

ЗАСТОСУВАННЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДО ВИВЧЕННЯ ДИНАМІКИ АНТИБАКТЕРІАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛІЕТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТНИХ МЕМБРАН

Розроблено ефективну математичну модель для вивчення і прогнозування зміни антибактеріальних властивостей хітозановмісних ультрафільтраційних трекових поліетилентерефталатних мембран з часом. Описана методика математичного визначення антибактеріальних властивостей трекових мембран може бути застосована не тільки при експлуатації хітозановмісних мембран, а також мембран, оброблених іншими бактерицидними агентами.

Ключові слова: антибактеріальний, трекові мембрани, хітозановмісний, забруднення.

Важливою проблемою при експлуатації антибактеріальних мембран є встановлення інтенсивності падіння їх бактерицидності та зниження функціональних характеристик при частковому забрудненні їхньої поверхні та поступовому вимиванні антибактеріального агента у водному середовищі.

Як показано нами в попередніх працях [1, 2], зв'язування антибактеріального агента з поверхнею мембран відбувається за рахунок утворення подвійного електричного шару біля їх поверхні. Утворення цього шару є результатом нейтралізації потенціалвизначальних карбоксильних груп поверхні мембрани позитивно зарядженими макромолекулами катіоноактивного антибактеріального агента. В ході експлуатації мембран у водному середовищі відбувається поступове заміщення макромолекул антибактеріального полімеру, що ввійшли до адсорбційного шару Штерна, молекулами води, що веде до зниження бактерицидних властивостей мембрани (табл. 1).

Застосовуючи методи математичного моделювання [3, 4] до кінетики процесу вимивання антибактеріальної речовини з поверхні мембрани при її експлуатації, можна визначити інтервал часу, коли антибактеріальна здатність мембрани є прийнятною (допустимою), а також визначити час, після якого використання мембрани недоцільне (неефективне). Додатково можна отримати відомості про механізм процесу видалення полімеру з подвійного електричного шару.

Для вивчення динаміки зміни антибактеріальної здатності мембран із урахуванням початкового індукційного періоду нами розроблена математична модель, що описується таким диференціальним рівнянням:

$$\frac{dB}{dt} = -k_1 t^a B, \quad (1)$$

з початковою умовою $B(0) = B_0$.

Інтегрування цього рівняння дає:

$$\int_{B_0}^B \frac{dB}{B} = - \int_0^t k_1 t^a dt, \quad (2)$$

$$\ln \frac{B}{B_0} = - \frac{k_1 t^{a+1}}{a+1};$$

або

$$\ln \frac{B}{B_0} = -k' t^{a+1}, \text{ де } k' = \frac{k_1}{a+1}. \quad (3)$$

З рівняння (3) отримуємо:

$$B(t) = B_0 e^{-k' t^{a+1}}, \quad (4)$$

або

$$\ln \frac{B_0}{B} = k' t^{a+1}. \quad (5)$$

Для верифікації математичної моделі використовуємо експериментальні значення B та B_0 , наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Залежність бактерицидності трекової мембрани, модифікованої хітозаном (ступінь прищеплення 4,3 %), від тривалості її експлуатації (t_i , міс.), $P = 0,01$ МПа, $i = 1, 2, 3, \dots$

t_i	$t_0 = 0$	$t_1 = 1$	$t_2 = 2$	$t_3 = 3$	$t_4 = 4$	$t_5 = 5$	$t_6 = 6$
B_i	$B_0 = 100$	$B_1 = 99$	$B_2 = 87$	$B_3 = 64$	$B_4 = 45$	$B_5 = 23$	$B_6 = 12$

Для визначення константи k та показника ступеня $(a+1)$ рівняння (5), прологарифмуємо:

$$\lg(\ln \frac{B_0}{B}) = \lg \{k' + (a+1) \lg t\}, \text{ де } a+1 = n. \quad (6)$$

Із графіка залежності в координатах $\lg(\ln B_0/B)$ від $\lg t$ отримуємо значення для константи $k' = 0,05$ ($\lg k' = -2$) та значення показника $a+1 = n = 2$ степеневій функції.

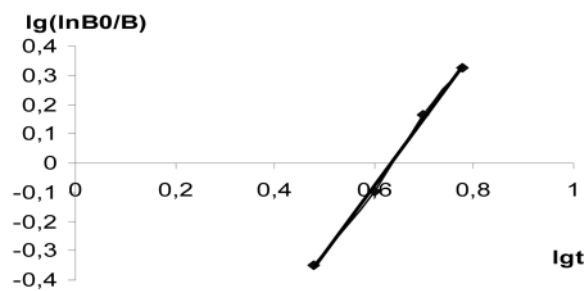


Рис. 1. Експериментальні дані в наведених координатах

Отже, верифікована модель процесу зміни бактерицидності (5) набуде такого вигляду:

$$B_i(t_i) = B_0 e^{-0,05t_i^2} \quad (7)$$

Відносна похибку знаходимо за формулою:

$$\varepsilon = \frac{\Delta B_i}{B} = \frac{\Delta B_i}{61,4}; \quad B = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 B_i \quad (8)$$

Таблиця 2. Розрахунок похибок математичної моделі

$B_{\text{експеримент.}}$	$B_{\text{розрах.}}$	ΔB	ε
$B_0 = 100$	$B_0 = 100$	0	0,0 %
$B_1 = 99$	$B_1 = 95,1$	3,9	6,4 %
$B_2 = 87$	$B_2 = 81,9$	5,1	8,3 %
$B_3 = 64$	$B_3 = 63,8$	0,2	0,3 %
$B_4 = 45$	$B_4 = 44,9$	0,1	0,2 %
$B_5 = 23$	$B_5 = 28,7$	5,7	9,3 %
$B_6 = 12$	$B_6 = 16,5$	4,5	7,3 %

Для цього у формулу (7) послідовно підставляли значення часу (міс.) $t_i = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ (табл. 2), і розраховували відповідне значення бактерицидності. Відносна середня похибка розрахунків становила $\varepsilon = 4,5 \%$, мінімальна похибка – $\varepsilon_{\min} = 0,2 \%$, а максимальна похибка – $\varepsilon_{\max} = 9,3 \%$.

- [1] Мурланова Т. В. Імобілізація хітозану на поверхні трекових мембран / Т. В. Мурланова, П. В. Вакулук, В. В. Нижник // Доповіді Національної академії наук України. Математика, природознавство, технічні науки. – 2008. – Т. 12. – С. 126–129.
- [2] Мурланова Т. В. Імобілізація хітозану на поверхні трекових поліетилентерефталатних мембран активованих періодом натрію / Т. В. Мурланова, В. П. Вакулук, А. Ф. Бурбан // Наукові записки. Хімічні науки і технології. – 2008. Т. 79. – С. 35–39.

Теоретична крива зміни бактерицидності мембрани в часі, розрахована за рівнянням 7, та експериментальні результати наведено на рис. 2.

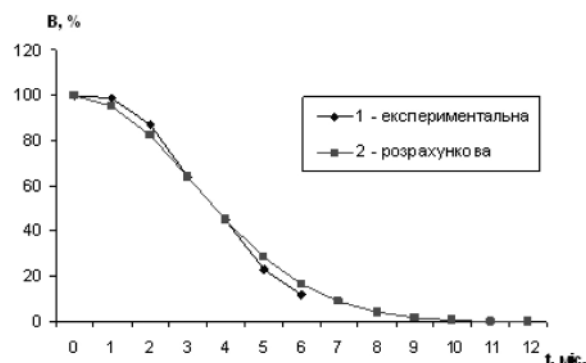


Рис. 2. Кінетика зміни бактерицидності мембран, екстраполяція за часом: 1 – експериментально встановлена; 2 – теоретично розрахована

Як видно з рис. 2, ці криві задовільно узгоджуються між собою.

Теоретична крива зміни бактерицидності мембрани дає змогу визначити межу практичного її використання. Згідно з кривою (2), повна втрата мембраною антибактеріальних властивостей настає при ($B_{10} = 0,67 \%$).

Знайдене з рис. 1 значення показника ступеня при t ($n = 2$) свідчить, що зменшення бактерицидності мембран відбувається внаслідок лінійного вимивання антибактеріального агента з поверхні мембрани. Також показник ступеня при t , що дорівнює 2, дає змогу виявити механізм втрати бактерицидності [5]. Він показує, що визначальними для втрати бактерицидності є не процеси на міжфазовій поверхні поділу, а дифузійні процеси в граничному шарі води біля подвійного електричного шару.

3. Лаврик В. І. Методи математичного моделювання в екології / В. І. Лаврик. – К. : Видав. дім «КМ Академія», 2002. – 203 с.
- [4] Bowen W. R. Steps of membrane blocking in flux decline during protein microfiltration / W. R. Bowen, J. I. Calvo, A. Hernandez // J. Membr. Sci. – 1995. – I. 101. – P. 153–165.
- [5] Манделькєрн Л. Кристаллізація полімерів / Л. Манделькєрн ; Пер. с англ. под ред. д-ра физ.-мат. наук С. Я. Френкеля. – М.–Л. : Химия, 1966. – 336 с.

T. Murlanova, V. Lavryk, P. Vakuliuk, V. Nyzhnyk

APPLICATION OF MATHEMATICAL MODELING FOR STUDYING THE DYNAMICS OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE MEMBRANES ANTIBACTERIAL PROPERTIES

The effective mathematical model for the study and prediction of changing in time antibacterial properties of chitosan-containing track ultrafiltration polyethylene terephthalate membranes was developed. The described method of mathematical modeling of changing antibacterial properties of track membranes can be applied not only for chitosan-containing membranes, but also for the membranes treated with another bactericidal agents.

Keywords: antibacterial properties, track membranes, mathematical model.