

УДК 531/534: [57+61]

ПРИМЕНЕНИЕ ПАКЕТА ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ, СВЯЗАННЫХ С ОЧИСТКОЙ ПОЧВЫ ОТ НЕФТИ И ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ПОСРЕДСТВОМ БИОСУРФАКТАНТА

О.А. Коростина¹, М.С. Куюкина^{2,3}, И.Б. Ившина^{2,3}, Л.В. Костина²,
М.А. Осипенко¹, Ю.И. Няшин¹

¹ Кафедра теоретической механики Пермского национального исследовательского политехнического университета, Россия, 614990, Пермь, Комсомольский проспект, 29, e-mail: oma@theormech.pstu.ac.ru

² Институт экологии и генетики микроорганизмов Уральского отделения Российской академии наук, Россия, 614081, Пермь, ул. Голева, 13, e-mail: kuyukina@iegm.ru

³ Кафедра микробиологии и иммунологии Пермского государственного национального исследовательского университета, Россия, 614900, Пермь, ул. Букирева, 15, e-mail: ivshina@iegm.ru

Аннотация. Разработан пакет прикладных программ, позволяющий решать следующие задачи биомеханики: вычисление времени отмывания биогенным поверхностно-активным веществом (биосурфактантом) загрязненной нефтью почвы, находящейся в накопительном резервуаре, вычисление коэффициента сопротивления при фильтрации биосурфактанта в почве, загрязненной солями тяжелых металлов, прогнозирование эффективности биологической очистки (биоремедиации) почвы. Описываются основные блоки, составляющие пакет прикладных программ, а также кратко формулируются биомеханические и математические модели, на основе которых производятся расчеты в данном пакете.

Ключевые слова: биомеханика, пакет прикладных программ, загрязнение почвы, биоремедиация, нефтезагрязненная почва, тяжелые металлы, сорбция, десорбция, *Rhodococcus*-биосурфактант, математическое моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы с целью ликвидации последствий углеводородных загрязнений почвы все чаще применяют эффективные и экологически безопасные технологии биологической очистки (биоремедиации), основанные на использовании микроорганизмов и продуктов их жизнедеятельности, в частности биогенных поверхностно-активных веществ (биосурфактантов).

В лаборатории алканотрофных микроорганизмов Института экологии и генетики микроорганизмов УрО РАН получены высокоактивные биосурфактанты, синтезируемые бактериями рода *Rhodococcus*. Полученные биосурфактанты с высокой нефтеэмульгирующей и нефтеотмывающей способностью успешно применяются в процессах биоремедиации загрязненных почвогрунтов [1]. Лабораторные

© Коростина О.А., Куюкина М.С., Ившина И.Б., Костина Л.В., Осипенко М.А., Няшин Ю.И., 2011

Коростина Ольга Андреевна, соискатель кафедры теоретической механики, Пермь

Куюкина Мария Станиславовна, д.б.н., в.н.с. лаборатории алканотрофных микроорганизмов, профессор кафедры микробиологии и иммунологии, Пермь

Ившина Ирина Борисовна, д.б.н., профессор, чл.-корр. РАН, зав. лабораторией алканотрофных микроорганизмов, профессор кафедры микробиологии и иммунологии, Пермь

Костина Людмила Викторовна, к.б.н., инженер лаборатории алканотрофных микроорганизмов, Пермь

Осипенко Михаил Анатольевич, к.ф.-м.н., доцент кафедры теоретической механики, Пермь

Няшин Юрий Иванович, д.т.н., профессор, зав. кафедрой теоретической механики, Пермь

исследования показали, что *Rhodococcus*-биосурфактант способствует эффективной десорбции нефтяных углеводородов [6, 7] и солей тяжелых металлов [2, 3, 8, 9] из загрязненной почвы.

Для подбора эффективных приемов и создания оптимальной схемы биоремедиации необходимо построение биомеханических и математических моделей, адекватно описывающих процесс очистки загрязненного почвогрунта от нефти и тяжелых металлов с помощью биосурфактанта. Ранее авторами построены согласующиеся с экспериментальными данными биомеханические модели: модель проникновения нефти в почву, модель проникновения биосурфактанта в нефтезагрязненной почве, модель проникновения биосурфактанта в почву, загрязненной солями тяжелых металлов [2, 4].

Прогнозное математическое моделирование – эффективный инструмент современной экологической биотехнологии, направленный на адекватное описание и прогнозирование природных процессов в условиях техногенного воздействия. В частности, построение математических моделей позволяет находить оптимальное решение, адекватное описанию процесса загрязнения почв нефтью и нефтепродуктами, прогнозирование последствий нарушения почвенных процессов и выбор оптимальной стратегии биоремедиации [4]. Следует отметить, что очищение почвы от загрязняющих веществ (углеводородов нефти) – процесс комплексный, в котором участвуют физические, химические и биологические факторы. При этом действие всех факторов взаимообусловлено и синергично. Исследование сложных механизмов биоремедиации требует создания пакета прикладных программ на основе биомеханических и математических моделей, описывающих процессы очистки почвы от нефти и солей тяжелых металлов под действием биосурфактантов.

В настоящей работе представлен пакет прикладных программ, разработанный на основе биомеханических и математических моделей процесса фильтрации *Rhodococcus*-биосурфактанта в нефтезагрязненной почве и почве, загрязненной солями тяжелых металлов.

ОПИСАНИЕ ПАКЕТА ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ

Пакет прикладных программ «Очистка загрязненной нефтью и тяжелыми металлами почвы с помощью биосурфактанта» (рис. 1) позволяет решать следующие биомеханические задачи: вычисление времени отмывания биосурфактантом загрязненной нефтью почвы, находящейся в накопительном резервуаре; вычисление коэффициента сопротивления k фильтрации биосурфактанта в почве, загрязненной солями тяжелых металлов, прогнозирование эффективности биоремедиации. Пакет состоит из трех блоков, функционирование которых описано ниже.

Блок «Расчет времени отмывания биосурфактантом загрязненной нефтью почвы, находящейся в накопительном резервуаре» предназначен для определения времени прохождения заданного количества биосурфактанта в загрязненной нефтью почве, находящейся в накопительном резервуаре, а также для определения средней скорости вытекания биосурфактанта из накопительного резервуара.

Загрязненный нефтепродуктами почвогрунт находится в резервуаре, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 2). На верхней границе (открытая поверхность) давление атмосферное; на дне находится вакуумный насос, который откачивает биосурфактант под давлением, равным атмосферному; боковые стенки и часть дна ($l_0 \leq x \leq l_1$) – непроницаемые поверхности.

Открытая поверхность орошается биосурфактантом. В нефтезагрязненном почвогрунте происходит фильтрация биосурфактанта, осуществляющаяся в два этапа.

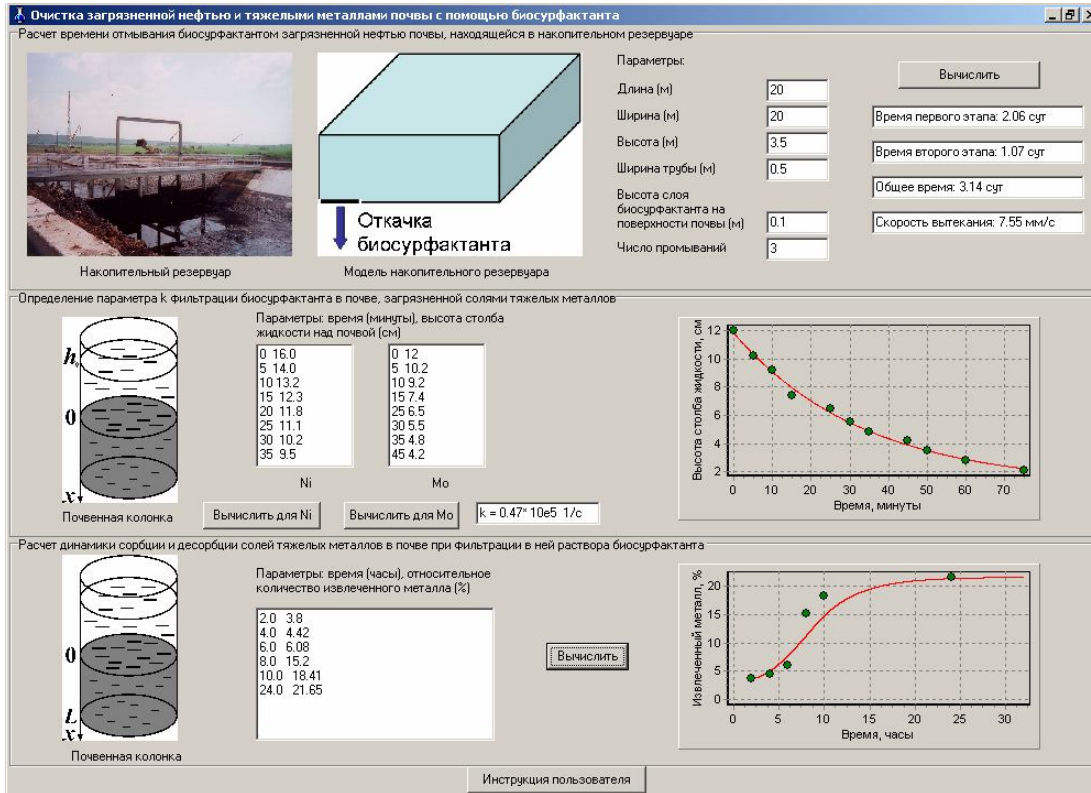


Рис. 1. Пакет прикладных программ «Очистка загрязненной нефтью и тяжелыми металлами почвы с помощью биосурфактанта»

На первом этапе имеется фронт проникновения биосурфактанта. На втором этапе, после достижения биосурфактантом дна резервуара, происходит его откачивание через трубу с помощью вакуумного насоса.

Процесс фильтрации описывается уравнениями безынерционного течения идеальной несжимаемой жидкости под действием силы тяжести, объемной силы сопротивления, пропорциональной скорости, и силы сопротивления, сосредоточенной на фронте проникновения и зависящей от скорости. Для решения использованы математические модели: задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения и краевая задача для уравнения Лапласа в прямоугольнике. А именно, на первом этапе фильтрации

$$gh_0/\alpha + (g - k dl(t)/dt)l(t) - f(dl(t)/dt) = 0,$$

где g – ускорение свободного падения, h_0 – толщина слоя биосурфактанта на открытой поверхности почвогрунта, α – пористость почвогрунта, k – коэффициент сопротивления при фильтрации, l – глубина проникновения биосурфактанта, $f(\cdot)$ – зависящая от скорости сила сопротивления, сосредоточенная на фронте проникновения биосурфактанта. На втором этапе фильтрации

$$\Delta p(x, y, z) = 0,$$

где Δ – оператор Лапласа, p – давление биосурфактанта. Краевые условия для давления на границе резервуара

$$\partial p/\partial x|_{x=0} = \partial p/\partial x|_{x=l_1} = \partial p/\partial y|_{y=0} = \partial p/\partial y|_{y=l_2} = 0, \quad \partial p/\partial z|_{z=0} = -\rho g \text{ при } y > l_0,$$

где l_1 – ширина резервуара, l_2 – длина резервуара, l_0 – ширина трубы, ρ – эффективная плотность биосурфактанта. Так как на открытой поверхности резервуара

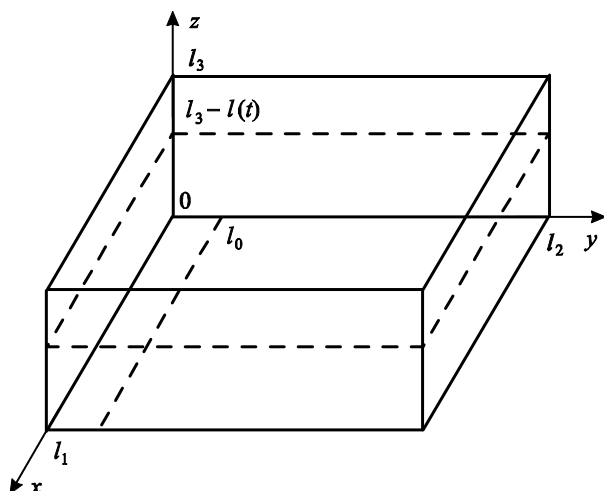


Рис. 2. Модель резервуара с загрязненным почвогрунтом

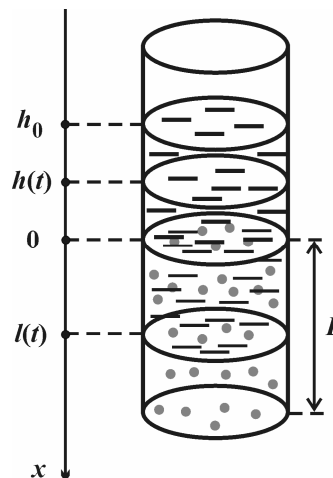


Рис. 3. Схематическое изображение почвенной колонки

имеется слой биосурфактанта толщиной h_0 , а откачивание биосурфактанта производится вакуумным насосом, то

$$p|_{z=l_3} = p_0 + \rho_0 g h_0, \quad p|_{z=0} = 0 \quad \text{при } y < l_0,$$

где l_3 – высота резервуара, p_0 – атмосферное давление, ρ_0 – плотность чистого биосурфактанта. Последнее условие заменяется на приближенное

$$\partial p / \partial z|_{z=0} = \rho(kU - g) \quad \text{при } y < l_0,$$

где U следует найти из соотношения

$$\int_0^{l_1} \int_0^{l_0} p(x, y, 0) dx dy = 0.$$

Величина U есть средняя (по области $0 < x < l_1$, $0 < y < l_0$) скорость откачивания биосурфактанта. Решение задачи для p имеет вид [5]

$$p(y, z) = p_0 + \rho_0 g h_0 + \rho \left(g - \frac{kU l_0}{l_2} \right) (l_3 - z) - \\ - \frac{2\rho k U l_2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \frac{\pi n l_0}{l_2}}{n^2 \operatorname{ch} \frac{\pi n l_3}{l_2}} \operatorname{sh} \frac{\pi n (l_3 - z)}{l_2} \cos \frac{\pi n y}{l_2},$$

где

$$U = \frac{\frac{g}{k} + \frac{1}{k l_3} \left(\frac{p_0}{\rho} + \frac{g h_0}{\alpha} \right)}{\frac{l_0}{l_2} + \frac{2 l_2^2}{\pi^3 l_0 l_3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^3} \sin^2 \frac{\pi n l_0}{l_2} \operatorname{th} \frac{\pi n l_3}{l_2}}.$$

Блок «Определение параметра k фильтрации биосурфактанта в почве, загрязненной солями тяжелых металлов» предназначен для определения k – коэффициента сопротивления со стороны среды при фильтрации биосурфактанта в почве на основе экспериментальных данных по фильтрации биосурфактанта в почве, загрязненной солями тяжелых металлов.

Эксперимент проводится в модельных почвенных колонках. Почва, загрязненная солями тяжелых металлов (никеля и молибдена), находится в стеклянной колонке. Одна колонка схематично показана на рис. 3. Здесь h_0 – высота столба налитой сверху жидкости (водного раствора *Rhodococcus*-биосурфактанта), l – глубина проникновения жидкости в почву, t – время; поверхность почвы отвечает координате $x = 0$. Параметры колонок – диаметр d и высота L слоя почвы (рис. 3).

Процесс фильтрации биосурфактанта в модельной почвенной колонке описывается уравнениями безынерционного течения идеальной несжимаемой жидкости под действием силы тяжести и объемной силы сопротивления, пропорциональной скорости. Высота h столба жидкости как функция времени оказывается согласно теории различной для солей никеля и молибдена, а именно для солей никеля

$$h(t) = a_1 - a_2 t,$$

а для солей молибдена

$$h(t) = a_3 \exp(-a_4 t) + a_5,$$

где один из параметров a_i (в каждом случае) выражается через k . Обработка экспериментальных данных методом наименьших квадратов позволяет найти этот параметр и, следовательно, коэффициент k .

Данный блок состоит из полей для ввода параметров (для каждого металла предназначено отдельное поле), полей для вывода результата и диаграммы, на которой отображаются экспериментальные точки и теоретическая кривая, построенная по результатам расчета.

Блок «Расчет динамики сорбции и десорбции солей тяжелых металлов в почве при фильтрации в ней раствора биосурфактанта» предназначен для прогнозирования эффективности биоремедиации. Данный блок состоит из поля для ввода параметров, поля для вывода результата и диаграммы, на которой отображаются экспериментальные точки и теоретическая кривая, построенная по результатам расчета.

Процессы сорбции и десорбции солей тяжелых металлов изучались в модельных почвенных колонках. Наблюдалась динамика извлечения солей никеля и молибдена из почвы под действием водной эмульсии *Rhodococcus*-биосурфактанта (4 г/л, штамм *Rhodococcus ruber* ИЭГМ 231), синтетического биосурфактанта *Tween* 80 и дистиллированной воды [2]. Загрязненная солями тяжелых металлов модельная почва находилась в стеклянных колонках (см. рис. 3). Выше нулевой отметки находилась жидкость, ниже нулевой отметки – загрязненная почва и проникающая в почву жидкость; поверхность почвы отвечает координате $x = 0$.

Количественное определение ионов никеля и молибдена, десорбированных из почвы в водную фазу, проводилось с помощью спектрофотометра диметилглиоксимным и роданидным методом, соответственно. Эффективность процесса десорбции с течением времени t выражалась в массовой доле $\mu(t)$ десорбированной соли от общего начального количества сорбированной соли.

Для решения использована математическая модель: начально-краевая задача для уравнения переноса. Математическая модель очистки почвы от солей тяжелых металлов основана на уравнениях материального баланса, описывающих десорбцию тяжелых металлов от почвы и повторную сорбцию их к почве:

$$\begin{cases} \partial m / \partial t + V \partial m / \partial x = \alpha n - \beta m, \\ \partial n / \partial t = -\alpha n + \beta m, & x > 0, \quad t > 0, \\ n|_{t=0} = n_0, \quad m|_{t=0} = 0, \quad m|_{x=0} = 0, \end{cases}$$

где x – координата, отсчитываемая вдоль колонки, t – время, m – концентрация десорбированной соли, n – концентрация сорбированной соли, α – коэффициент сорбции, β – коэффициент повторной сорбции, V – скорость течения жидкости в загрязненной почве, n_0 – начальная концентрация соли в почве. Решение записанной задачи имеет вид [5]

$$m(x, t) = \frac{\alpha n_0}{\alpha + \beta} (1 - \exp(-(\alpha + \beta)t)) - \frac{\alpha n_0}{\alpha + \beta} \exp(-\beta x / V) \times$$

$$\times \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq x/V, \\ \int_0^{t-x/V} \exp(-\alpha\tau) I_0(2\sqrt{\alpha\beta x\tau/V}) (\alpha + \beta \exp(-(\alpha + \beta)(t - x/V - \tau))) d\tau, & t \geq x/V, \end{cases}$$

$$n(x, t) = n_0 \left(1 - \frac{\alpha}{\alpha + \beta} + \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \exp(-(\alpha + \beta)t) \right) - \frac{\alpha\beta n_0}{\alpha + \beta} \exp(-\beta x / V) \times$$

$$\times \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq x/V, \\ \int_0^{t-x/V} \exp(-\alpha\tau) I_0(2\sqrt{\alpha\beta x\tau/V}) (1 - \exp(-(\alpha + \beta)(t - x/V - \tau))) d\tau, & t \geq x/V, \end{cases}$$

где I_0 – модифицированная функция Бесселя. Экспериментально измеряемая зависимость $\mu(t)$ выражается следующим соотношением:

$$\mu(t) = \frac{V\mu_*}{Ln_0} \int_0^t m(L, \tau) d\tau,$$

где L – длина колонки, $\mu_* = \lim_{t \rightarrow \infty} \mu(t)$. Тогда

$$\mu(t) = \frac{\alpha V\mu_*}{(\alpha + \beta)L} \left[t - \frac{1 - \exp(-(\alpha + \beta)t)}{\alpha + \beta} - \begin{cases} 0, & 0 \leq t \leq L/V \\ \exp(-\beta L/V) \int_0^{t-x/V} \tilde{\mu}(t, \tau) d\tau, & t \geq L/V \end{cases} \right],$$

где

$$\tilde{\mu}(t, \tau) = \exp(-\alpha\tau) I_0(2\sqrt{\alpha\beta L\tau/V}) \left[\alpha(t - L/V - \tau) + \frac{\beta}{\alpha + \beta} [1 - \exp(-(\alpha + \beta)(t - L/V - \tau))] \right].$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе представлен пакет прикладных программ «Очистка загрязненной нефтью и тяжелыми металлами почвы с помощью биосурфактанта». Описаны основные блоки, составляющие представленный пакет прикладных программ, биомеханические и математические модели, на основе которых осуществляется решение задач в каждом из блоков пакета программ.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследования поддержаны грантами Министерства образования и науки РФ (ГК 16.518.11.7069, 2011-1.3-513-082) и Программы Президиума РАН “Молекулярная и клеточная биология”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ившина И.Б., Куюкина М.С., Костарев С.М. Применение экологически безопасной экспресс-технологии очистки нефтезагрязненных почв и грунтов // Нефтяное хозяйство. – 2003. – № 9. – С. 116–118.
2. Коростина О.А., Куюкина М.С., Ившина И.Б., Костина Л.В., Осипенко М.А., Няшин Ю.И. Моделирование процессов фильтрации растворов солей тяжелых металлов и биосурфактанта в почве // Российский журнал биомеханики. – 2009. – Т. 13, № 3 (45). – С. 32–43.
3. Костина Л.В., Куюкина М.С., Ившина И.Б. Методы очистки загрязненных тяжелыми металлами почв с использованием (био)сурфактантов // Вестник Пермского университета. Биология. – 2009. – Вып. 10 (36). – С. 95–110.
4. Куюкина М.С., Ившина И.Б., Осипенко М.А., Няшин Ю.И., Коростина О.А. Модель нефтеотмывания загрязненного почвогрунта под действием *Rhodococcus*-биосурфактанта // Российский журнал биомеханики. – 2006. – Т. 10, № 1 (31). – С. 59–67.
5. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999. – 798 с.
6. Kuyukina M.S., Ivshina I.B., Makarov S.O., Litvinenko L.V., Cunningham C.J., Philp J.C. Effect of biosurfactants on crude oil desorption and mobilization in a soil system // Environment International. – 2005. – Vol. 31. – P. 155–161.
7. Kuyukina M.S., Ivshina I.B., Osipenko M.A., Korostina O.A., Nyashin Yu.I. Mathematical modelling of crude oil-contaminated soil washing process using *Rhodococcus*-biosurfactant // Proc. Third IASTED Int. Conference “Environmental Modelling and Simulation”. Honolulu, USA. – 2007. – P. 77–81.
8. Miller R.M. Biosurfactant-facilitated remediation of metal-contaminated soils // Environmental Health Perspectives. – 1995. – Vol. 103, No. 1. – P. 59–62.
9. Mulligan C.N., Wang S. Remediation of a heavy metal-contaminated soil by a rhamnolipid foam // Engineering Geology. – 2006. – Vol. 85. – P. 75–81.

THE USE OF THE APPLICATION PACKAGE FOR SOLVING THE PROBLEMS CONCERNING OIL- AND HEAVY METAL-CONTAMINATED SOIL WASHING BY MEANS OF BIOSURFACTANT

**O.A. Korostina, M.S. Kuyukina, I.B. Ivshina, L.V. Kostina,
M.A. Osipenko, Y.I. Nyashin (Perm, Russia)**

The application package has been designed for solving the following biomechanical problems: the calculation of the duration of oil-contaminated soil washing in the reservoir by means of the biogenic surface-active compound (biosurfactant), the calculation of the resistance coefficient for the biosurfactant filtration in heavy metal-contaminated soil, the prediction of the soil biological refinement (bioremediation) effectiveness. The basic package blocks are described. The biomechanical and mathematical models that govern the calculation are outlined.

Key words: biomechanics, application package, soil contamination, bioremediation, oil-contaminated soil, heavy metals, sorption, desorption, *Rhodococcus*-biosurfactant, mathematical modelling.

Получено 07 сентября 2011