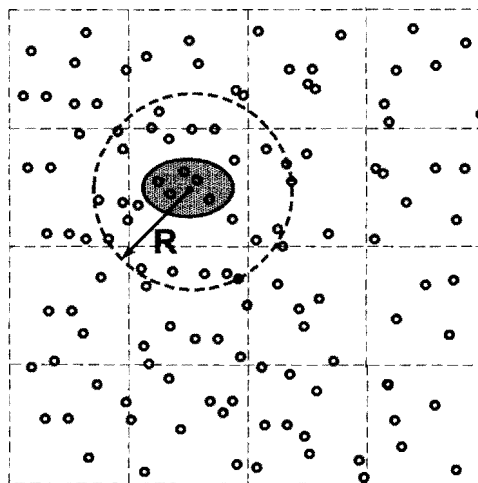


Figura 2. Esquema en dues dimensions d'una cèl·lula amb partícules al seu interior, envoltada de partícules. En un pas de temps poden entrar al seu interior una fracció de les partícules que hi ha al seu voltant (a la cel·la on es troba i part de les cel·les del voltant) fins a un valor màxim. El càlcul de partícules que entren es veurà afectat per un factor aleatori

assoleix l'energia necessària per realitzar el seu manteniment cel·lular, se'n produirà la lisi. La seva biomassa es transformarà en les corresponents partícules de C_L i N_L que es dipositen a la posició de l'espai on es trobava la cèl·lula (taula 4, reacció 3); també es dipositen les substàncies sense metabolitzar que hi hagi a l'interior de la cèl·lula (taula 3).

En un pas de temps, cada cèl·lula realitzarà el bescanvi de substàncies amb el seu entorn. Utilitzarà les que siguin necessàries per obtenir l'energia per al manteniment cel·lular. Amb la resta de substàncies, fonts de carboni i nitrogen, crearà nova biomassa, incorporant sempre com a biomassa a_1 unitats de carboni per cada unitat de nitrogen. En les reaccions on es crea nova biomassa apareixen alguns productes químics (taula 4). Aquests resten a l'interior de la cèl·lula i, en el següent pas de temps, es poden desplaçar a l'exterior de la cèl·lula per difusió.

Altrament, en cada pas de temps una cèl·lula es podrà moure de forma aleatòria a una cel·la del seu entorn.

Flux de carboni i nitrogen

A la figura 3 hi ha esquematitzats els fluxos de carboni i nitrogen corresponents al nostre model. El carboni es pot trobar en set formes diferents: C_R , C_L en el medi exterior, CO_2 en el medi exterior, C_L a l'interior de les cèl·lules amonificadores, CO_2 a l'interior de les cèl·lules nitrificadores, i carboni incorporat a la biomassa dels bacteris amonificadors o a la biomassa dels bacteris nitrificadors. El nitrogen el tenim distribuït en onze compartiments: N_R , N_L en el medi exterior, N_L a l'interior dels bacteris amonificadors, $N-NH_4^+$ en el medi exterior, $N-NH_4^+$ a l'interior de les cèl·lules amonificadores o nitrificadores, $N-NO_3^-$ en el medi exterior, $N-NH_4^+$ a l'interior de bacteris amonificadors o nitrificadors, i incorporat a la biomassa del bacteris amonificadors o a la biomassa dels bacteris nitrificadors.

Els fluxos entre compartiments estan determinats per diferents fenòmens que es troben indicats a la figura 3:

(1) En cada posició de l'espai es produeix una transformació d'un nombre de partícules de carboni i nitrogen resistents a làbils. La quantitat de partícules transformades és proporcional a les quantitats de carboni i nitrogen resistent present en cada cel·la.

(2) Entrada (o sortida) per difusió. El nitrogen

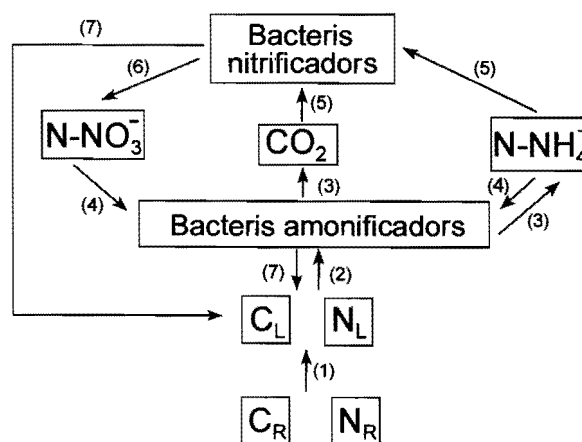


Figura 3. Esquema general del comportament del carboni i el nitrogen en el sòl segons el model. El carboni es troba en cinc formes diferents, i el nitrogen en sis formes. Les fletxes indiquen les direccions en què es pot produir transport de carboni i nitrogen. Els números entre parèntesis estan explicats en el text.

pot ser consumit a l'interior de les cèl·lules amonificadores com a font d'energia (taula 4, reacció 2) o com a font de matèria (taula 4, reacció 5).

(3) Resultat de les reaccions metabòliques de les cèl·lules amonificadores (taula 4).

(4) En presència de nitrogen làbil, les cèl·lules amonificadores no utilitzaran altres formes de nitrogen. En absència d'aquest, consumiran nitrogen mineral com a font de matèria (taula 4, reaccions 6 i 7): immobilització del nitrogen.

(5) Considerem que la font d'energia per a les cèl·lules nitrificadores és el nitrogen amoniacal (taula 4, reacció 4). Utilitzen aquest i el diòxid de carboni com a fonts de matèria (taula 4, reacció 8).

(6) Producte de la utilització del nitrogen amoniacal com a font d'energia i de massa (taula 4, reaccions 4 i 8).

(7) Si una cèl·lula no obté prou energia per al seu manteniment, se'n produeix la lisi. La seva biomassa es transforma en productes làbils; les formes de carboni i nitrogen no metabolitzades de l'interior de la cèl·lula s'alliberen.

Utilització de nombres aleatoris

En els models d'espai i de bacteri considerem sempre la necessitat d'utilitzar variables aleatòries. Els sistemes biològics estan formats per elements que, malgrat ser similars entre ells, no actuen exactament de la mateixa forma ni es troben en el mateix entorn microscòpic. Com a conseqüència

d'això, l'ús de l'atzar és imprescindible per poder reproduir els comportaments experimentals. Així, els models no són microscòpicament deterministes. Alhora, es pot comprovar que com a conseqüència de l'ús de nombres aleatoris el comportament del sistema obehirà el segon principi de la termodinàmica (WAGENSBERG *et al.*, 1988; LÓPEZ, 1992).

Simulació

L'esquema de la simulació es fonamenta en mètodes consolidats dins de la física, fonamentalment els mètodes de la dinàmica molecular. A partir de l'experiència de simulació en física s'han resolt força dificultats i s'han elaborat nous algorismes importants per al nostre treball.

Es parteix d'unes determinades condicions inicials que pretenen assemblar-se a estats diferents de sistemes reals (distribució de substàncies químiques a l'espai i nombre de cèl·lules amb les seves característiques inicials definides). Mitjançant l'ordinador, podem controlar una per una la composició de cada posició de l'espai, i una per una les característiques de cada cèl·lula bacteriana. Si la cèl·lula assoleix les condicions per a la duplicació, controlarem també la nova cèl·lula; si una cèl·lula no assoleix prou energia per mantenir-se deixarem de controlar-la i la seva biomassa es convertirà en C_L i N_L . Controlem l'evolució del sistema al llarg dels passos de temps quan tots els elements estan actuant conjuntament.

En un sistema real tots els elements actuen simultàniament en el temps, mentre que un ordinador treballa seqüencialment. Fins i tot els ordinadors actuals més potents, que treballen amb diversos processadors en paral·lel, tan sols poden realitzar un nombre relativament petit d'accions simultàniament. Per reduir els efectes d'aquest problema, les accions a realitzar es fan, en cada ocasió, seguint una seqüència aleatòria diferent.

Com a sortida del programa de simulació podem conèixer una descripció total de l'estat del sistema, descripció que podríem anomenar microscòpica; o bé obtenir sumes o mitjanes de diversos valors (quantitats totals de cada substància química, nombre de cèl·lules de cada tipus, biomassa total...). Aquesta descripció del sistema, la podem anomenar macroscòpica. La descripció macroscòpica és la que té més interès perquè és comparable amb resultats experimentals; tot i així, la descripció microscòpica sovint es mostra útil per poder entendre el funcionament del sistema.

Resultats

S'ha desenvolupat un simulador (implementació en el programa de simulació del model de sòl desenvolupat) i s'han realitzat diverses simulacions, partint de condicions inicials diferents, per avaluar la bondat del model (CENTELLES i MARTÍN, 1997).

La primera simulació s'ha utilitzat per avaluar el comportament al llarg del temps dels diversos paràmetres controlats. En les figures 4-11 es troben representades les evolucions temporals d'alguns d'aquests paràmetres. Per fer-ne una interpretació correcta, cal tenir present que hem realitzat simulacions qualitatives. Les unitats utilitzades són les pròpies del programa de simulació; no s'han cercat les equivalències amb unitats amb sentit físic, químic o biològic. Trobar aquesta equivalència és una de les darreres etapes del treball de modelització i simulació. Cal afrontar-la quan es consideri que el model desenvolupat ja té un interès pràctic.

Els resultats mostrats en les figures 4-11 corresponen a la simulació d'un sòl on inicialment s'ha realitzat una aportació important de matèria orgànica. S'observa que, després d'un període d'activitat biològica important, el sistema evoluciona cap a un estat que podem considerar aproximadament estacionari. La disminució ràpida de nitrogen i carboni làbils provoquen l'aparició de diverses etapes en el comportament del sistema. Aquestes etapes es veuen clarament en la figura 4, on podem ob-

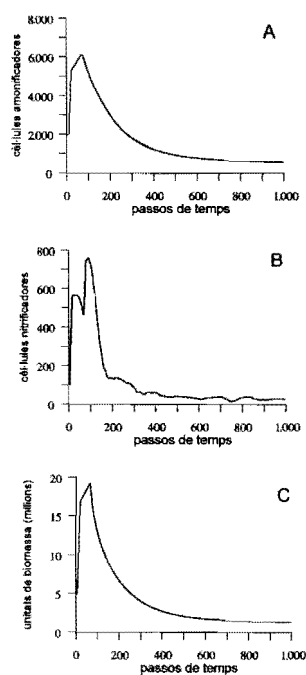


Figura 4. Simulació d'un sòl.
A. Evolució del nombre de cèl·lules amonificadores.
B. Evolució del nombre de cèl·lules nitrificadores.
C. Biomassa total del sistema.

servar l'evolució de les poblacions de bacteris amonificadors i de bacteris nitrificadors. La importància d'aquestes etapes depèn clarament de les condicions inicials i de quines siguin les proporcions de les diferents formes de carboni i nitrogen presents en el sòl. La simulació mostra la seva capacitat per identificar l'existència de diferents comportaments al llarg del temps.

En la figura 4 s'observa que són molt més importants quantitativament les cèl·lules amonificadores que les nitrificadores. Això és així atès que l'activitat metabòlica de la biomassa nitrificadora depèn de l'activitat de la biomassa amonificadora. S'ha observat en el model utilitzat com la concentració d'amoni és molt important per donar estabilitat al sistema. En el nostre model, l'aportació d'amoni la fan únicament les cèl·lules amonificadores. Caldrà incloure en models posteriors l'aportació d'amoni no estrictament bacteriana (microfauna, herbívors...) per poder estudiar correctament el comportament del sòl, especialment dels bacteris que han de realitzar la nitrificació.

En les figures 5 i 6 s'observen les evolucions del carboni i el nitrogen làbils. Després d'unes ràpides disminucions degudes a la seva incorporació a la biomassa microbiana, aquests elements assoleixen valors que són aproximadament constants. En la darrera etapa temporal, s'observen clarament oscil·lacions d'aspecte complex. Aquestes oscil·la-

cions, que apareixen en tots els paràmetres controlats, són pròpies de la dinàmica del sistema. Hem de tenir en consideració que en aquest model no s'han introduït oscil·lacions mediambientals que afectin el comportament del sistema. Cal tenir en compte l'existència d'oscil·lacions intrínseques al sistema en cercar la interpretació de resultats experimentals que molt sovint mostren comportaments d'aquesta mena. Les oscil·lacions no sempre són degudes a factors externs, i costen de controlar.

Un factor que probablement és molt important per poder avaluar la correcció dels models a desenvolupar és el quocient C/N (figura 7). En la simulació realitzada, aquest factor tendeix cap a un valor estable amb una magnitud lleugerament inferior a 5. Aquest valor dependrà fortament dels balanços d'entrades i sortides de carboni i nitrogen del sistema (aportacions de nitrogen, lixiviació...).

En l'evolució simulada del nitrogen mineral es constata la major importància del nitrogen nítric enfront del nitrogen amoniacal (figures 8 i 9). En assajos controlats o en condicions de laboratori, el nitrogen nítric -tot i que pot ser utilitzat per les cèl·lules bacterianes- s'acumula en el sistema, mentre que el nitrogen amoniacal és ràpidament incorporat en la biomassa bacteriana. S'observa clarament l'existència de dues etapes: en primer lloc predomina la immobilització, i posteriorment té més importància la mineralització (figura 9).

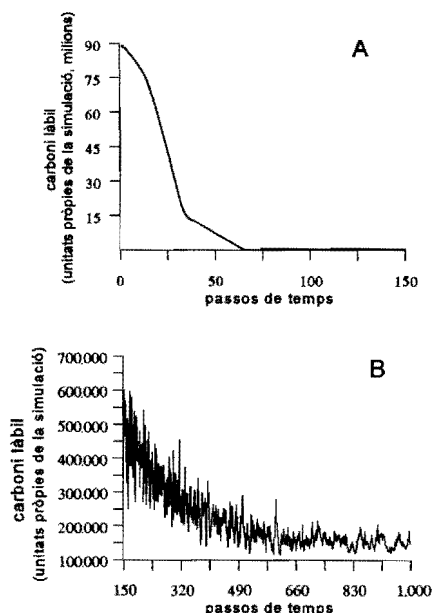


Figura 5. Simulació d'un sòl. Evolució temporal del carboni làbil present. A, evolució inicial; B, ampliació de les ordenades per observar el comportament final

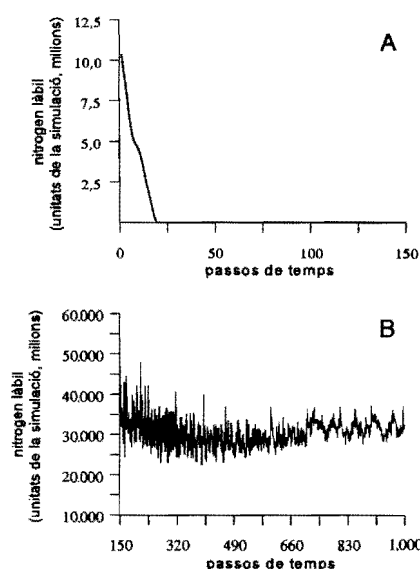


Figura 6. Simulació d'un sòl. Evolució temporal del nitrogen làbil present. A, evolució inicial; B, ampliació de les ordenades per observar el comportament final

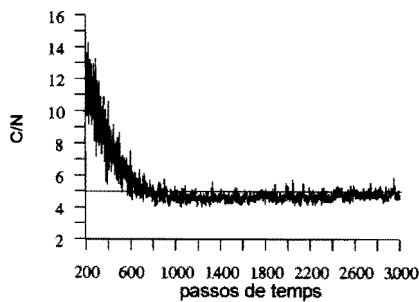


Figura 7. Simulació d'un sòl. Comportament de la relació C/N

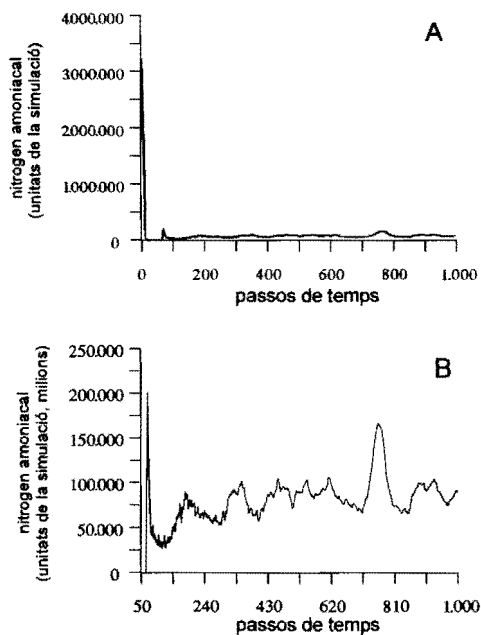


Figura 8. Simulació d'un sòl. Evolució temporal del nitrogen amoniacal present. A, evolució inicial; B, ampliació de les ordenades per observar el comportament final

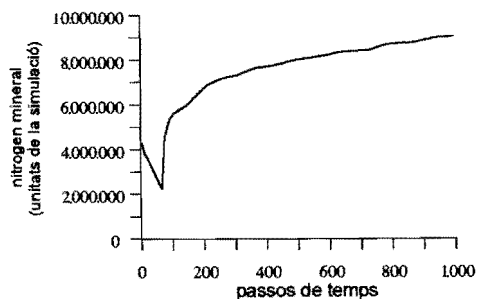


Figura 9. Simulació d'un sòl. Nitrogen mineral acumulat en el sistema al llarg del temps. Inicialment es produeix una disminució (immobilització), i finalment un augment (mineralització)

En estudiar la producció de diòxid de carboni (figura 10) s'observen l'aparició de diversos pics o etapes. Aquest comportament s'observa també en un treball experimental anterior (NAVARRO, 1989). En la simulació han aparegut aquestes oscil·lacions com a conseqüència de la dinàmica de les poblacions bacterianes associades a l'evolució de les diverses formes químiques del carboni i del nitrogen.

S'han realitzat, posteriorment, sèries de simulacions variant les condicions inicials. En una primera sèrie es van variar les quantitats absolutes de carboni i nitrogen làbils mantenint la relació C/N. En la segona sèrie es va variar la relació C/N, mantenint constants les quantitats absolutes de nitrogen. En la primera sèrie, després d'un període inicial en què l'activitat microbiana és més o menys gran en funció del carboni i nitrogen disponibles, el sistema evoluciona cap al mateix estat estacionari. El comportament varia de forma considerable en la segona de les sèries. Quan la proporció de nitrogen és més gran, els bacteris amonificadors assoleixen una importància relativa més gran. En la primera etapa de les simulacions, la immobilització és progressivament més intensa que la mineralització perquè la relació C/N és superior (figura 11).

Per concloure, cal dir que els resultats obtinguts amb la simulació han estat comparats amb la majoria dels resultats experimentals de NAVARRO (1989), s'ha comparat també l'evolució de la biomassa amb els treballs experimentals de ROBERTSON *et al.* (1988), i l'evolució del diòxid de carboni amb els treballs de WHITMORE (1996a,b). En tots els casos els resultats obtinguts amb la simulació semblen correctes i coherents.

Conclusions i perspectives

Atenent els resultats obtinguts, la metodologia emprada es mostra apta per afrontar l'estudi dels sòls. Tot i així, l'enorme complexitat dels sòls fa que calgui avançar lentament i amb prudència. Inicialment ens proposem augmentar la complexitat del model. A continuació exposem de forma esquemàtica quins canvis s'estan avaluant en aquests moments:

1. Introducció, amb un flux variable al llarg del temps, de matèria orgànica fresca. Així es fa possible la simulació de l'acció humana a través de l'agricultura o l'acció dels cicles biològics naturals dels vegetals.

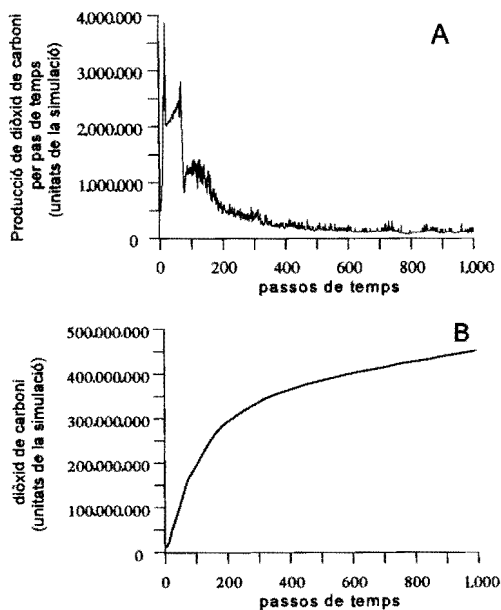


Figura 10. Simulació d'un sòl. A. Producció per unitat de temps de diòxid de carboni. B. Diòxid de carboni acumulat en el sistema

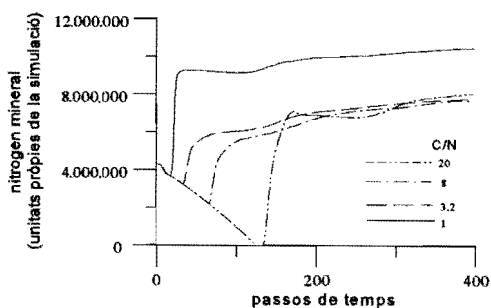


Figura 11. Simulacions variant la relació inicial de C/N, mantenint constants les quantitats absolutes de nitrogen. La immobilització és molt més important perquè els valors de C/N són alts

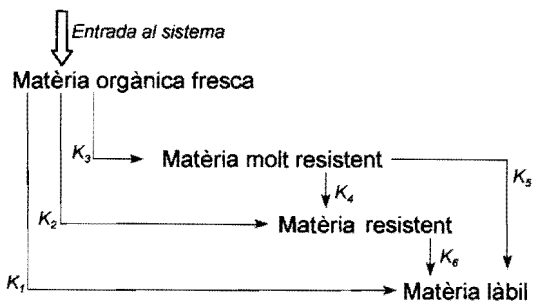


Figura 12. Esquema dels fluxos entre diferents tipus de matèria orgànica

2. La matèria orgànica fresca es transformarà en tres tipus de matèria (molt resistent, resistent i làbil). Considerem que els materials resistents i molt resistents no són directament utilitzables pels microorganismes controlats en la simulació. S'estableix l'existència de fluxos entre cada un dels tipus de matèria, i cada un d'aquests fluxos tindrà la seva velocitat específica (figura 12). D'aquesta forma es vol introduir de manera molt simplificada l'acció de la microfauna i de la mesofauna del sòl, així com accions microbianes no controlades en el model.

3. Entrada al sistema de nitrogen amoniacal. Es pretén introduir l'efecte de la fauna que introdueix nitrogen amoniacal com a conseqüència del seu catabolisme.

4. Desdoblarem el grup de bacteris nitrificadors en dos, corresponents als bacteris que oxiden l'amoni a àcid nítrós, i als que oxiden el nítrós a nítric. Considerarem aquests dos grups lligats fonamentalment als gèneres *Nitrosomonas* i *Nitrobacter*, respectivament.

5. Control de la concentració d'oxigen des de la superfície del sòl, on es considerarà un valor constant. Per difusió, l'oxigen es transportarà cap a l'interior del sòl. Es pretén, així, començar a introduir els efectes de la fondària.

6. Modificació de les reaccions metabòliques controlades per introduir l'efecte de la presència d'oxigen i definició de les reaccions metabòliques que cal realitzar en situacions d'anòxia. Els bacteris que en presència d'oxigen són amonificadors, en absència d'aquesta substància considerarem que es poden comportar com a desnitrificadors.

Introduir aquestes modificacions no és senzill; tot i així, aquesta sembla ser tan sols una etapa més en el desenvolupament de la metodologia per aplicar en l'estudi dels sòls. Cal analitzar, encara, la forma d'introduir altres factors importants, com per exemple l'efecte de les arrels.

L'ús de la metodologia de la simulació discreta es presenta com una línia de recerca bàsica aplicable al sòl i a altres sistemes relacionats, com ara el compost. Tot i així, és necessari fer un llarg treball per donar una veritable utilitat tècnica a aquesta metodologia aplicada als sòls. L'objectiu final és que arribi a ser una eina útil per a la gestió de sòls agrícoles, forestals i pradencs, i una eina per conèixer millor el comportament de diferents productes orgànics en procés de compostatge.

Bibliografia

- ANTON, A. (1996). «Estudi de la contaminació d'aliments amb *Salmonella typhimurium*». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.
- ARMSTRONG, E. F.; PROSSER, J. I. (1988). «Growth of *Nitrosomonas Europaea* on ammoniatreated vermiculite». *Soil Biology and Biochemistry*, 20: 409-411.
- BERMÚDEZ, J.; LÓPEZ, D.; VALLS, J. L.; WAGENSBERG, J. (1989). «On the analysis of microbiological processes by Monte Carlo simulation techniques». *Cabios*, 4: 305-312.
- BOSATTA, E.; AGREN, G. I. (1996). «Theoretical analysis of microbial biomass dynamics in soil». *Soil Biology and Biochemistry*, 26: 143-148.
- BURNS, L. C.; STEVENS, R. J.; LAUGHLIN, R. J. (1995). «Determination of the simultaneous production and consumption of soil nitrite using ^{15}N ». *Soil Biology and Biochemistry*, 27: 839-844.
- CENTELLES, A.; MARTÍN, P. (1997). «Estudi mitjançant simulació discreta del comportament del carboni i el nitrogen en el sòl». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.
- DENDOOVEN, L.; MERCKX, R.; VLASSAK, K. (1995). «Limitations of a calculated N mineralization potential in studies of the N mineralization process». *Plant and Soil*, 177: 175-181.
- DE NEVE, S.; HOFMAN, G. (1996). «Modelling N mineralization of vegetable crop residues during laboratory incubations». *Soil Biology and Biochemistry*, 28: 1451-1457.
- GINOVART, M. (1997). «Desenvolupament d'una metodologia fonamentada en la simulació discreta per a l'estudi de sistemes biològics d'interès tecnològic i científic» [Tesi doctoral.] Barcelona: Universitat Politècnica de Catalunya.
- GINOVART, M.; LÓPEZ, D.; SANAHUJA, A.; SERRANO, A.; WAGENSBERG, J. (1991). «Simulation and microcalorimetry of metabolic oscillations of *Escherichia coli*» A: Mosekilde, E. [ed.] Modeling and Simulation 1991. *Proceedings of the 1991 European Simulation Multiconference*. Copenhagen, Dinamarca, 771-772.
- GINOVART, M.; LÓPEZ, D.; XIFRÉ, J. (1992). «Growth simulation of *Saccharomyces cerevisiae*: alcohol-induced inhibition phenomena». Praga: *Proceedings of the 8th Prague Symposium on computer simulation in biology, ecology and medicine*, 82-86.
- GIRÓ, A.; PADRÓ, J. A.; VALLS, J.; WAGENSBERG, J. (1985). «Monte Carlo simulation of an ecosystem: a matching between two levels of observation». *Bull. Math. Biol.*, 47: 111-122.
- GIRÓ, A.; PADRÓ, J. A.; VALLS, J.; WAGENSBERG, J. (1986). «Monte Carlo simulation program for ecosystems». *Cabios*, 2: 291-296.
- GRANT, R. F. (1994). «Simulation of ecological controls on nitrification». *Soil Biology and Biochemistry*, 26: 305-315.
- GRANT, R. F.; JUMA, N. G.; MCGILL, W. B. (1993a). «Simulation of carbon and nitrogen transformations in soil: microbial biomass and metabolic products». *Soil Biology and Biochemistry*, 25: 1331-1338.
- GRANT, R. F.; JUMA, N. G.; MCGILL, W. B. (1993b). «Simulation of carbon and nitrogen transformations in soil: mineralization». *Soil Biology and Biochemistry*, 25: 1317-1329.
- HUWE, B.; TOTSUHE, K. U. (1995). «Deterministic and stochastic modelling of water, heat and nitrogen dynamics on different scales with WHNSIM». *Journal Of Contaminant Hydrology*, 20: 265-284.
- IBÁÑEZ, M. V.; VAQUERO, S. (1995). «Simulación discreta del comportamiento del hongo filamentoso *Aspergillus niger*». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.
- IBÁÑEZ, M. V.; VAQUERO, S.; LÓPEZ, D.; GINOVART, M. (1996). «*Aspergillus niger*: simulació discreta de un cultiu en un medi sòlid». Resúmenes del II Congreso Latinoamericano de Micología 1996. L'Havana, Cuba, 1-2. 63.
- JOU, D. (1985). «Introducció a la termodinàmica de processos biològics». Barcelona: Institut d'Estudis Catalans.
- KÉPÈS, F. (1986). «The cell cycle of *Escherichia coli* and some of its regulatory systems». *FEMS Microbiology Reviews*, 32: 225-246.
- LÓPEZ, D.; GINOVART, M.; VALLS, J.; SOLÉ, R. V. (1991). «Simulació discreta de sistemes biològics: una potent eina en la recerca en ciència i tecnologia». *Arxius de l'ESAB*, 13-14: 3-17.
- LÓPEZ, D. (1992). «Simulació de cultius bacterians. Estudi cinètic i termodinàmic». [Tesi doctoral.] Barcelona: Universitat de Barcelona.
- NAVARRO, M. (1989). «Estudi del procés de mineralització en el sòl del compost de deixalles». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.
- NORTON, J. M.; FIRESTONE, M. K. (1996). «N dynamics in the rhizosphere of *Pinus Ponderosa* seedlings». *Soil Biology and Biochemistry*, 28: 351-362.
- PARDINILLA, E. (1995). «Simulació discreta de la flocculació de llevats cervesers». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.
- RECOUS, S. *et al.* (1995). «Soil inorganic N availability: effect on maize residue decomposition». *Soil Biology and Biochemistry*, 27: 1529-1538.
- ROBERTSON, K. *et al.* (1988). «Microbial biomass in relation to C and N mineralization laboratory incubations». *Soil Biology and Biochemistry*, 20: 281-286.
- SALLIH, Z.; PANSU, M. (1993). «Modelling of soil carbon forms after organic amendment under controlled conditions». *Soil Biology and Biochemistry*, 25: 1755-1762.
- SCOTT, E. M. (1995). «A mathematical model for dispersal of bacterial inoculants colonizing the wheat rhizosphere». *Soil Biology and Biochemistry*, 27: 1307-1318.
- SOLÉ, R.V.; VALLS, J. (1992). «Nonlinear phenomena and chaos in a Monte Carlo simulated ecosystem». *Bull. Math. Biol.*, 54: 939.
- SOLÉ, R.V.; VALLS, J.; BASCOMPTE, J. (1992a). «Spiral waves, chaos and multiple attractors in lattice models of interacting populations». *Physics Letters A*, 166: 123-128.
- SOLÉ, R.V.; BASCOMPTE, J.; VALLS, J. (1992b). «Stability and complexity of spatially extended two-species competition». *J. Theor. Biol.*, 159: 469.
- SOLÉ, R. V.; BASCOMPTE, J.; VALLS, J. (1992c). «Non-equilibrium dynamics in lattice ecosystems: chaotic stability and dissipative structures». *Chaos*, 2: 387.
- SOLÉ, R. V.; LÓPEZ, D.; GINOVART, M.; VALLS, J. (1992d). «Self-organized criticality in Monte Carlo simulated ecosystems». *Physics Letters A*, 172: 56-61.
- STARK, J. M.; FIRESTONE, M. K. (1995). «Mechanisms for

Soil Moisture Effects on Activity of Nitrifying Bacteria». *Applied And Environmental Microbiology*, 61: 218-221.

VALLS, J. (1986). «Simulació de sistemes de N-cossos interactius. Aplicació als ecosistemes». [Tesi doctoral.] Barcelona: Universitat de Barcelona.

VERDAGUER, A. (1995). «Simulació discreta del creixement bacterià en la fabricació de iogurt». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.

WAGENSBERG, J.; LÓPEZ, D.; VALLS, J. (1988). «Statistical aspects of biological organization». *J. Phys. Chem. Solids*, 49: 695-700.

WHITMORE, A. P. (1996a). «Alternative kinetics laws to describe the turnover of the microbial biomass». *Plant and Soil*, 181: 169-173.

WHITMORE, A. P. (1996b). «Describing the mineralization of carbon added to soil in crop residues using second-order kinetics». *Soil Biology and Biochemistry*, 28: 1435-1442.

WILLIGEN, P. (1991). «Nitrogen turnover in the soil-crop system; comparison of fourteen simulation models». *Fertilizer Research*, 27: 141-149.

XIFRÉ, J. (1992). «Simulació discreta de cultius de *Saccharomyces cerevisiae*». [Treball final de carrera.] Barcelona: Escola Superior d'Agricultura de Barcelona.

XIFRÉ, J.; LÓPEZ, D.; GINOVART, M.; VALLS, J. (1994). «Simulació discreta de cultivos de *Saccharomyces cerevisiae*». *Revista Iberoamericana de Micología*, 11: S-31.

YAMAGUCHI, T. *et al.* (1996). «Nitrification in porous media during rapid, unsaturated water flow». *Water Research*, 30: 531-540.