

РАЗРАБОТКА И РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОДЕГРАДАЦИИ С УЧЕТОМ ДИФФУЗИИ НЕФТЕПРОДУКТОВ В ПОЧВЕ

Бигаева Л.А., к.ф.-м.н., доцент

Садрисламов М.Ф., магистрант

Бирский филиал УУНиТ, г. Бирск, Россия

Аннотация. Статья посвящена математическому моделированию процессов биоремедиации почв, загрязненных нефтепродуктами. На основе модифицированного уравнения Моно разработана модель, описывающая кинетику роста микроорганизмов, диффузию и биodeградацию загрязнителей. Разработанное программное обеспечение позволяет не только прогнозировать общее количество остаточных нефтяных углеводородов, но и визуализировать динамику очистки.

Ключевые слова: биоремедиация, математическое моделирование, уравнение Моно, нефтепродукты, диффузия.

Загрязнение почв нефтепродуктами и другими органическими соединениями представляет собой серьезную экологическую проблему, требующую эффективных и экономически целесообразных решений. Биоремедиация – технология, основанная на способности микроорганизмов разлагать загрязняющие вещества, – предлагает перспективную альтернативу. Применение микроорганизмов, естественно обитающих в экосистемах, позволяет сохранить существующую биологическую структуру почвы и минимизировать вредное воздействие на неё [1, 4].

Математические модели, способные адекватно описывать процессы биоремедиации, являются важным инструментом для прогнозирования и оптимизации очистных мероприятий. Такие модели должны учитывать множество взаимосвязанных факторов: кинетику роста микроорганизмов, диффузию загрязнителей в почве, влияние температуры и кислотности среды.

Актуальность разработки программного обеспечения для моделирования процессов биоремедиации обусловлена несколькими ключевыми факторами. Во-первых, современные экологические вызовы требуют перехода от дорогостоящих и разрушительных методов очистки к более устойчивым и экологически безопасным технологиям. Биоремедиация соответствует этим требованиям, но ее эффективность сильно зависит от условий окружающей среды и характеристик конкретного загрязнения.

Во-вторых, экспериментальные исследования процессов биодegradации в полевых условиях отличаются высокой стоимостью и длительностью. Математическое моделирование [3] позволяет существенно сократить время и ресурсы, необходимые для оценки перспективности применения биоремедиации на конкретном участке. Особенно это важно при работе с большими площадями загрязнения или труднодоступными территориями.

Модель, использованная в данной работе, опирается на исследования Компалы Д. С. [1]. Кинетика роста микроорганизмов и поглощения субстрата описывается с помощью уравнения Моно:

$$\mu = \frac{\mu_{max} * C}{k_c + C} \quad (1)$$

μ - удельный темп роста (час⁻¹)

μ_{max} – максимальная скорость роста микроорганизмов (час⁻¹)

k_c - константа, численно равная концентрации субстрата s , при которой скорость роста равна половине максимальной. ($\frac{\mu}{\mu_{max}} = 0,5$ (г/л))

C – концентрация субстрата (г/л)

Скорость роста биомассы:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\mu_{max} C}{k_c + C} M \quad (2)$$

Скорость утилизации субстрата:

$$\frac{dC}{dt} = -\frac{1}{Y_{M/C}} \frac{dM}{dt} = \frac{-\mu_{max} C M}{Y_{M/C} (k_c + C)} \quad (3)$$

Где $Y_{M/C}$ - коэффициент выхода в граммах клеточной массы, полученного при поглощении грамма субстрата.

В реальных условиях на активность микроорганизмов влияют внешние факторы, которые снижают способность микроорганизмов к росту и деградации. Поэтому в математическую модель включена диффузия загрязнителя и микроорганизмов

Диффузия загрязнителя и микроорганизмов в почве моделируется по второму закону Фика[3]: изменение концентрации вещества по времени пропорционально второй производной концентрации по пространственной координате.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_C \nabla^2 C \quad (4)$$

$$\frac{\partial M}{\partial t} = D_M \nabla^2 M \quad (5)$$

Типичные значения для коэффициентов диффузии нефти в почве $D_C = 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$. Для подвижных бактерий (*Pseudomonas*, *Bacillus*) $D_M = 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$ [2].

Совместное влияние этих факторов на скорость биodeградации выражается через СДУ:

$$\begin{cases} \frac{\partial M}{\partial t} = D_M \left(\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 M}{\partial y^2} \right) + \frac{\mu_{max} C}{k_C + C} M, \\ \frac{\partial C}{\partial t} = D_C \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - \frac{\mu_{max} C M}{Y_{M/C}(k_C + C)} \end{cases} \quad (6)$$

Программа для численного решения данной системы уравнений была разработана с использованием языка программирования Python. Для задания параметров модели и визуализации результатов используется графический интерфейс (рис. 1), который отображает концентрацию загрязняющего вещества в виде цветовой карты. Каждая ячейка решетки окрашивается в зависимости от уровня загрязнения, что позволяет наглядно наблюдать изменения во времени.

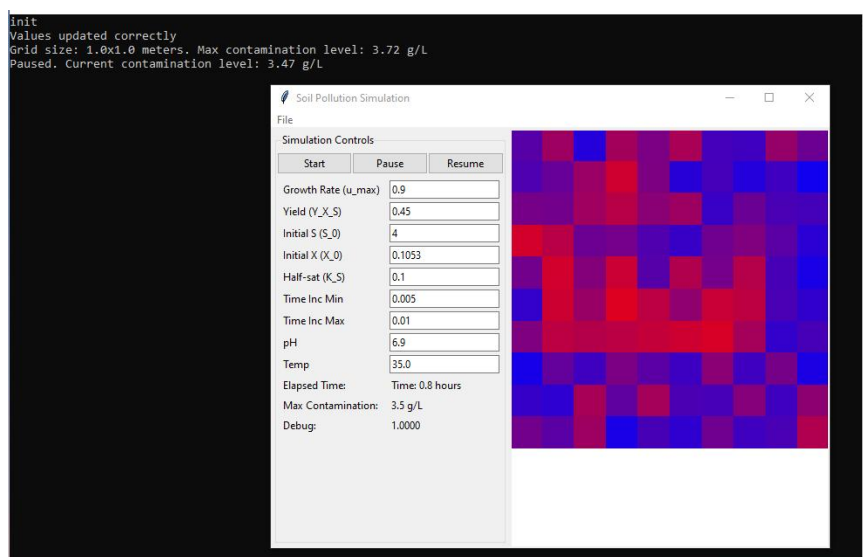


Рисунок 1 - Окно программы

Программа представляет собой объектно-ориентированное приложение, моделирующее процесс на двумерной сетке, где каждая ячейка представляет собой участок почвы с определённой концентрацией загрязнителя. Симуляция учитывает динамику изменения концентрации загрязнителя под воздействием микробной активности и диффузии, а также влияние внешних факторов, таких как кислотность и температура.

Графический интерфейс включает:

- Поля ввода параметров.
- Кнопки управления: "Start", "Pause" и "Resume" для запуска, приостановки и возобновления симуляции.
- Метки для отображения текущего времени симуляции, максимальной концентрации загрязнителя и отладочной информации.
- Меню для сохранения данных и выхода из программы.
- Программа поддерживает экспорт результатов симуляции в CSV-файл, что позволяет анализировать данные в других приложениях, таких как Excel или специализированные программы для обработки данных.

Из [1] были взяты следующие исходные параметры для модели: $\mu_{max} = 0,9 \left(\frac{1}{ч}\right)$, $M_0 = 0,1053$ (г/л), $C_0 = 4$ (г/л), $Y_{M/C} = 0,45$, $k_C = 0,1$ (г/л).

В результате численной реализации разработанной модели были получены графики изменения концентрации нефтяных углеводородов в загрязненной почве и концентрация микроорганизмов и сравнены с данными из работы Компалы [1].

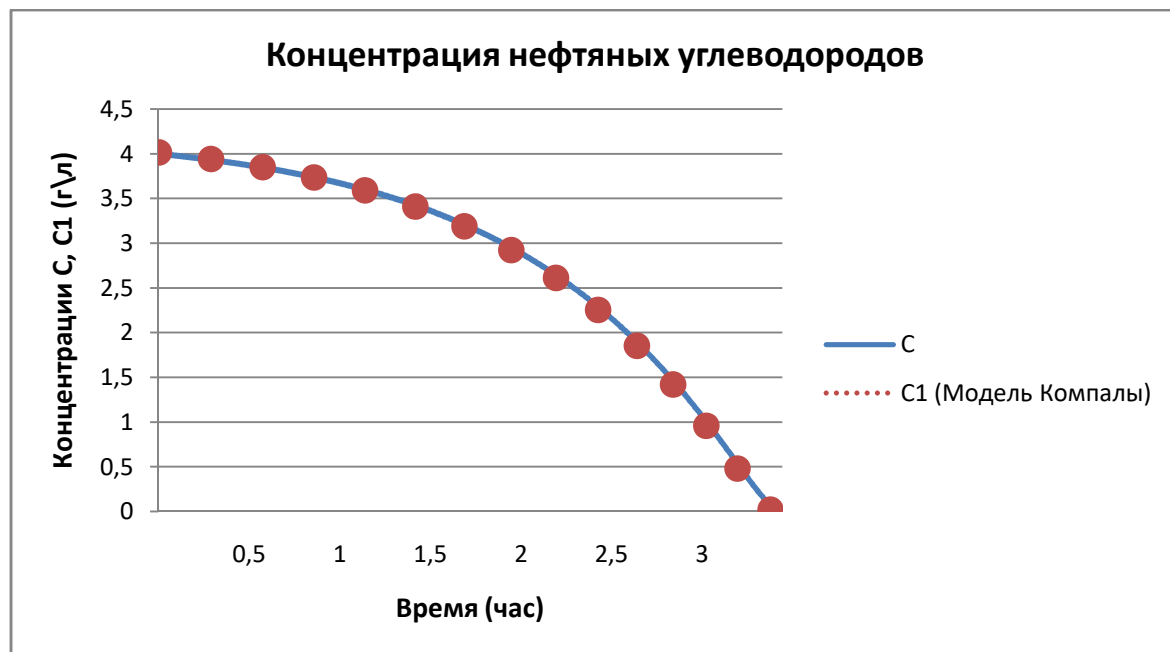


Рисунок 2 - Изменение концентрации нефтяных углеводородов C и C_1 (Модель Д.С. Компалы) в почве с течением времени

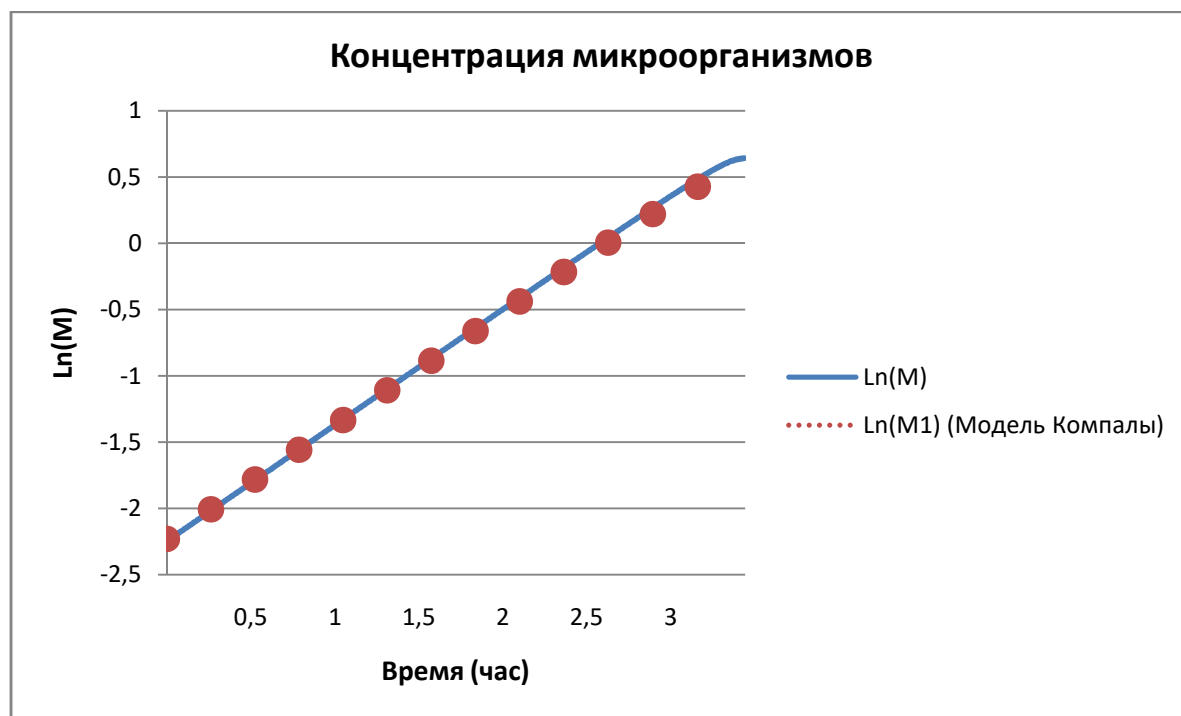


Рисунок 3 – Концентрация микроорганизмов $\ln(M)$ и $\ln(M_1)$ (Модель Д.С. Компалы)

График на рисунке 2 показывает, что через 3,5 часа содержание субстрата в почве было бы полностью исчерпано. Результаты симуляций, представленные выше, демонстрируют согласованность моделей. Как видно из рис. 2-3, получено хорошее соответствие между ними.

Разработанная в данной работе математическая модель, основанная на уравнении Моно и модифицированная с учётом диффузии, может быть использована для более точного прогнозирования общего количества остаточных нефтяных углеводородов, присутствующих в почве. Разработанное программное обеспечение с графическим интерфейсом представляет удобный инструмент для визуализации и анализа процессов биоремедиации, а также для прогнозирования их эффективности при различных условиях.

Литература

1. Компала Д. С., Рамкришна Д., Янсен Н.Б., Цао Г.Т. Исследование роста бактерий на смешанных субстратах: экспериментальная оценка кибернетических моделей. – М.: Biotechnology and Bioengineering, 1986. – С. 1044-1055.
2. Кох А. Л. Диффузия - важнейший процесс во многих аспектах биологии бактерий. Достижения в области микробной экологии, 1990. – С. 37-70.
3. Латыпов И. И. Компьютерное моделирование / И. И. Латыпов, Л. А. Бигаева. – Бирск : Бирский филиал Уфимского университета науки и технологий, 2023. – 142 с. – EDN RRSXBP.
4. Садрисламов, М. Ф. Влияние концентрации питательной среды – субстрата на рост микроорганизмов / М. Ф. Садрисламов, Л. А. Бигаева // Актуальные проблемы и тенденции развития современной экономики и информатики : Материалы Международной научно-практической конференции, Бирск, 04–06 декабря 2024 года. – Бирск: Уфимский университет науки и технологий, 2024. – С. 362-365. – EDN GFXXL F.