## 2011 高教社杯全国大学生数学建模竞赛

## 承 诺 书

我们仔细阅读了中国大学生数学建模竞赛的竞赛规则.

我们完全明白,在竞赛开始后参赛队员不能以任何方式(包括电话、电子邮件、网上咨询等)与队外的任何人(包括指导教师)研究、讨论与赛题有关的问题。

我们知道,抄袭别人的成果是违反竞赛规则的,如果引用别人的成果或其他 公开的资料(包括网上查到的资料),必须按照规定的参考文献的表述方式在正 文引用处和参考文献中明确列出。

我们郑重承诺,严格遵守竞赛规则,以保证竞赛的公正、公平性。如有违反 竞赛规则的行为,我们将受到严肃处理。

我们参赛选择的题号是(从 A/E	B/C/D 中选择一项	填写):	A	<b>A</b>		
我们的参赛报名号为(如果赛区	区设置报名号的话	) <b>:</b>				
所属学校(请填写完整的全名)	:湖南工等	<b></b>				
参赛队员 (打印并签名): 1	官艳凤					
2	朱秀辉					
3	唐宏					
指导教师或指导教师组负责人	(打印并签名):_	李彬				
	日期:	2011	年	9	月 12	日

赛区评阅编号(由赛区组委会评阅前进行编号):

## 2011 高教社杯全国大学生数学建模竞赛

## 编号专用页

赛区评阅编号(由赛区组委会评阅前进行编号):

赛区评阅记录(可供赛区评阅时使用):

评阅人					
评分					
备注					

全国统一编号(由赛区组委会送交全国前编号):

全国评阅编号(由全国组委会评阅前进行编号):

# 基于城市表层土壤重金属污染分析 摘要

关键词:

## 一、问题重述

随着城市经济的快速发展和城市人口的不断增加,人类活动对城市环境质量的影响日显突出。对城市土壤地质环境异常的查证,以及如何应用查证获得的海量数据资料开展城市环境质量评价,研究人类活动影响下城市地质环境的演变模式,日益成为人们关注的焦点。

按照功能划分,城区一般可分为生活区、工业区、山区、主干道路区及公园绿地区等,分别记为1类区、2类区、……、5类区,不同的区域环境受人类活动影响的程度不同。

现对某城市城区土壤地质环境进行调查。为此,将所考察的城区划分为间距 1 公里左右的网格子区域,按照每平方公里 1 个采样点对表层土 (0~10 厘米深度)进行取样、编号,并用 GPS 记录采样点的位置。应用专门仪器测试分析,获得了每个样本所含的多种化学元素的浓度数据。另一方面,按照 2 公里的间距在那些远离人群及工业活动的自然区取样,将其作为该城区表层土壤中元素的背景值。

附件1列出了采样点的位置、海拔高度及其所属功能区等信息,附件2列出了8种主要重金属元素在采样点处的浓度,附件3列出了8种主要重金属元素的背景值。

现要求你们通过数学建模来完成以下任务:

- (1) 给出8种主要重金属元素在该城区的空间分布,并分析该城区内不同区域重金属的污染程度。
  - (2) 通过数据分析,说明重金属污染的主要原因。
  - (3) 分析重金属污染物的传播特征,由此建立模型,确定污染源的位置。
- (4) 分析你所建立模型的优缺点,为更好地研究城市地质环境的演变模式,还应收集什么信息?有了这些信息,如何建立模型解决问题?

## 二、问题分析

随着城市经济的快速发展和城市人口的不断增加,人类活动对城市环境质量的影响日显突出。对于重金属在环境中的影响更为明显,因此研究城市表层土壤重金属污染是迫在眉下的事。

对于问题一,经过对数据和题目的分析,直接使用matlab(附录一)使用二次插值法可以画出8种主要重金属元素在该城区的空间分布图。对于第二小问,我们首先根据所给的数据将已区分好的各个区域归在一起,求出各种重金属元素在该区域的平均值,建立综合污染指数评价法模型;分析各种重金属元素在各个区域的污染指数来分析该城区内不同区域重金属的污染程度。

对于问题二,由所给的数据求出每个区域的各种金属的平均值,采用主成分分析法对其对进行综合评价分析。通过主成分的主要元素因子和土壤中的重金属

元素的载荷矩阵和各个因子的累积贡献率以及其百分比来具体分析各种重金属元素对环境污染的主要原因。

对于问题三,根据题目和有关资料对重金属污染物的传播特征的分析,可将8种重金属污染物分为两类。一类是主要在大气中传播,一类是主要在土壤中传播。对于在大气中传播的重金属污染物,我们建立重金属污染物在气体中扩散模型,根据所在的空间任意位置土壤表面的重金属污染物浓度的多少来确立污染源的位置,函数的最大值即为污染源的位置;同理,对于另一类,我们也可以建立重金属污染物在土壤中扩散模型来确立污染源的位置,只是所考虑的方面不一样,从而所涉及的式子有所差别而已。

## 三、模型假设

- (1) 假设所给的采样点的数据都是可靠准确的;
- (2) 假设每个样本点都能很好的反映该平方公里的实际情况;
- (3) 污染物的排放瞬时完成,且排放速率恒定;
- (4) 风向为水平方向, 且风速和风向不随时间的变化而变化:
- (5) 气体的传播服从扩散定律,即单位时间通过单位扩展面积的流量与它的浓度梯度成正比;
- (6) 污染物的沉降速率恒定;

## 四、符号说明

 $P_i$ : 土壤重金属i的污染指数;

 $C_i$ : 土壤重金属i的实测值;

 $R_i$ : 土壤重金属i的背景值;

 $x_i$ : 第i种指标变量;

 $x_{ii}$ : 第i个评价对象的第i个指标的取值;

 $r_{ii}$ : 第i个评价对象的第j个指标的相关系数;

 $b_i$ : 主成分  $y_i$  的信息贡献率;

 $a_p$ : 主成分  $y_p$  的累积贡献率;

S: 污染物的扩散速度;

k: 风速, 单位 m/s;

H:污染源O距有效地面的高度:

t: 任意扩散时刻:

C(x,y,z,t): 空间任意一点扩散污染物的浓度;

 $v_{\cdot}$ : 空气向土壤的沉降系数;

 $w_a$ : 地面干沉结率系数;

 $\varphi$ : 冲洗系数;

 $k_i(i=x,y,z)$ : 空间任意一点扩散污染物的扩散系数;

 $Q_0$ :从污染源放出的污染物总量;

 $Q_1$ :在 $(t,t+\Delta t)$ 内通过某空间域的流量;

 $Q_2$ :在某空间域污染物的增量;

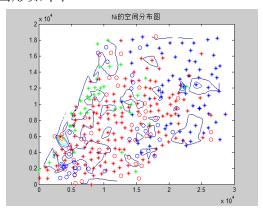
 $\partial_x$ , $\partial_y$ , $\partial_z$ : 分别为用浓度标准差表示的x,y,z轴上的扩散参数;

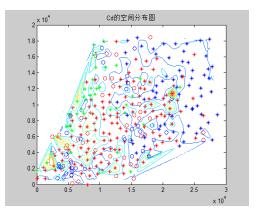
 $p_0$ : 为单位体积内污染物排放的速率;

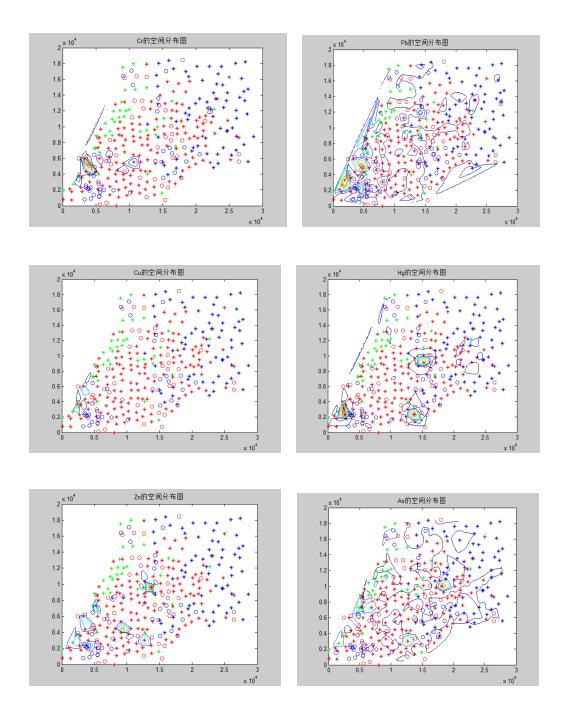
## 五、模型建立及其求解

## 5.1 模型一

经过对数据和题目的分析,直接使用matlab(附录一)使用二次插值法可以画出8种主要重金属元素在该城区的空间分布图,由图形来反映各种的分布情况,具体图形如下;







注: 红 o 代表生活区,绿\*代表工业区,蓝\*代表山区,红\*代表交通道路区,蓝 o 代表公园区

由图形可以得出:某种重金属元素对某个区域具有非常显著的影响,因此我们再次利用软件matlab(附录二)求出各种重金属在各个区域最大的浓度和所在的区域,具体的信息可以在下表体现:

表一 元素分布

元素	最大值 ( <i>µg/g</i> )	编号	所在区域
As	30. 13	84	交通区(4)
Cd	1619.8	95	交通区(4)

Cr	920.84	22	交通区(4)
Cu	2528.5	8	工业区 (2)
Hg	16000	9	交通区(4)
Ni	142.5	22	交通区(4)
Pb	472.48	16	生活区(1)
Zn	3760.8	61	交通区(4)

由表格可以知道,Pb主要分布在生活区,Cu元素主要分布在工业区,其他元素主要分布在交通区。

对于第二小问,我们首先根据所给的数据将已区分好的各个区域归在一起,求出各种重金属元素在该区域的平均值,建立综合污染指数评价法模型;分析各种重金属元素在各个区域的污染指数来分析该城区内不同区域重金属的污染程度。

综合污染指数采用国内相关研究常用的内梅罗(Nemerow)污染指数来评价土壤重金属的复合污染状况,综合污染指数评价可用来评价土壤中某一重金属元素富集和污染程度,而污染程度一般用污染指数来表示,计算见公式:

$$P_i = C_i / R_i \tag{1}$$

综合污染评价公式:

$$P = \sqrt{\frac{\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}P_{i}\right)^{2} + \left[\max\left(P_{i}\right)\right]^{2}}{2}}$$
(2)

单因子指数评价标准为:  $P_i \le 1$ , 无富集(无污染);  $1 < P_i \le 2$ , 轻度富集(轻度污染);  $2 < P_i \le 3$ , 中富集(中度污染);  $3 < P_i$ , 过度富集(严重污染)。

由matlab(附录三、四)软件可以得到各种重金属元素在各个区域的污染指数。

表二 污染指数

区域	生活区	工业区	山区	主干道路区	公园绿地
元素P					X
As	1.7418	2.0143	1.1234	1.5856	1.7399
Cd	2. 2305	3. 0239	1. 1717	2. 7693	2. 1580
Cr	2. 2264	1.7229	1. 2568	1.8727	1. 4076
Cu	3. 7427	9. 6618	1.3119	4. 7133	2. 2873
Hg	2.6583	18. 3530	1. 1702	12. 7664	3. 2855
Ni	1. 4912	1.6107	1. 2564	1. 4323	1. 2431
Pb	2. 2292	3.0013	1. 1792	2. 0495	1. 9583
Zn	3. 4349	4. 0279	1.0622	3. 5196	2. 2354
P	3. 1706	13. 5330	1. 2531	9. 426	2. 7344

通过以上表格分析可知, 生活区为严重污染, 工业区为严重污染, 山区为轻

度污染接近无污染,主干道路区为严重污染,公园绿地区为中度污染。

#### 5.2 模型二

由所给的数据求出每个区域的各种金属的平均值,采用主成分分析法对其对进行综合评价分析。

#### 5.2.1 模型的建立

1) 对原数据进行标准化处理

假设进行主成分分析的指标变量为8种重金属元素:  $x_1, x_2, \cdots, x_p$ , 评价对象可以为五个区域,第i个评价对象的第j个指标的取值为 $x_{ij}$ 。将各个指标 $x_{ij}$ 转换成标准化指标 $x_{ij}$ ,

$$x_{ij} = \frac{x_{ij} - \overline{x_j}}{s_j}, \quad (i = 1, 2, \dots, p)$$
 (3)

其中 $\overline{x_j} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_{ij}, s_j = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_{ij} - \overline{x_j})^2, (j = 1, 2, \dots, p), 即\overline{x_j}, s_j$ 为第j个指标的样本

均值和样本标准差。对应的,称

$$x_{ij} = \frac{x_{ij} - \overline{x_j}}{s_j}$$
,  $(i = 1, 2, \dots, p)$ 

为标准化指标变量。

2) 计算相关系数矩阵 R

相关系数矩阵  $R = (r_{ij})_{p \times p}$ 

$$r_{ij} = \frac{\sum_{k=1}^{n} x_{ki} x_{kj}}{n-1}, (i, j = 1, 2, \dots, p)$$
(4)

式中 $r_{ij} = 1, r_{ij} = r_{ji}, r_{ij}$ 是第i个指标与第j个指标的相关系数。

3) 计算特征值和特征向量

计算相关系数矩阵 R的特征值 $\lambda \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$ ,及对应的特征向量

 $u_1, u_2, \cdots, u_p$ ,其中 $u_j = (u_{1j}, u_{2j}, \cdots, u_{np})^T$ ,由特征向量组成m个新的指标变量

$$\begin{cases} y_{1} = u_{11}x_{1} + u_{21}x_{2} + \dots + u_{n1}x_{n} \\ y_{2} = u_{12}x_{1} + u_{22}x_{2} + \dots + u_{n2}x_{n} \\ \dots \\ y_{m} = u_{1m}x_{1} + u_{2m}x_{2} + \dots + u_{nm}x_{n} \end{cases}$$
 (5)

式中 $y_1$ 是第一主成分, $y_2$ 是第二主成分,…, $y_m$ 是第m主成分。

- 4) 选择  $p(p \le m)$  个主成分, 计算综合评价值
- a、计算特征值 $\lambda_i$  ( $j=1,2,\cdots,m$ )的信息贡献率和累积贡献率。称

$$b_{j} = \frac{\lambda_{j}}{\sum_{k=1}^{m} \lambda_{k}} \left( j = 1, 2, \dots, m \right)$$
 (6)

为主成分 $y_i$ 的信息贡献率;

$$\alpha_p = \frac{\sum_{k=1}^p \lambda_k}{\sum_{k=1}^m \lambda_k} \tag{7}$$

为主成分  $y_1, y_2, \cdots, y_p$  的累积贡献率,当  $\alpha_p$  接近于1( $\alpha_p = 0.85, 0.90, 0.95$ )时,则选择前 p 个指标变量  $y_1, y_2, \cdots, y_p$  作为 p 个主成分,代替原来 m 个指标变量,从而可对 p 个主成分进行综合分析。

b、计算综合得分:

$$Z = \sum_{j=1}^{p} b_j y_j \tag{8}$$

其中 $b_i$ 为第j个主成分的信息贡献率,根据综合得分就可进行评价。

#### 5.2.2 模型的求解

经过对土壤单点样重金属元素含量的数据标准化处理后,利用matlab软件进行主成分分析,可得出如下结果;

《A 文重相八尺件								
指标	As	Cd	Cr	Cu	Hg	Ni	Pb	Zn
As	1.000	. 739	296	. 473	. 319	. 100	. 892	. 590
Cd	. 739	1.000	- <b>.</b> 546	. 731	. 762	. 225	. 830	. 646
Cr	296	546	1.000	780	842	015	523	. 242
Cu	. 473	. 731	780	1.000	. 943	. 595	. 809	. 292
Hg	. 319	. 762	- <b>.</b> 842	. 943	1.000	. 423	. 656	. 205
Ni	. 100	. 225	015	. 595	. 423	1.000	. 442	. 501
Pb	. 892	. 830	- <b>.</b> 523	. 809	. 656	. 442	1.000	. 585
Zn	. 590	. 646	. 242	. 292	. 205	. 501	. 585	1.000

表三 变量相关矩阵

再利用SPSS统计软件可得到前几个因子的累积贡献率和初始特征值,如表四所示;

表四 解释的总方差

	初始特征值			提取平方和载入			
			累积贡献		方差百分	累积贡献	
因子	合计	方差百分比%	值%	合计	比%	值%	
1	4.828	60. 355	60. 355	4.828	60. 355	60. 355	
2	1.676	20. 956	81. 310	1.676	20. 956	81. 310	
3	1. 109	13.862	95. 172	1. 109	13.862	95. 172	
4	0.368	4.828	100.000				
5	3. 913E-8	4. 891E-7	100.000				
6	2. 643E-9	3. 304E-8	100.000				
7	2. 194E-9	2. 743E-8	100.000				
8	6. 468E-18	8. 085E-17	100.000				

由表四可见,前三个主成分分别累计提取了总方差的95.172%,表明所提取的主成分能够较好地代表源数据所蕴涵的信息。

将表四的前三个主成分的主要元素因子和土壤中的重金属元素的载荷矩阵 反映在表五中:

表五 载荷矩阵

	因子					
元素	1	2	3			
As	. 730	. 368	- <b>.</b> 508			
Cd	. 909	. 104	- <b>.</b> 245			
Cr	- <b>.</b> 660	. 736	. 146			
Cu	. 928	- <b>.</b> 272	. 245			
Hg	. 861	- <b>.</b> 422	. 187			
Ni	. 495	. 274	. 806			
Pb	. 942	. 176	144			
Zn	. 549	. 794	. 070			

从表五中可见,Cd、Cu和Pb在主成分1中具有非常高的载荷,Hg和As在主成分1中的载荷尽次于前三种。研究证实Pb和Cd在来源上关系较密切,并且Pb主要来源于汽车尾气排放而汽车轮胎磨损可以释放Cd,再加上Cu可以来源于汽油和车体的磨损,从而可以推断出因子1可能主要代表汽车交通运输活动的影响。其次Hg污染不仅与燃煤污染有关,在很大的程度上还与汽车尾气的排放有关;As和S

一样在空气中以 $AsO_2$ 为主,也可以是由汽车燃料燃烧所释放的,进一步的加大

了推断的可能性。由表格可以看出,第一主成分解释的原变量方差最多

(60.355%),而其后的主成分所解释的方差逐渐在减少,因此可以认为第一主成分是污染的主要来源,鉴于此,可认为主干道路区上的尾气排放和轮胎磨损是重金属Cd、Cu、Pb、Hg和As污染的主要原因。

在表五中体现了,Cr和Zn在主成分2中具有较高的载荷。有学者研究表明,

厂矿企业的三废排放中含有大量的Zn和Cr,因此可以断定因子2为工业活动的影响。与此我们可以认为工业区的工业废气排放是重金属Zn和Cr的主要原因。

在表五中也体现了,Ni单独在主成分3中具有较高的载荷,且与其他元素关系不密切。由资料显示,废水中含有较多的Ni,因此也可以认为生活区的生活废水、污水是重金属Ni的主要原因。

综合以上所述,可知Ni使生活区的污染变严重,Cr和Zn使工业区的污染变严重,Cd、Cu、Pb、Hg和As使主干道路区的污染变严重。与第一问的结果一致,验证了两个模型的准确性。

#### 5.3 模型三

根据题目和有关资料对重金属污染物的传播特征的分析,可将8种重金属污染物分为两类。一类是主要在大气中传播,一类是主要在土壤中传播。对于在大气中传播的重金属污染物,我们建立重金属污染物在气体中扩散模型来确立污染源的位置;而对于另一类,我们则建立重金属污染物在土壤中扩散模型来确立污染源的位置。

#### 1) 重金属污染物在气体中的扩散模型

记污染物开始扩散的时刻为t=0,并且以污染源作为扩散中心,则可将t 时刻无穷空间中任一点(x, y, z)的污染物浓度记为C(x, y, z, t)。假设单位时间内通过单位法向量面积的流量与浓度梯度成正比,则有

$$\vec{q} = -k_i \cdot gradC$$

其中 $k_i(i=x,y,z)$ 是扩散系数,grad表示浓度梯度,其中的负号代表重金属粉尘的浓度是由高到低的地方扩散。

假设空间域 $\Omega$ 的体积为 V,包围空间域 $\Omega$ 的曲面为一规则的球面,设其表

面面积为
$$S_{\bar{x}}$$
,外法线向量为 $\vec{n} = \left(-\frac{x}{z}, -\frac{y}{z}, 1\right)$ ,

则在 $(t,t+\Delta t)$ 内流通过空间域 $\Omega$ 的流量可表示为:

$$Q_{1} = \int_{t}^{t+\Delta t} \iint_{s} \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma dt \tag{9}$$

空间域 $\Omega$ 所包围的区域内污染的重金属的增量可表示为:

$$Q_2 = \iiint_V \left[ C(x, y, z, t + \Delta t) - C(x, y, z, t) \right] dV$$
 (10)

由污染源排放出的该重金属的总量为: 
$$Q_0 = \int_t^{t+\Delta t} \iint\limits_{\Omega} p_0 dV dt$$
 (11)

由质量守恒可得出:  $Q_0 = Q_1 + Q_2$ , 即,

$$\iiint_{V} \left[ C(x, y, z, t + \Delta t) - C(x, y, z, t) \right] dV + \int_{t}^{t + \Delta t} \iint_{C} \vec{q} \cdot \vec{n} d\sigma dt = \int_{t}^{t + \Delta t} \iiint_{C} p_{0} dV d$$
 (12)

根据曲面积分Gauss公式得: 
$$\iint_{s} \overrightarrow{q} \cdot \overrightarrow{n} d\sigma = \iiint_{V} div \overrightarrow{q} dV$$
 (13)

则式子(12)可以转换成

$$\iiint_{V} \left[ \frac{C(x, y, z, t + \Delta t) - C(x, y, z, t)}{\Delta t} \cdot \Delta t \right] dV + \int_{t}^{t + \Delta t} \iiint_{V} div\vec{q}dV dt = \int_{t}^{t + \Delta t} \iiint_{Q} p_{0}dV dt$$
 (14)

$$\pm \frac{\partial C}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{C(x, y, z, t + \Delta t) - C(x, y, z)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\int_{t}^{t + \Delta t} k div(gradC) dt}{\Delta t} \tag{15}$$

故式子 (14) 即可转换成 
$$\iiint_{V} \left[ \frac{\partial C}{\partial t} \right] dV \cdot \Delta t + \iiint_{V} div \vec{q} dV \cdot \Delta t = \iiint_{O} p_{0} dV \cdot \Delta t$$
 (16)

化简得: 
$$\iiint_{V} \left[ \frac{\partial C}{\partial t} \right] dV + \iiint_{V} di v \vec{q} dV = P_{0}$$
 (17)

根据A. Fick扩散微分方程式中:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_X \frac{\partial C}{\partial X} + U_Y \frac{\partial C}{\partial Y} + U_Z \frac{\partial C}{\partial Z} = k_X \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + k_Y \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + k_Z \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2}$$
(18)

其中: C为气体浓度; t为时间;  $u_x, u_y, u_y$ 为x, y, z方向风速;  $k_x, k_y, k_z$ 为x, y, z方向上的扩散系数。

假设重金属污染物在无风条件下扩散,此时有,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$$
 (19)

结合式子(18)可解出(17)的结果为:

$$C(x, y, z, t) = \frac{p_0}{(4\pi t)^{1.5} (k_x k_y k_z)^{0.5}} \exp\left\{-\frac{x}{4k_x t} - \frac{y}{4k_y t} - \frac{(z - H)}{4k_z t}\right\}$$
(20)

由此得到地面土壤表层的浓度:

$$C'(x, y, z, t) = (v_s - w_d - \varphi)C(x, y, z, t)$$
  $(x^2 + y^2 + z^2 = s^2t^2)$  (21)

由(21)式可知,土壤表层的浓度是一个向四周逐渐减少的函数。

2) 重金属污染物在土壤中的扩散模型

记污染物开始扩散的时刻为t=0,并且以污染源作为扩散中心,则可将t 时刻无穷平面中任一点(x,y)的污染物浓度记为 C(x,y,t)。假设单位时间内通过单位路程的流量与浓度梯度成正比,则有

$$\vec{q} = -k_i \cdot gradC$$

其中 $k_i(i=x,y)$ 是扩散系数,grad表示浓度梯度,其中的负号代表重金属污染物的浓度是由高到低的地方扩散。

假设在平面S上,设其传播路径为l,法线向量为  $\vec{n} = \begin{pmatrix} -\frac{x}{y}, 1 \end{pmatrix}$ ,

则在 $(t,t+\Delta t)$ 内流通过平面S的流量可表示为:

$$Q_{1} = \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{t} \vec{q} \cdot \vec{n} ds dt \tag{9}$$

平面 S 所包围的区域面积内污染的重金属的增量可表示为:

$$Q_2 = \iint \left[ C(x, y, t + \Delta t) - C(x, y, t) \right] d\sigma \tag{10}$$

在有水气共存的土壤中,即土壤非饱和带中,污染物随水运移时,水中的污染物会与气体及土壤颗粒发生物质交换。水气两相间的物质交换平衡可用亨利定律

来表示: 
$$C_a = HC_w$$
 (22)

式中, $C_a$ 为气体中的污染物浓度 $(mg \cdot cm^{-3})$ , $C_w$ 为水中的污染物浓度 $(mg \cdot cm^{-3})$ ,H为亨利系数。不同物质的H值可在文献中查到。对于水中污染物与固体颗粒间的物质交换,经常用到以下这一简单的线性方程:

$$q_s = K_d C_w \tag{23}$$

式中, $q_s$ 为固体颗粒表面的污染物浓度 $(mg\cdot g^{-1}), K_d$ 为污染物在水与固体颗粒间的分配系数 $(cm^3\cdot g^{-1})$ 。

对于土壤中的水-固物质交换,可以使用Freundlich方程。它是一个经常被使用的非线性吸附等温线方程,其表达式为:

$$q_s = K_F C_w^{1/n} \tag{24}$$

 $K_F$ 为Freundlich分配系数 $\left(mg^{1-1/n}\cdot g^{-1}\cdot cm^{3/n}\right)$ ,1/n表示水-固吸附非线性指数。

假设气相为静止,且不考虑污染物在气相中的扩散,污染物在非饱和带中随 水运移可由下列一维对流一扩散方程来表示:

$$\theta_{w} \frac{\partial C_{w}}{\partial t} + \rho \frac{\partial q_{s}}{\partial t} + \theta_{a} \frac{\partial C_{a}}{\partial t} = -\theta_{w} v_{x} \frac{\partial C_{w}}{\partial x} + \theta_{w} D_{w} \frac{\partial^{2} C_{w}}{\partial x^{2}}$$
(25)

式中, $\theta_w$ , $\theta_a$ 分别为土壤含水率与含气率, $\rho$  为土壤干容重 $\left(g \cdot cm^{-3}\right)$ , $v_x$  为孔 隙水流速度 $\left(cm \cdot \min^{-1}\right)$ ,x 为平面距离 $\left(cm\right)$ , $D_w$  为扩散系数 $\left(cm^2 \cdot \min^{-1}\right)$ 。

综上式子可得: 
$$R_t \frac{\partial C_w}{\partial_t} = -v_x \frac{\partial C_w}{\partial_x} + D_w \frac{\partial^2 C_w}{\partial x^2}$$
 (26)

式中,
$$R_t$$
为延滞系数,即 $R_t = 1 + \frac{\rho K_d}{\theta_a H} + \frac{\theta_w}{\theta_a H}$  (27)

延滞系数  $R_{t}$ 代表污染物运移时由于发生了水一气及水一固体颗粒之间的物质交换而产生的延滞作用。

则土壤中污染物的总浓度:  $Q_2 = C_w + C_a + q_s$ 

由污染源排放出的该重金属的总量为: 
$$Q_0 = \int_t^{t+\Delta t} \iint p_0 ds dt$$
 (11)

由质量守恒可得出:  $Q_0 = Q_1 + Q_2$ , 即,

$$\iiint \left[ C(x, y, t + \Delta t) - C(x, y, t) \right] d\sigma + \int_{t}^{t + \Delta t} \int_{t}^{t} \vec{q} \cdot \vec{n} ds dt = \int_{t}^{t + \Delta t} \iint_{t} p_{0} ds dt$$
 (12)

根据曲面积分Gauss公式得: 
$$\int_{c}^{d} \vec{q} \cdot \vec{n} ds = \iint_{c} div \vec{q} d\sigma$$
 (13)

则式子(12)可以转换成

$$\iiint_{S} \frac{C(x, y, t + \Delta t) - C(x, y, t)}{\Delta t} \cdot \Delta t d\sigma + \int_{t}^{t + \Delta t} \iint_{S} div \vec{q} d\sigma = \int_{t}^{t + \Delta t} \iint_{S} p_{0} ds dt \quad (14)$$

$$\pm \frac{\partial C}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{C(x, y, t + \Delta t) - C(x, y)}{\Delta t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\int_{t}^{t + \Delta t} k div(gradC) dt}{\Delta t} \tag{15}$$

故式子(14)即可转换成
$$\iint \left[ \frac{\partial C}{\partial t} \right] d\sigma \cdot \Delta t + \iint div \vec{q} d\sigma \cdot \Delta t = \iint_{L} p_0 ds \cdot \Delta t$$
 (16)

化简得: 
$$\iint_{s} \left[ \frac{\partial C}{\partial t} \right] d\sigma + \iint_{s} di v \vec{q} d\sigma = P_{0}$$
 (17)

根据A. Fick扩散微分方程式中:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_X \frac{\partial C}{\partial X} + U_Y \frac{\partial C}{\partial Y} + U_Z \frac{\partial C}{\partial Z} = k_X \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + k_Y \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + k_Z \frac{\partial^2 V}{\partial Z^2}$$
(18)

其中: C为气体浓度; t为时间;  $u_x, u_y, u_y$ 为x, y, z方向风速;  $k_x, k_y, k_z$ 为x, y, z方向上的扩散系数。

假设重金属污染物在无风条件下扩散,此时有,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = k_x \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 V}{\partial z^2}$$
 (19)

结合式子(18)可解出(17)的结果为:

$$C(x, y, z, t) = \frac{p_0}{(4\pi t)^{1.5} (k_x k_y k_z)^{0.5}} \exp\left\{-\frac{x}{4k_x t} - \frac{y}{4k_y t} - \frac{(z - H)}{4k_z t}\right\}$$
(20)

由此得到地面土壤表层的浓度:

$$C'(x, y, z, t) = (v_s - w_d - \varphi)C(x, y, z, t)$$
  $(x^2 + y^2 + z^2 = s^2t^2)$  (21)

由(21)式可知,土壤表层的浓度是一个向四周逐渐减少的函数。

## 六、模型的评价及改进

## 七、参考文献

- [1] 杨苏才,曾静静,王胜利,南忠仁,兰州市表层土壤 Cu、 Zn、 Pb 污染评价及成因分析,市场周刊•理论研究第,2004.11。
- [2] 吴邵华,周生路,潘贤章,赵其国,城市扩建过程对土壤重金属积累影响的 定量分析,土壤学报,2011.5。
- [3] 刘丽琼,魏世江,江韬,三峡库区消落带土壤重金属分析特征及潜在风险评价,中国环境科学,2011,31(17):1204-1211。
- [4] 彭 胜,陈家军,王红旗,挥发性有机污染物在土壤中的运移机制与模型, 土壤学报,第38卷第3期2001年8月
- [5] 王雄军,赖健青等,基于因子分析法研究太原市土壤重金属污染的主要来源 2008.17(2):671-676。
- [6] 放射气体模型的预估模型
- [7] 姜启源,谢金星,叶俊,数学模型(第三版),高等教育出版社,2003,1-12。
- [8] 王沫然, MATLAB 与科学计算(第二版), 电子工业出版社, 2004, 89-90。
- [9] 王冬琳, 数学建模及实验, 国防工业出版社, 2004, 197-199

## 八、附录

#### 附录一:

```
plot(xm(1),ym(1),'ow')
hold
for i=1:319
  switch gongneng(i)
     case 1
    plot(xm(i),ym(i),'or')
     case 2
    plot(xm(i),ym(i),'*g')
     case 3
    plot(xm(i),ym(i),'*b')
```

```
case 4
  plot(xm(i),ym(i),'*r')
     case 5
   plot(xm(i),ym(i),'ob')
 end
end
load data.txt
load data2.txt
x=data(:,1)';
y=data(:,2)';
z=data2(:,8)';
xi=0:100:max(x);
yi=min(y):100:max(y);
zi=griddata(x,y,z,xi,yi','cubic');
contour(xi, yi, zi)
title('Zn的空间分布图')
附录二:
for i=1:8;
    [a, b] = max(data(:i));
End
附录三:
%划分区域
for i=1:size(qu, 1)
    if qu(i) == 1
        shenghuo=[shenghuo;i];
    end
    if qu(i) == 2
        gongye=[gongye;i];
    end
    if qu(i) == 3
        shanqu=[shanqu;i];
    end
    if qu(i) == 4
        daolu=[daolu;i];
    end
    if qu(i) == 5
        gongyuan=[gongyuan;i];
    end
shenghuo, gongye, shanqu, daolu, gongyuan,
```

```
结果:
1) 生活区为以下采样点:
12
           16
                      20
                             21
                                   23
                                          25
                                                 33
                                                        36
                                                               39
                                                                     42
     13
                 18
63
      67
             68
                    72
                          94
                                106
                                       107
                                              152
                                                     154
                                                           156
                                                                  157
                                                                         158
                                                      199 243 254
176
      180
             183
                    184
                           186
                                 187
                                        195
                                               198
                                                                     258
259
      267
             268
                    269
                          272
                                 273
                                        276
                                               306
2) 工业区为以下采样点:
4
      6
             8
                   29
                          30
                                31
                                      103
                                            153
                                                   177
                                                                 197
                                                                        221
                                                          185
223
      224
             225
                    226
                          228 230
                                      231
                                            232
                                                   233
                                                          237
                                                                 238
                                                                        239
                                 262
             248
                    249
                          255
                                        270
                                               271
                                                     274
246
      247
                                                            275 277
                                                                        278
3) 山区为以下采样点:
  62
        76
               80
                      81
                             82
                                   92
                                         100
                                                101
                                                       104
                                                             108
                                                                    109
110
      111
             112
                    114
                           115
                                 116
                                        117
                                               119
                                                     120
                                                            121
                                                                   122
                                                                          123
124
      125
             126
                    127
                                 129
                                        131
                                               132
                                                      133
                                                            134
                                                                          136
                           128
                                                                   135
137
      138
             189
                    194
                          207
                                 209
                                        210
                                               211
                                                     217
                                                            218
                                                                   219
                                                                          220
251
      280
             281
                    282
                          286
                                 287
                                        288
                                               290
                                                      291
                                                            295
                                                                   296
                                                                          297
298
      299
             300
                    301
                          302
                                 304
                                        305
  4) 主干道路区为以下采样点:
 1
       2
              3
                     5
                            7
                                   9
                                         10
                                                14
                                                       15
                                                             17
                                                                    19
                                                                           22
      27
             28
                    32
26
                          34
                                 35
                                        37
                                               38
                                                     40
                                                            41
                                                                   43
                                                                          44
                                        51
                                               52
                                                     53
                                                            54
                                                                   55
45
      46
             47
                    48
                          49
                                 50
                                                                          56
57
      58
             59
                    60
                          61
                                 64
                                        65
                                                     71
                                                            73
                                                                   75
                                                                          77
                                               66
78
      79
             83
                          85
                                 86
                                        87
                                                     89
                                                            90
                                                                   91
                                                                          93
                    84
                                               88
95
      96
             97
                    98
                          99
                                102
                                       105
                                              113
                                                    118
                                                           130
                                                                  150
                                                                         151
155
      159
             160
                    161
                          162
                                163
                                       164
                                              165
                                                    166
                                                           167
                                                                  168
                                                                         169
170
             172
                                            179
      171
                   173
                        174
                               175
                                      178
                                                   181
                                                          182
                                                                 188
                                                                        191
192
                 203
                                            208
                                                   212
      196
            201
                        204
                               205
                                      206
                                                          214
                                                                 215
                                                                        216
222
     227
            229
                   234
                          235
                                236
                                       240
                                              241
                                                    242
                                                           244
                                                                  245
                                                                         250
                                               265
252
      256
             257
                    260
                          261
                                 263
                                        264
                                                      266
                                                            279
                                                                   283
                                                                         284
285
      289
             292
                    293
                          303
                                 318
5) 公园绿地区为以下采样点:
11
       24
              69
                     70
                            74
                                 139
                                        140
                                               141
                                                      142
                                                            143
                                                                   144
                                                                          145
                    149
                           190
                                        200
                                               202
                                                                   294
                                                                          307
146
      147
             148
                                 193
                                                     213
                                                            253
308
      309
             310
                    311
                          312
                                 313
                                        314
                                               315
                                                     316
                                                            317
                                                                   319
附录四:
load data. txt
qu=data(:, 4);
```

```
load data.txt
qu=data(:,4);
shenghuo=[];gongye=[];shanqu=[];daolu=[];gongyuan=[];
for i=1:size(qu,1)
    if qu(i)==1
       shenghuo=[shenghuo;i];
    end
```

```
if qu(i) == 2
        gongye=[gongye;i];
    end
    if qu(i) == 3
        shanqu=[shanqu;i];
    end
    if qu(i) == 4
        daolu=[daolu;i];
    end
    if qu(i) == 5
        gongyuan=[gongyuan;i];
    end
end
shenghuo=shenghuo', gongye=gongye', shanqu=shanqu', daolu=daolu', gongyua
n=gongyuan',
load data2. txt
load data3. txt
pingjunzhi=data3(:,1);
fangcha=data3(:, 2);
shenghuo=data2(shenghuo,:);
a1=std(shenghuo)
shenghuo=mean(shenghuo)'./pingjunzhi;
gongye=data2(gongye,:);
a2=std(gongye)
gongye=mean(gongye)'./pingjunzhi;
shanqu=data2(shanqu,:);
a3=std(shanqu)
shanqu=mean(shanqu)'./pingjunzhi;
daolu=data2(daolu,:);
a4=std(daolu)
daolu=mean(daolu)'./pingjunzhi;
gongyuan=data2(gongyuan, :);
a5=std(gongyuan)
gongyuan=mean(gongyuan)'./pingjunzhi;
pi=[shenghuo, gongye, shanqu, daolu, gongyuan]
p=sqrt(mean(pi).^2+(max(pi)).^2)./sqrt(2)
```