

Н.М. ДЕРБАСОВА, М.М. ДИВИЗИНЮК

*Севастопольский национальный университет ядерной энергии и промышленности,
г. Севастополь*

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ БИОДЕСТРУКЦИИ ГЕКСОГЕН И ТРИНИТРОТОЛУОЛ СОДЕРЖАЩИХ ВЕЩЕСТВ

Разработана математическая модель для микробиологического этапа работы, отражающая зависимость сроков проведения процесса от степени загрязнения компоста взрывчатым веществом. Доказано, что главным условием применения математической модели микробиологического этапа является постоянство концентраций микроорганизмов в перерабатываемом субстрате.

Введение

Одним из путей решения актуальной для Украины проблемы утилизации гексоген и тринитротолуол содержащих веществ является использование биотехнологии, достоинства которой заключаются в возможности утилизации широкого спектра органических и неорганических веществ, относительно невысоких эксплуатационных расходах и обеспечении экологической безопасности.

Для решения задачи повышения эффективности биодеструкции тринитротолуола и гексогена большое значение имеет моделирование процесса утилизации данных веществ. Прогнозирование процесса позволяет правильно оценить условия и сроки биодеструкции тринитротолуола и гексогена, а также определить эффективность применяемого метода и принять решение об его усовершенствовании.

Динамика роста микроорганизмов в компосте является многофакторным процессом, зависящим от концентрации клеток в системе, времени деления клеток бактерий, наличия питательных веществ, температуры, влажности, рН и других факторов.

Постановка цели и задач исследования

Цель данной работы – разработать математическую модель для микробиологического этапа работы, отражающую связь сроков проведения процесса в зависимости от степени загрязнения компоста ВВ.

Научная задача исследования, исходя из актуальности и практического значения работы, состоит в разработке научно-методического аппарата оценки эффективности и продолжительности процесса биодеструкции гексоген и тринитротолуол содержащих веществ.

Утилизация тринитротолуола и гексогена проводилась в два этапа [1]. На микробиологическом этапе готовилась смесь, содержащая тринитротолуол или гексоген с добавлением компоста, содержащего бактерии. Биодеструкция тринитротолуола и гексогена осуществлялась за счет переработки его бактериями. Компост тщательно перемешивался, поэтому с большой вероятностью можно считать, что содержание бактерий в единице объема в начальный момент любого эксперимента было постоянным. Общее количество бактерий в единице объема компоста примем равным единице.

В первом приближении динамика роста микроорганизмов может быть описана функцией времени в период биодеструкции ВВ.

Определение максимальной скорости роста бактерий

Скорость изменения числа микроорганизмов в режиме его роста (экспоненциальной фазе) линейно связана с концентрацией клеток в системе и зависит от наличия питательных веществ, температуры, влажности, рН и других факторов. Считаем, что для роста бактерий созданы идеальные условия и известно время T деления клеток бактерий.

Динамика изменения концентрации бактериальных клеток ΔN в компосте определяется удельной скоростью роста культуры μ (бактерий/час). Тогда за время Δt число бактерий будет:

$$\Delta N = \mu \cdot N \cdot \Delta t. \quad (1)$$

где: N – кол-во бактерий в момент времени t .

Дифференцируя и преобразуя (1), получим

$$\frac{dN}{dt} = \mu \cdot N \text{ (бактерий / час)}. \quad (2)$$

После интегрирования данного уравнения при начальных условиях: $t = 0, N(0) = n_0$, получаем, что:

$$N = n_0 \cdot e^{\mu \cdot t} \quad (3)$$

Так как за время T число бактерий удваивается, в таком случае, данное уравнение принимает вид:

$$2n_0 = n_0 \cdot e^{\mu \cdot T} \quad (4)$$

После логарифмирования получим: $\mu = \frac{\ln 2}{T}$. Таким образом, предельная максимальная скорость роста бактериальной культуры (μ_{\max}), характеризующая время удвоения биомассы, равна:

$$\mu_{\max} = \frac{\ln 2}{T}, \quad (5)$$

Если питательных веществ неограниченное количество, то число бактерий будет неограниченно возрастать, что хорошо иллюстрируется графиком зависимости роста бактерий от времени (рис. 1.) [2].

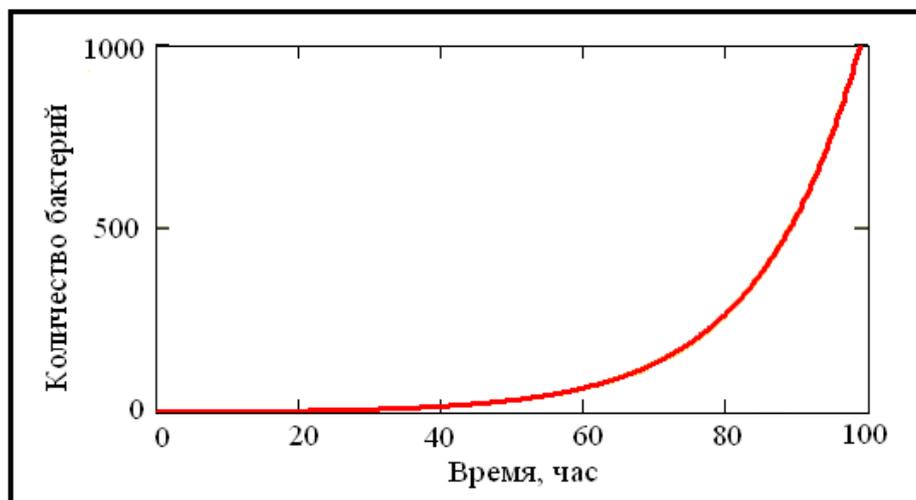


Рис. 1. Рост числа бактерий при неограниченном объеме питательной среды без учета аутоингибирования

Уравнения роста и гибели бактерий в компосте

При достаточном объеме питательных веществ необходимо учитывать, что кроме прироста бактерий происходит и их естественная гибель. Если объем питательных веществ неограничен, то и число погибших микроорганизмов неограниченно растет.

В целом ряде микробиологических производств процессы отмирания и лизиса имеют решающее значение. Под отмиранием понимают переход живых клеток в

нежизнеспособные, т.е. неспособные расти и делиться в благоприятных условиях. Лизис - распад отмерших клеток на органические и неорганические составляющие. Эти процессы особенно существенны при биодеструкции загрязняющих веществ.

Процессы отмирания и лизиса оказывают влияние на рост и развитие популяции микроорганизмов, не только подверженных воздействию вредных факторов, но и растущих в относительно благоприятных условиях. Причем, продукты лизиса, накапливающиеся в среде, угнетающе действуют на рост живых клеток и ускоряют их гибель.

Сами процессы отмирания и лизиса иногда меняют метаболизм живых клеток и приводят их к гибели в результате изменения состава среды (аутоингибирование). Механизм отмирания в результате перекисного окисления мембранных фосфолипидов – один из наиболее общих в живой природе и характерен как для эвкариотических, так и для прокариотических клеток [3].

Исходя из этого, следует, что число погибших бактерий увеличивается за счет аутоингибирования и может оказаться, что в некоторый момент среда будет настолько токсична, что даже при наличии пищи все бактерии погибнут.

Составим уравнение числа погибших бактерий.

Если принять число бактерий в момент времени t равным N , естественную скорость гибели за 1 час равной a , то в этом случае уравнение числа погибших бактерий естественным путем можно представить в виде:

$$\Delta N_p = a \cdot N \cdot \Delta t, \quad (6)$$

где: N_p – число погибших бактерий к моменту времени t .

После дифференцирования и преобразования (6), будем иметь

$$\frac{dN_p}{dt} = a \cdot N, \quad (7)$$

где: N - число бактерий в момент времени t ;

a - естественная скорость гибели бактерий за 1 час.

Исходя из выше изложенного, число бактерий в компосте определяется следующими величинами:

$N \mu$ – приростом бактерий, находящихся в компосте;

$a N$ – числом погибших бактерий естественным путем;

b - скоростью гибели бактерий за счет аутоингибирования ;

$b \cdot N_p$ – числом погибших бактерий за счет аутоингибирования.

Отсюда получаем, что за время Δt прирост числа бактерий определяется в виде:

$$\Delta N = (N \mu - a N - b \cdot N_p) \cdot \Delta t = (N(\mu - a) - b \cdot N_p) \cdot \Delta t \quad (8)$$

или

$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = N(\mu - a) - b \cdot N_p. \quad (9)$$

Интегрируя, получаем кинетическое уравнение роста числа бактерий в компосте в единицу времени:

$$\frac{dN}{dt} = N(\mu - a) - b \cdot N_p. \quad (10)$$

За время Δt происходит рост, а также гибель бактерий. Обозначим общее число погибших бактерий суммой из бактерий, погибших естественным путем и за счет отравлений, то есть:

$$\frac{dN_p}{dt} = a \cdot N + b \cdot N_p. \quad (11)$$

Таким образом, получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = N(\mu - a) - b \cdot Np, \\ \frac{dNp}{dt} = a \cdot N + b \cdot Np. \end{cases} \quad (12)$$

Уравнение изменения массы ВВ в компосте

Скорость роста бактерий μ_{\max} возможна в том случае, если созданы идеальные условия для их развития. Учитывая, что период удвоения числа бактерий происходит в течении 5-7 часов, поэтому скорость роста бактерий составляет от 0.8 до 1.1.

Для составления уравнения изменения массы ВВ будем считать, что скорость переработки ВВ бактериями равна w . Независимо от того, какое вещество рассматривается, скорость переработки зависит от массы переработанного ВВ. Введем в рассмотрение коэффициент эффективности в момент времени t . Пусть в момент t масса ВВ равна m , начальная масса ВВ m_0 , конечная масса mk , тогда коэффициент эффективности определяем по формуле

$$k_{\text{эф}} = \frac{m - mk}{m_0}. \quad (13)$$

Очевидно, чем выше этот коэффициент, тем выше скорость поглощения ВВ. Эмпирически получена формула скорости:

$$w(m) = w_0 \left(\frac{m - mk}{m_0} \right)^3, \quad (14)$$

где: m - масса ВВ в момент времени t ,

w_0 - эмпирический коэффициент, зависящий от вида ВВ.

После элементарных преобразований формула скорости переработки ВВ примет вид:

$$w(m) = w_0 \left(\frac{m_0 - mk}{m_0} - \frac{m_0 - m}{m_0} \right)^3. \quad (15)$$

Первое слагаемое – коэффициент эффективности для всего процесса при заданном m_0 . Коэффициент w_0 для тротила равен 0,29, для гексогена – 0,49.

Аппроксимируя коэффициент эффективности для всех опытов, полученных из экспериментальных данных (сплайн - методом кубическими параболами) и обозначая его $k(m_0)$, уравнение скорости в момент времени t принимает вид:

$$w(m) = w_0 \left(k(m_0) - \frac{m_0 - m}{m_0} \right)^3. \quad (16)$$

Для вывода уравнения изменения массы примем, что в момент времени t масса оставшегося ВВ равна m , количество бактерий N , тогда за время Δt масса уменьшится на величину:

$$\Delta m = -w(t) \cdot N \cdot \Delta t. \quad (17)$$

Следовательно, уравнение изменения массы ВВ будет иметь вид:

$$\frac{dm}{dt} = -w(t) \cdot N. \quad (18)$$

Таким образом, математическая модель микробиологического этапа примет вид системы уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = N(\mu - a) - b \cdot Np, \\ \frac{dNp}{dt} = a \cdot N + b \cdot Np, \\ \frac{dm}{dt} = -w(t) \cdot N. \end{cases} \quad (19)$$

где: N - количество бактерий в момент времени t ;
 μ - удельная скорость роста культуры (бактерий/час);
 a - естественная скорость гибели бактерий за 1 час;
 bNp - число погибших бактерий за счет аутоингибирования;
 $W(t)$ - скорость переработки ВВ в момент времени t .

Коэффициенты, входящие в систему, являются эмпирическими, поэтому их значения определяются из эксперимента путем подборки. Для решения системы (15) в условиях биодеструкции тринитротолуола (ТНТ) имеем:

$$W_0=0,29; b=0,00122; a=0,05 - 0,078; \mu=0,1.$$

При решении системы методом Рунге-Кутта для различных начальных концентраций тринитротолуола максимальная ошибка численного решения не превосходит 18%. Для гексогена ошибка не превосходит 20% соответственно (рис. 2.).

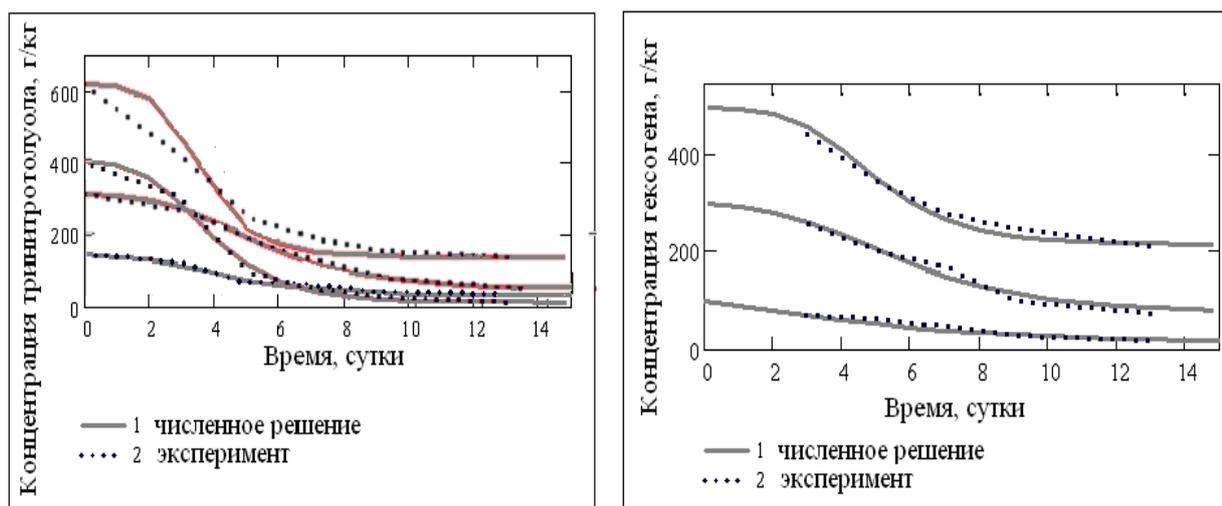


Рис. 2. Динамика изменения концентрации веществ во времени

Таким образом, математическая модель для микробиологического этапа утилизации ТНТ и гексогена хорошо описывает реальный процесс.

Анализируя обработанные результаты исследования и данные решения системы математических уравнений, можно установить, что оптимальное время биодеструкции составляет 13 суток. На 14-е сутки работы микроорганизмов снижается скорость (w) переработки, что подтверждается экспериментальными исследованиями. Снижение переработки тринитротолуола и гексогена объясняется процессом аутоингибирования. Этим обусловлена необходимость проведения второго этапа эксперимента – вермикультивирования.

Выводы

1. Показано, что динамика роста микроорганизмов в компосте является многофакторным процессом, зависящим от концентрации клеток в системе, времени деления клеток бактерий, наличия питательных веществ, температуры, влажности, рН и

других факторов. В первом приближении динамика роста микроорганизмов может быть описана функцией времени в период биодеструкции ВВ.

2. Впервые разработана математическая модель для микробиологического этапа работы, отражающая зависимость сроков проведения процесса в зависимости от степени загрязнения компоста ВВ. Анализируя результаты решения системы методом Рунге-Кутты для различных начальных концентраций тринитротолуола и гексогена, выявлено, что после 13 суток непрерывной работы микроорганизмов процесс переработки данных веществ практически отсутствует. Это обстоятельство объясняется явлением аутоингибирования и показывает, что реализация микробиологического этапа не является достаточной для доведения концентрации ЗВ до ПДК и необходимо проведение второго этапа – вермикультивирования.

3. Доказано, что главным условием применения математической модели микробиологического этапа является постоянство концентраций микроорганизмов в перерабатываемом субстрате. Модель обеспечивает учет основных параметров биотехнологического процесса, в частности, количества бактерий в момент времени t ; удельной скорости роста культуры $\mu = 0,1$ (бактерий/час); естественной скорости гибели бактерий за 1 час, равной $0,05 - 0,078$; bN_p - числа погибших бактерий за счет аутоингибирования, $b = 0,00122$; скорости переработки тринитротолуола в момент времени t , $W(t) = 0,29$.

Из результатов решения системы видно, что максимальная ошибка численного решения для тринитротолуола не превосходит 18%, для гексогена – 20 % соответственно. Таким образом, математическая модель для микробиологического этапа утилизации ТНТ и гексогена хорошо описывает реальный процесс биодеструкции веществ.

1. Дербасова Н.М., Гавриш М.В. / Утилизация взрывчатых веществ с использованием биотехнологии // Збірник наукових праць СНУЯЕтаП. - Севастополь: СНУЯЕтаП, 2005. – вип. 16. – С. 110 - 113.

2. Варфоломеев С. Д., Гуревич К.Г. Биокинетика: практический курс – М.: ФАИР – ПРЕСС, 1999. – 547 с.

3. Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. Математические модели биологических продукционных процессов: учеб. пос. – М.: Изд. – МГУ, 1993. – 226 с.

Н.М. Дербасова, М.М. Дівізінюк

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ БІОДЕСТРУКЦІЇ РЕЧОВИН З ВМІСТОМ ГЕКСОГЕНУ ТА ТРИНІТРОТОЛУОЛУ

Розроблено математичну модель для мікробіологічного етапу роботи, яка відображає залежність термінів проведення процесу від ступеня забруднення компосту вибуховою речовиною. Доведено, що головною умовою застосування математичної моделі мікробіологічного етапу є сталість концентрацій мікроорганізмів у перероблюваному субстраті.

N.M. Derbasova, M.M. Diviziniuk

MATHEMATICAL MODEL OF BIODEGRADATION OF HEXOGEN AND TRINITROTOLUENE CONTAINING SUBSTANCES

A mathematical model for microbiological phase of work, reflecting the dependence of the process' carrying out terms depending on the degree of pollution of compost by explosive is developed. It is proved, that the main condition for application of a mathematical model of microbiological stage is the constancy of the concentration of microorganisms in the processed substrate.