

АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВЫ НЕФТЕШЛАМАМИ

ANALYSIS OF THE USE OF MATHEMATICAL MODELS FOR CALCULATION OF SOIL POLLUTION BY OIL SLUDGE

*M. Kravtsov
D. Orlova*

Summary. The article presents a comparative analysis of existing mathematical models and the possibility of their use in the process of assessing the degree of soil contamination by oil products and the possibility of restoring the soil cover using chemical and biological methods of its purification. The article substantiates the use of mathematical modeling methods to assess the degree of soil contamination by oil products and the choice of the most effective biological method of their purification without the use of long-term analytical studies, which will provide the opportunity to maximally reduce environmental damage through operational measures for restoration. Particular attention is paid to the search for an optimal mathematical model that allows the most accurate calculation of the degree of soil contamination and the time for its remediation, taking into account the choice of biopreparation. The models consider the processes of transfer and transformation of the object of pollution in homogeneous soil, transfer in water-saturated soils with deep and close groundwater table taking into account equilibrium sorption (characterized by linear isotherm of exchange), as well as non-equilibrium irreversible sorption. Models that take into account the influence of various factors on the spread of contamination, such as temperature, soil moisture, presence of vegetation and others, are considered.

Keywords: mathematical modeling, oil sludge, neutralization of contaminated soil, bioremediation, biological methods.

Кравцов Михаил Валериевич

ФГБОУ ВО «Тольяттинский
государственный университет»
eco_engineer_63@mail.ru

Орлова Дарья Дмитриевна

ФГБОУ ВО «Тольяттинский
государственный университет»
orlova2001.d@yandex.ru

Аннотация. В статье проведен сравнительный анализ существующих математических моделей и возможности их использования в процессе оценки степени загрязнения почвы нефтепродуктами и возможности восстановления почвенного покрова при использовании химических и биологических способов ее очистки. Обоснованно использование методов математического моделирования для оценки степени загрязнения почвы нефтепродуктами и выбора наиболее эффективного биологического способа их очистки без применения длительных аналитических исследований, что обеспечит возможность максимально снизить экологический ущерб за счет оперативных мероприятий по восстановлению. Особое внимание уделяется поиску оптимальной математической модели, которая позволяет наиболее точно провести расчет степени загрязнения почвы и времени на ее восстановление с учетом выбора биопрепарата. В моделях рассматриваются процессы переноса и трансформации объекта загрязнения в однородной почве, переноса в водонасыщенных почвах с глубоким и близким залеганием уровня грунтовых вод с учетом равновесной сорбции (характеризуемой линейной изотермой обмена), а также неравновесной необратимой сорбции. Рассмотрены модели, которые учитывают влияние различных факторов на распространение загрязнения, таких как температура, влажность почвы, наличие растительности и другие.

Ключевые слова: математическое моделирование, нефтезагрязненные почвы, модель, биоремедиация почв, биологические методы.

Введение

Почва сложная биологическая система, которая находится в динамическом равновесии. Нарушение такого равновесия в большинстве случаев связана с производственной деятельностью.

Нефтешламы, представляющие собой смесь нефти, минеральных веществ и других химических компонентов, становятся серьезной угрозой для почвенного покрова и его биологического разнообразия. Они попадают в почву в результате разлива нефти, несчастных случаев на нефтеперерабатывающих заводах и других промышленных объектах, а также в результате несанкционированного использования грунта для размещения нефтесодержащих отходов.

Поэтому загрязнение почвы нефтешламами является серьезной проблемой, которая может иметь негативные последствия для окружающей среды. Поэтому для эффективного решения этой проблемы необходимо разрабатывать и применять математические модели, позволяющие предсказывать и анализировать распространение загрязнения и его воздействие на окружающую среду, а также позволит оценить степень загрязнения и разработать эффективные методы рекультивации почвы.

Моделирование является одним из основных средств исследования как в физике, так и в биологии. Во многих практически важных случаях только основанная на экспериментальных данных модель позволяет понять и оценить происходящие процессы. Теория динамиче-

ских систем дает принципиальную возможность описания сложных типов динамического поведения.

Литературный обзор

Математические модели расчета загрязнения почвы нефтешламами основаны на решении уравнений, описывающих процессы переноса и трансформации объекта загрязнения в почве. Одной из основных задач моделирования является определение концентрации нефтешламов в почве в зависимости от времени и пространственных координат.

Одной из наиболее распространенных моделей для расчета загрязнения почвы нефтешламами является модель распространения загрязнения в однородной почве. Для расчета концентрации загрязнения используется уравнение диффузии, которое описывает процесс переноса нефтепродуктов в почве.

Модель конвективного переноса учитывает скорость движения загрязняющих веществ с помощью уравнения диффузии. Она базируется на предположении о равномерном распределении загрязнений в почве и позволяет оценить изменение концентрации загрязняющих веществ в зависимости от времени и расстояния.

Объектом анализа является решение уравнения переноса в водонасыщенных почвах с глубоким и близким залеганием уровня грунтовых вод с учетом равновесной сорбции (характеризуемой линейной изотермой обмена), а также неравновесной необратимой сорбции (характеризуемой биологической трансформацией в почвенном растворе, протекающей в соответствии с моделью кинетики первого порядка) в почве, которое имеет вид:

$$\left(1 + \frac{\rho}{\theta} k\right) \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \mu C(x, t)$$

- где $C(x, t)$ — концентрация почвенного раствора (ML-3);
- k — константа уравнения изотермы адсорбции Фрейндлиха (L3M-1);
- θ — объемная влажность почвы (L3L-3);
- ρ — плотность сложения почвы (ML-3);
- D — коэффициент конвективной диффузии (L2T-1);
- v — средняя скорость потока почвенной влаги (LT-1);
- t — время (T);
- x — расстояние (M);
- μ — коэффициент скорости разложения в почвенном растворе (T-1).

Однако в действительности почва в большинстве случаев является неоднородной, что приводит к неравномерному распределению в ней нефтешлама. Поэтому важным фактором в таких математических моделях следует учесть геометрическую структуру почвенного слоя.

Для учета этого фактора используются более сложные модели. Эти модели позволяют учесть влияние пористости почвы, степени насыщения влагой, а также гидродинамических свойств веществ на распределение загрязнений в почве.

Кроме того, модели для расчета концентрации загрязнения почвы нефтешламами могут учитывать различные процессы трансформации загрязнителей, такие как биологическое разложение, физико-химические реакции и адсорбция на минеральных частицах почвы. Это позволяет более точно предсказывать динамику загрязнения и оценивать эффективность различных методов очистки почвы.

Одним из примеров таких моделей является модель Моно, которая описывает распространения загрязнения почвы нефтешламами с учетом биологического разложения. В этой модели учитывается процесс разложения нефтешламов под воздействием микроорганизмов, что позволяет оценить скорость очистки почвы и определить оптимальные условия для биоремедиации.

Модель Моно описывает процесс изменения количества субстрата под действием микроорганизмов:

$$\frac{d(t)}{dt} = -\frac{\alpha \mu C(t)}{C(t) + K} M(t)$$

$$\frac{dM(t)}{dt} = -\frac{\mu C(t)}{C(t) + K} M(t) - \lambda M(t)$$

- где $C(t)$ — концентрация субстрата;
- $M(t)$ — концентрация микроорганизмов;
- μ — максимальная скорость роста микроорганизмов при данных условиях;
- K — константа, численно равная концентрации субстрата, при которой скорость роста культуры равна половине максимальной;
- α^{-1} — коэффициент, показывающий, какая часть поглощенного субстрата идет на приращение биомассы;
- λ — скорость отмирания клеток;
- t — время (в мес.).

В случае внесения в почву микроорганизмов-нефтедеструкторов в качестве субстрата выступает нефть. Однако данная модель не учитывает того, что часть компонентов нефти может разлагаться под действием физико-химических факторов. Рассмотрим линейную модель разложения компонентов нефти под действием физико-химических факторов

$$\frac{dC_1(t)}{dt} = -\delta C_1(t)$$

где $C_1(t)$ — часть компонентов нефти, разлагаемых под действием физико-химических факторов;

δ — коэффициент, зависящий от характера загрязнения и свойств почвы, рассчитывается на основе экспериментальных данных.

С учетом действия физико-химических факторов, модель изменения концентрации нефти в случае внесения в почву нефтеразлагающих микроорганизмов может быть записана в виде:

$$\begin{cases} \frac{dC(t)}{dt} = \frac{dC_1(t)}{dt} + \frac{dC_2(t)}{dt}; \\ \frac{dC_1(t)}{dt} = -\delta C_1(t); \\ \frac{dC_2(t)}{dt} = -\frac{\alpha \mu C_2(t)}{C_2(t) + K} M(t); \\ \frac{dM(t)}{dt} = \frac{\mu C_2(t)}{C_2(t) + K} M(t) - \lambda M(t). \end{cases}$$

где $C(t)$ — концентрация нефти в почве;
 $C_1(t)$ — часть компонентов нефти, разлагаемых под действием физико-химических факторов;
 $C_2(t)$ — часть компонентов нефти, разлагаемых под действием микроорганизмов.

Начальные условия для такой системы имеют вид:

$$M(0) = M_0, C(0) = C_0, C_1(0) = (1 - \sigma)C_0, C_2(0) = \sigma C_0$$

Коэффициент σ определяет часть нефти, разлагаемой под действием микроорганизмов.

Модель Н.Д. Иерусалимского. В 1965 году им был сформулирован закон «лимитирующего фактора» для ферментативных процессов. Также Иерусалимский показал, что «при отсутствии продукта скорость роста биомассы максимальна, то есть данная модель учитывает рост клеток не только от концентрации субстрата, но и от продуктов метаболизма. Их накопление является ингибирующим фактором для роста биомассы. Модель имеет вид

$$\mu = \frac{\mu_m}{1 + \frac{P}{K_p}}$$

где K_p — кинетическая константа ингибирования продуктом, г/л;
 μ_m — максимальная удельная скорость роста;
 P — концентрация продуктов метаболизма.

Модель П.Ф. Ферхюльста. Он установил, что удельная скорость отмирания биомассы принята пропорциональной плотности (биомассе) популяции клеток, также он учел системный фактор, который ограничивает рост этой популяции клеток. «Стоит отметить, что при малых значениях количества клеток их численность возрастает экспоненциально, а при больших — приближается к определенному пределу K . Эта величина называется

емкостью популяции клеток, определяется ограниченностью пищевых ресурсов и другими факторами» [1]. Модель имеет вид

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

где r — количество клеток;
 x — удельная скорость роста клеток, сутки⁻¹;
 K — ёмкость популяции, характеризующая предельную численность популяции клеток.

Модель Н.В. Степановой. Было допущено, что «однородность клеток в микробной популяции относительно, большую роль в процессах роста играет возрастная структура. Клетки разбиты на 2 группы — молодые и старые. Клетки первой группы интенсивно растут, но не достигли физиологической зрелости и неспособны делиться, а члены второй группы способны к делению, процесс может быть задержан с помощью ингибиторов» [1]. Модель для молодых и старых клеток может быть записана в следующем виде, где множитель 2 предполагает, что старая клетка делится на две молодые:

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{2 \cdot N_2}{T_2} - \frac{N_1}{T_1} - D \cdot N_1, \quad \frac{dN_2}{dt} = \frac{N_1}{T_1} - \frac{N_2}{T_2} - D \cdot N_2$$

где N_1, N_2 — численность молодых и старых клеток;

T_1, T_2 — среднее время созревания молодой клетки и время пребывания старой клетки в репродуктивном периоде;

D — скорость протока.

Модель Холдейна: (с учетом ингибирующего действия субстрата)

$$\frac{dx}{dt} = \mu_{max} \cdot \frac{S}{k_s + S + S^2 / k_i} \cdot x$$

k_i — константа ингибирования

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{x}{Y_{S/X}} \cdot \mu_{max} \cdot \frac{S}{k_s + S + S^2 / k_i}$$

Модель Герберта (с учетом гибели микроорганизмов)

$$\frac{dx}{dt} = \mu_{max} \cdot \frac{S}{k_s + S} \cdot x - \beta \cdot x$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{x}{Y_{S/X}} \cdot \mu_{max} \cdot \frac{S}{k_s + S}$$

Модели для смешанных популяций учитывают гетерогенность видового состава биомассы.

Модель Кеннела (учитывает взаимоотношение микроорганизмов как хищник — жертва).

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\mu_m x S}{(k_S + S)}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\mu_m x S}{(k_S + S)} - \frac{\mu_b x b}{\alpha_b (k_x + x)}$$

$$\frac{db}{dt} = \frac{\mu_b x b}{(k_x + b)}$$

Также существуют модели, которые учитывают влияние различных факторов на распространение загрязнения, таких как температура, влажность почвы, наличие растительности и другие. Это позволяет более точно предсказывать динамику загрязнения и разрабатывать эффективные стратегии управления и восстановления загрязненных почв.

Заключение

Таким образом, анализ математических моделей расчета загрязнения почвы нефтешламами является

важным инструментом для прогнозирования и оценки степени загрязнения, а также разработки эффективных методов рекультивации почвы. Данные модели позволяют учитывать различные факторы, влияющие на распространение загрязнения, и предоставляют информацию, необходимую для принятия решений по управлению и защите окружающей среды.

Важно отметить, что точность и достоверность результатов моделирования зависит от качества входных данных, поэтому необходимо проводить тщательный анализ параметров, используемых в моделях. Такой подход позволит получить объективные оценки степени загрязнения и разработать эффективные меры по его устранению.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ризниченко Г.Ю. Математические модели в биофизике и экологии.
2. Водопьянов В.В. Математическое моделирование численности микроорганизмов и биодеградация нефти в почве // Вест. УГАТУ. — 2006 — Т.8. — №1(17). — С.132–137.
3. Чеботарева Э.В. Математические модели изменения концентрации нефти в загрязненных почвах под действием сорбентов и микроорганизмов // Вестник ТГГПУ. 2011. № 26 (4). С. 2–5.
4. Венецианов Е.В. Расчет процесса биологической очистки подземных вод и почв от нефтяных загрязнений на основе математической модели // Экология промышленного производства. 2006. С. 24–28.
5. Данилов А.С., Созина И.Д. Микробиологическая ремедиация нефтезагрязненных почв // Записки Горного института. 2023. (2023). С. 1–16.
6. Кузнецов А.Е. Прикладная экибиотехнология: учеб. пособие для студентов обучающихся по специальности «Биотехнология» / А.Е. Кузнецов, 2013. 629 с.
7. Goi A. Combined chemical and biological treatment of oil contaminated soil // Chemosphere. 2006. № 10 (63). С. 1754–1763.
8. Артюх Е.А. Перспективы применения биосорбентов для очистки водоемов при ликвидации аварийных разливов нефти // Экология и системы жизнеобеспечения. 2014. С. 58–66.
9. Моделирование загрязнения почв при разливах углеводородов. [Электронный ресурс] — URL: https://studme.org/135927/ekologiya/modelirovanie_zagryazneniya_pochv_razlivah_uglevodorodov
10. Ветрова А.А. Биодеструкция нефти отдельными штаммами и принципы составления микробных консорциумов для очистки окружающей среды от углеводородов нефти // Известия Тульского Государственного Университета. Естественные Науки. 2013. № 2–1. С. 241–257.

© Кравцов Михаил Валериевич (eco_engineer_63@mail.ru); Орлова Дарья Дмитриевна (orlova2001.d@yandex.ru)
Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»