

2023 年第八届“数维杯”大学生 数学建模挑战赛论文

目 录 有机污染物在河流地下水系统中的行为特征研究

摘 要

有机污染是河流地下水污染中最难治理和危害最大的，因此对有机污染物行为特征（对流、弥散和吸附）研究具有重要意义。本文主要建立基于对流、弥散和吸附的偏微分方程，有限差分法，Langmuir 等温非线性吸附方程，Monod 模型。实现了有机物在河流地下水中迁移转化规律和生物降解特性的探索。

针对问题一，假设环境为一维方向上的多孔介质。然后利用流体力学数学物理方程，推导出有机物在河流-地下水系统中**对流、弥散和吸附偏微分方程**。

针对问题二的迁移过程研究，基于问题一的微分方程和题目所给实验数据参数，构建**有限差分法**，得到古典差分格式和 Crank-Nicolson 差分格式。利用 MATLAB 模拟计算**偏微分数值解**作为对流-弥散过程的实验数据。发现有机污染物浓度在时间方向上先快速减少，后趋于稳定。在位置方向上呈现**线性和非线性减少两种结果**，据此现象，本文猜测有机污染物在迁移过程中，介质对其有吸附转化作用。最后为验证模拟数据的可靠性，对模拟的实验数据使用回归拟合，发现拟合系数与题给系数接近，说明模型可靠。

针对问题二的吸附过程研究，建立了固、液介质中有机物量变化的可视化分析模型，得出有机污染物在等温非平衡条件下经历了**快速吸附和慢速平衡吸附两阶段**。其次构建**Langmuir 等温非线性吸附方程**结合步长搜索法和最小二乘法得出最佳吸附系数后，再次构建有限差分法。证明有机污染物在迁移过程中，介质对其有吸附作用，并且有机物**初始浓度高时吸附转化作用强**。

针对问题三，建立**Monod 模型**，根据所给数据计算生物降解饱和和常数后，分析微生物对该有机污染物的降解特性。得出结论，控制有机物浓度为 3.42ml/L 时可使微生物降解保持最大速率。

关键词：有限差分法；Langmuir 等温非线性吸附方程；Monod 模型

目 录

| | |
|--------------------------------------|----|
| 一、 问题重述 | 1 |
| 1.1 问题背景 | 1 |
| 1.2 问题提出 | 1 |
| 二、 问题分析 | 2 |
| 2.1 问题 1 的分析 | 2 |
| 2.2 问题 2 的分析 | 2 |
| 2.3 问题 3 的分析 | 3 |
| 三、 模型假设 | 4 |
| 四、 定义与符号说明 | 5 |
| 五、 模型的建立与求解 | 6 |
| 5.1 问题 1 的模型建立与求解 | 6 |
| 5.1.1 对流、弥散、吸附模型的建立 | 6 |
| 5.2 问题 2 的模型建立与求解 | 7 |
| 5.2.1 有机污染物对流弥散方程模型的建立 | 7 |
| 5.2.2 有机污染物对流弥散方程差分格式的推导 | 7 |
| 5.2.3 有机污染物对流弥散方程差分格式模拟实验数据 | 9 |
| 5.2.4 差分格式模拟实验数据的准确性验证 | 10 |
| 5.2.5 位移和时间方向上各污染有机物浓度变化规律结果分析 | 11 |
| 5.2.6 有机污染物非等温平衡吸附过程可视化研究 | 13 |
| 5.2.7 等温平衡吸附过程的研究 | 14 |
| 5.2.8 Langmuir 方程构建 | 14 |
| 5.2.9 步长搜索法寻找最优 k_a | 15 |
| 5.3 问题 3 的模型建立与求解 | 16 |
| 5.3.1 Monod 模型的建立 | 16 |
| 5.3.2 Monod 微生物降解模型的求解 | 16 |
| 5.3.3 结果 | 17 |
| 六、 模型的评价及优化 | 19 |
| 6.1 误差分析 | 19 |
| 6.1.1 针对于问题 1 的误差分析 | 19 |
| 6.1.2 针对于问题 2 的误差分析 | 19 |
| 6.1.3 针对于问题 3 的误差分析 | 19 |
| 6.2 模型的优点 | 19 |
| 6.3 模型的缺点 | 19 |

| | |
|-----------|----|
| 参考文献..... | 21 |
| 附 录..... | 22 |

一、问题重述

1.1 问题背景

河流与地下水之间存在着密切的水力联系，河流与地下水的相互转化是自然界普遍存在的一种水文现象，它是水资源的基本属性之一。二者之间不仅发生水量交换，还涉及溶质和污染物的迁移转化。近几十年来，受自然因素和人类活动的影响，河流对地下水系统的影响变得更为显著，二者之间的相互作用机理也更为复杂。这种变化引起了水循环的变化，诱发了一系列生态环境负效应，使得水资源和生态问题更加突出。

河流作为自然界中主要的纳污水体，一旦被污染，往往会在较短时间内导致下游河流的大面积污染，并进一步导致河流补给地下水区域的地下水污染。当河流向地下水补给水量时，一旦河流受到污染，将容易导致地下水以及与河流紧邻的水源地受到不同程度的污染。这将严重影响工农业的正常运作、社会经济的发展和饮水安全。而在地下水中，有机污染物是最难治理和危害最大的问题。河流有机污染对地下水的影响已经成为全球水环境的热点问题，研究其行为特征及其控制治理也是环境科学领域关注的焦点。因此，对于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和实际意义。

1.2 问题提出

试就问题背景及相关数据对有机污染物的迁移和转化规律进行研究和探索，建立数学模型解决以下的问题：

问题一：通过研究相关文献和资料，分析并建立有机污染物在河流-地下水系统对流、弥散和吸附作用的数学模型。

问题二：利用所介绍的内容、试验参数和数据，建立数学模型来研究某种有机污染物在河流-地下水系统中的迁移转化机理。

问题三：生物降解是有机污染物转化的一个重要过程。为了考虑生物降解对有机污染物转化的影响，通过建立恰当的数学模型，并结合已有的试验数据来分析微生物对该有机污染物的降解特性。

二、问题分析

2.1 问题 1 的分析

问题一需要我们查阅关于有机物在河流地下河系统中对流、弥散及吸附作用所用到的相关物理学和数学知识，关于对流、弥散及吸附作用，涉及流体力学下的对流扩散方程，一种基本的运动方程，也是偏微分方程下一个重要方程。我们要结合河流地下河系统的实际情况对方程的结构、参数进行调整和优化。

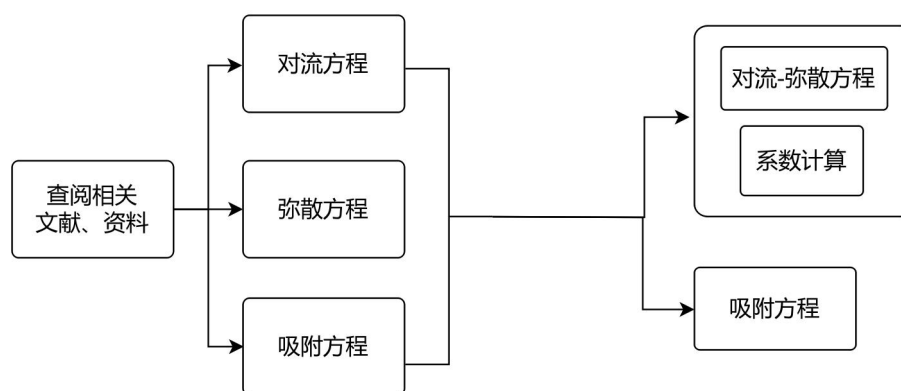


图 2-1 问题 1 流程图

2.2 问题 2 的分析

对于问题二，我们用题给实验有关参数，结合问题一中的微分方程，利用有限差分格式求解微分方程的初边值问题的数值解，拟合验证数据的可靠性后，选取合适的数值解数据作为对流弥散过程的实验数据，对迁移过程的机理进行研究。然后对题目表二数据进行可视化分析出非等温平衡吸附过程有机物的浓度随时间变化规律。最后利用题目表三所给数据拟合出等温平衡过程种，线性或者非线性吸附的参数，最后结合对流弥散方程，建立新的在吸附作用下的微分方程，求出其数值解，并且分析规律。

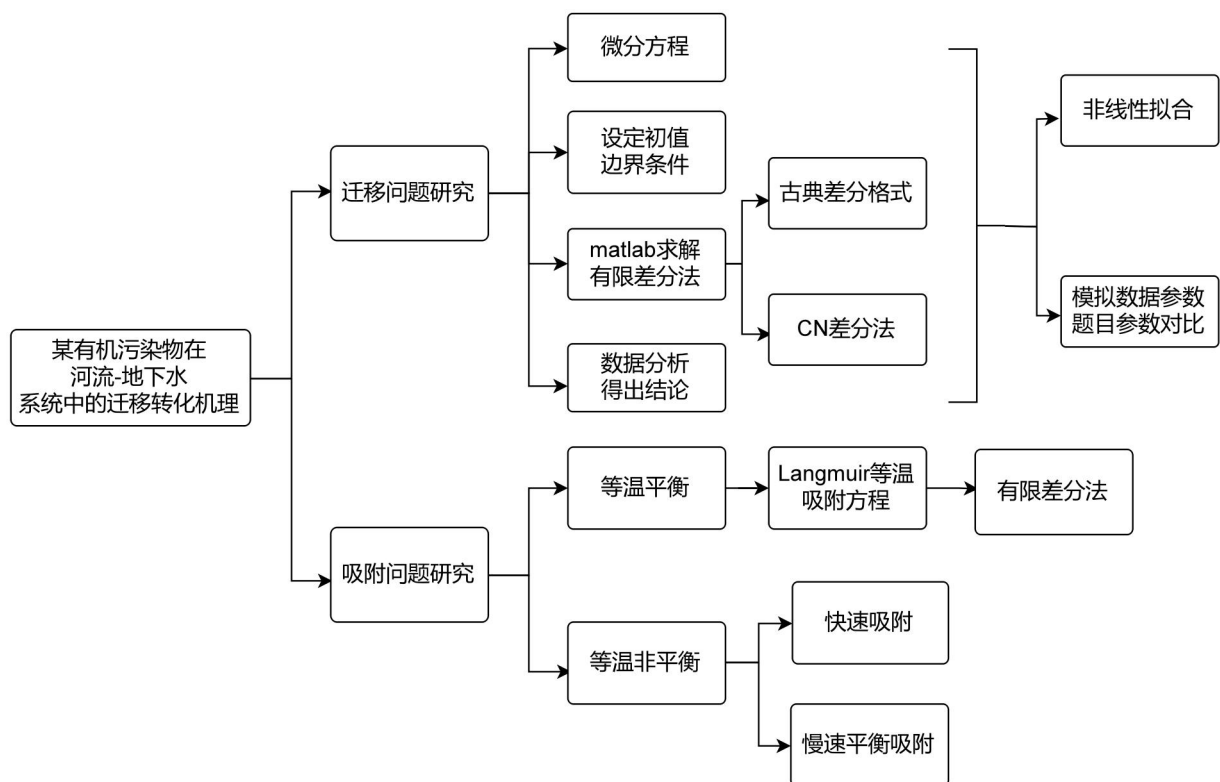


图 2-2 问题 2 流程图

2.3 问题 3 的分析

首先根据微生物增长特性建立 Monod 方程，根据题目所给数据计算出生物饱和系数后，针对该有机物的微生物降解特性进行了综合分析。

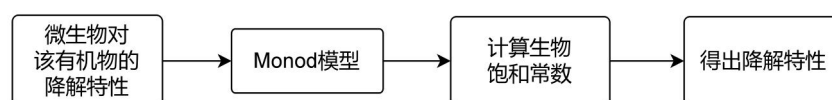


图 2-3 问题 3 流程图

三、模型假设

假设 1：污染有机物不在介质中发生物理挥发或者于介质化学反应；

假设 2：污染有机物的位移仅考虑一维方向；

假设 3：固体表面吸附力场存在，其范围相当于分子直径；固体表面吸附能力相同，与表面覆盖程度无关；被吸附在固体表面上的分子相互之间无作用力；吸附平衡是动态平衡；

假设 4：溶质在吸附有机污染物的过程中不会因为外部环境干扰导致变化。

四、定义与符号说明

| 符号定义 | 符号说明 |
|------------|---------------------|
| u | 平均孔隙流速 |
| v | 地下水渗流流速 |
| k | 渗透系数 |
| D | 弥散系数 |
| ρ | 含水层样品的干密度 |
| n | 多孔介质的孔隙率 |
| S | 固相介质上污染物的单位吸附量 |
| x | 水流方向上污染物的迁移距离 |
| ρ_s | 含水层中固相密度 |
| Q | 渗透流量 |
| w | 过水断面 |
| C_0 | 污染源输入的初始浓度 |
| C_i | 污染源没有排入时液相中污染物的背景浓度 |
| K_s | 饱和常数 |
| B | 微生物浓度 |
| C | 有机物浓度 |
| u_{\max} | 最大比生长速率 |

五、模型的建立与求解

5.1 问题 1 的模型建立与求解

5.1.1 对流、弥散、吸附模型的建立

对于问题一，查阅文献和学习相关数学物理理论知，污染有机物会在含水层介质中发生对流、弥散、溶解和吸附等物理迁移作用，在这个过程中有机物的结构一般不会发生变化；污染有机物在地下水中会发生化学反应和生物降解反应被转化^[1]。

据流体力学中关于对流-弥散问题的研究，结合题目给出的背景条件，地下水渗流场为各向同性均质的稳态流，我们建立在一维方向上，有机污染物在河流地下水系统中的对流方程为^{[6],[7]}：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (5.1)$$

弥散方程为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5.2)$$

地下水对有机物的吸附作用由于存在线性和非线性吸附两种过程，较为复杂，这里用一个方程简化代替它的作用：

$$\frac{\partial C}{\partial t} + n_s \rho_s \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (5.3)$$

综合 1、2 对流-弥散-吸附方程为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - n_s \rho_s \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.4)$$

由于地下水也有本身的渗流速度，将其和有机物的渗流速度分开处理：

$$n \frac{\partial C}{\partial t} = Dn \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_{\text{地}} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{\text{有}} \frac{\partial C}{\partial x} - n_s \rho_s \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.5)$$

式中：\$C\$ 一污染物液相浓度；\$t\$ 一时间；\$x\$ 一水流方向上污染物的迁移距离；\$D\$ 一地下水动力弥散系数；\$v\$ 一渗透流速，它与平均孔隙流速 \$u\$ 的关系为 \$v = nu\$；\$n_s\$ 一含水层中固相体积分量，\$n_s = 1 - n\$；\$\rho_s\$ 一含水层中固相密度，它与含水层介质干密度 \$\rho\$ 的关系为 \$\rho = n_s \rho_s\$；\$n\$ 一多孔介质的孔隙率；\$S\$ 一固相介质上污染物的单位吸附量；

最后我们将该问题分为对流-弥散吸附两种方程，即有机物的迁移和转化，方程 2 需要我们进一步研究。

$$n \frac{\partial C}{\partial t} = Dn \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_{\text{地}} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{\text{有}} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \rho \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.7)$$

污染物在地下水中对流弥散的运移方程 (5.6)，仅是描述污染物在固、液相间的通量转移，当考虑吸附作用时，方程可变成式 (5.5)。

为进一步研究关于河流地下水系统的有关背景和原理，发现，在该系统中，有机污

染物是在多孔介质含水层中对流、弥散、吸附，在河流-地下水系统中，有机污染物的对流和弥散通常受到孔隙流速和多孔介质的孔隙度的影响。平均孔隙流速（ u ）是指地下水在孔隙或裂缝中的平均流动速度。在许多情况下，它可以通过利用达西定律进行估算：

$$Q = -K \frac{\partial H}{\partial x} w \quad (5.8)$$

其中， Q 是渗透流量， w 为过水断面， k 是渗透系数，是水头（ h ）梯度，即单位长度的水头变化量。

为了让模型得到一定程度的简化上式可简化为：

$$v = -K \frac{\partial H}{\partial x} \quad (5.9)$$

其中 v 为渗透流速。

假设水流通过包括骨架与空隙在内的断面（ ω ）时所具有的一种虚拟流速，地下水在孔隙中的实际流速应为

$$u = \frac{v}{n} \quad (5.10)$$

其中 u 为平均实际（孔隙）流速， n 为孔隙度。

5.2 问题 2 的模型建立与求解

5.2.1 有机污染物对流弥散方程模型的建立

由题目所给的通过试验测得河流-地下水系统中某有机污染物的对流、弥散有关参数我们可以计算出有机物在多孔介质中的渗流速度为 $38.67 \text{ cm/d} \times 0.375 = 14.50 \text{ cm/d}$ 。

有机污染物的迁移转化问题可分为迁移和转化。结合由我们问题一，我们首先研究污染有机物的转化问题，结合题目所给的条件和假设污染有机物进入河流地下水系统前浓度为 0，污染源输入的初始浓度为 0.5 mg/L ，其方程和边界条件为：

$$\begin{aligned} n \frac{\partial C}{\partial t} &= Dn \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_{\text{地}} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{\text{有}} \frac{\partial C}{\partial x} \\ C(x, t=0) &= 0 \\ C(x=0, t>0) &= 0.5 \\ C(x \rightarrow \infty, t \geq 0) &= 0 \end{aligned} \quad (5.11)$$

5.2.2 有机污染物对流弥散方程差分格式的推导

代入题目给出的系数后，然后运用偏微分方程中差分格式计算该初边值问题，由偏微分方程模拟计算出单位位移变化下有机物随时间的浓度变化，就是模拟出实验数据：

$$\begin{aligned} 0.375 \frac{\partial C}{\partial t} &= 0.38 \times 0.375 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - 5.01 \frac{\partial C}{\partial x} - 14.5 \frac{\partial C}{\partial x} \\ C(x, t=0) &= 0 \\ C(x=0, t>0) &= 0.5 \\ C(x \rightarrow \infty, t \geq 0) &= 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

由于该问题是典型的抛物型方程的初边值问题，需要我们对微分方程进行的步骤是：为构建微分方程的有限差分逼近，首先求解区域 Ω 。再用二组平行于 t 轴和 x 轴的直线构建网格覆盖，网格边长在 x 方向上为 $\Delta x = h$ ，在 t 方向上为 $\Delta t = k$ 。 h, k 分别称为

空间步长和时间步长。网格线的交点则称为网格节点。

对初值问题来讲，求解域为：

$$\Omega = \{(x, t) | -\infty < x < +\infty, 0 < t \leq T\} \quad (5.13)$$

1. 选取网格线：

$$x_m = mh \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (5.14)$$

$$t_n = nk \quad n = 0, 1, 2, \dots, N; N = \left\lceil \frac{T}{k} \right\rceil \quad (5.15)$$

2. 然后进行离散化，为研究导数的差商近似表达式。为此对二元函数 $u = u(x, t)$ 定义 $u_m^n = u(x_m, t_n)$ ，并且假定 $u = u(x, t)$ 具有我们需要的有界偏导数。

由 Taylor 展开可以得到：

$$u(x_{m-1}, t_n) = u(x_m - h, t_n) = u(x_m, t_n) - \frac{h}{1!} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_m^n + \frac{h^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_m^n - \frac{h^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_m^n + \dots \quad (5.16)$$

$$u(x_{m+1}, t_n) = u(x_m + h, t_n) = u(x_m, t_n) + \frac{h}{1!} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_m^n + \frac{h^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_m^n + \frac{h^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right)_m^n + \dots \quad (5.17)$$

3. u 在 (x_m, t_n) 处对 x 的一阶和二阶偏导数有三个可能的近似：

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_m^n \approx \frac{u(x_{m+1}, t_n) - u(x_m, t_n)}{h} = \frac{u_{m+1}^n - u_m^n}{h} \quad (5.18)$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_m^n = \frac{u_{m+1}^n - u_{m-1}^n}{2h} \quad (5.19)$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right)_m^n = \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} \quad (5.20)$$

基于差分格式的理论我们首先使用古典显式由错误！未定义书签。和错误！未定义书签。差分格式推导出差分方程为：

$$\begin{aligned} u_{m+1}^n &= (1 - 2Dr)2u_m^n + Dr(u_{m+1}^n + u_{m-1}^n) \\ &\quad - \frac{(v_1 + v_2)k}{2nh}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) \\ u_m^0 &= 0 \\ u_0^n &= 0.5 \\ u_\infty^n &= 0 \end{aligned} \quad (5.21)$$

其中我们取 $h = 0.1, k = 0.01$ 作为网格步长 x 是从 0 到 1m, t 是从 0 到 2h。

由于古典差分格式存在不稳定的情况，我们进一步使用 Crank-Nicolson 格式的，来模拟出实验数据，此处建立过程不再叙述，直接给出 Crank-Nicolson 格式方程，步长，初边值也和古典差分格式一致：

$$\begin{aligned}
u_{m+1}^n &= (1-2Dr)/(1+Dr)2u_m^n \\
&+ 0.5Dr/(1+Dr)(u_{m+1}^n + u_{m-1}^n) \\
&+ 0.5Dr/(1+Dr)(u_{m+1}^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}) \\
&- \frac{(v_1+v_2)k}{2nh(1+Dr)}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) \\
u_m^0 &= 0 \\
u_0^n &= 0.5 \\
u_\infty^n &= 0
\end{aligned} \tag{5.22}$$

最后使用古典差分方程和 Crank-Nicolson 方程计算该问题，matlab 程序编程计算出结果。

5.2.3 有机污染物对流弥散方程差分格式模拟实验数据

通过代入试验测得河流-地下水系统中某有机污染物的对流、弥散有关参数，用微分方程的两种有限差分近似模拟出在单位位移下，河流-地下水系统中有机物对流、弥散过程的实验数据。再计算出两种差分格式的误差，发现古典显格式标准误差为：0.2130，CN 格式标准误差为：0.1106 可以看出 CN 格式的误差较小，结果较优秀。由下图看出两种模拟结果随时间和位移的变化趋势，模拟出的实验数据表格见支撑材料 data_UxianM.xlsx 和 data_CxianM.xlsx。

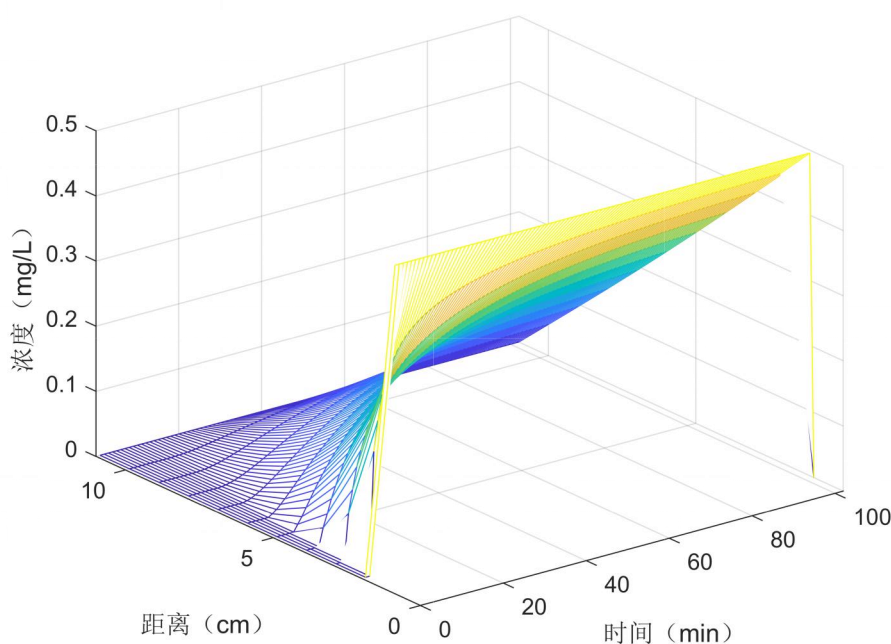


图 5-1 古典差分格式模拟数据图

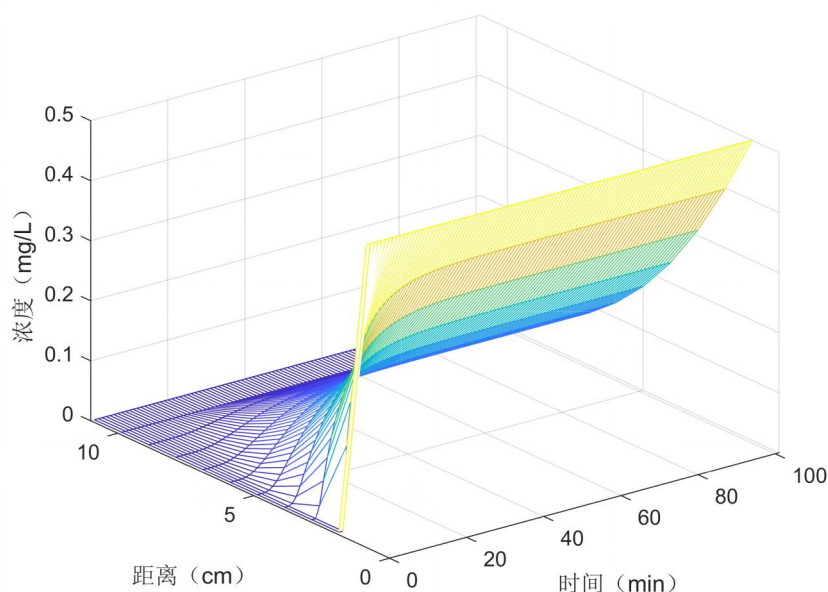


图 5-2 Crank-Nicolson 格式模拟实验数据图

5.2.4 差分格式模拟实验数据的准确性验证

为了更为直观的验证模拟的数据的准确性，我们使用古典差分方程和 Crank-Nicolson 方程模拟的实验数据,选取三个位移 $x = 0.3\text{m}$, $x = 0.5\text{m}$, $x = 0.7\text{m}$ ，使用 MATLAB 非线性回归模型拟合公式错误!未定义书签。计算得出各取样孔的弥散系数 D 和平均孔隙流速 u ，具体结果见表 5-1 和表 5-2。

由题目知，当水流为均匀流时，孔隙率为单和弥撒系数为常数，对流弥散方程式子也可变化为如下：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.23)$$

根据 Laplace 变换方法，可以得到该偏微分方程的简化过的解析解非线性方程为：

$$C(t, x) = C_i - \frac{C_0 - C_i}{2} \left[\exp\left(\frac{ux}{D}\right) + \omega \right] \quad (5.24)$$

其中 C_i ---污染源没有排入时液相中污染物的背景浓度， C_0 —污染源输入的初始浓度， w 为误差余项。

我们对模拟数据进行非线性拟合可视化出在不同位置两种差分格式的拟合效果见下图：

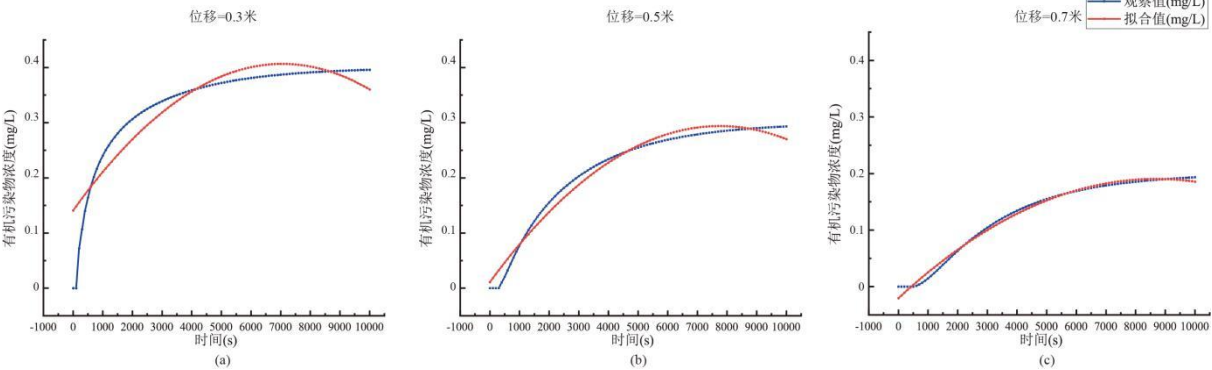


图 5-3 古典格式非线性拟合图

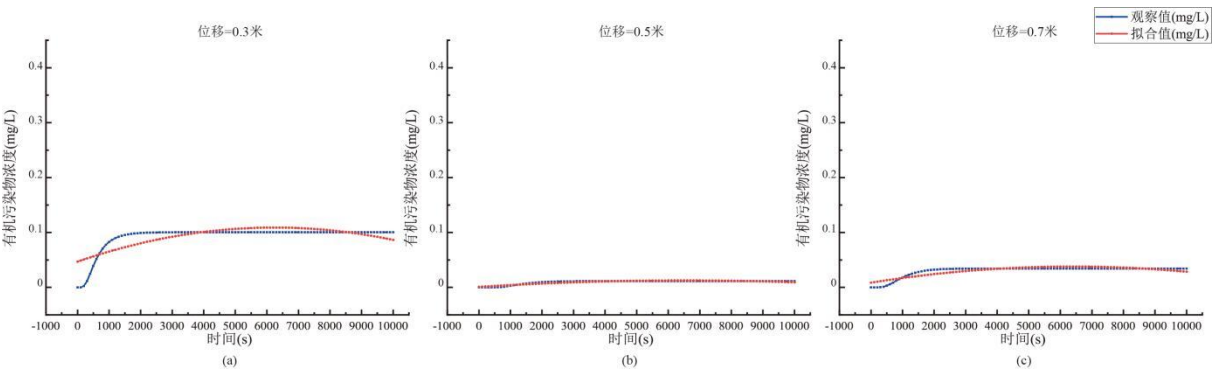


图 5-4 CN 格式非线性拟合图

| 表 5-1 古典格式拟合参数 | | | |
|----------------|---------------------|--------|--------|
| 位置 | 0.3 | 0.5 | 0.7 |
| 弥散系数 D | 0.3689 | 0.4469 | 0.3102 |
| 平均孔隙流速 u | 0.0298 | 0.0397 | 0.0483 |
| 均值 | $D=0.375, u=0.0396$ | | |

| 表 5-2 Crank-Nicolson 格式拟合参数 | | | |
|-----------------------------|----------------------|--------|--------|
| 位置 | 0.3 | 0.5 | 0.7 |
| 弥散系数 D | 0.3712 | 0.4693 | 0.3097 |
| 平均孔隙流速 u | 0.0215 | 0.0321 | 0.0210 |
| 均值 | $D=0.3834, u=0.0348$ | | |

根据表 5-1、表 5-2、图 5-3 和图 5-4 可知，回归曲线与模拟的观测数据在两种差分格式的拟合下都比较接近，说明回归得到的弥散系数 D 和平均孔隙流速 u 都比较合理，由表中平均计算出的弥散系数 D 和平均孔隙流速 u 在两种差分模拟的实验数据拟合的参数都与题目给出的比较接近，说明本文拟合的实验数据比较准确，可以作为分析河流-地下河系统对流-弥散迁移的机理分析数据。

5.2.5 位移和时间方向上各污染有机物浓度变化规律结果分析

位移方向上，取 $t = 0.05, t = 0.1 \dots$ 不同时刻的变化如图 5-5 和图 5-6 所示：

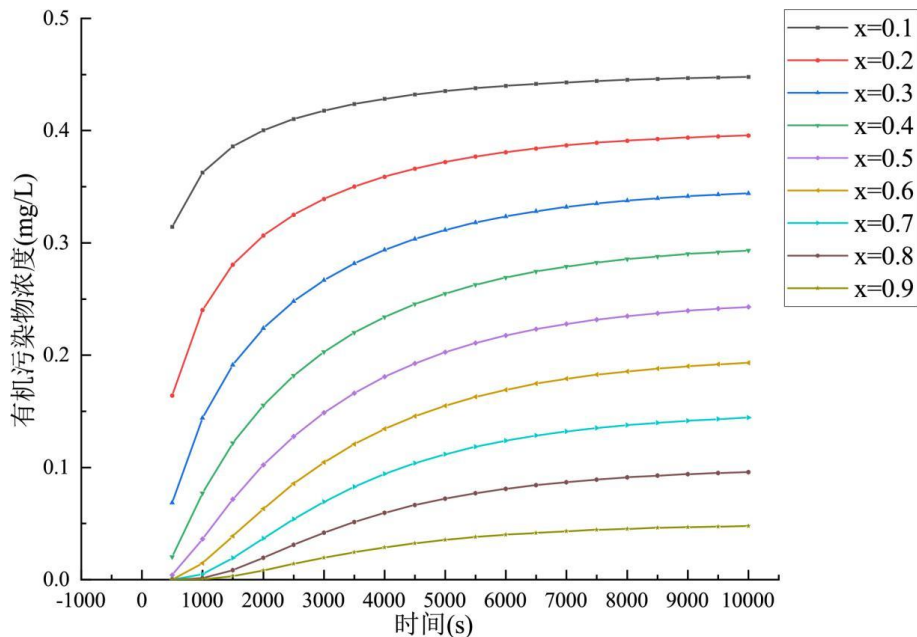


图 5-5 古典格式浓度时间变化图

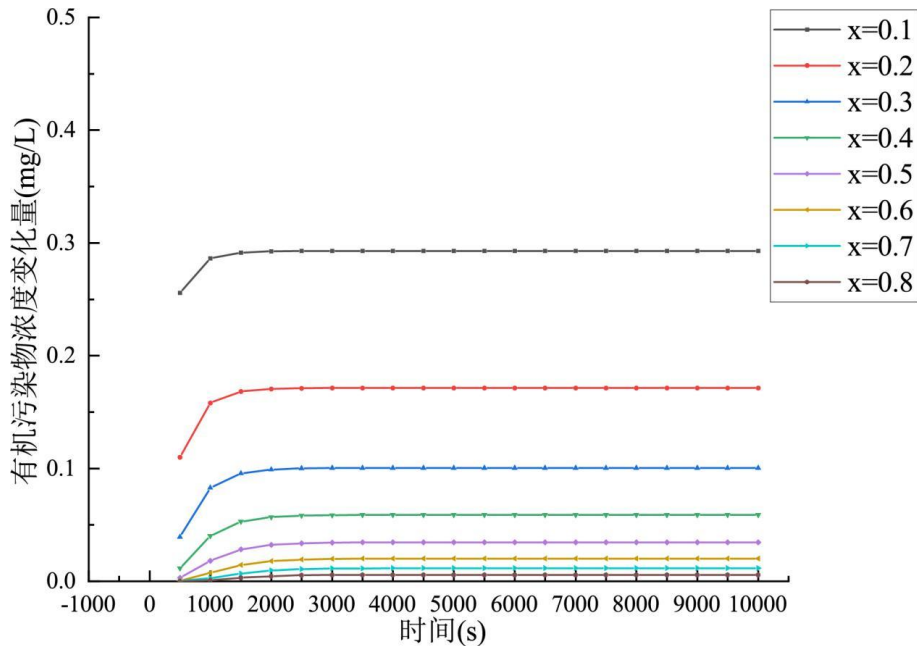


图 5-6 CN 格式浓度时间分布图

两种差分格式污染有机物浓度在不同位移中有相似的变化规律，可知，在位移较小的位置地下水中污染有机物浓度较小，位移较大的位置地下水中污染有机物浓度较大，古典差分模拟的实验数据在位置随位置变化浓度变化较为均匀，在同一位置上，浓度随在前 2000 秒降低速度较快，随后趋于平缓。

CN 格式模拟的实验数据在位置随位置变化浓度变化呈现指数递减变化，在同一位置上，浓度随在前 500 秒降低速度较快，随后趋于平缓。

由上述两种模拟数据可知随着时间的延长，污染有机物浓度分布逐渐趋于一个定值，在位移上呈现两种不同的变化趋势，这可能与表明在地下水中污染有机物吸附和生物降

解等共同作用下的结果，需要我们进一步研究。

5.2.6 有机污染物非等温平衡吸附过程可视化研究

查阅文献知，吸附作用对有机污染物在河流—地下河系统中的迁移有很大的影响。由题目给出的数据我们可视化出单位在在液相中单位介质液相浓度 p 随时间 t 的变化，固相介质 S 吸附量与时间的关系曲线。

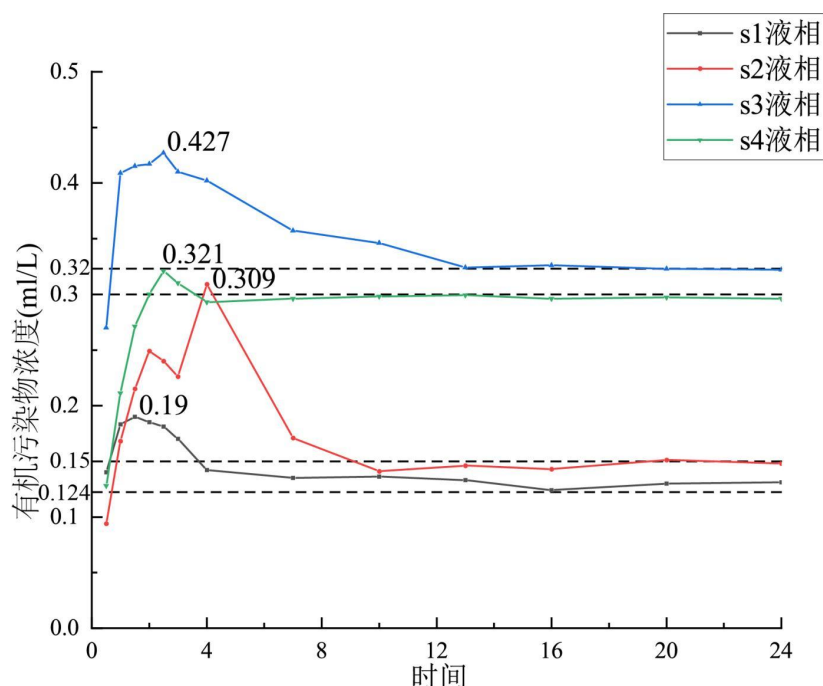


图 5-7 液相环境下有机物浓度变化图

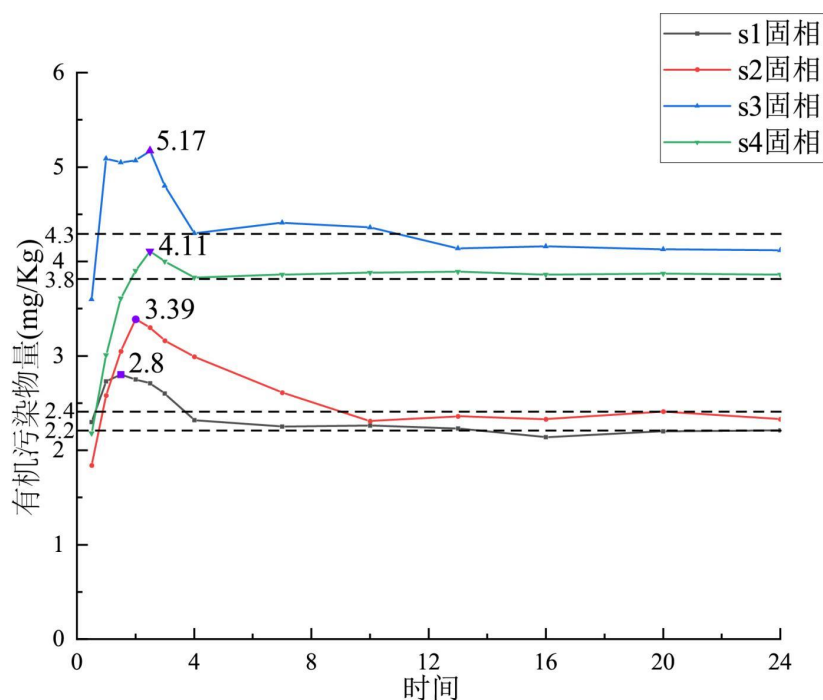


图 5-8 固相环境有机物量变化图

由图 5-7 与图 5-8 可以看出，四种介质污染有机物的吸附速率曲线相似，在短时间内都经历了快速增加至最高值，然后又快速降低，直至达到表观平衡，介质 s_4 明显比

s2、s3、s1 介质的吸附量高，s1 的吸附量最低。

等温非平衡吸附试验结果表明，不同类型沉积物对污染有机物的吸附均经历了快速吸附期和慢速平衡期两阶段。

在液相吸附体系中：

介质 s1 在 2 小时内吸附浓度快速增加直至最大值，峰值为 0.19，是平衡时间段的 1.46 倍。

介质 s2 在 3 小时内吸附浓度快速增加直至最大值，峰值为 0.309，是平衡时间段的 2.06 倍。

介质 s3 在 3 小时内吸附浓度快速增加直至最大值，峰值为 0.472，是平衡时间段的 1.33 倍。

介质 s4 在 4 小时内吸附浓度快速增加直至最大值，峰值为 0.321，是平衡时间段的 1.07 倍。

在液相吸附体系中：

介质 s1 在 2 小时内吸附量快速增加直至最大值，峰值为 2.8，是平衡时间段的 1.27 倍。

介质 s2 在 3 小时内吸附量快速增加直至最大值，峰值为 3.39，是平衡时间段的 1.41 倍。

介质 s3 在 3 小时内吸附量快速增加直至最大值，峰值为 5.17，是平衡时间段的 1.2 倍。

介质 s4 在 4 小时内吸附量快速增加直至最大值，峰值为 4.11，是平衡时间段的 1.08 倍。

结论为有机污染物先快速吸附进入慢速平衡期，吸附和解吸作用同时发生，之后随着时间的延长，吸附量趋于稳定。

5.2.7 等温平衡吸附过程的研究

5.2.8 Langmuir 方程构建

Langmuir 方程为单层分子吸附是常用的吸附等温线方程之一，由物理化学家朗格缪尔根据分子运动理论和一些假定提出的。根据此吸附模型，在平衡时，可以得到如下方程：

$$S = \frac{S_0 b C}{1 + b C} \quad (5.25)$$

其中 S_0 为介质吸附的最大容量， b 为吸附表面亲和性常数， C 为液相浓度。

在等温平衡吸附试验结果表 3 中已经知道 S 与 C 的值，然后使用最小二乘法进行拟合得到 S_0 和 b 的值如表 5-3 所示：

表 5-3 介质吸附最大容量与吸附系数表

| 最大吸附(mg/Kg) | 吸附系数 |
|-------------|-----------|
| 5.162 | 0.557e+07 |
| 8.152 | 1.065e+07 |
| 6.442 | 0.533e+07 |
| 7.312 | 1.180e+07 |

建立基于 Langmuir 吸附模型的液相-固相综合模型，并且综合考虑对流迁移、水动力弥散和吸附过程：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + k_a (c_{eq} - c) \frac{\partial S}{\partial t} \quad (5.26)$$

其中 C 为液相浓度， t 为时间， x 为空间坐标轴， D 为弥散系数， v 为流速， k_a 为固相吸附速率常数， c_{eq} 为液相平衡时的浓度， S 为固态吸附量。

将 S 带入可得：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + k_a (c_{eq} - c) \frac{S_0 b}{(1 + bc)^2} \frac{\partial c}{\partial t} \quad (5.27)$$

然后像上面一样构建有限差分法再将 t 和 x 离散化。

5.2.9 步长搜索法寻找最优 k_a

t 和 x 的离散化组成一个网格，通过初始条件和边界条件进行迭代求解，获得浓度 c 在 t 和 x 的网格中的数值，对于一个固定的 k_a ，有唯一浓度 c 的分布，因此可以根据表 2 的数据通过最小二乘法拟合 k_a ，公式如下：

$$\min \sum (c_1 - c_0)^2 \quad (5.28)$$

其中 c_1 为模型得出数据， c_0 为表中所给真实数据。

然后设定 k_a 的搜索区间，为 $[0.001, 100]$ ，搜索步长为 0.001，遍历这个区间，并求解每一个 k_a 值，求解有限差分法得到浓度，然后计算对应的最小二乘差异，差异最小的即为本文需要的 k_a 。

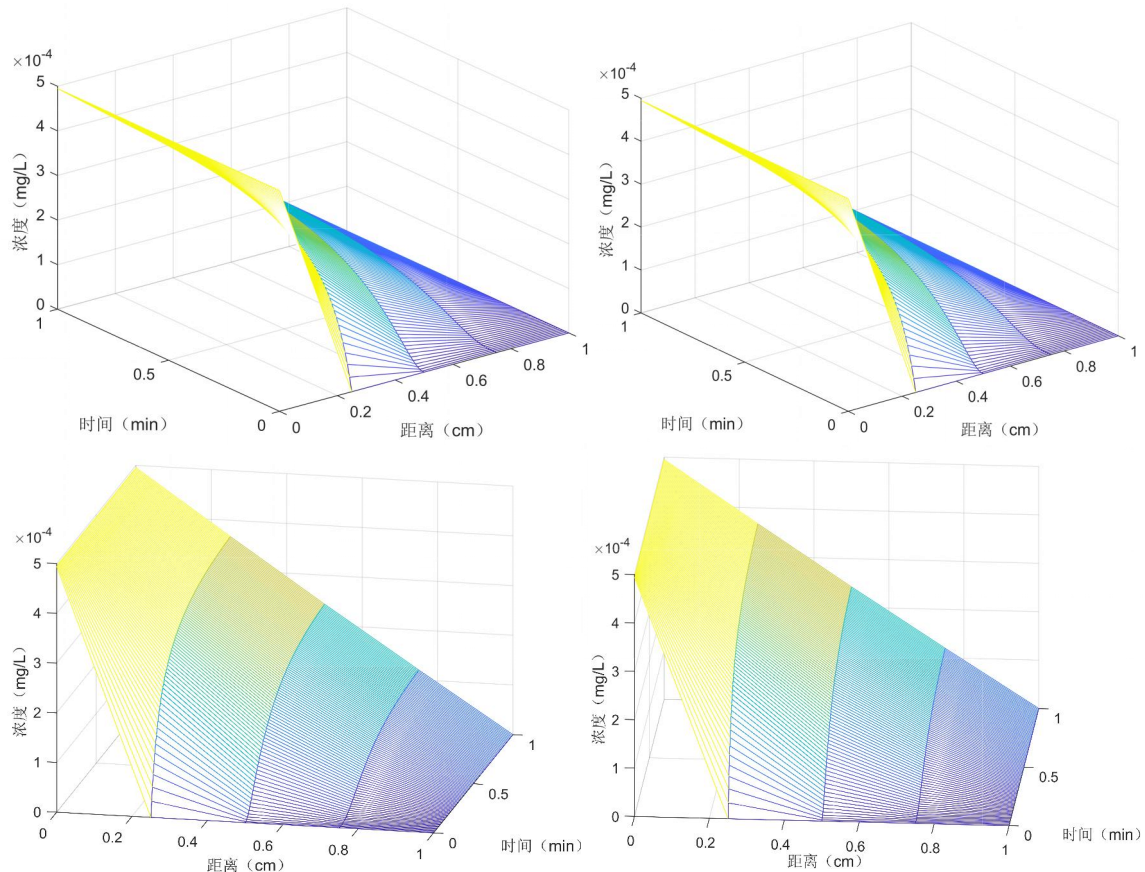


图 5-9 S1 到 S4 在时间空间上的浓度分布图

由图 5-9 可以得出结论，有机物初始浓度高时吸附转化能力强。

5.3 问题 3 的模型建立与求解

5.3.1 Monod 模型的建立

有机污染物是指进入环境并污染环境的有机化合物。生物降解是指复杂有机化合物在微生物的作用下转变为结构较为简单的化合物或者说完全被分解的过程。即有机污染物在生物或者其酶的作用下分解的过程。

微生物动力学是研究微生物生长过程的速率及其影响速率的因素，从而获得相关信息。

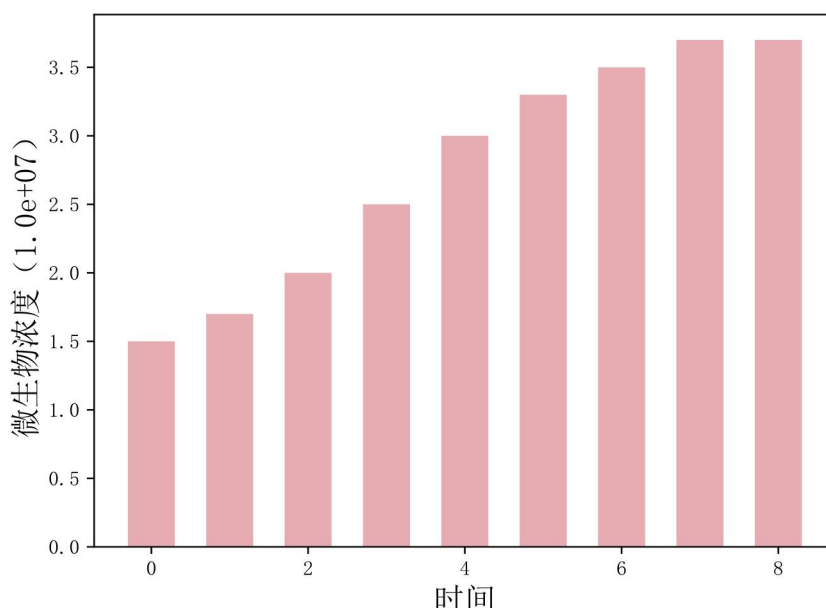


图 5-10 微生物浓度随时间变化图

由图 5-10 可以看出和 Monod 模型微生物生长规律一致，可以认为符合 Monod 模型。

5.3.2 Monod 微生物降解模型的求解

Monod 为典型的均衡生长模型^[8]。现代细胞生长动力学的奠基人 Monod，指出在培养基中无抑制剂存在的情况下，细胞的比生长速率与限制性基质浓度的关系可以使用如下式表示：

$$\mu = \frac{\mu_{\max}}{K_s} \cdot S \quad (5.29)$$

其中 μ 为比生长速率， μ_{\max} 为最大比生长速率， S 为有机物浓度； K_s 为饱和常数，为最大比生长速率的一半时的限制性基质浓度。

当浓度较低时，生物降解速率随着浓度的增加而增加，但当浓度达到一定程度后，生物降解速率会趋于稳定。

Monod 理论描述底物降解的动力学方程为^[9]：

$$\frac{dC}{dt} = \frac{q_{\max} BC}{K_s + C} \quad (5.30)$$

其中 B 为微生物浓度， C 为有机物浓度。

根据各变量定义可以转化为如下方程：

$$\frac{dC}{dt} = K_s \frac{C^2}{K_s + C} \mu \quad (5.31)$$

其中， K_s 仍为生物降解饱和常数。 u 为题目中提供的微生物浓度求导的结果。再令 $C = x$, 两端同时除 u 。可以得到下式：

$$y = K_s \frac{x^2}{K_s + x} \quad (5.32)$$

5.3.3 结果

根据题目所给数据，可以得出 x, y 的关系。他们之间的关系如下图所示：

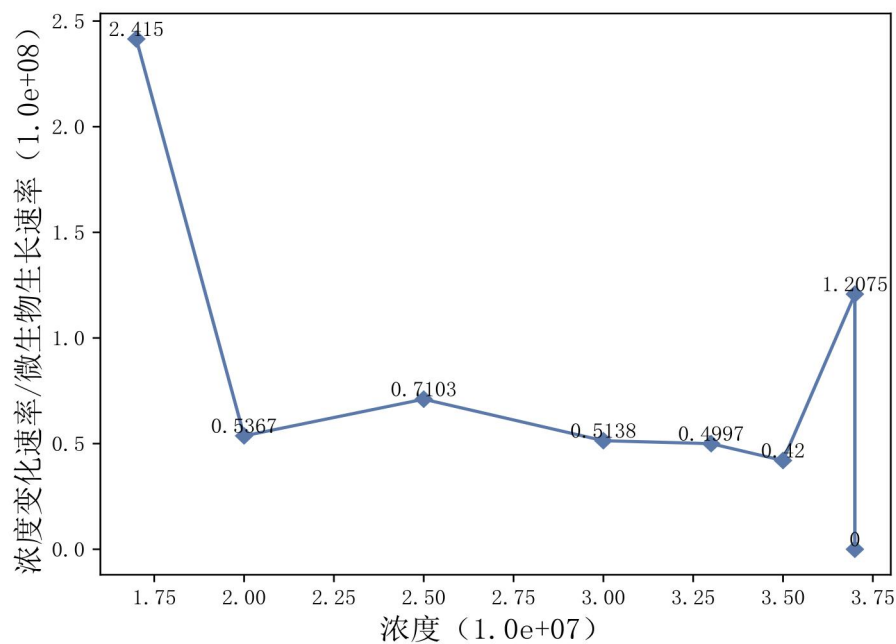


图 5-11 单位微生物生长速率变化引发的有机物浓度变化图

在最后一天时微生物增长速率为 0。然后计算出每天 K_s 值，如下图所示：

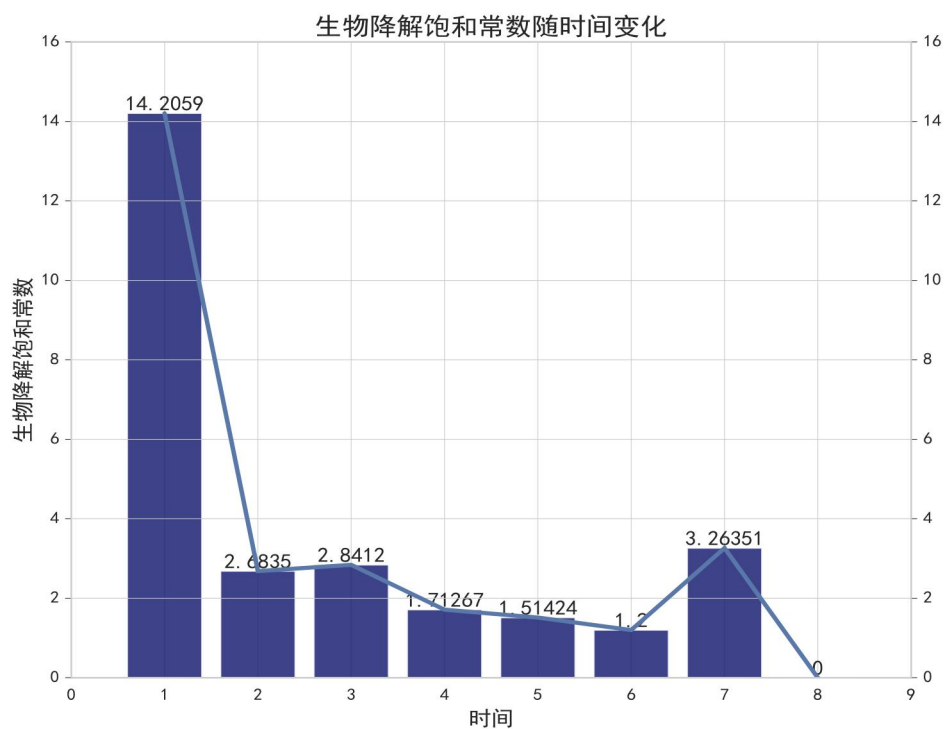


图 5-12 生物降解饱和常数随时间变化图

最后计算出平均 K_s 的值为 3.42，即生物降解饱和常数。我们可以据此控制基质有机物浓度使微生物降解保持最大速率。

六、模型的评价及优化

6.1 误差分析

6.1.1 针对于问题 1 的误差分析

问题一建立的微分方程实在一维反向上的，忽略了二位平面上流体对流弥散的特性，可能造成数据实验结果的浓度在位置方向上有误差。

6.1.2 针对于问题 2 的误差分析

问题二在使用差分格式时可能存在系统性数值解和实验数据之间纯在误差，拟合系数时可能拟合的结果不准确。选取 Langmuir 等温吸附方程由于污染有机物可能纯在线性吸附作用，会造成非线性的 Langmuir 等温吸附方程不能准确描述等温平衡吸附过程。

6.1.3 针对于问题 3 的误差分析

Monod 模型假设微生物的生长速率与底物浓度之间存在线性关系。然而，在一些情况下，微生物的生长可能受到其他因素的限制，例如氧气浓度、温度、pH 值等。这些因素在 Monod 模型中没有考虑到，因此该模型在描述复杂的微生物生长过程时可能存在局限性。

6.2 模型的优点

针对问题 1：基于环境给出一维方向上的对流弥散吸附微分方程，且可根据过程优化方程。

针对问题 2：基于题给参数，利用微分方程有限差分法模拟实验数据，根据沉积物的吸附特性，将平衡吸附方程，并以此建立符合模型的微分方程表达式来量化和描述污染物在地下水中的吸附现象。并且拟合验证了数据的准确性。

针对问题 3：Monod 模型是一种简单的模型，只需要一个底物浓度参数即可描述微生物的生长速率。这种简化使得模型易于理解和使用，并且可以通过实验数据拟合参数。

直观性：该模型提供了一个直观的框架，用于解释微生物在不同底物浓度下的生长行为。它表明微生物生长速率随底物浓度的增加而增加，但随着底物浓度达到一定水平后，生长速率将趋于饱和。

6.3 模型的缺点

针对问题 1：由于有机物在地下水中会发生水解、氧化还原等化学反应和生物降解反应而转化成其它物质的作用，在这个过程中污染物的结构发生变化我们未考虑这个方向的误差。

针对问题 2：有机物在迁移过程中建立的微分方程只考虑了一维没考虑二位平面。同时并未考虑沉积物的理化特性，比如沉积物的含碳量，颗粒大小等性质，可能对于等温平衡实验的系数模拟造成误差。对于吸附过程研究，本文仅基于 Langmuir 等温非线性吸附方程进行研究，可能无法完全反映实际情况；实验数据参数有限，模型预测精度可能受到一定影响。

针对问题 3：由于有机物在不同微生物环境下的降解过程比较复杂，目前关于有机物的生物降解的具体途径还不很清楚，有待于进一步研究探索。本文所使用的 **Monod** 模型是一个简单而直观的微生物生长动力学模型，但在描述复杂的微生物生长过程时存在一些局限性。在实际应用中，需要根据具体情况和系统的复杂性来选择适当的模型。

参考文献

- [1]Spitz K, Moreno J. A practical guide to groundwater and solute transport modeling[M]. John Wiley and sons, 1996.
- [2]邱立萍.硝基苯在河流—地下水系统中的行为特征与模拟研究[D].长安大学,2012.
- [3]杨梅.典型岩溶区地下河有机污染物控制因素及运移特征研究[D].西南大学,2010.
- [4]范成新,刘敏,王圣瑞,方红卫,夏星辉,曹文志,丁士明,侯立军,王沛芳,陈敬安,游静,王菊英,盛彦清,朱伟.近 20 年来我国沉积物环境与污染控制研究进展与展望[J].地球科学进展,2021,36(04):346-374.
- [5]邱立萍,王虎.硝基苯在渭河沉积物中双模式吸附阻滞因子[J].环境工程学报,2016,10(02):761-767.
- [6]仵彦卿编著.多孔介质污染物迁移动力学[M].上海:上海交通大学出版社,2007.03.
- [7]薛禹群, 朱学愚编著. 地下水动力学[M].北京: 地质出版社,1979.07.
- [8]吴英海,韩蕊,林必桂,张菲菲,陈晓燕,许振成,张雨葵.复合人工湿地中低浓度有机物的去除及Monod模型模拟[J].环境工程学报,2013,7(06):2139-2146.
- [9]覃晶晶,江小林.污水处理中Monod方程的简化及其线性化方程[J].市政技术,2006(02):75-76+80.

附 录

附录 1

介绍：古典格式和 CN 格式有限差分 MATLAB 代码

```

%function [ ] = ParabolicEquation( h,k )
%求解抛物型方程中的一种：热传导方程
%h:x 轴步长
%k:t 轴步长
h=0.1,k=0.01
r=k/(h*h);%网格比
Mx=floor(1.0/h)+1;%网格在 x 轴上的节点个数（算上 0）
Nt=floor(1.0/k)+1;%网格在 t 轴上的节点个数（算上 0）
N=(Mx-2)*(Nt-1); %U 的维数
D=0.38;
v1=5.01/1000000;
v2=14.50/1000000;
n=0.375;
%%
%*****古典显格式
*****
%直接递推的方法求古典显格式
UxianM=zeros(Mx,Nt);
Uxian=[];u1=Uxian;
%先赋初值和边界值
for x=1:Mx
    UxianM(x,1)=InitialConditions((x-1)*h);
end
for t=1:Nt
    UxianM(1,t)=BoundaryConditions(0,(t-1)*k);
    UxianM(Mx,t)=BoundaryConditions(1,(t-1)*k);
end
%先赋初值和边界值
for t=2:Nt
    for x=2:Mx-1

        UxianM(x,t+1)=(1-2*D*r)*UxianM(x,t)+D*r*(UxianM(x+1,t)+UxianM(x-1,t))-((v1+v2)*(k/2*h)/n)*(UxianM(x+1,t)-UxianM(x-1,t));
    end
end
figure
mesh(UxianM)
ylabel('距离 (cm) ');
xlabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');

u1=Uxian;

```

```

%将结果按 Ku=f 方法的 u 的结构重排
for t=2:Nt
    Uxian = [Uxian; UxianM(2:Mx-1,t)];
end

%*****Crank-Nicolson 格式
*****CxianM=zeros(Mx,Nt);
Ucn=[];u2=Ucn;
for x=1:Mx
    CxianM(x,1)=InitialConditions((x-1)*h);
end
for t=1:Nt
    CxianM(1,t)=BoundaryConditions(0,(t-1)*k);
    CxianM(Mx,t)=BoundaryConditions(1,(t-1)*k);
end
for t=2:Nt-1
    for x=2:Mx-1-1

CxianM(x,t+1)=(1-D*r)/(1+D*r)*CxianM(x,t)+0.5*D*r/(1+D*r)*(CxianM(x+1,t)+CxianM(x-1,t))-((v1+v2)*(k/2*h)/n)/(1+D*r)*(UxianM(x+1,t)-UxianM(x-1,t))+0.5*D*r/(1+D*r)*(CxianM(x+1,t+1)+CxianM(x-1,t+1));
    end
end
figure
mesh(CxianM)
ylabel('距离 (cm) ');
xlabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');
u3=Ucn;
for t=2:Nt
    Ucn = [Ucn; CxianM(2:Mx-1,t)];
end

%%
U_M=zeros(Mx-2,Nt-1);
U=[];
for x=1:Mx-2
    for t=1:Nt-1
        U_M(x,t)=ExactSolution(x*h,t*k);
    end
end
for t=1:Nt-1
    U=[U; U_M(1:Mx-2,t)];
end
%%
temp=(U-Uxian).^2;
temp=sum(sum(temp));
temp=temp/(Mx*Nt);
Exian=sqrt(temp);

```

```
temp=(U-Ucn).^2;
temp=sum(sum(temp));
temp=temp/(Mx*Nt);
Ecn=sqrt(temp);

fprintf('h: %d;k= %d\n',h,k);
fprintf('古典差分格式标准误差%d\n',Exian);
fprintf('CN 格式标准误差%d\n',Ecn);
xlswrite('D:\asW\data\data_UxianM.xlsx',UxianM)
xlswrite('D:\asW\data\data_CxianM.xlsx',CxianM)

function [ Uxt ] = InitialConditions ( x )
%在此函数中定义初值条件
Uxt=0;
end
function [ Uxt ] = ExactSolution( x,t)
%在此函数中定义待求函数的精确解 u(x,t),用于比较数值解
Uxt=0;
end
function [ Uxt ] = BoundaryConditions( LeftOrRight,t )
%在此函数中定义边值条件
%LeftOrRight 标识左边界条件还是右边界条件 0 代表左, 1 代表右
Uxt=-1;
if LeftOrRight==0
    Uxt=0.5;
elseif LeftOrRight==1
    Uxt=0;
else
    %不应该出现此情况, 抛异常
    error('错误使用边界条件!');
end
end
```

附录 2

介绍：问题二四种介质差分计算 MATLAB 代码

```

%% 模型参数设置
v = (0.375 * 38.67 + (1 - 0.375) * 5.01)/(24*60); % 流速 cm/d>>>cm/min
D = 0.38; % 扩散系数 cm^2/min
L = 1; % 离散化长度 cm
T = 1; % 离散化时间 min
dx = 0.25; % 空间步长 cm
dt = 0.01; % 时间步长 min

M = L / dx + 1; % 空间网格数
N = T / dt + 1; % 时间网格数

C = zeros(M, N); % 初始化浓度矩阵
C(1, :) = 0.495/1000; % 边界条件(mg/L>>>mg/cm^3)
ceq = 0.347/1000; % 平衡浓度 (由实验 2 最后时刻的液相浓度获得)

%k 和 qmax 根据前面拟合的参数填写
k = 1.0650e7/1e3; % 吸附系数(L/mg>>>cm^3/mg) (Langmuir 吸附等温式)
qmax = 8.3819; % 最大吸附量 mg/Kg
ka = 1e-4; % 设置 ka, ka 通过遗传算法获得

%% 有限差分法求解
for n = 1:N-1
    for m = 2:M-1
        C(m, n+1) = C(m, n) ...
            - v*dt/(2*dx)*(C(m+1,n)-C(m-1,n)) ... % 对流项
            + D*dt/(dx^2)*(C(m+1,n)-2*C(m,n)+C(m-1,n)) ... % 扩散项
            + ka*(ceq-C(m,n))/((1+k*C(m,n))^2)*(k*qmax*C(m,n)*dt); % 吸附项
    end
end
end
%% 结果可视化
x = 0:dx:L;
t = 0:dt:T;
[X, T] = meshgrid(x, t);
figure
surf(X, T, C);
colormap([1 1 0; 0 1 1]);
xlabel('距离 (cm) ');
ylabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');

%% 模型参数设置
v = (0.375 * 38.67 + (1 - 0.375) * 5.01)/(24*60); % 流速 cm/d>>>cm/min
D = 0.38; % 扩散系数 cm^2/min

```

```

L = 1; % 离散化长度 cm
T = 1; % 离散化时间 min
dx = 0.25; % 空间步长 cm
dt = 0.01; % 时间步长 min

M = L / dx + 1; % 空间网格数
N = T / dt + 1; % 时间网格数

C = zeros(M, N); % 初始化浓度矩阵
C(1, :) = 0.495/1000; % 边界条件(mg/L>>>mg/cm^3)
ceq = 0.173/1000;%平衡浓度
%k 和 qmax 根据前面拟合的参数填写
k = 0.5325e7/1e3; % 吸附系数(L/mg>>>cm^3/mg) (Langmuir 吸附等温式)
qmax = 6.3492; % 最大吸附量 mg/Kg
ka=1e-4;%设置 ka,ka 通过遗传算法获得

%% 有限差分法求解
for n = 1:N-1
    for m = 2:M-1
        C(m, n+1) = C(m, n) ...
            - v*dt/(2*dx)*(C(m+1,n)-C(m-1,n)) ... % 对流项
            + D*dt/(dx^2)*(C(m+1,n)-2*C(m,n)+C(m-1,n)) ... % 扩散项
            + ka*(ceq-C(m,n))/((1+k*C(m,n))^2)*(k*qmax*C(m,n)*dt); % 吸附项
    end
end
end
%% 结果可视化
x = 0:dx:L;
t = 0:dt:T;
[X, T] = meshgrid(x, t);
figure
surf(X, T, C);
colormap([1 1 0; 0 1 1]);
xlabel('距离 (cm) ');
ylabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');

%% 模型参数设置
v = (0.375 * 38.67 + (1 - 0.375) * 5.01)/(24*60); % 流速 cm/d>>>cm/min
D = 0.38; % 扩散系数 cm^2/min

L = 1; % 离散化长度 cm
T = 1; % 离散化时间 min
dx = 0.25; % 空间步长 cm
dt = 0.01; % 时间步长 min

M = L / dx + 1; % 空间网格数

```

```

N = T / dt + 1; % 时间网格数
C = zeros(M, N); % 初始化浓度矩阵
C(1, :) = 0.495/1000; % 边界条件(mg/L>>>mg/cm^3)
ceq = 0.199/1000;%平衡浓度
%k 和 qmax 根据前面拟合的参数填写
k = 1.1796e7/1e3; % 吸附系数(L/mg>>>cm^3/mg) (Langmuir 吸附等温式)
qmax = 7.1117; % 最大吸附量 mg/Kg
ka=1e-4;%设置 ka,ka 通过遗传算法获得

%% 有限差分法求解
for n = 1:N-1
    for m = 2:M-1
        C(m, n+1) = C(m, n) ...
            - v*dt/(2*dx)*(C(m+1,n)-C(m-1,n)) ... % 对流项
            + D*dt/(dx^2)*(C(m+1,n)-2*C(m,n)+C(m-1,n)) ... % 扩散项
            + ka*(ceq-C(m,n))/((1+k*C(m,n))^2)*(k*qmax*C(m,n)*dt); % 吸附项
    end
end
%% 结果可视化
x = 0:dx:L;
t = 0:dt:T;
[X, T] = meshgrid(x, t);
figure
surf(X, T, C');
colormap([1 1 0; 0 1 1]);
xlabel('距离 (cm) ');
ylabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');

%% 模型参数设置
v = (0.375 * 38.67 + (1 - 0.375) * 5.01)/(24*60); % 流速 cm/d>>>cm/min
D = 0.38; % 扩散系数 cm^2/min
C = zeros(M, N); % 初始化浓度矩阵
C(1, :) = 0.495/1000; % 边界条件(mg/L>>>mg/cm^3)
ceq = 0.173/1000;%平衡浓度
%k 和 qmax 根据前面拟合的参数填写
k = 0.5325e7/1e3; % 吸附系数(L/mg>>>cm^3/mg) (Langmuir 吸附等温式)
qmax = 6.3492; % 最大吸附量 mg/Kg
ka=1e-4;%设置 ka,ka 通过遗传算法获得
L = 1; % 离散化长度 cm
T = 1; % 离散化时间 min
dx = 0.25; % 空间步长 cm
dt = 0.01; % 时间步长 min

M = L / dx + 1; % 空间网格数
N = T / dt + 1; % 时间网格数

```

```

%%% 有限差分法求解
for n = 1:N-1
    for m = 2:M-1
        C(m, n+1) = C(m, n) ...
            - v*dt/(2*dx)*(C(m+1,n)-C(m-1,n)) ... % 对流项
            + D*dt/(dx^2)*(C(m+1,n)-2*C(m,n)+C(m-1,n)) ... % 扩散项
            + ka*(ceq-C(m,n))/((1+k*C(m,n))^2)*(k*qmax*C(m,n)*dt); % 吸附项
    end
end
%%% 模型参数设置
v = (0.375 * 38.67 + (1 - 0.375) * 5.01)/(24*60); % 流速 cm/d>>>cm/min
D = 0.38; % 扩散系数 cm^2/min

L = 1; % 离散化长度 cm
T = 1; % 离散化时间 min
dx = 0.25; % 空间步长 cm
dt = 0.01; % 时间步长 min

M = L / dx + 1; % 空间网格数
N = T / dt + 1; % 时间网格数

C = zeros(M, N); % 初始化浓度矩阵
C(1, :) = 0.495/1000; % 边界条件(mg/L>>>mg/cm^3)
ceq = 0.364/1000; % 平衡浓度
%k 和 qmax 根据前面拟合的参数填写
k = 0.5571e7/1e3; % 吸附系数(L/mg>>>cm^3/mg) (Langmuir 吸附等温式)
qmax = 5.0571; % 最大吸附量 mg/Kg
ka=1e-4;%设置 ka,ka 通过遗传算法获得

%%% 有限差分法求解
for n = 1:N-1
    for m = 2:M-1
        C(m, n+1) = C(m, n) ...
            - v*dt/(2*dx)*(C(m+1,n)-C(m-1,n)) ... % 对流项
            + D*dt/(dx^2)*(C(m+1,n)-2*C(m,n)+C(m-1,n)) ... % 扩散项
            + ka*(ceq-C(m,n))/((1+k*C(m,n))^2)*(k*qmax*C(m,n)*dt); % 吸附项
    end
end
%%% 结果可视化
x = 0:dx:L;
t = 0:dt:T;
[X, T] = meshgrid(x, t);
figure
surf(X, T, C');
xlabel('距离 (cm) ');
ylabel('时间 (min) ');
zlabel('浓度 (mg/L) ');

```

附录 3

介绍：问题三 Monod 模型 PYTHON 代码

```

from matplotlib import pyplot as plt
plt.rcParams['font.sans-serif'] = ['SimSun']
x=[1.7,2.0,2.5,3.0,3.3,3.5,3.7,3.7]
y=[2.4150,0.5367,0.7103,0.5138,0.4997,0.4200,1.2075,0]
k=[]
for i in range(len(x)):
    n=x[i]*y[i]*(10**7)/((x[i]**2)*(10**6)+y[i])
    k.append(n)
print(k)
print(k)
avg=sum(k)/len(k)
print(avg)
import numpy as np
import seaborn as sns
import pandas as pd
from matplotlib import pyplot as plt
# 中文和负号的正常显示
plt.rcParams['font.sans-serif']=['ei']
plt.style.use('cssic')
sns.set_style('whitegrid')
# 取图的数,6,7,8]
y1 =
prity1)
# pint(type(y1))
# pint(y1)
y2y1
plt.rcParams['font.family'] = ['SimHei'] #用来正常显示中文标签
# 设图形大小
plt.rcParams['figure.figsize'] = (10.0, 8.0)
fig =plt.figure()
# 画形图
ax1 = fig.add_subplot(111)
# plt.xticks(alpha0)
# plt.tick_params(xis='x', width=0)
p1=ax.bar(x, y1, alpha=.8, color='#0C1269',width=0.8)
ax1.set_ylabel('生物解饱和数', fontsize='15')
plt.xlabel("时间", fontsize'15')
ax1.settitle("物降解饱和和常数随时间变化",fontsize='15')
plt.barlabel(p1, label_type='edge',fontsize='15')
# 画折线图
ax2 =ax1.twinx() # 组合图必须加这个
ax2.plot(x, y2, '#5A7A9', ms=10,linewidth=3)
plt.savefig('E:\A 数模 数维图片\Ks.svg')
plt.shw()
function [ Uxt ] = InitialConditions ( x )
%在此函数中定义初值条件

```



```
Uxt=0;
end
function [ Uxt ] = ExactSolution( x,t)
%在此函数中定义待求函数的精确解 u(x,t),用于比较数值解
Uxt=0;
end
function [ Uxt ] = BoundaryConditions( LeftOrRight,t )
%在此函数中定义边值条件
%LeftOrRight 标识左边界条件还是右边界条件 0 代表左, 1 代表右

Uxt=-1;
if LeftOrRight==0
    Uxt=0.5;
elseif LeftOrRight==1
    Uxt=0;
else
    %不应该出现此情况, 抛异常
    error('错误使用边界条件!');
end
end
```