

## ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ФИТОРЕМЕДИАЦИИ ПОЧВ ЗАГРЯЗНЕННЫХ УГЛЕВОДОРОДАМИ

Х. Ш. Мустафабейли, М. С. Тахмазли, Л. Дж. Абдуллаева

Национальное Аэрокосмическое Агентство, г. Баку, Азербайджан

Поступила в редакцию 11.11.2012 г.

**Аннотация.** Сформулирована задача оптимизации процесса фиторемедиации почв загрязненных углеводородными соединениями. Показана возможность выбора в качестве оптимального одного из двух конкретных случаев загрязнения почвы, в которых загрязнители идентифицируются условием  $\log K_{ow} < 1.78$  и  $\log K_{ow} > 1.78$ . Решение сформулированной оптимизационной задачи показало возможность осуществление оптимизации в смысле минимизации остаточного количества загрязнителей для группы углеводородов, у которых  $\log K_{ow} > 1.78$ .

**Ключевые слова:** фиторемедиация; оптимизация; углеводы; загрязнение, почва

**Abstract.** The task of optimization of the process of phytoremediation of soil contaminated with hydrocarbon compounds is formulated. The possibility of choosing of the two concrete cases of soil pollution, where the pollutant are identified with condition  $\log K_{ow} < 1.78$  and  $\log K_{ow} > 1.78$  is shown. The solution of the formulated optimization task has shown the possibility to carry out an optimization in sense of minimization of rest amount of pollutants of hydrocarbons type featured by condition  $\log K_{ow} > 1.78$ .

**Keywords:** phytoremediation; optimization; hydrocarbons; pollution; soil

Хорошо известно, что общие нефтяные углеводородные соединения (ТРН) включают в себя различные смеси углеводородов, которые имеют место на территориях производства и хранения нефтехимических продуктов, а также на территориях полигонов хранения промышленных отходов. ТРН разделяются на две категории. Первая из них – органические соединения газолинового ряда, которые в частности включают изопентан, n-бутан, n-пентан, такие летучие ароматические соединения как бензол, толуол, этилбензол, ксилол (ВТЕХ). Вторая категория – включает органические соединения типа дизеля, в частности полициклические ароматические углеводороды.

Все соединения типа ТРН являются устойчивыми загрязнителями и обладают свойством биоаккумуляции и биоаккумуляции.

Фиторемедиация является биологическим технологическим процессом, где используются природные процессы, происходящие в растениях, чтобы усилить деградацию и устранить загрязнителей от загрязненной почвы. Процесс фиторе-

медиаии во многих случаях считается экономически эффективным, имеет эстетичность, и может быть использован в течение долгого времени.

Далее в настоящей статье мы рассмотрим вопросы оптимизации процесса фиторемедиации почв, загрязненных умеренно гидрофобичными углеводородами, характеризующихся показателем  $\log K_{ow} = 1-3$ , где  $K_{ow}$  – коэффициент разделение октанол-вода [1].

### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

К умеренно гидрофобичным углеводородам относятся, в частности, вышеуказанные углеводороды типа ВТЕХ.

Согласно работе [1] в качестве косвенной меры оценки эффективности извлечения углеводородов из загрязненной почвы используется такой безразмерный показатель как коэффициент концентрации потока транспирации (TSCF). В работе [2], была предложена следующая колоколообразная функция зависимости TSCF от логарифма коэффициента гидрофобичности  $\log K_{ow}$

$$TSCF = 0,784 \cdot \exp \left\{ \frac{-(\log K_{ow} - 1,78)^2}{2,44} \right\}, \quad (1)$$

© Мустафабейли Х. Ш., Тахмазли М. С., Абдуллаева Л. Дж., 2014

График функции (1) показан на рис. 1.

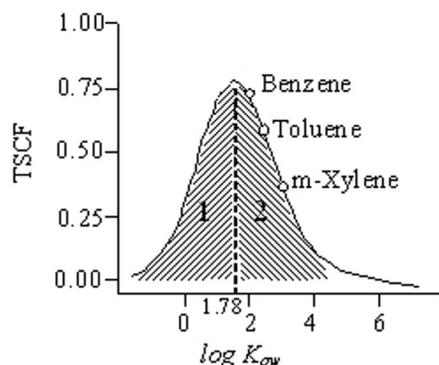


Рис. 1. График зависимости функции TSCF от  $\log K_{ow}$  (формула 1) [1].

Согласно [1] существуют и другие видеизменения зависимости TSCF от  $K_{ow}$ . Следует отметить, что в процессе фиторемедиации из почвы извлекаются не все органические загрязнители. В этом смысле показатель TSCF характеризует частичную эффективность извлечения загрязнителей. Причиной неполного извлечения загрязнителей из почвы является мембранные барьеры на поверхности корней растений.

Согласно (1), имеет место следующее уравнение

$$U = (TSCF) \cdot (T) \cdot (C), \quad (2)$$

где  $U$  - скорость извлечения, мг/день;  $T$  - скорость транспирации растения, л/день;  $C$  - концентрация водной фазы в системы почва-вода или земля-вода, мг/л.

Согласно работе [1], для оценки скорости извлечения загрязнителей, может быть использована кинетика первого порядка. Постоянная скорости извлечения загрязнителей  $k$  определяется следующим образом

$$k = U/M_0, \quad (3)$$

где  $U$  - скорость извлечения загрязнителя, кг/год;  $M_0$  - исходная масса загрязнителя, кг.

Остаточная масса загрязнителя в почве в момент  $t$  определяется следующей формулой

$$M = M_0 e^{-kt}, \quad (4)$$

где  $M$  - оставшаяся масса, кг;  $t$  - время, год.

Используя вышеприведенные формулы (1) - (4) осуществим оптимизацию процесса фиторемедиации почв, загрязненной нефтепродуктами типа ВТЕХ.

### РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ

Введем на рассмотрение две функции:

1. Функция зависимости TSCF от  $\log K_{ow}$ , отличная от выражения (1).

$$TSCF = TSCF(\log K_{ow}) \quad (5)$$

При этом априорно полагаем, что искомым оптимальным вид функции  $TSCF(\log K_{ow})$  отличается от формулы (1).

2. Функция зависимости  $M_0$  от  $\log K_{ow}$ , отображающая количественный состав загрязнителей по массе. Общее количество оставшейся в момент  $F_1$  массы всех загрязнителей  $F^1$  может быть оценено следующим интегралом

$$F_1 = \int_0^{\log K_{ow, \max}} M_0(\log K_{ow}) \exp\left[-\frac{TSCF(\log K_{ow}) \cdot a_1}{M_0(\log K_{ow})}\right] d(\log K_{ow}), \quad (6)$$

где  $a_1 = T \cdot C \cdot t$

Для осуществления безусловной вариационной оптимизации в смысле нахождения наилучшей функции TSCF от  $\log K_{ow}$ , приводящей  $F_1$  к минимальной величине примем следующее ограничительное условие

$$F_2 = \int_0^{\log K_{ow, \max}} TSCF(\log K_{ow}) = C_2. \quad (7)$$

Смысл ограничительного условия (7) заключается в том, что в графике функции  $TSCF = TSCF(\log K_{ow})$  оптимальной может оказаться ветвь графика, относящаяся заштрихованной зоне 1 или 2, площадь которых приблизительно одинакова. При этом учитываем, что сравниваются два независимых сценария загрязнения почвы:

1. Все загрязнители почвы находятся на восходящей ветви графика, показанного на рис. 1, где  $\log K_{ow} < 1.78$ .

2. Все загрязнители почвы находятся на спадающей ветви графика, где  $\log K_{ow} > 1.78$ .

Автономность двух рассматриваемых сценариев позволяет считать, что ограничительное условие (7) универсально и охватывает оба сценария.

Для упрощения дальнейшей записи осуществим замену переменной  $\log K_{ow}$  на  $x$  и с учетом выражений (6) и (7) составим полный функционал безусловной вариационной оптимизации (9). При этом функцию  $M(x)$  в первом приближении представим как

$$M(x) = M_0 + M'_x \cdot x, \quad (8)$$

$$F_3 = \int_0^{x_{\max}} F_0 dx$$

$$F_3 = \int_0^{x_{\max}} (M_0 + M'_x) \cdot \exp\left[-\frac{TSCF(x) \cdot a_1}{M_0 + M'_x K_{ow}}\right] dx + \lambda \int_0^{x_{\max}} TSCF(x) dx, \quad (9)$$

где  $\lambda$  - множитель Лагранжа.

Согласно правилу Эйлера для нахождения оптимальной функции  $TSCF(x)$  должно быть удовлетворено условие

$$\frac{dF_0}{dTSCF(x)} = 0. \quad (10)$$

С учетом выражений (9) и (10) получаем

$$-a_1 \exp \left[ -\frac{TSCF(x) \cdot a_1}{M_0 + M'_x \cdot x} \right] + \lambda = 0. \quad (11)$$

Проверка второй производной  $\frac{d^2F_0}{dTSCF(x)}$ ,

показывает, что она положительна. Это подтверждает, что сформулированная оптимизационная задача позволить выбрать тот сценарий, который обеспечит в момент  $t$  минимальное количество загрязнителей, оставшихся в почве.

Из выражения (11) находим

$$TSCF(x) = \left( \ln \frac{a_1}{\lambda} \right) (M_0 + M'_x) \cdot \quad (12)$$

Учитывая выражение (12) в условии (7) с учетом осуществленной замены переменной получаем

$$\lambda = a_1 \cdot \exp \left[ a_1 \left( -C_1 + M_0 x_{max} + \frac{M'_x x_{max}^2}{2} \right) \right] \quad (13)$$

С учетом выражений (11) и (13) окончательно получаем

$$TSCF(x) = \frac{-M_0 - M'_x x}{a_1} + \beta = \beta - \frac{M_0 + M'_x x}{a_1}, \quad (14)$$

где

$$\beta = M_0 \cdot x_{max} + \frac{M'_x x_{max}^2}{2} - G_1 + \ln a_1. \quad (15)$$

## ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Осуществив обратную замену переменных уравнений (14) и (15) имеем

$$TSCF(\log K_{ow}) = \beta - \frac{M_0 + M'_{\log(K_{ow})} \log(K_{ow})}{a_1}, \quad (16)$$

где

$$\beta = M_0 \log K_{owmax} + \frac{M'_x (\log K_{ow})_{max}^2}{2} - C_1 + \ln a_1. \quad (17)$$

Следовательно, так как вычисленная оптимальная функция  $TSCF(\log K_{ow})_{opt}$  убывает с ростом  $\log K_{ow}$ , можно заключить, что ветвь графика, охватывающая зону 2 на рис. 1 является оптимальной. Таким образом, процедуру оптимизации почв, загрязненных углеводородами типа ВТЕХ можно считать завершённой.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении сформулируем основные выводы и положения проведенного исследования:

1. Сформулирована задача оптимизации биотехнологического очищения почв загрязненных углеводородными соединениями.

2. Из двух конкретных случаев загрязнения почвы, в которых загрязнители идентифицируются условием  $\log K_{ow} < 1,78$  и  $\log K_{ow} > 1,78$  показано возможность минимизации остаточного количества загрязнителей для группы углеводородов, у которых  $\log K_{ow} > 1,78$ .

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kamath R., Rentz J.A., Schnoor J.L., Alvarez P.J.J. Phytoremediation of hydrocarbon-contaminated soils: principles and applications <http://alvarez.blogs.rice.edu/files/2012/02/55.pdf>
2. Briggs G.G., Bromilov R.H., Evans A.A. Pesticide Sci., 1982, Vol. 12, 495

Мустафабейли Хаяла Ширин гызы — диссертант Института Экологии Национального Аэрокосмического Агентства.

Mustafabeyli Khayala S. — dissertant of Ecology Institute of National Aerospace Agency.

Тахмазли Матанат Сахиб гызы — научный сотрудник Института Космических Исследований Природных Ресурсов Национального Аэрокосмического Агентства.

Takhmazli Matanat S. — researcher of Research Institute of Space Researches of Natural Resources National Aerospace Agency.

*Абдуллаева Латифа Джафарага гызы* — научный сотрудник НИИ Аэрокосмической Информатики Национального Аэрокосмического Агентства.

*Abdullayeva Latifa J.* — researcher of Research Institute of Aerospace Informatics of National Aerospace Agency.