

2023 年第八届“数维杯”大学生 数学建模挑战赛论文

题 目 河流-地下水系统水体污染研究

摘 要

党的二十大报告指出，“深入推进环境污染防治，统筹水资源、水环境、水生态治理，推动重要江河湖库生态保护治理，基本消除城市黑臭水体”。其中河流和地下水系统在人类生活中发挥关键作用。当污染发生时，河流对地下水的补给可能导致周边水源受污，影响工农业运作、社会发展及饮水安全。在地下水污染中，有机污染物的问题最为棘手。为了解这类污染物在河流-地下水系统中的行为，我们需要深入研究其物理、化学反应和生物转化过程。本研究将以各向同性均质的稳态流作为地下水渗流场，探究有机污染物的迁移与转化规律。

对于问题一，我们查阅相关文献资料分别得出对流方程、弥散方程以及吸附作用方程。我们将基于质量守恒方程与一些假设条件，建立描述有机污染物浓度变化的一维及多维对流-弥散-吸附微分方程，接着通过有限差分法求解该一维微分方程，以便直观地观察模型参数对有机污染物迁移转化过程的影响。

对于问题二，我们将基于给定的四种有机物液、固相实验数据，对模型进行参数调整和检验。首先，基于对流、弥散试验参数，更新微分方程的模型参数，以更准确地描述有机污染物的迁移转化过程；然后，根据四种不同河流沉积物的吸附动力学数据，重新计算吸附系数 k 值，由于给定的时间数据比较离散，本文使用插值方法进行数值模拟，将更新后的 k 值用于微分方程求解；最后，基于四种有机物液、固相状态下的初始浓度与平衡浓度数据，通过匹配对可以迭代计算出初始浓度与等温吸附24小时后平衡的浓度的吸附系数 k 值。然后求均值作为吸附系数 k ，更新微分方程模型参数。

对于问题三，我们将在微分方程模型中引入生物降解过程，以研究微生物对有机污染物的降解特性，假设生物降解速率与微生物浓度 M 和有机物浓度 C 之间存在线性关系，则可在原有的对流弥散-吸附模型中添加生物降解项，形成新的数学模型一对流-弥散-吸附-生物降解的微分方程。

关键词 微分方程；有限差分法；插值模拟；迭代计算；优化模型参数

目 录

一、问题重述	1
1.1 问题背景	1
1.2 问题重述	1
二、模型假设	1
三、符号说明	2
四、技术路线	2
五、问题 1 模型建立与求解	3
5.1 问题 1 分析	3
5.2 基于质量守恒定律原理建立的对流方程	3
5.2.1 基于Darcy定律的地下水流动方程	3
5.2.2 基于质量守恒原理的对流运动守恒方程结果	3
5.3 基于Fick扩散定律建立的弥散方程.....	4
5.3.1 Fick扩散定律原理.....	4
5.3.2 弥散方程结果.....	5
5.4 基于偏微分方程及有限差分法求解对流—弥散方程.....	5
5.4.1 一维情况下的对流—弥散方程.....	5
5.4.2 多维情况下的对流—弥散方程的推广.....	5
5.5 基于线性、Freundlich、Langmuir吸附模型建立的吸附作用方程.....	6
5.5.1 基于线性吸附模型建立的吸附作用方程.....	7
5.5.2 基于Langmuir吸附模型建立的吸附作用方程.....	7
5.5.3 基于Freundlich吸附模型建立的吸附作用方程.....	7
5.6 一维对流-弥散-吸附微分方程	7
5.6.1 模型参数设定.....	7
5.6.2 对流-弥散-吸附微分方程的建立.....	8
5.6.3 对流-弥散-吸附微分方程的离散化和求解.....	8
5.6.4 模型的可视化和解析.....	10
六、问题 2 模型建立与求解	11
6.1 问题 2 分析	11
6.2 基于对流、弥散试验参数微分方程模型优化	11
6.2.1 模型建立	11
6.2.2 模型求解	12
6.3 基于吸附动力学试验结果微分方程模型优化	13
6.3.1 模型建立.....	13
6.3.2 模型求解.....	17
6.4 基于等温平衡吸附试验结果微分方程模型优化.....	18
6.4.1 模型建立.....	20
6.4.2 模型求解.....	20
七、问题 3 模型建立与求解	22
7.1 问题 3 分析	22
7.2 基于生物降解对流-弥散-吸附微分方程模型建立.....	22
7.3 基于生物降解对流-弥散-吸附微分方程模型求解	24
八、模型总结与推广	26
8.1 模型优势	26
8.2 模型劣势	27

8.3 模型总结与展望	27
参考文献	29
附 录	30

一、问题重述

1.1 问题背景

在二十大报告中，习近平总书记强调：“深入推进污染防治，统筹水资源、水环境、水生态治理，推动重要江河湖库生态保护治理，基本消除城市黑臭水体”。水污染防治中与人们最密切相关的是河流-地下水污染治理。河流-地下水是当今人们生产生活用水的重要来源，治理好河流-地下水系统水体污染，对工农业的正常运作、社会经济的发展、饮水安全等具有重大意义。而在河流-地下水系统中最难治理的是有机物污染，因而对有机污染物在河流-地下水系统中的行为特征进行研究具有十分重要的理论意义和实际价值，引起社会公众的广泛关注。

1.2 问题重述

已有研究表明在河流地下水系统中有机污染物的行为特征主要涉及对流迁移、水动力弥散、吸附及阻滞等物理过程、化学反应过程以及生物转化过程等。我们需要结合有机污染物的行为特征涉及的三方面完成以下三项任务。

问题1：通过查阅相关文献和资料，分析并建立河流-地下水系统中有机污染物的对流、弥散及吸附作用的数学模型。

问题2：利用题目中的试验参数以及数据依据数学模型研究某有机污染物在河流-地下水系统中的迁移转化机理。

问题3：生物降解是污染物一个很重要的转化过程，考虑生物降解作用对有机污染物转化的影响，建立适当的数学模型，试结合题中所给0.483mg/L有机污染物对应的微生物降解过程分析微生物对该有机污染物的降解特性。

二、模型假设

1. **一维空间假设**:将河流-地下水系统近似为一维空间，忽略横向扩散和纵向非均匀性；

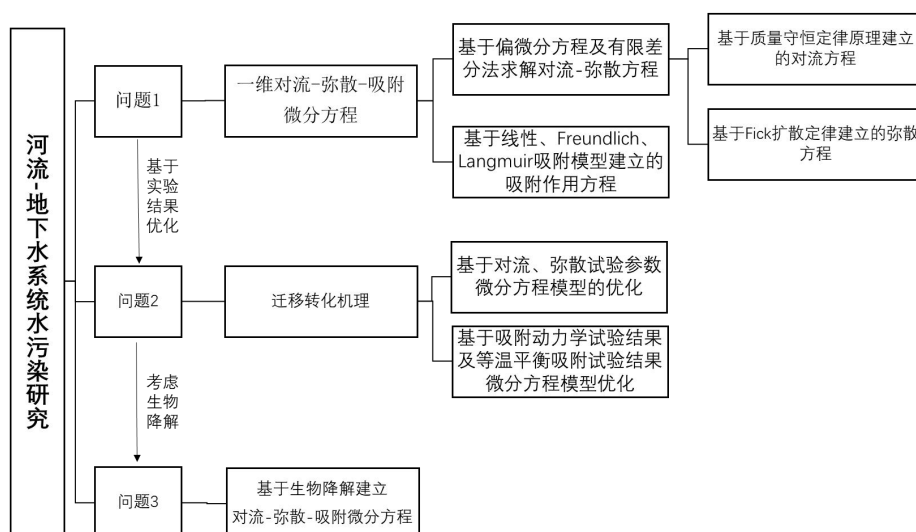
2. **连续性假设**:假设有机污染物的浓度分布在空间上具有一定的连续性和平滑性，可以用微分方程来描述；

3. **线性生物降解假设:**假设生物降解速率与微生物浓度和有机物浓度之间存在线性关系，用生物降解速率常数上表示；
4. **稳态吸附假设:**假设吸附过程处于稳态，吸附系数 k 不随时间变化；
5. 地下水流速相对于孔隙流速 u 来说较小，因此可以**忽略**其对流的**影响**。

三、符号说明

符号	符号说明	符号	符号说明
u	平均孔隙流速	dx	空间步长
v	地下水渗流流速	C	有机污染物浓度
k	渗透（吸附）系数	C_0	初始浓度
D	弥散系数	C_e	平衡浓度
ρ	含水层样品密度	C_L	相邻位置L的浓度
n	孔隙度	C_R	相邻位置R的浓度
Q	渗透流量	$C_{i,j}$	i 时间、 j 位置的有机污染物浓度
A	实验土柱的过水断面面积	k_{t_i}	某时间点对应的吸附系数
L	渗透路径	M	微生物浓度
h	测量水位点	μ	生物降解速率常数
dt	时间步长		

四、技术路线



五、 问题 1 模型建立与求解

5.1 问题 1 分析

问题1要求我们从已有的相关理论研究和实证分析中找到适用于本题的数学模型，用以描述河流-地下水系统中有机污染物的对流、弥散及吸附作用。由于团队相关专业知识的了解程度较低，我们决定将问题简化，建立描述河流-地下水系统中有机污染物变化的一维对流—弥散—吸附微分方程，并通过有限差分法求解该方程，以便能够直观地呈现出模型参数对有机物污染物迁移转化过程的影响，同时有利于求解问题2。

5.2 基于质量守恒定律原理建立的对流方程

5.2.1 基于Darcy定律的地下水流动方程

Darcy定律是水利工程师达西在1856年通过均匀的沙砾渗流实验得出的线性渗流定律^[4]，其数学表达式为

$$Q = kA \frac{h_1 - h_2}{\Delta L} \quad (1)$$

其中， h_1 和 h_2 为两个测量点水位。

又因为Darcy定律是描述中立水渗流的基本方程，由水力学知识可得渗透流量 Q 、过水断面横截面积 A 与渗透流速 v 三者之间存在以下关系：

$$v = \frac{Q}{A} \quad (2)$$

结合(1)和(2)的表达式，我们可以得出：

$$v = -k \frac{\Delta h}{\Delta L} \quad (3)$$

当 $\Delta L \rightarrow 0$ 时，

$$v = -k \frac{dh}{dL} \quad (4)$$

公式(4)为达西定律，式中负号表明水力坡度与水流量方向相反。由此可见，水在渗流过程中的体积通量与其势梯度成比例。^[3]

5.2.2 基于质量守恒原理的对流运动守恒方程结果

根据质量守恒定律，有机物污染物的对流作用的数学模型可表示为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(Cv) = 0 \quad (5)$$

5.3 基于 Fick 扩散定律建立的弥散方程

5.3.1 Fick 扩散定律原理

(1) Fick第一定律

扩散过程可以分为稳态和非稳态。

在**稳态扩散**中，单位时间内通过垂直于给定方向的单位面积的净原子数(称为通量)不随时间变化，即任一点的浓度不随时间变化。在非稳态扩散中，通量随时间而变化。研究扩散时首先遇到的是扩散速率问题。

菲克(A.Fick)在1855年提出了Fick第一定律，将扩散通量和浓度梯度联系起来。菲克第一定律指出，在稳态扩散条件下，单位时间内通过垂直于扩散方向的单位面积的扩散物质质量（通称扩散通量）与该截面处的浓度梯度成正比。^[2]

Fick第一定律的表达式为：

$$J = -D \frac{dC}{dx} \quad (6)$$

式中： J 为扩散通量,单位为 $(atoms/m^2 \cdot s)$ 或 $kg/(m^2 \cdot s)$; D 为扩散系数，单位为 m^2/s ; $\frac{dC}{dx}$ 为浓度梯度，单位为 $(atoms/m^2 \cdot m)$ 或 $kg/(m^2 \cdot m)$ 。此方程又称为扩散第一方程。

当扩散在稳态条件下应用(6)式相当方便。

(2) Fick第二定律

在一维稳定均匀流条件下，溶质在饱和多孔介质中的运移规律可描述为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^n R_i \quad (7)$$

式中： C 为溶质浓度，单位为 kg/m^3 ； D 为水动力弥散系数，单位为 m^2/s ； x 为运移距离，单位为 m ； t 为运移时间，单位为 s ； v 为实际渗流速度，单位为 m/s ； R_i 为 n 个反应中第 i 个反应的溶质产率，单位为 $kg/(s \cdot m^3)$

对于保守型物质, 不考虑 $\sum_{i=1}^n R_i$ 项, 式(7)可简化为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (8)$$

5.3.2 弥散方程结果

由于地下水渗流具有不可压缩性和连续性, 因此会存在水动力弥散现象。针对这一问题, 可以使用Fick第二定律建立弥散方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D \nabla^2 C = 0 \quad (9)$$

其中: D 是水动力弥散系数, ∇^2 是拉普拉斯算子 ($\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$)

5.4 基于偏微分方程及有限差分法求解对流-弥散方程

对流-弥散方程是一种常用的数学模型, 用于描述污染物在水流中的迁移过程, 它考虑了污染物在水流中的对流运动和分子扩散作用。

5.4.1 一维情况下的对流-弥散方程

对于一维情况, 对流-弥散方程可以表示为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (10)$$

其中, C 是污染物浓度, t 是时间, x 是空间坐标, v 是水流速度, D 是污染物的弥散系数。

5.4.2 多维情况下的对流-弥散方程的推广

对于二维或三维情况, 对流-弥散方程可以推广为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (vC) = D \nabla^2 C \quad (11)$$

其中, $\nabla \cdot (vC)$ 表示对流项, $D \nabla^2 C$ 表示扩散项。^[1]

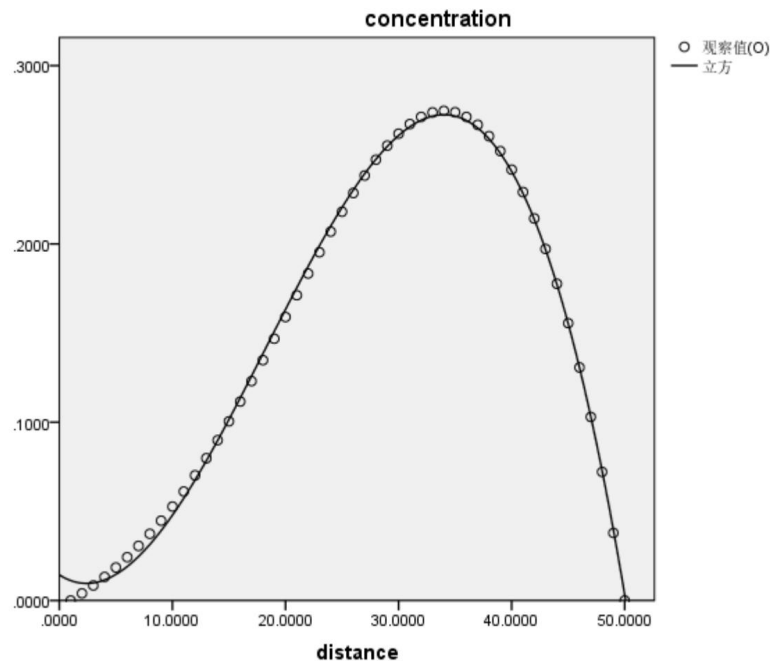


图5.4.2-1 对流-弥散模型拟合

表5.4.2-1 模型摘要和参数估算

因变量: concentration

方程式	模型摘要					参数估计值			
	R 平方	F	df1	df2	显著性	常量	b1	b2	b3
立方 (U)	.999	12718.719	3	46	.000	.014	-.004	.001	-1.663E-5

自变量为 distance。显著性<0.05,拒绝H0

结合迭代所得数据，将对流—弥散模型进行拟合，拟合情况较好，所以我们认为一维情况下对流-弥散模型更加符合题意；多维情况下的对流—弥散方程可做推广至其他条件情形，本文不再赘述。

5.5 基于线性、Freundlich、Langmuir吸附模型建立吸附作用方程

吸附是污染物由液相或气象进入固相的过程。物质的吸附有两种机理：分配作用和表面吸附作用。介质对有机物污染物的吸附实质上是介质的矿物组分与有机质共同作用的结果，通常在土壤中，有机质起着重要作用。

在给定污染物质与固相介质情况下，污染物质的吸附主要与污染物在水中的浓度，以及污染物被吸附在固相介质上的固相浓度有关。

5.5.1 基于线性吸附模型建立的吸附作用方程

线性吸附模型假设污染物在土壤颗粒表面的吸附量与污染物在水中的浓度成正比，即：

$$q = k_d C \quad (12)$$

其中， q 是污染物在土壤颗粒表面的吸附量， C 是污染物在水中的浓度， k_d 是分配系数。

5.5.2 基于Langmuir吸附模型建立的吸附作用方程

Langmuir吸附模型假设土壤颗粒表面有限吸附位点，当所有吸附位点都被占据时，污染物的吸附量不再增加，即：

$$Q = \frac{k_l C}{1 + k_l C} \quad (13)$$

其中， k_l 和 n 为常数。

5.5.3 基于Freundlich吸附模型建立的吸附作用方程

Freundlich吸附模型假设污染物在土壤颗粒表面的吸附量与污染物在水中的浓度的幂函数关系，即：

$$q = k_f C^{\frac{1}{n}} \quad (14)$$

其中， k_l 和 n 为常数。

5.6 一维对流-弥散-吸附微分方程

在环境水资源学中，对流-弥散-吸附方程在污染物运移研究中占有重要地位。它为理解有机污染物在河流-地下水系统中的行为提供了理论依据。本文将进一步通过建立有机污染物浓度的一维对流-弥散-吸附微分方程来研究这个问题。

5.6.1 模型参数设定

在建立模型之前，首先设定模型的基本参数。假设系统的空间长度为 L ，时间长度为 T ，空间离散化点数为 N_x ，时间离散化步数为 N_t ，水流速度为 v ，弥散系数为 D ，吸附系数为 k 。由此，可以计算出空间步长 $dx = L/(N_x - 1)$ ，时间步长为 $dt = T/N_t$ 。

5.6.2 对流-弥散-吸附微分方程的建立

污染物浓度 C 的变化受到对流、弥散和吸附三种过程的影响。这三种过程可以用以下一维对流 - 弥散 - 吸附微分方程来描述:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC \quad (15)$$

其中, C 是污染物的浓度, t 是时间, x 是一维空间距离, v 是水流速度, D 是弥散系数, k 是吸附系数。

方程的左侧代表污染物浓度 C 随时间 t 的变化率, 右侧的三个项分别表示对流过程、弥散过程和吸附过程对有机污染物浓度变化的影响。

对流项 $-v \frac{\partial C}{\partial x}$ 描述了由于水流的对流作用, 污染物在 x 方向上的浓度梯度产生的浓度变化, 这个项在水流速度较大时起主要作用。

弥散项 $D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 描述了由于污染物分子的随机运动产生的浓度变化, 这个项在水流速度较小, 污染物分子运动活跃的情况下起主导作用。

吸附项 $-kC$ 表示由于污染物在水流中的吸附作用而减少的浓度, 这个项与有机污染物的性质和水流中的吸附物质有关。

5.6.3 对流-弥散-吸附微分方程的离散化和求解

求解微分方程是整个建模过程中的重要环节, 即结果能够为揭示有机污染物浓度在河流-地下水系统中的分布和变化情况。

一般来说, 由于微分方程的复杂性, 往往难以找到其解析解, 因此通常需要借助数值方法来求解, 在此采用了有限差分法来求解对流-弥散-吸附方程。有限差分法是一种将微分方程转化为代数方程组的数值方法, 该方法的基本思路是将求解区域离散化, 即将时间和空间分为一系列的网格点, 然后在这些网格点上求解方程。这样, 原来的微分方程就转化为了在每个网格点上的代数方程, 从而可以通过计算机编程进行求解。

为了使用有限差分法需要将微分方程离散化, 对于方程将时间 t 和空间 x 离散化为一系列的网格点, 其中时间步长为 dt , 空间步长为 dx , 对于任意网格点 (i, j) , 其对应的时间和空间坐标分别为 $t = i_{dt}$ 和 $x = j_{dx}$ 。

可以将方程 中的导数用有限差分格式来近似, 得到对应的离散方程, 对于时间导数 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 采用前项差分格式, 对于空间倒数 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 和 $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 采, 用中心差分格式, 即:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx (C_{i+1,j} - C_{i,j}) / dt \quad (16)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx (C_{i,j+1} - C_{i,j-1}) / (2 * dx) \quad (17)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx (C_{i,j+1} - 2 * C_{i,j} + C_{i,j-1}) / (dx^2) \quad (18)$$

...

将上述差分格式带入方程(15), 可以得到离散方程, 然后通过迭代方法来求解。在每个时间步, 首先根据上一个时间步的浓度分布以及对流、弥散和吸附的计算公式, 计算出每个空间点上的浓度变化, 然后更新浓度分布。

具体的迭代过程可以用以下递推公式表示:

$$C_{i+1,j} = C_{i,j} + dt * \left(-v * (C_{i,j+1} - C_{i,j-1}) / (2 * dx) + D * (C_{i,j+1} - 2 * C_{i,j} + C_{i,j-1}) / (dx^2) - k * C_{i,j} \right) \quad (19)$$

公式式(21) 求解微分方程的核心公式, 在每个时间步都会使用这个公式来更新每个空间点的浓度值。

值得注意的是, 上述迭代过程需要一个初始条件, 即初始时刻的浓度分布。在这个模型中, 初始浓度分布是在中心位置设置了有机污染物的浓度, 其余位置浓度均为0, 随着时间的推移有机污染物会在水体中扩散, 并受到对流和吸附的影响。

对于边界条件, 假设系统的边界是完全封闭的, 即没有污染物能够通过系统的边界, 因此在计算过程中需要保证边界上的浓度始终为0。

求解过程可以通过编程语言如Python来实现, 可以创建一个二维数组C来存储每个时间步、每个空间点的浓度值, 然后根据双层循环来实现公式(21)的迭代过程, 其中外层循环对应于时间步, 内层循环对应于空间点。

经过迭代求解后, 可以得到每个时间步、每个空间点的浓度值及污染物在河流—地下水系统中的分布和变化情况, 此外还可以通过绘制等高线图或热力图来直观地展示污染物的分布情况。

总的来说, 数值求解过程是基于有限差分方法的, 通过将微分方程离散化, 并使用适当的差分格式来近似导数, 从而将微分方程转化为可以通过计算机求解的代数方

程，然后通过逐步迭代，可以得到每个时间步、每个空间点的污染物浓度，进而揭示污染物在河流地下水系统中的迁移转化机理。

5.6.4 模型的可视化和解析

微分方程的数值解也可以通过可视化的方式来观察和分析，在本研究中，使用等高线图来展示污染物浓度随时间和空间的变化情况，此外还可以通过数值解析研究各个因素对流弥散和吸附对污染物浓度变化的影响程度，以及这些因素之间的相互作用。

在求解过程中，首先需要设定初始条件，即在时间 $t = 0$ 时。各个空间位置的污染物浓度，然后根据上述的离散微分方程，逐步更新每个时间步长和空间步长处的污染物浓度。

最后可以通过等高线图或者三维图形等方式，对求解结果进行可视化，观察污染物浓度随时间和空间的变化情况，分析每个因素对污染物浓度的影响，为污染控制和治理提供科学依据。

总的来说，对流-弥散-吸附微分方程是一个强大的工具，可以帮助理解和预测有机物污染，在河流-地下水系统中的运移和分布。但也需要注意，这是一个理想化的模型，实际情况可能会受到许多其他因素的影响，如水流的湍流效应、地下水的非均质性、污染物的生物降解等，因此在应用这个模型时，需要结合实际情况对模型进行适当的调整和改进。

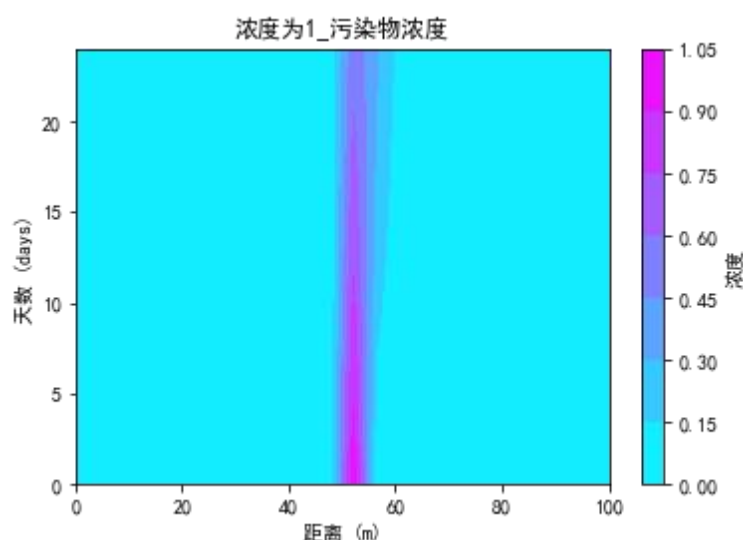


图5.6.4-1 浓度为1的污染物随时间、空间变化的等高线图

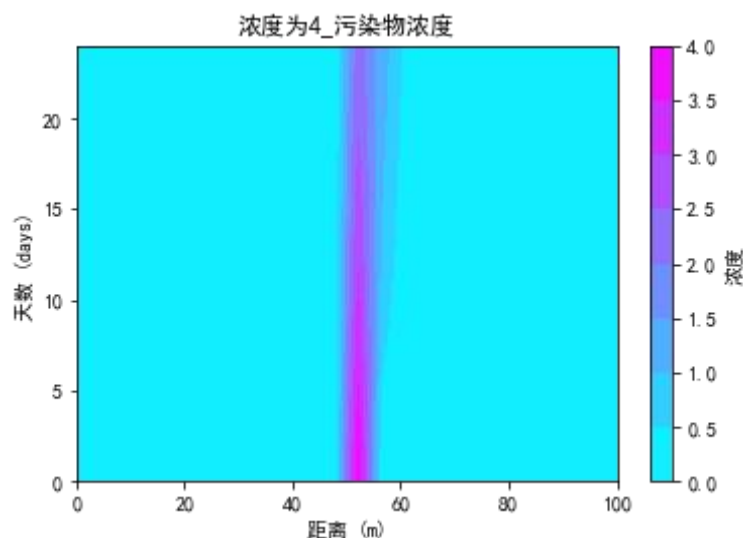


图5.6.4-2 浓度为4的污染物随时间、空间变化的等高线图

(浓度为7和10的污染物随时间、空间变化的等高线图分别见附录-数据可视化图5.6.4-3及图5.6.4-4)

六、问题2模型的建立与求解

6.1 问题 2 分析

对于第二个问题，我们将基于给定的实验数据，对模型进行参数调整和验证。首先，我们将优化微分方程的模型参数，以更准确地描述有机污染物的迁移转化过程。然后，我们将根据四种不同河流沉淀物的吸附动力学数据，重新计算吸附系数 k 值。由于给定的时间数据比较离散，我们将考虑结合插值方法进行数值模拟，最后，我们将对每种有机物在不同状态下的浓度变化情况进行模拟，以验证我们的模型和参数调整的有效性。

6.2 基于对流、弥散试验参数微分方程模型优化

6.2.1 模型建立

在研究有机污染物在河流-地下水系统中的迁移转化机理的过程中，需要考虑包括对流、弥散在内的多种因素。其于给定的有关参数，将对微分方程进行更新，并给出建模步骤与公式。

(1) 参数的单位转化

根据给出的参数值，首先需要将其转化为国际单位系统。平均孔隙流速 $u = 38.67 \text{ cm/d} = 0.3867 \text{ m/d}$ ，地下水渗流流速 $v = 5.01 \text{ cm/d} = 0.0501 \text{ m/d}$ ，渗透系数 $k = 6.32 \text{ m/d}$ ，弥散系数 $D = 0.38 \text{ cm}^2/\text{min} = 0.00038 \text{ m}^2/\text{min} = 0.0228 \text{ m}^2/\text{d}$ ，含水层样品干密度 $\rho = 1.67 \text{ g/cm}^3 = 1670 \text{ kg/m}^3$ ，孔隙度 $n = 37.5\%$ 。

(2) 优化微分方程

根据以上参数，将对流-弥散微分方程进行优化。在这个模型中，假设地下水流速 v 相对于孔隙流 u 来说较小，因此可以忽略其对流的影响。于是得到了优化后的微分方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - kC \quad (20)$$

以上是描述有机污染物在河流-地下水系统中迁移转化机理的微分方程。其中：

- C 是有机污染物的浓度；
- t 是时间；
- x 是空间坐标；
- D 是弥散系数，该值由实验测得，为 $0.38 \text{ cm}^2/\text{min}$ ；
- v 是对流速度，由地下水渗流流速代表， v 为 5.01 cm/d ；
- k 是吸附系数，由实验测得，为 6.32 m/d 。

吸附系数 k 的计算可以通过孔隙度 n 和干密度 ρ 来获得，如下所示：

$$\phi = \frac{n}{(1-\rho)/\rho_w}$$

$$k = k \cdot \phi$$

其中， ρ_w 是水的密度。

6.2.2 模型求解

可以采用有限差分法来求解这个微分方程。首先，将时间和空间进行离散化，然后通过Taylor级数展开法，将微分方程转化为差分方程，最后通过迭代求解差分方程，得到每个时间步长和空间步长处的污染物浓度。

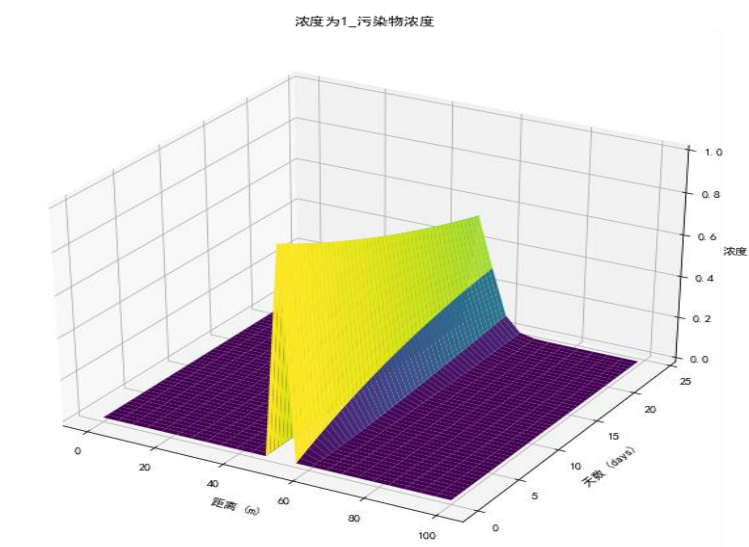


图6.2.2-1 浓度为1的污染物随时间、空间变化的三维示意图

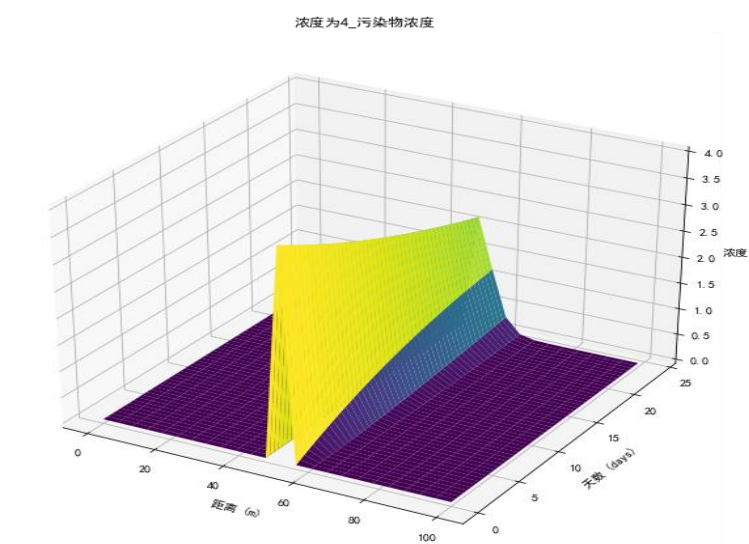


图6.2.2-2 浓度为4的污染物随时间、空间变化的三维示意图

(浓度为7和10的污染物随时间、空间变化的三维示意图见附录_数据可视化图6.2.2-3,6.2.2-4)

6.3基于吸附动力学试验结果微分方程模型优化

6.3.1模型建立

四种不同河流沉积物对初始浓度为 0.5 mg/L 左右的某有机污染物吸附体系的吸附动力学过程及不同吸附时间测得固、液相某有机物的浓度列于表2中。

表2 某有机物在河流 X 段吸附体系中不同时间的液、固相浓度(液 mL/L 、固 mg/kg)

样品 编号 浓度 时间	S1		S2		S3		S4	
	液相	固相	液相	固相	液相	固相	液相	固相
0	0.495		0.495		0.495		0.495	
0.5	0.355	2.30	0.401	1.84	0.225	3.60	0.367	2.18
1.0	0.312	2.73	0.327	2.58	0.086	5.09	0.284	3.01
1.5	0.305	2.80	0.280	3.05	0.080	5.05	0.224	3.61
2.0	0.310	2.75	0.246	3.39	0.078	5.07	0.195	3.90
2.5	0.314	2.71	0.255	3.30	0.068	5.17	0.174	4.11
3.0	0.325	2.60	0.269	3.16	0.085	4.80	0.185	4.00
4.0	0.353	2.32	0.186	2.99	0.093	4.30	0.202	3.83
7.0	0.360	2.25	0.324	2.61	0.138	4.41	0.199	3.86
10	0.359	2.26	0.354	2.31	0.149	4.36	0.197	3.88
13	0.362	2.23	0.349	2.36	0.171	4.14	0.196	3.89
16	0.371	2.14	0.352	2.33	0.169	4.16	0.199	3.86
20	0.365	2.20	0.344	2.41	0.172	4.13	0.198	3.87
24	0.364	2.21	0.347	2.33	0.173	4.12	0.199	3.86

表6.3.1-1表2相关参数计算结果

编号	性质	平均浓度	分配系数	最大吸附量
样品S1	液相	0.34269 mg/L	7.0707	2.0804 mg/kg
	固相	2.4231 mg/Kg		
样品S2	液相	0.31031 mg/L	8.592	2.3558 mg/kg
	固相	2.6662 mg/Kg		
样品S3	液相	0.12977 mg/L	34.6177	4.3625 mg/kg
	固相	4.4923 mg/Kg		
样品S4	液相	0.21685 mg/L	16.9777	3.4647 mg/kg
	固相	3.6815 mg/Kg		

根据表 2 数据，可以观察到四种有机物固相、液相的浓度变化。表 2 可视化结果如下图所示：

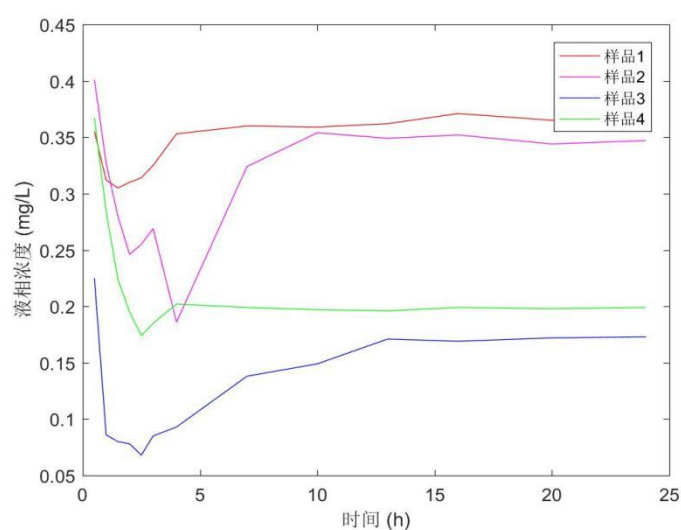


图6.3.1-1 各样品液相浓度随时间变化折线图

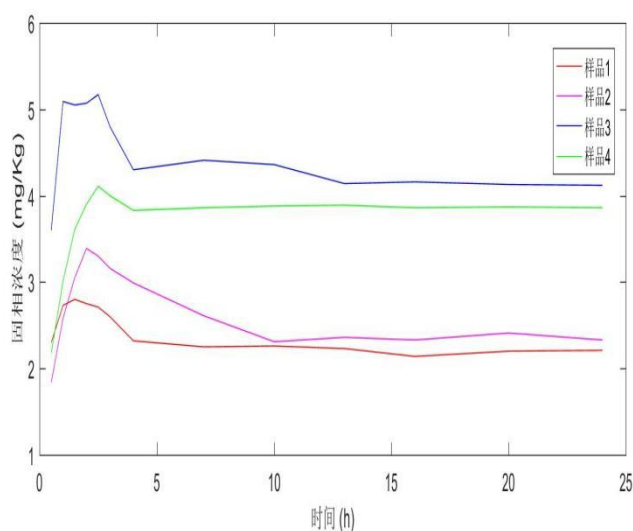


图6.3.1-2 各样品固相浓度随时间变化折线图

以S1有机物液相为例（下称“S1液相”），以下是在给定的时间 T 为24小时内，更新后的建模。

(1) 数据准备

首先，提取出“时间”和“S1液相”的数据，记作 t 和 C 。这些数据都是试验观测到的有机污染物“S1液相”的浓度随时间的变化。

(2) 初始条件

设置 $t=0$ 时刻的污染物浓度 C 为0.495，这是实验测得的初始浓度。

(3) 插值计算

为了得到吸附系数 k ，需要对给出的数据进行插值计算。插值是一种数学处理，使得通过已知的、离散的数据点，在一定范围内求得新的数据点。插值方法的应用广泛，可以用于数据的预测、缺失数据的填补、函效的近似等。在这个过程中，假设在两个已知数据点之间的所有位置，吸附系数 k 都是连续变化的。通过插值计算，可以得到任意时间 t 对应的吸附系数 k 。

插值方法有很多种，例如线性插值、多项式插值、样条插值等。具体选择哪种插值方法，需要根据实际问题和已有数据的特性来决定。在这里，可以假设使用线性插值方法，即假设在两个已知数据点之间，吸附系数 k 是线性变化的。线性插值的公式如下：

插值方法有很多种，例如线性插值、多项式插值、样条插值等。具体选择哪种插值方法，需要根据实际问题和已有数据的特性来决定。在这里，可以假设使用线性插值方法，即假设在两个已知数据点之间，吸附系数 k 是线性变化的。线性插值的公式如下：

$$k_t = k_{t_i} + \frac{(k_{t_{i+1}} - k_{t_i}) \cdot (t - t_i)}{t_{i+1} - t_i} \quad (21)$$

其中： t_i 和 t_{i+1} 是给定据点的时间， k_{t_i} 和 $k_{t_{i+1}}$ 买对应的吸附系数

(4) 吸附系数的迭代计算

对于每个物始依选代证和对应的平衡浓度 C_e ，使用以下公式计算吸附系数 k ：

$$k = \frac{C_{\max}}{C_e - C_{\max}} \cdot \rho \cdot n$$

其中， ρ 是含水层样品的干密度， n 是孔隙度。

(5) 优化建立微分方程模型

有了吸附系数 k 的插值函数之后，可以将其带入到方程6中，得到描述有机污染物“S1液相”的浓度变化的微分方程，可以将其带入到方程6中，得到描述有机污染物“S1液相”的浓度变化的微分方程模型。这个微分方程模型不仅考虑了对流、弥散和吸附等过程，而且还包含了吸附系数 k 随时间的变化，因此，它更准确地描述了有机污染物在河流-地下水系统中的迁移转化过程。得到的微分方程模型如下：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - k_t C$$

在上面方程， k_t 是插值得到的吸附系数随时间的变化函数。这个方程是一个偏微分方程，描述了有机污染物浓度 C 随时间 t 和空间位置 x 的变化规律。这个方程的左边是浓度 C 随时间的变化率，右边则包含了三个部分：

第一部分 $D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 表示浓度 C 随空间位置的一阶变化。这是由于弥散作用导致的；

第二部分 $-v \frac{\partial C}{\partial x}$ 表示浓度 C 随空间位置的一阶变化，这是由于对流作用导致的；

第三部分 $-k_t C$ 表示浓度 C 随时间的变化，这是由于吸附作用导致的。

6.3.2 模型求解

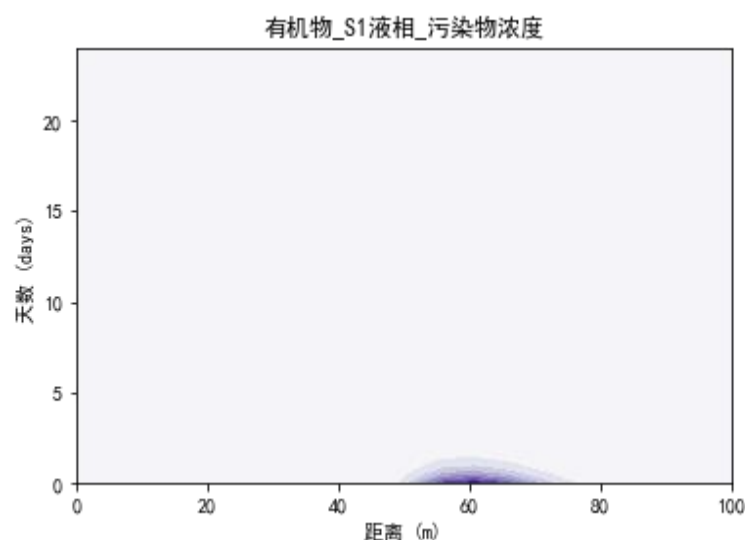


图6.3.2-1 有机污染物“S1液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

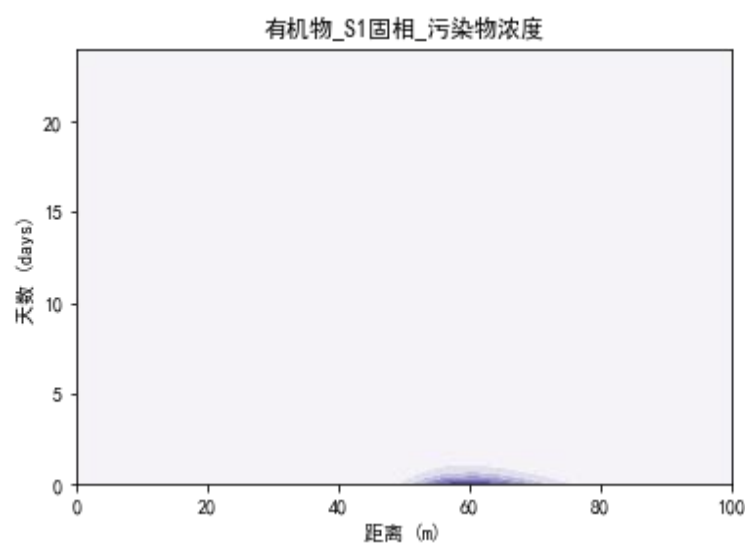


图6.3.2-2 有机污染物“S1固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

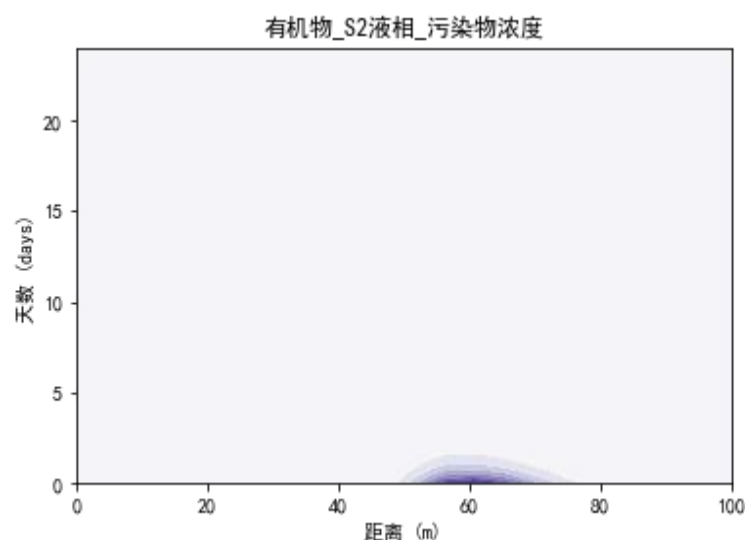


图6.3.2-3 有机污染物“S2液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

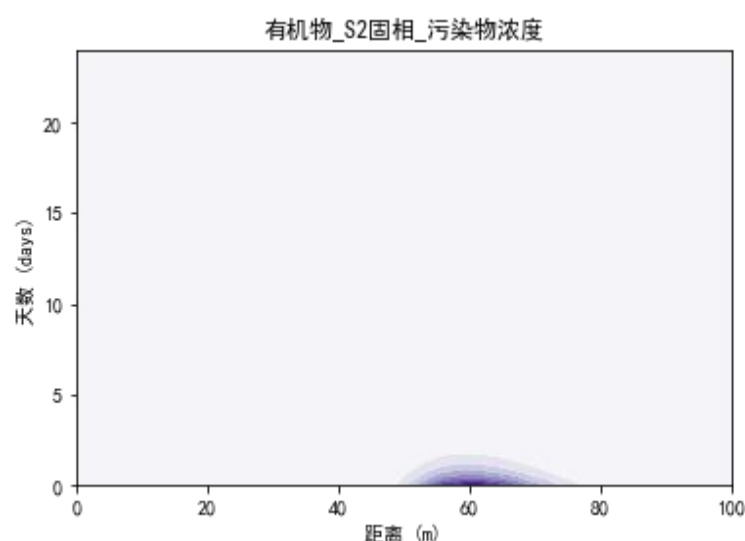


图6.3.2-4 有机污染物“S2固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

(有机污染物“S3液、固相”和“S4液、固相”浓度随时间、空间变化的等高线图。分别见附录-数据可视化图6.3.2-5，图6.3.2-6，图6.3.2-7，图6.3.2-8)

6.4 基于等温平衡吸附试验结果微分方程模型优化

下表为是四种有机物在10种不同初始浓度的某有机污染物24小时的等温平衡吸附试验结果，本题思路以下表的初始决度“和有机物“S1液相”(对应初始浓度24小时后的平衡浓度)为例，通过迭代计算出全部初始浓度与24小时后的平衡浓度的吸附系数 k 值，然后求均值作为吸附系数 k ，并基于方程(20)给出优化后的建模步骤与公式。

表3河流 X 段等温平衡吸附24 h 后液 固相中某有机物浓度(液 ml/L、固 ml/kg)

<div> <div>样品编号</div> <div>平衡浓度</div> <div>初始浓度</div> </div>	S1		S2		S3		S4	
	液相	固相	液相	固相	液相	固相	液相	固相
0.0681	0.0461	0.1702	0.0246	0.1852	0.0424	0.2071	0.0354	0.2772
0.1372	0.0722	0.6005	0.0492	0.8301	0.0654	0.6683	0.0613	0.7101
0.2177	0.1235	0.8921	0.0903	1.224	0.1091	1.036	0.0993	1.134
0.3302	0.2150	1.102	0.1725	1.527	0.2068	1.184	0.1931	1.321
0.4324	0.2951	1.323	0.2563	1.711	0.2614	1.660	0.2528	1.546
0.5338	0.3716	1.572	0.3376	1.912	0.3304	1.984	0.2879	1.781
0.5842	0.3969	1.823	0.3574	2.218	0.3852	1.940	0.3568	2.124
0.6222	0.4547	2.100	0.3701	2.471	0.4065	2.107	0.4195	1.977
0.7062	0.4852	2.160	0.4352	2.660	0.4467	2.545	0.5071	2.461
0.7956	0.5714	2.192	0.5043	2.863	0.5999	2.937	0.5061	2.845

表6.4-1 表3相关参数计算结果

样品编号	等温吸附系数 (L/kg)	最大吸附量 (mg/kg)
S1	4.6103	1.1977
S2	6.7691	1.6492
S3	5.7129	1.4722
S4	5.9239	1.4684

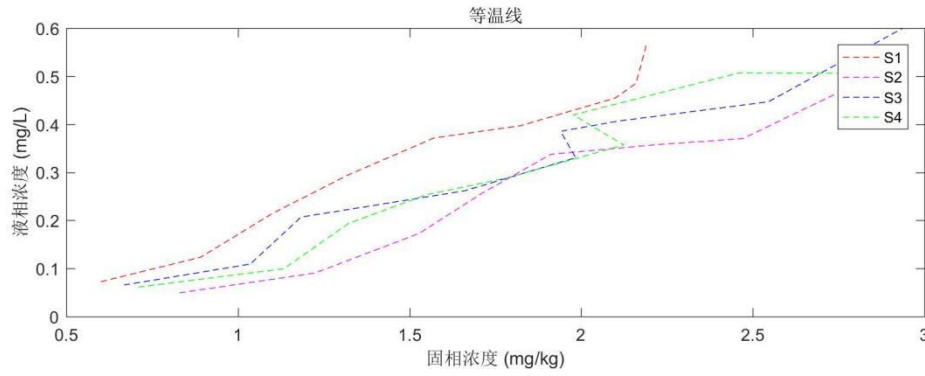


图6.4-1 表3数据可视化折线图

6.4.1模型建立

(1) 数据准备

从表三中提取初始浓度和对应的24小时平衡浓度数据，分别记作 C_0 和 C_e 。这些数据是通过实验测得的初始浓度与平衡浓度之间的关系。

(2) 吸附系数的迭代计算

对于每个初始浓度 C_{\max} 和对应的平衡浓度 C_e ，使用以下公式计算吸附系数：

$$k = \frac{C_{\max}}{(C_e - C_{\max})} \cdot \rho \cdot n$$

其中： ρ 是含水层样品的干密度， n 是孔隙度

(3) 平均吸附系数的求取

将所有吸附系数 k 进行求和，并除以吸附系数的数量得到平均吸附系数 k 的估计值。

$$k = \frac{k_1 + k_2 + \cdots + k_n}{n}$$

(4) 微分方程模型的建立

将求得平均吸附系数 k 代入到方程 6 得到描述有机污染物“S1液相”的浓度变化的微分方程模型。根据前文的描述，方程6可以表示为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - kC$$

其中， C 是有机污染物“S1液相”的浓度， t 是时间， x 是空间坐标， D 是弥散系数， v 是对流速度， k 是吸附系数。

6.4.2模型求解

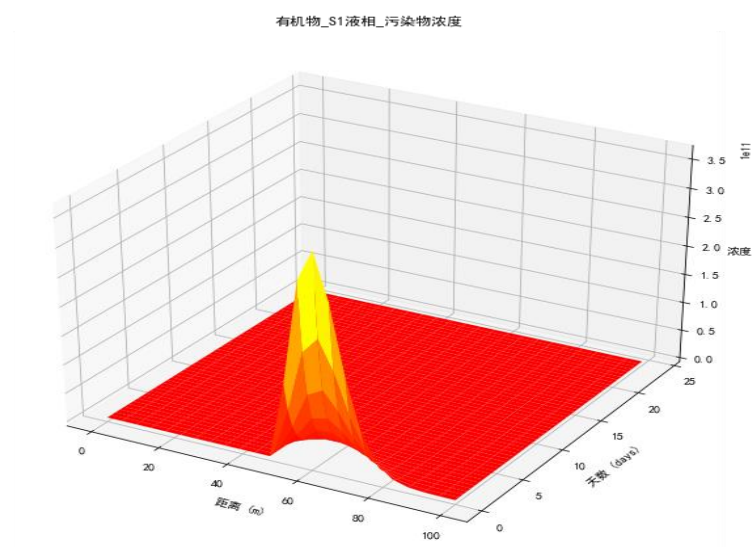


图6.4.2-1 有机污染物“S1液相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

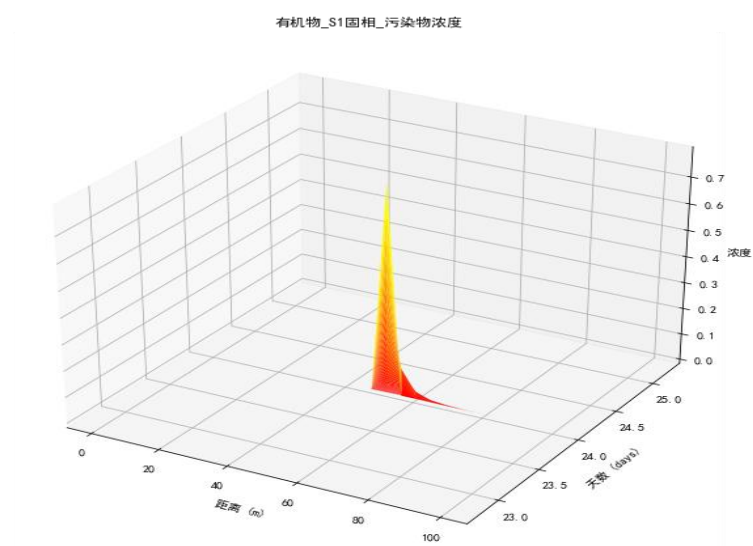


图6.4.2-2 有机污染物“S1固相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

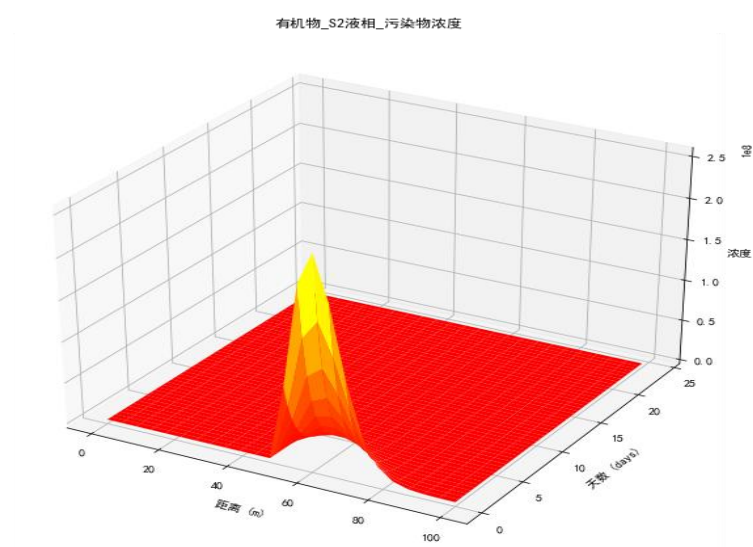


图6.4.2-3 有机污染物“S2液相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

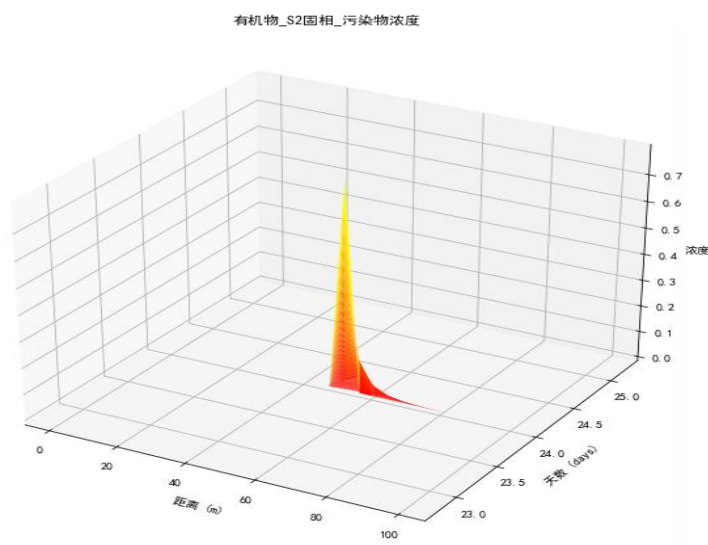


图6.3.2-4 有机污染物“S2固相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

(有机污染物“S3液、固相”和“S4液、固相”浓度随时间、空间变化的三维示意图分别见附录-数据可视化图6.3.2-5，图6.3.2-6，图6.3.2-7，图6.3.2-8)

七、问题3模型建立与求解

7.1 问题 3 分析

对于第三个问题，我们将在微分方程模型中引入生物降解过程，以研究微生物对有机污染物的降解特性。具体地，我们将在原有的对流-弥散-吸附模型中添加生物降解项，形成新的数学模型。然后，我们将根据河流等温平衡吸附24小时后的浓度变化数据，通过迭代计算方法求解吸附系数 k 值。最后，我们将求得的 k 值的均值作为新模型的吸附系数 k ，以此来更新我们的数学模型。

7.2 基于生物降解对对流-弥散-吸附微分方程模型建立

表4 0.483mg/L有机污染物对应的微生物降解过程

浓度	微生物浓度	有机物浓度比	天数
0.483	1.50E+07	1	0
0.479	1.70E+07	0.991718427	1
0.452	2.00E+07	0.935817805	2
0.418	2.50E+07	0.865424431	3
0.371	3.00E+07	0.768115942	4
0.342	3.30E+07	0.708074534	5
0.319	3.50E+07	0.660455487	6
0.311	3.70E+07	0.64389234	7
0.309	3.70E+07	0.639751553	8

根据表4数据，可以观察得出如下四种基于生物降解相关指标与时间的关系模型：

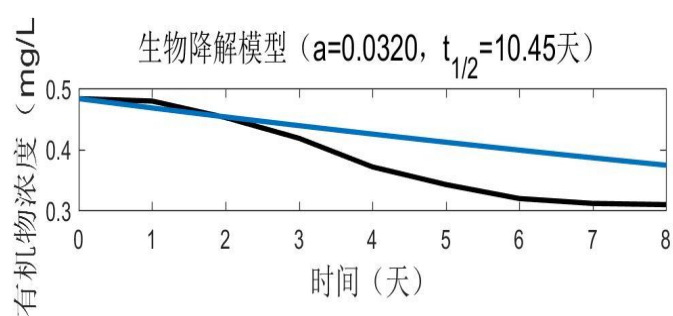


图7.2-1 生物降解速率模型

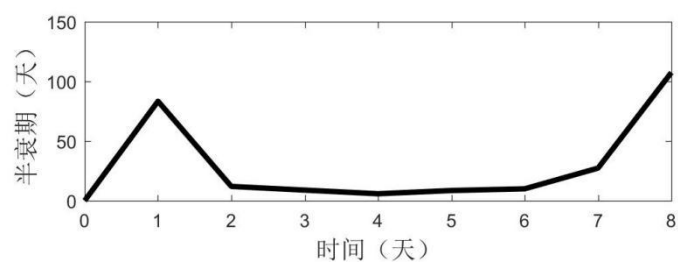


图7.2-2 生物降解速率及有机物浓度比值变化分析

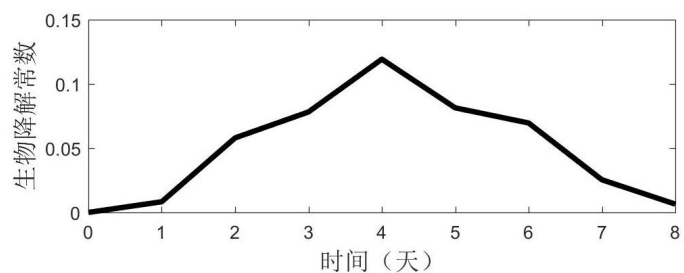


图 7.2-3 生物降解速率常数与时间的关系曲线

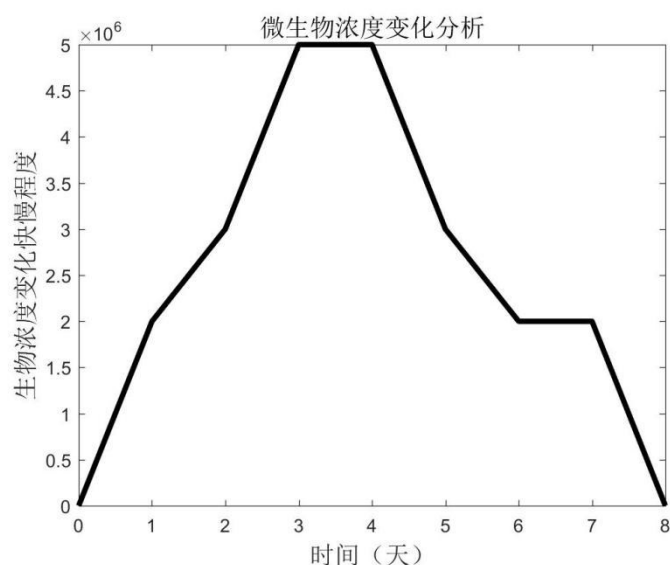


图7.2-4生物浓度变化快慢与时间的关系曲线

为了考虑生物降解对有机污染物转化的影响，修改了之前的微分方程模型，添加了生物降解项。假设生物降解速率与微生物浓度 M 和有机物浓度 C 之间存在线性关系则可以得到如下更新的微分方程模型：

$$\frac{dC}{dt} = -(u+v)\frac{C-C_L}{dx} + D\frac{C_R-2C+C_L}{dx^2} - kC - \mu CM$$

其中， C 表示有机污染物的浓度， t 表示时间， x 表示空间坐标， u 表示对流速度， v 表示渗流速度， D 是弥散系数， k 是吸附系数， μ 是生物降解速率常数， C_L 和 C_R 分别表示相邻位置的浓度， M 表示微生物浓度。^[5]

该微分方程模型综合考虑了对流、弥散、吸附和生物降解等多个过程对有机污染物转化的影响。对流项描述了有机污染物在水流中的移动，弥散项考虑了有机污染物在介质中的扩散过程，吸附项描述了有机污染物与介质颗粒之间的相互作用，而生物降解项表示了微生物降解有机污染物的速率。

7.3 基于生物降解对对流-弥散-吸附微分方程模型求解

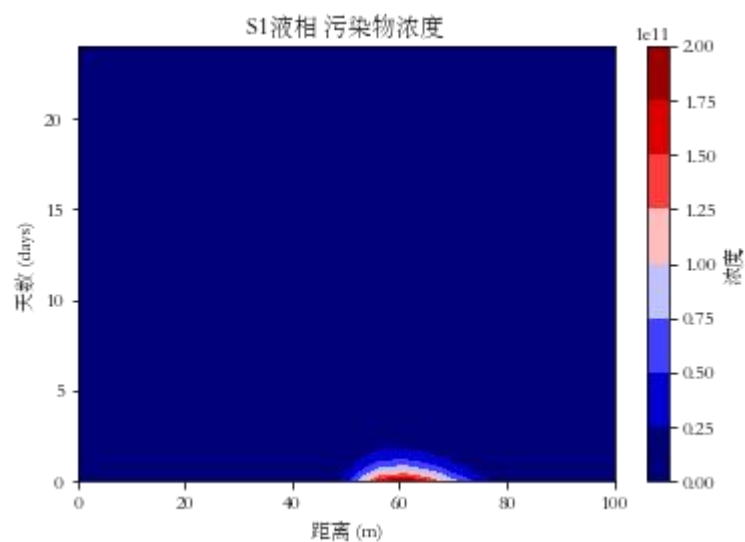


图7.31 有机污染物“S1液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

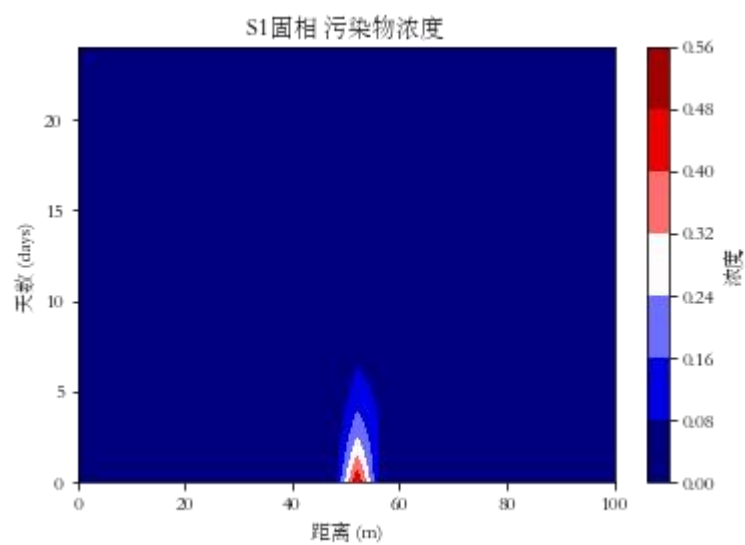


图7.3-2 有机污染物“S1固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

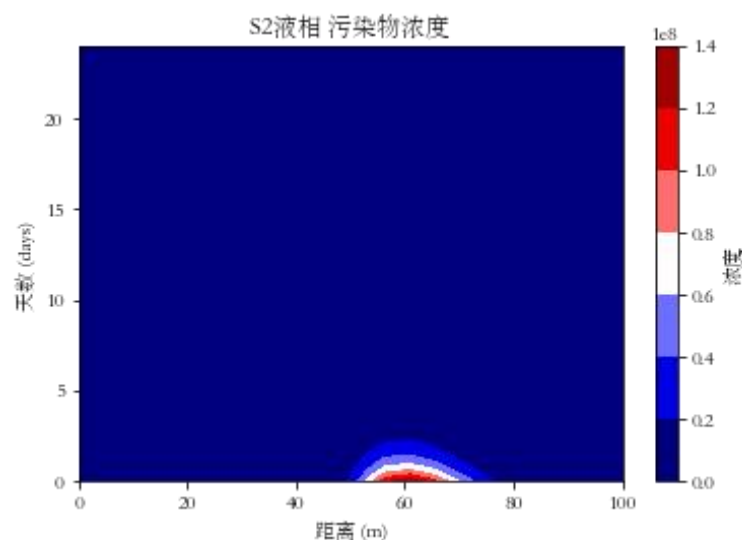


图7.3-3 有机污染物“S2液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

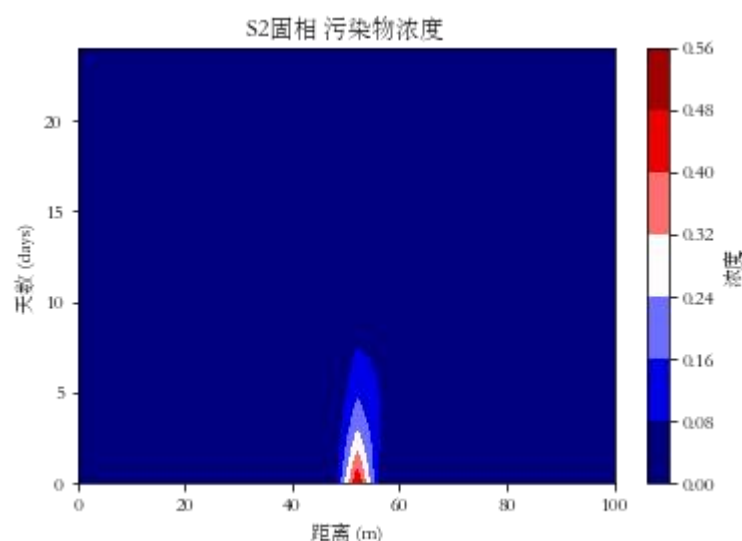


图7.3-4 有机污染物“S2固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

(有机污染物“S3液、固相”和“S4液、固相”浓度随时间、空间变化的等高线图分别见附录-数据可视化图7.3-5，图7.3-6，图7.3-7，图7.3-8)

八、模型总结与推广

8.1模型优势

1. **综合性：**模型综合考虑了对流、弥散、吸附和生物降解等多个过程的影响，能够更全面地描述有机污染物的转化过程。
2. **灵活性：**模型可以根据实际情况调整和拓展，灵活应用于不同的研究对象和研究目的。

3. **实用性:** 模型的参数可以通过实验测定或文献报道获得, 具有一定的实用性和可操作性。
4. **数值求解:** 模型采用数值方法进行求解, 能够获得有机污染物浓度随时间和空间变化的数值解, 提供了更直观的结果。

8.2 模型劣势

1. **简化性:** 模型中的假设和简化使其能够更易于处理和求解, 但可能无法准确描述复杂的现实情况, 对于特定的系统和环境条件, 模型需要进行适当的修正和调整。
2. **参数确定:** 模型中的参数需要通过实验测定或文献报道获取, 参数的准确性和可靠性对于模型的精度和适用性具有重要影响, 因此需要合理选择和确定参数。
3. **缺乏时空变异性考虑:** 模型在对流速度、渗流速度等参数的确定上, 通常采用常数值或均分分布假设, 无法充分考虑实际情况下河流-地下水系统的时空变异性, 这可能限制了模型的适用性。
4. **生物降解速率的线性假设:** 模型假设生物降解速率与微生物浓度和有机物浓度之间存在线性关系, 这在一些情况下可能不准确, 因为生物降解速率可能受到多种因素的复杂影响, 如营养物质的供应、温度、 pH 值等。

8.3 模型总结与展望

为了克服模型劣势, 可以考虑以下改:

1. **引入时空变异性:** 对于实际价况中存在时空变异性的河流-地下水系统, 可以进一步研究和采集更多的数据, 以更准确地确定对流速度、渗流速度等参数, 并将其考虑到模型中。可以利用地质信息、水文监测数据等多源数据, 采用地统计学方法或空间插值技术来描述时空变异性。
2. **考虑非线性生物降解:** 对于复杂的生物降解过程, 可以引入更为准确的生物降解速率模型, 考电做生物浓度、有机物浓度以及其他环境因素的非线性关系。可以基于实验数据或文献研究来拟合生物降解速率模型, 并将其集成到微分方程模型中。
3. **结合实测数据优化参数:** 通过与实际的观测数据进行对比和校正, 可以优化模型中的参数, 提高模型的适用性和准确性。可以利用参数优化算法, 如最小二乘法或贝叶斯推断等, 对模型中的参数进行估计和调整, 以使模型的输作更加符合实测数据。

4. **进一步验证和验证模型：**通过与更多实际数据的对比和验证，可以进一步评估模型的准确性和可靠性。可以进行现场监测和采样，获取更多的观测数据，并与模型的预测结果进行对比，以验证模型的适用性。

综上所述，本文针对河流-地下水系统中有机污染物的转化问题，建立了一个微分方程模型，模型基于对流-弥散-吸附-生物降解的微分方程，综合考虑了多个影响因素，能够较好地描述河流-地下水系统中有机污染物的转化过程，同时引入了生物降解项，考虑了微生物的作用，能够更准确地模拟有机污染物的降解过程，提供了更真实的结果，模型采用数值方法进行求解，可以获得有机污染物浓度随时间和空间变化的数值求解，为深入理解有机污染物的转化机理提供了便利。

参考文献

- [1] 郝丽雯. 地下水污染迁移模拟及防控技术研究[D].吉林化工学院,2019.
- [2] 黄冠华,黄权中,詹红兵等.均质介质中污染物迁移的分数微分对流-弥散模拟[J].中国科学(D辑:地球科学),2005(S1):249-254.
- [3] 生态环境部环境工程评估中心.环境影响评价技术方法[M].北京.中国环境出版社.2022.271-273
- [4] Krasil'shchik I. S. and Morozov O. I.. The Equation of Filtration for Real Gases: Group Classification, Exact Solutions, Conservation Laws, and Differential Invariants[J]. Lobachevskii Journal of Mathematics, 2023, 43(10) : 2781-2784.
- [5] NiMaofei,Li Siyue. Ultraviolet humiclike component contributes to riverine dissolved organic matter biodegradation[J]. Journal of Environmental Sciences,2023,124

一、代码

1. 河流-地下水系统有机污染物浓度扩散微分方程求解

```
import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

import matplotlib.pyplot as plt

plt.rcParams["font.sans-serif"]=["SimHei"]

plt.rcParams["axes.unicode_minus"]=False

for dd in range(1,13,3):

    # 模型参数

    L = 100 # 系统长度 (单位: m)

    Nx = 24 # 空间离散化点数

    T = 24 # 模拟时间 (单位: 天)

    Nt = 1000 # 时间离散化步数

    dx = L / (Nx - 1) # 空间步长

    dt = T / Nt # 时间步长

    v = 0.1 # 水流速度 (单位: m/day)

    D = 0.01 # 弥散系数 (单位: m2/day)

    k = 0.001 # 吸附系数 (单位: 1/day)

    # 初始条件

    C0 = np.zeros(Nx) # 初始浓度分布

    C0[int(Nx / 2)] = dd # 在中心位置设置初始浓度为1.0

    # 数值求解

    C = np.zeros((Nt, Nx)) # 存储浓度分布的数组

    C[0, :] = C0

    for t in range(1, Nt):
```

```

for x in range(1, Nx - 1):

    # 对流项

    convective = -v * (C[t-1, x] - C[t-1, x-1]) / dx

    # 弥散项

    dispersive = D * (C[t-1, x+1] - 2 * C[t-1, x] + C[t-1, x-1]) / (dx**2)

    # 吸附项

    adsorption = -k * C[t-1, x]

    # 数值更新

    C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption)

# 绘制浓度随时间和空间的分布图

x = np.linspace(0, L, Nx)

t = np.linspace(0, T, Nt)

X, T = np.meshgrid(x, t)

plt.contourf(X, T, C, cmap='cool')

plt.colorbar(label='浓度')

plt.xlabel('距离 (m)')

plt.ylabel('天数 (days)')

plt.title('浓度为%s_污染物浓度'%dd)

plt.savefig('./Q1/浓度为%s_污染物浓度.jpg'%dd)

plt.show()

```

2. 基于对流、弥散试验参数微分方程模型优化

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.pyplot as plt
plt.rcParams["font.sans-serif"]=["SimHei"]
plt.rcParams["axes.unicode_minus"]=False
for dd in range(1,13,3):
    # 模型参数

    L = 100 # 系统长度 (单位: m)

    Nx = 24 # 空间离散化点数

    T = 24 # 模拟时间 (单位: 天)

    Nt = 1000 # 时间离散化步数

```

```

dx = L / (Nx - 1) # 空间步长
dt = T / Nt # 时间步长
v = 0.1 # 水流速度 (单位: m/day)
D = 0.01 # 弥散系数 (单位: m2/day)
k = 0.001 # 吸附系数 (单位: 1/day)
# 初始条件
C0 = np.zeros(Nx) # 初始浓度分布
C0[int(Nx / 2)] = dd # 在中心位置设置初始浓度为1.0
# 数值求解
C = np.zeros((Nt, Nx)) # 存储浓度分布的数组
C[0, :] = C0
for t in range(1, Nt):
    for x in range(1, Nx - 1):
        # 对流项
        convective = -v * (C[t-1, x] - C[t-1, x-1]) / dx
        # 弥散项
        dispersive = D * (C[t-1, x+1] - 2 * C[t-1, x] + C[t-1, x-1]) / (dx**2)
        # 吸附项
        adsorption = -k * C[t-1, x]
        # 数值更新
        C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption)
# 绘制浓度随时间和空间的分布图
x = np.linspace(0, L, Nx)
t = np.linspace(0, T, Nt)
X, T = np.meshgrid(x, t)
fig = plt.figure(figsize=(10,10))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(X, T, C, cmap='viridis')
ax.set_xlabel('距离 (m)')
ax.set_ylabel('天数 (days)')
ax.set_zlabel('浓度')
ax.set_title('浓度为%s_污染物浓度' % dd)
plt.savefig('./Q2_1/_浓度为%s_污染物浓度.jpg' % dd)
plt.show()

```

3. 基于吸附动力学试验结果微分方程模型优化

```

plt.show()
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
plt.rcParams["font.sans-serif"]=["SimHei"]

```

```

plt.rcParams["axes.unicode_minus"]=False
# 创建数据集
data2 = pd.DataFrame({
    '时间': [0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 4.0, 7.0, 10, 13, 16, 20, 24],
    'S1液相': [0.495, 0.355, 0.312, 0.305, 0.310, 0.314, 0.325, 0.353, 0.360, 0.359, 0.362,
0.371, 0.365, 0.364],
    'S1固相': [0.00001, 2.30, 2.73, 2.80, 2.75, 2.71, 2.60, 2.32, 2.25, 2.26, 2.23, 2.14, 2.20,
2.21],
    'S2液相': [0.495, 0.401, 0.327, 0.280, 0.246, 0.255, 0.269, 0.186, 0.324, 0.354, 0.349,
0.352, 0.344, 0.347],
    'S2固相': [0.00001, 1.84, 2.58, 3.05, 3.39, 3.30, 3.16, 2.99, 2.61, 2.31, 2.36, 2.33, 2.41,
2.33],
    'S3液相': [0.495, 0.225, 0.086, 0.080, 0.078, 0.068, 0.085, 0.093, 0.138, 0.149, 0.171,
0.169, 0.172, 0.173],
    'S3固相': [0.00001, 3.60, 5.09, 5.05, 5.07, 5.17, 4.80, 4.30, 4.41, 4.36, 4.14, 4.16, 4.13,
4.12],
    'S4液相': [0.495, 0.367, 0.284, 0.224, 0.195, 0.174, 0.185, 0.202, 0.199, 0.197, 0.196,
0.199, 0.198, 0.199],
    'S4固相': [0.00001, 2.18, 3.01, 3.61, 3.90, 4.11, 4.00, 3.83, 3.86, 3.88, 3.89, 3.86, 3.87,
3.86]
})

for dd in data2.columns[1:]:
    # 模型参数
    L = 100 # 系统长度 (单位: m)
    Nx = 24 # 空间离散化点数
    T = 24 # 模拟时间 (单位: 天)
    Nt = 1000 # 时间离散化步数
    dx = L / (Nx - 1) # 空间步长
    dt = T / Nt # 时间步长
    # 河流-地下水参数
    u = 38.67 * 0.01 # 平均孔隙流速 (单位: m/day), 将单位转换为cm/d
    v = 5.01 * 0.01 # 地下水渗流流速 (单位: m/day), 将单位转换为cm/d
    D = 0.38 * (1 / 1440) * 0.01**2 # 弥散系数 (单位: cm²/min 转换为 m²/d)
    k = 6.32 * 0.01 # 渗透系数 (单位: m/day), 将单位转换为cm/d
    # 含水层样品的干密度和孔隙度
    ρ = 1.67 # 干密度 (单位: g/cm³)
    n = 0.375 # 孔隙度
    print(dd)
    temp=data2[['时间',dd]]
    # 初始条件
    C0 = np.zeros(Nx) # 初始浓度分布

```

```

C0[int(Nx / 2)] = temp[dd].values[0]# 在中心位置设置初始浓度为1.0
# 数值求解
C = np.zeros((Nt, Nx)) # 存储浓度分布的数组
C[0, :] = C0
# 计算吸附系数
C_max = temp[dd].max() # 最大吸附浓度
Ce = temp[dd].values[-1] # 平衡浓度
k = C_max / (Ce - C_max) * (ρ * n)
print(k)
for t in range(1, Nt):
    for x in range(1, Nx - 1):
        # 对流项
        convective = -(u + v) * (C[t-1, x] - C[t-1, x-1]) / dx
        # 弥散项
        dispersive = D * (C[t-1, x+1] - 2 * C[t-1, x] + C[t-1, x-1]) / (dx**2)
        # 吸附项
        adsorption = -k * (ρ * n * C[t-1, x])
        # 数值更新
        C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption)
# 绘制浓度随时间和空间的分布图
x = np.linspace(0, L, Nx)
t = np.linspace(T, 0, Nt)

X, T = np.meshgrid(x, t)
plt.contourf(X, T, C, cmap='Purples')
plt.xlabel('距离 (m)')
plt.ylabel('天数 (days)')
plt.title('有机物_%s_污染物浓度'%dd)
plt.savefig('./Q2_2/有机物_%s_污染物浓度.jpg'%dd)
plt.show()

```

4. 基于等温平衡吸附试验结果微分方程模型优化

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
plt.rcParams["font.sans-serif"]=["SimHei"] #设置字体
plt.rcParams["axes.unicode_minus"]=False #该语句解决图像中的“-”负号的乱码问题
# 创建数据集
data3 = pd.DataFrame({
    '初始浓度': [0.0681, 0.1372, 0.2177, 0.3302, 0.4324, 0.5338, 0.5842, 0.6222, 0.7062,
0.7956],

```

```

'S1液相': [0.0461, 0.0722, 0.1235, 0.2150, 0.2951, 0.3716, 0.3969, 0.4547, 0.4852,
0.5714],
'S1固相': [0.1702, 0.6005, 0.8921, 1.102, 1.323, 1.572, 1.823, 2.100, 2.160, 2.192],
'S2液相': [0.0246, 0.0492, 0.0903, 0.1725, 0.2563, 0.3376, 0.3574, 0.3701, 0.4352,
0.5043],
'S2固相': [0.1852, 0.8301, 1.224, 1.527, 1.711, 1.912, 2.218, 2.471, 2.660, 2.863],
'S3液相': [0.0424, 0.0654, 0.1091, 0.2068, 0.2614, 0.3304, 0.3852, 0.4065, 0.4467,
0.5999],
'S3固相': [0.2071, 0.6683, 1.036, 1.184, 1.660, 1.984, 1.940, 2.107, 2.545, 2.937],
'S4液相': [0.0354, 0.0613, 0.0993, 0.1931, 0.2528, 0.2879, 0.3568, 0.4195, 0.5071,
0.5061],
'S4固相': [0.2772, 0.7101, 1.134, 1.321, 1.546, 1.781, 2.124, 1.977, 2.461, 2.845]
})

```

```

for ii in data3.columns[1:]:
    # 模型参数
    L = 100 # 系统长度 (单位: m)
    Nx = 24 # 空间离散化点数
    T = 24 # 模拟时间 (单位: 天)
    Nt = 1000 # 时间离散化步数
    dx = L / (Nx - 1) # 空间步长
    dt = T / Nt # 时间步长
    # 河流-地下水参数
    u = 38.67 * 0.01 # 平均孔隙流速 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
    v = 5.01 * 0.01 # 地下水渗流流速 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
    D = 0.38 * (1 / 1440) * 0.01**2 # 弥散系数 (单位: cm²/min 转换为 m²/d)
    k = 6.32 * 0.01 # 渗透系数 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
    # 含水层样品的干密度和孔隙度
    ρ = 1.67 # 干密度 (单位: g/cm³)
    n = 0.375 # 孔隙度
    print(ii)
    temp=data3[['初始浓度',ii]]
    k_list=[]
    for i in range(temp.shape[0]):
        # 计算吸附系数
        C_max=temp.iloc[i,0]
        Ce=temp.iloc[i,1] # 平衡浓度
        k = C_max / (Ce - C_max) * ( ρ * n)
        k_list.append(k)
    k=np.mean(k_list)
    # 初始条件

```

```

C0 = np.zeros(Nx) # 初始浓度分布
C0[int(Nx / 2)] = temp.iloc[i,0]# 在中心位置设置初始浓度为1.0
# 数值求解
C = np.zeros((Nt, Nx)) # 存储浓度分布的数组
C[0, :] = C0
for t in range(1, Nt):
    for x in range(1, Nx - 1):
        # 对流项
        convective = -(u + v) * (C[t-1, x] - C[t-1, x-1]) / dx
        # 弥散项
        dispersive = D * (C[t-1, x+1] - 2 * C[t-1, x] + C[t-1, x-1]) / (dx**2)
        # 吸附项
        adsorption = -k * (rho * n * C[t-1, x])
        # 数值更新
        C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption)
# 绘制浓度随时间和空间的分布图
x = np.linspace(0, L, Nx)
t = np.linspace(T, 0, Nt)
if '固' in ii:
    # 绘制浓度随时间和空间的分布图
    x = np.linspace(0, L, Nx)
    t = np.linspace(0, T, Nt)
else:
    # 绘制浓度随时间和空间的分布图
    x = np.linspace(0, L, Nx)
    t = np.linspace(T, 0, Nt)
    X, T = np.meshgrid(x, t)

fig = plt.figure(figsize=(10,10))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(X, T, C, cmap='autumn')
ax.set_xlabel('距离 (m)')
ax.set_ylabel('天数 (days)')
ax.set_zlabel('浓度')
plt.title('有机物_%s_污染物浓度'%ii)
plt.savefig('./Q2_3/_有机物_%s_污染物浓度.jpg'%ii)
plt.show()

```

5. 基于生物降解对流-弥散-吸附微分方程模型求解

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

```

```

import pandas as pd
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['STSong']
plt.rcParams['axes.unicode_minus'] = False

# 创建数据集
data3 = pd.DataFrame({
    '初始浓度': [0.0681, 0.1372, 0.2177, 0.3302, 0.4324, 0.5338, 0.5842, 0.6222, 0.7062,
0.7956],
    'S1液相': [0.0461, 0.0722, 0.1235, 0.2150, 0.2951, 0.3716, 0.3969, 0.4547, 0.4852,
0.5714],
    'S1固相': [0.1702, 0.6005, 0.8921, 1.102, 1.323, 1.572, 1.823, 2.100, 2.160, 2.192],
    'S2液相': [0.0246, 0.0492, 0.0903, 0.1725, 0.2563, 0.3376, 0.3574, 0.3701, 0.4352,
0.5043],
    'S2固相': [0.1852, 0.8301, 1.224, 1.527, 1.711, 1.912, 2.218, 2.471, 2.660, 2.863],
    'S3液相': [0.0424, 0.0654, 0.1091, 0.2068, 0.2614, 0.3304, 0.3852, 0.4065, 0.4467,
0.5999],
    'S3固相': [0.2071, 0.6683, 1.036, 1.184, 1.660, 1.984, 1.940, 2.107, 2.545, 2.937],
    'S4液相': [0.0354, 0.0613, 0.0993, 0.1931, 0.2528, 0.2879, 0.3568, 0.4195, 0.5071,
0.5061],
    'S4固相': [0.2772, 0.7101, 1.134, 1.321, 1.546, 1.781, 2.124, 1.977, 2.461, 2.845]
})

# 创建数据集
data4 = pd.DataFrame({
    '浓度': [0.483, 0.479, 0.452, 0.418, 0.371, 0.342, 0.319, 0.311, 0.309],
    '微生物浓度': [1.50E+07, 1.70E+07, 2.00E+07, 2.50E+07, 3.00E+07, 3.30E+07,
3.50E+07, 3.70E+07, 3.70E+07],
    '有机物浓度比': [1, 0.991718427, 0.935817805, 0.865424431, 0.768115942,
0.708074534, 0.660455487, 0.64389234, 0.639751553],
    '天数': [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]
})

from scipy.interpolate import interp1d

for ii in data3.columns[1:]:

    # 模型参数
    L = 100 # 系统长度 (单位: m)
    Nx = 24 # 空间离散化点数
    T = 24 # 模拟时间 (单位: 天)
    Nt = 1000 # 时间离散化步数
    dx = L / (Nx - 1) # 空间步长

```



```

dt = T / Nt # 时间步长

# 河流-地下水参数
u = 38.67 * 0.01 # 平均孔隙流速 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
v = 5.01 * 0.01 # 地下水渗流流速 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
D = 0.38 * (1 / 1440) * 0.01**2 # 弥散系数 (单位: cm²/min 转换为 m²/d)
k = 6.32 * 0.01 # 渗透系数 (单位: m/day) , 将单位转换为cm/d
μ = 0.01 # 生物降解速率常数
# 含水层样品的干密度和孔隙度
ρ = 1.67 # 干密度 (单位: g/cm³)
n = 0.375 # 孔隙度
print(ii)
temp=data3[['初始浓度',ii]]

k_list=[]
for i in range(temp.shape[0]):
    # 计算吸附系数
    C_max =temp.iloc[i,0] # 最大吸附浓度
    Ce = temp.iloc[i,1] # 平衡浓度
    k = C_max / (Ce - C_max) * ( ρ * n)
    k_list.append(k)
k=np.mean(k_list)

# 初始条件
C0 = np.zeros(Nx) # 初始浓度分布
C0[int(Nx / 2)]=0.483# 在中心位置设置初始浓度为1.0
# 数值求解
C = np.zeros((Nt, Nx)) # 存储浓度分布的数组
C[0, :] = C0
# 创建插值函数
# 时间插值
interp_func = interp1d(data4['天数'], data4['浓度'], kind='quadratic')
time_interp = np.linspace(0, T, Nt)
for t in range(1, Nt):
    for x in range(1, Nx - 1):
        # 对流项
        convective = -(u + v) * (C[t-1, x] - C[t-1, x-1]) / dx
        # 弥散项
        dispersive = D * (C[t-1, x+1] - 2 * C[t-1, x] + C[t-1, x-1]) / (dx**2)
        # 吸附项

```

```

        adsorption = -k * ( ρ  * n * C[t-1, x])
        # 生物降解项
        bio_degradation = -μ  * C[t-1, x] * interp_func(np.clip([t * dt], 0, data4["浓
度"].iloc[-1]))
        # 数值更新
        C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption +
bio_degradation)
        ## 数值更新
        # C[t, x] = C[t-1, x] + dt * (convective + dispersive + adsorption)

# 绘制浓度随时间和空间的分布图
x = np.linspace(0, L, Nx)
t = np.linspace(T, 0, Nt)
if '固' in ii:
    # 绘制浓度随时间和空间的分布图
    x = np.linspace(0, L, Nx)
    t = np.linspace(0, T, Nt)
else:
    # 绘制浓度随时间和空间的分布图
    x = np.linspace(0, L, Nx)
    t = np.linspace(T, 0, Nt)

X, T = np.meshgrid(x, t)
plt.contourf(X, T, C, cmap='seismic')
plt.colorbar(label='浓度')
plt.xlabel('距离 (m)')
plt.ylabel('天数 (days)')
plt.title('%s 污染物浓度'%ii)
plt.savefig('./Q3/%s 污染物浓度.jpg'%ii)
plt.show()

```

二、数据可视化图

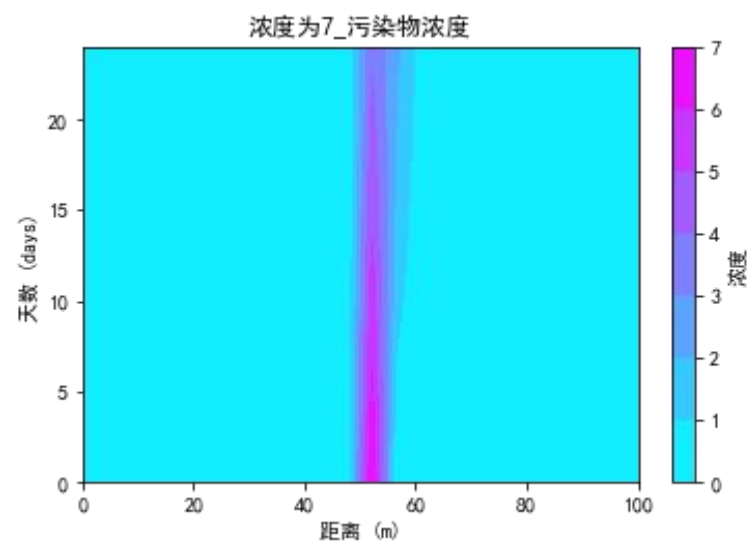


图5.6.4-3 浓度为7的污染物随时间、空间变化的等高线图

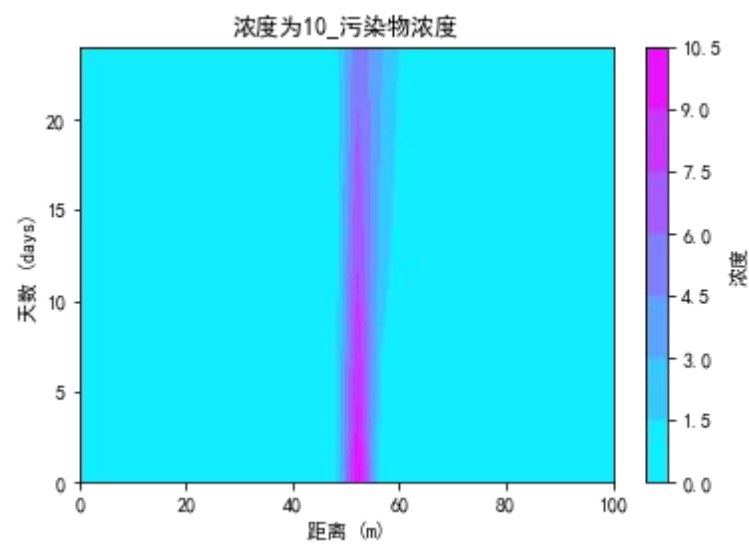


图5.6.4-4 浓度为10的污染物随时间、空间变化的等高线图

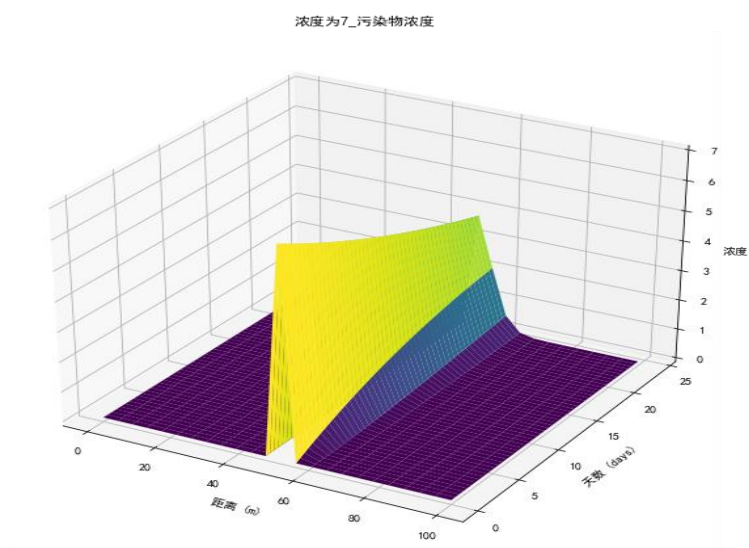


图6.2.2-3 浓度为7的污染物随时间、空间变化的三维示意图

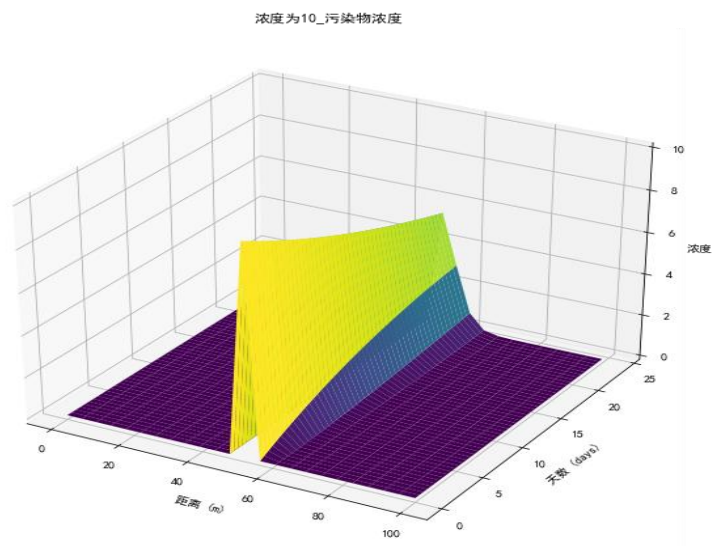


图6.2.2-4 浓度为10的污染物随时间、空间变化的三维示意图

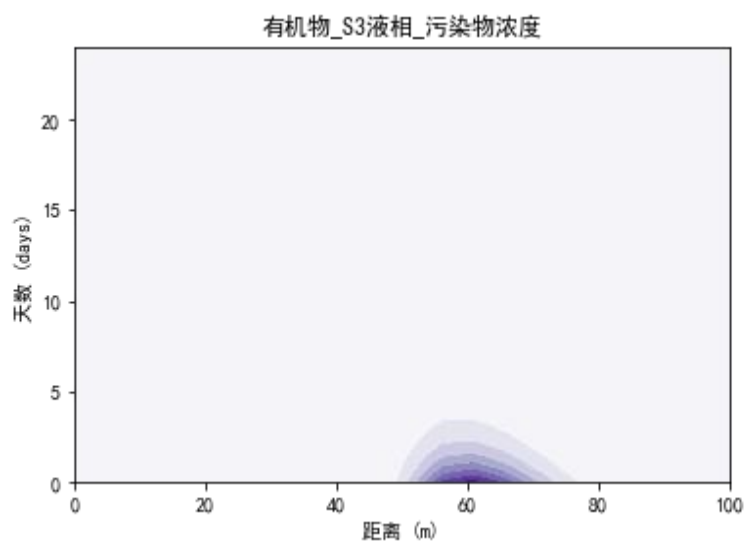


图6.3.2-5 有机污染物“S3液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

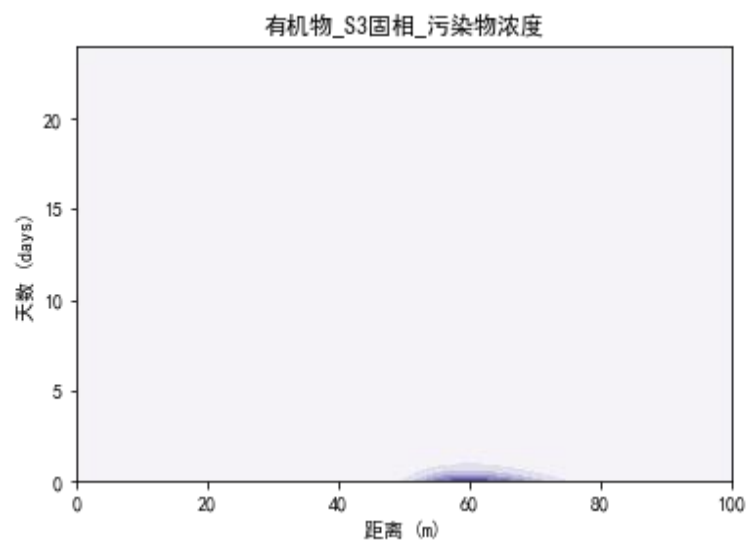


图6.3.2-6 有机污染物“S3固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

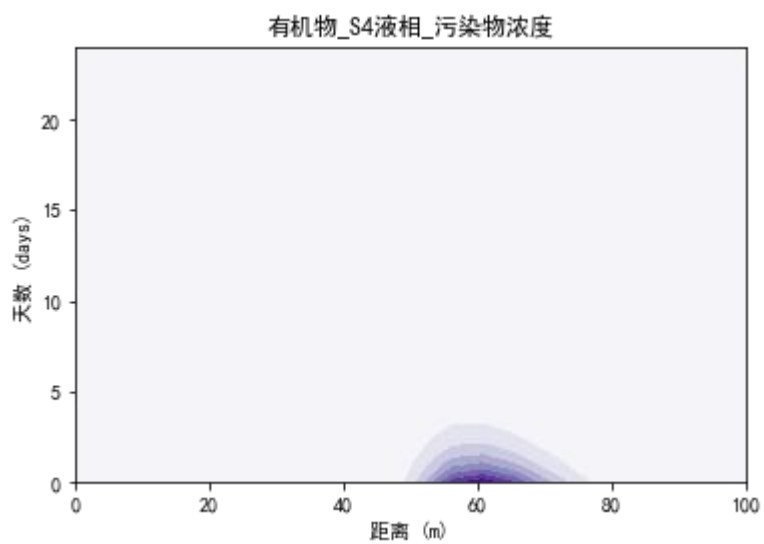


图6.3.2-7 有机污染物“S4液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

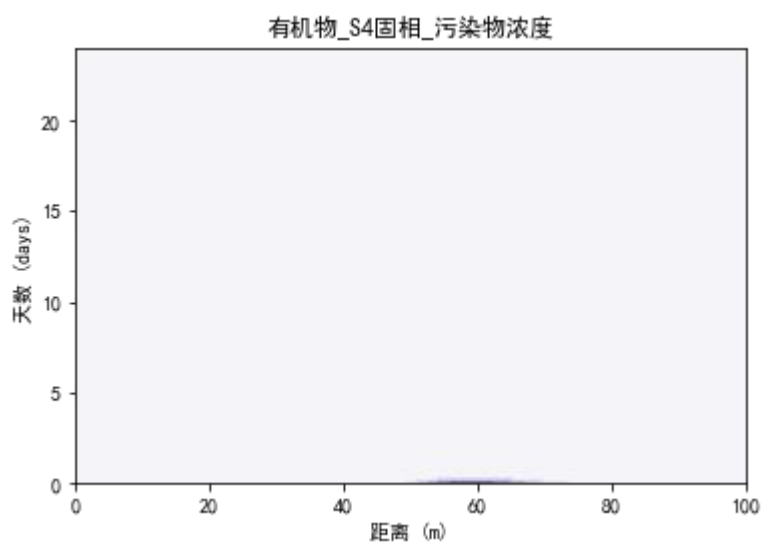


图6.3.2-8 有机污染物“S4固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

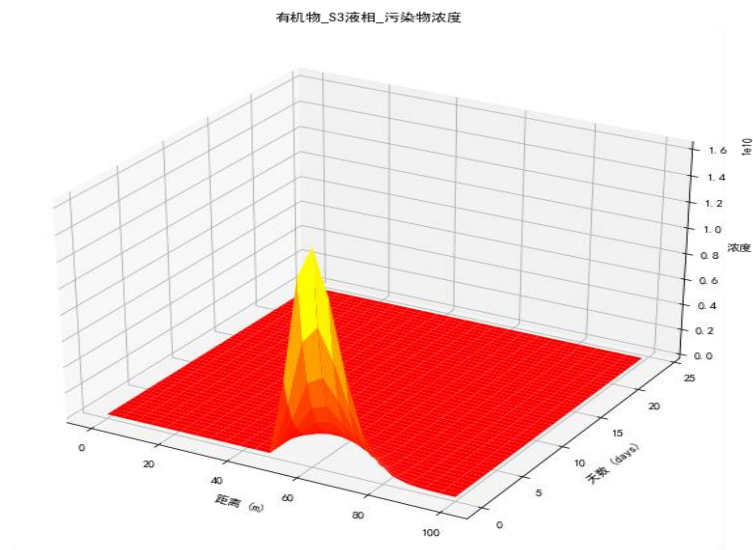


图6.4.2-5 有机污染物“S3液相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

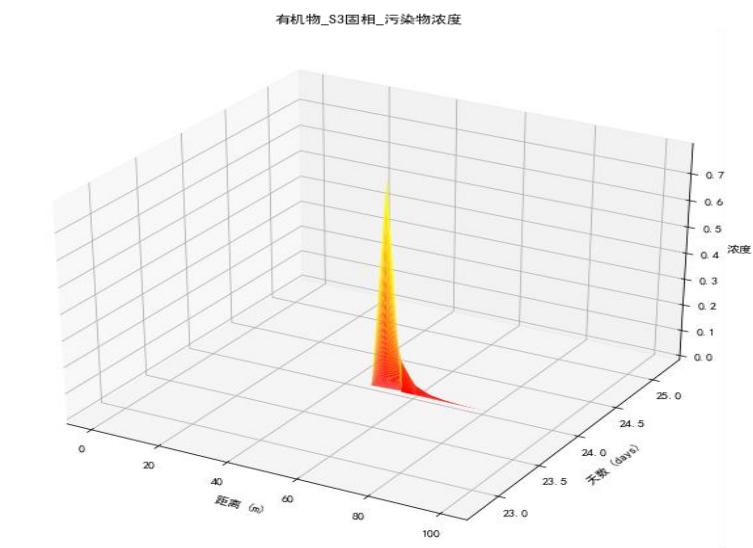


图6.4.2-6 有机污染物“S3固相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

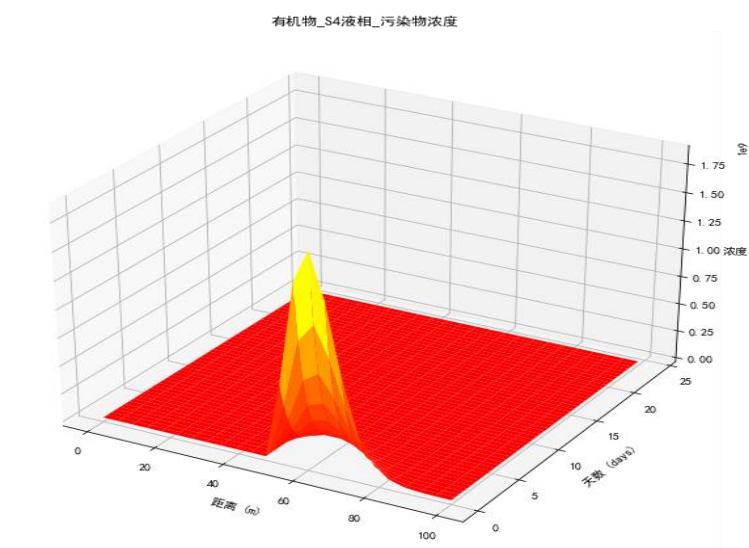


图6.4.2-7 有机污染物“S4液相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

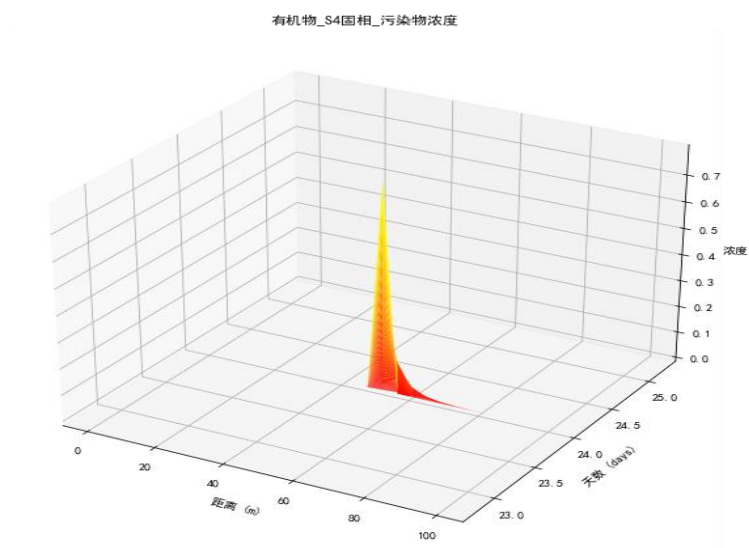


图6.4.2-8 有机污染物“S4固相”浓度随时间、空间变化的三维示意图

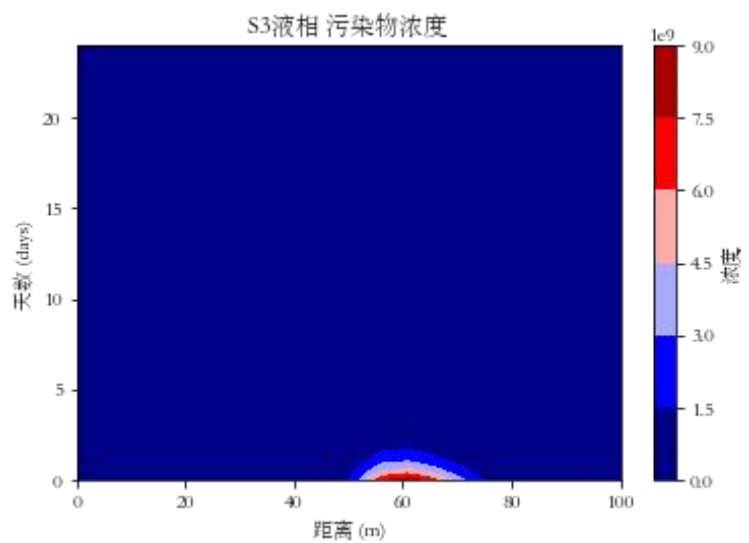


图7.3-5 有机污染物“S3液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

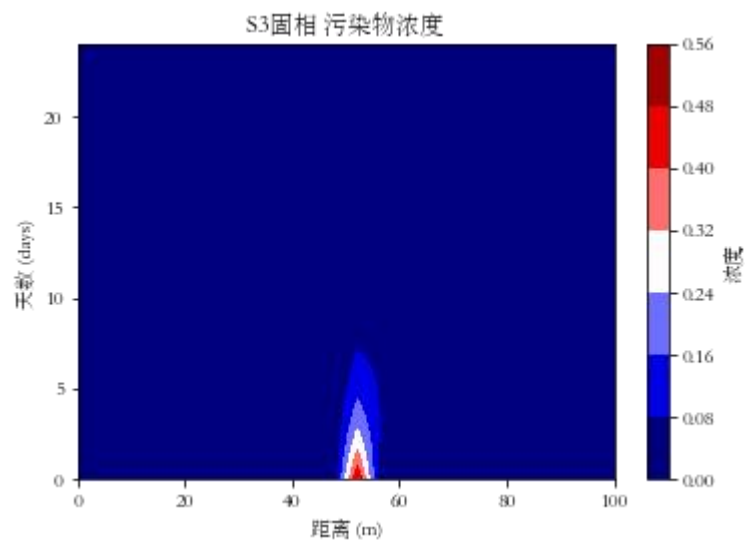


图7.3-6 有机污染物“S3固相”浓度随时间、空间变化的等高线图

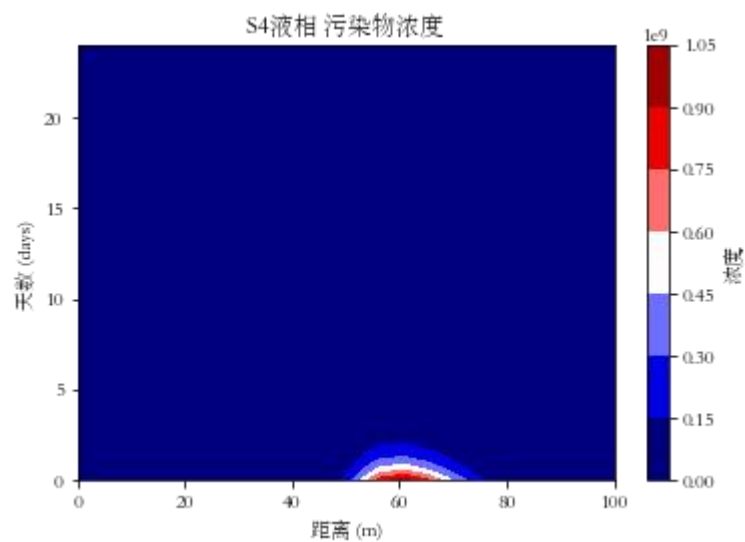


图7.3-7 有机污染物“S4液相”浓度随时间、空间变化的等高线图

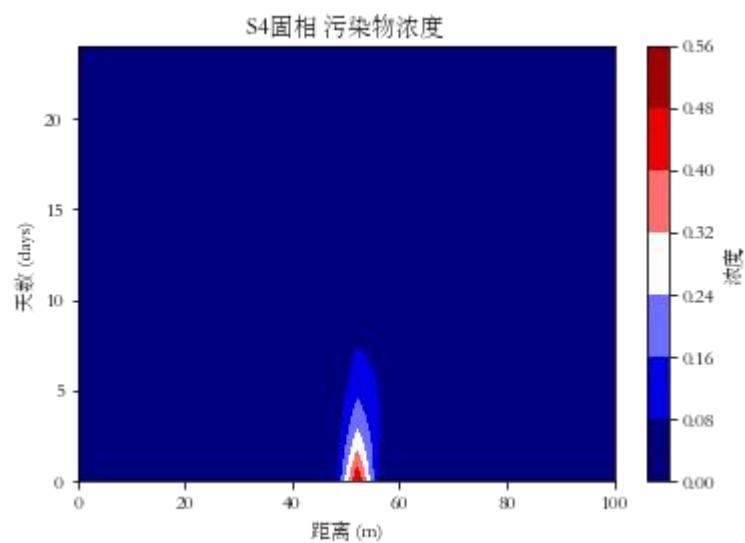


图7.3-8 有机污染物“S4固相”浓度随时间、空间变化的等高线图