北京化工大学本科毕业设计（论文)

微生物土壤运移模型的求解及仿真软件编制

中期检查报告

陆秋文

北京化工大学生命科学与技术学院

指导教师

周　延

二〇一三年三月十五日

1　问题的背景

在环境工程领域，我们需要对受污染的土壤进行治理。一个比较好的方法就是生物原位修复，即将分离的到的或基因工程合成的细菌或营养物质注入土壤，使其运移到受污染处并大量繁殖，分解有毒物质，达到治理目的。这样，我们需要对土壤中微生物的运动规律进行研究。

在解决传染病、垃圾处理、污水灌溉处理等问题上，人们逐渐认识到了微生物在这些介质中运动是有一定规律的，并有一些学者在这些领域上对微生物的运动规律进行了研究。随着研究的深入和微生物在提高石油开采量、放射性物质和有机污染物的携带运移、提高冶炼率等问题中的应用，更加需要对微生物运动规律的了解，而且要求越来越精确。这样，对微生物运动规律的研究就显得格外有意义。

微生物在土壤中的运移过程看似简单，实际很复杂。其运移机理包括生长、吸附、解吸、沉积（过滤、布朗扩散、截流、沉降）、腐解、钝化、滞留等过程，确定微生物运移速率、时间、分布范围，最大限度地提高细菌降解作用，减少细菌本身的再污染，有必要对微生物在土壤中运移及其影响因素进行定量研究，建立数学模型。

2　问题的数学模型

为了对微生物运动位移进行定量研究，首先应当清楚影响其运动的原因。这个原因有两个方面，一为土壤地下水环境造成的影响，另外一个是微生物自身的因素。

2.1　影响微生物运移规律的因素

微生物在土壤多孔介质中的迁移受到各种非生物和生物因素的影响。这些因素可概括为两个主要方面，即水文地质因素和微生物因素。其中水文地质因素包括多孔介质的结构、质地、有机质含量、氧化膜以及地下水水流速度、溶液化学成分、溶液 pH 值、离子强度等；微生物因素包括细胞的生理状态、细胞的生长与衰亡、细胞的趋磁性、细胞的吸附过程、过滤效应等。除上述因子控制细菌迁移以外，各因子互相影响也很复杂，而且微生物本身是活体，常被称为“活胶体”，受环境影响较大。以上这些复杂因素就增加了微生物迁移研究的难度。

微生物方面的因素对其运移规律也有着重要的影响，包括微生物吸附、微生物生理状态、微生物运动性、趋向性等。

2.2 数学模型的建立

为了建立微生物在饱和地下环境中迁移过程的数学模型，在对微生物迁移过程研究中，作如下基本假定:

1. 土壤是一个均质体;
2. 水流是稳定的;
3. 土壤孔隙率是一定的;
4. 微生物细胞在液相中均匀悬浮;

根据资料，我们看到液相微生物的质量守恒方程，表示为:

$$\frac{\partial(\theta S_w C_w)}{\partial t} = -\nabla(\theta S_w C_w v_w) + \nabla[\theta S_w D_w \nabla v_w] + I + B_w \tag{2.1}$$

式中，

θ 为介质的孔隙度;

S_w 为含水饱和度;

C_w 为液相中微生物的浓度，mol/L^3;

V_w 为液相的总流动速度，L/T;

D_w 液相微生物的物理弥散系数，L^2/T;

I 为单位体积土壤中微生物在液相固相之间的传质速率，mol/(TL^3);

B_w 为微生物生长的生物反应速率，mol/(TL^3)

式 2.1 左侧表示微生物的累积，右侧第一项为对流项，第二项为水动力弥散项，第三项为相间传质项，第四项为生物反应项。

考虑一个方向，微生物的迁移方程简化为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \nu\frac{\partial C}{\partial x} - k_{att}\theta C + k_{det}\rho S + \sigma C \tag{2.2}$$

式中，

C 为微生物在水相中的浓度，mg/m^3;

S 为微生物在固体表面可逆吸附的浓度，mg/g;

ρ 为土壤的容重，g/m^3;

D 为水动力弥散系数，m^2/s;

v 为流速，m/s

k_{att} 为可逆吸附常数，s^{-1}

k_{det} 为可逆解析常数，s^{-1}

σ 为微生物比生长速率，s^{-1}

其中，流速只考虑孔隙流速，孔隙流速可以表示为:

$$v = \frac{Q}{A\theta} \tag{2.3}$$

式中，

Q 表示测定微生物穿透曲线的控制流量，m^3/s

A 为土柱横截面积，m^2

在一维情况下，水动力弥散系数为:

$$D = \alpha v + D_e \tag{2.4}$$

式中，

α 弥散度，m;

v 孔隙流速，m/s;

D_e 有效扩散系数，m/s^2;

3 数学模型中的参数

将方程简化，得到方程 3.1:

$$R\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v\frac{\partial C}{\partial x} - \mu RC \tag{3.1}$$

其中，C 的单位为 /ml。

参考文献与相关实验结果，我们看到各类微生物的运移参数如表 1、表 2。

表 3 的参数是按照方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta\frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C + \delta \tag{3.2}$$

所表现的模型测得的，其中 C 的单位为mg/m^3。

得到了数学模型的参数，就可以对数学模型进行求解了。

表 1: 大肠杆菌运移参数

初始浓度	v(cm/min)	D(cm^2/min)	μ(min^{-1})	R
10^6	0.303	0.340	0.0123	1.20
	0.608	0.607	0.0286	1.05
	0.901	0.978	0.0362	1.02
10^7	0.303	0.316	0.0105	1.03
	0.607	0.610	0.0183	1.00
	1.050	0.905	0.0273	1.00
10^8	0.309	0.315	0.0106	1.00
	0.608	0.616	0.0192	1.00
	1.060	0.917	0.0205	1.00

表 2: IBV、MS2 病毒运移参数

病毒类别	v(cm/s)	D(cm^2/h)	μ(h^{-1})	R
IBV	3.12	0.39	0.18	1.10
MS2	1.60	0.10	0.09	0.98

表 3: 细菌运移参数

菌名	α(m^2/s)	β(m/s)	γ(s^{-1})	δ(T^{-1})
巨大芽孢杆菌	3.66×10^{-6}	0.0006	1.035×10^{-3}	7.819×10^5
假单胞菌	3.66×10^{-6}	0.0006	1.505×10^{-3}	1.338×10^6
大肠杆菌	3.66×10^{-6}	0.0006	5.413×10^{-3}	4.547×10^6
枯草芽孢杆菌	3.66×10^{-6}	0.0006	5.626×10^{-4}	2.067×10^6
金黄色葡萄球菌	3.66×10^{-6}	0.0006	2.037×10^{-3}	9.024×10^5
微球菌	3.66×10^{-6}	0.0006	2.238×10^{-3}	1.343×10^6

4 问题的数学模型求解

从问题中得出抽象的数学表达，得到方程 4.1:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C + \delta \tag{4.1}$$

这是一个对流扩散反应方程。

参考表 3 可以看到 $\beta \gg \alpha$，故此方程为一个对流占优的对流扩散反应方程。

解这样的一个方程是困难的，我们首先解扩散方程，然后解对流方程，再尝试解对流——扩散——反应方程。

4.1 扩散方程

考虑这样的一个方程，即方程 4.2

$$\frac{\partial C}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \tag{4.2}$$

它的定解条件为

$$\begin{gathered} C(x=0,t) = 0 \\ \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=L} = 0 \end{gathered} \tag{4.3}$$

$$C(x,t)|_{t=0} = \psi(x) \tag{4.4}$$

泛定方程和边界条件都是齐次的，应用分离变数法，其试探解

$$C(x,t) = X(x)T(t) \tag{4.5}$$

代入方程 4.2、 4.3，得

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x} + \lambda X = 0 \tag{4.6}$$

$$X(0) = 0, X'(l) = 0 \tag{4.7}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \lambda a^2 T = 0 \tag{4.8}$$

考虑 λ 为实数的情况，当 λ<0 时，方程 4.6 的解为

$$X(x) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x} \tag{4.9}$$

积分常数 C_1 和 C_2 由条件 4.3 确定，解得 $X(x) = 0$，这是没有意义的。

同样，当 λ=0 时 $X(x) = 0$，没有意义，我们来看 λ>0 时的情况，方程 4.6 的解为

$$X(x) = C_1 \cos\sqrt{\lambda}x + C_2 \sin\sqrt{\lambda}x \tag{4.10}$$

积分常数 C_1 和 C_2 由条件 4.3 确定，即

$$\begin{gathered} C_1 = 0 \\ C_2\sqrt{\lambda}\cos\sqrt{\lambda}l = 0 \end{gathered} \tag{4.11}$$

令 $\cos\sqrt{\lambda}l=0$，即 $\sqrt{\lambda}l=(k+1/2)\pi(k=0,1,2,\cdots)$，有

$$\lambda=\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2}{l^2}=\frac{(2k+1)^2\pi^2}{4l^2}\quad(k=0,1,2,\cdots)\tag{4.12}$$

给出了本征值，其本征函数为

$$X(x)=C_2\sin\frac{(2k+1)\pi}{2l}x\quad(k=0,1,2,\cdots)\tag{4.13}$$

我们来看关于 T 的方程，根据式 4.12，有

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2}{l^2}a^2T=0\tag{4.14}$$

解为

$$T_k(t)=Ce^{-\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2a^2}{l^2}t}\quad(k=0,1,2,\cdots)\tag{4.15}$$

这样，$C(x,t)$ 的解应是

$$u(x,t)=\sum_{k=0}^{\infty}C_ke^{-\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2a^2t}{l^2}}\sin\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)\pi x}{l}\tag{4.16}$$

将方程 4.2 代入方程 4.4 中，有

$$\sum_{k=0}^{\infty}C_k\sin\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)\pi x}{l}=\psi(x)\quad(0<x<l)\tag{4.17}$$

确定了系数 C_k。

4.2 对流方程

忽略掉扩散项，得到方程 4.18

$$R\frac{\partial C}{\partial t}+v\frac{\partial C}{\partial x}=-\mu C+\delta\tag{4.18}$$

是一个一阶线性偏微分方程，其定解条件为:

$$x=0,t>0,c=c_0\tag{4.19}$$

$$x=\infty, t>0, c=0 \tag{4.20}$$

$$t=0, c=f(x)=0 \tag{4.21}$$

这是一个半无界问题。

将方程 4.18 作变换，令 $a=v/R$、$b=\mu/R$、$D=\delta/R$ 有

$$\frac{\partial C}{\partial t}+a\frac{\partial C}{\partial x}=-bC+D \tag{4.22}$$

令

$$\begin{cases}\xi=x-at\\ \eta=x+at\end{cases} \tag{4.23}$$

即

$$\begin{cases}x=\dfrac{1}{2}(\xi+\eta)\\ t=\dfrac{1}{2a}(\eta-\xi)\end{cases} \tag{4.24}$$

用式 4.23 作映射变换，即

$$\frac{\partial C}{\partial \xi}=\frac{\partial C}{\partial t}\frac{dt}{d\xi}+\frac{\partial C}{\partial x}\frac{dx}{d\xi}=-\frac{1}{2a}\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4.25}$$

$$\frac{\partial C}{\partial \eta}=\frac{\partial C}{\partial t}\frac{dt}{d\eta}+\frac{\partial C}{\partial x}\frac{dx}{d\eta}=\frac{1}{2a}\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4.26}$$

我们再看方程 4.22，在变换 4.23 下有

$$2a\frac{\partial C}{\partial \eta}=-bC+D \tag{4.27}$$

是比较简单的偏微分方程，它的通解为

$$C=C_1(\xi)e^{-\frac{b}{2a}\eta}+\frac{D}{b} \tag{4.28}$$

即

$$C(x,t)=C_1(x-at)e^{-\frac{b}{2a}(x+at)}+\frac{D}{b} \tag{4.29}$$

由初值条件 4.21，即 $C(x,t)|_{t=0}=f(x)$，有

$$C_1(x)=e^{\frac{b}{2a}}\left(f(x)-\frac{D}{b}\right)\quad (x>0) \tag{4.30}$$

由边界条件 4.19，即 $C(x,t)|_{x=0}=c_0$，有

$$C_1(x)=\left(c_0-\frac{D}{b}\right)e^{-b\frac{b}{2a}x}\quad (x<0) \tag{4.31}$$

整理得

$$C(x,t)=\begin{cases}\left(f(x)-\dfrac{D}{b}\right)e^{-bt}+\dfrac{D}{b} & x-at>0\\ \left(c_0-\dfrac{D}{b}\right)e^{-\frac{b}{a}x}+\dfrac{D}{b} & x-at<0\end{cases} \tag{4.32}$$

是对流方程 4.22 的解，它的图像如图 1 所示。

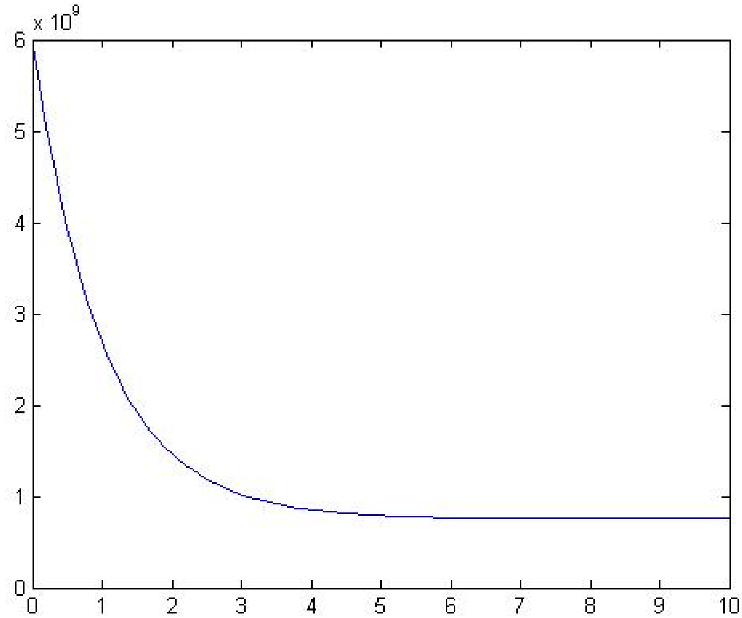


图 1: 对流方程的图像，数据取自巨大芽孢杆菌对流方程

4.3 对流扩散反应方程求解

求解对流扩散反应方程是比较复杂的。现考虑采用线性变换的方法将一阶偏导数项消去，化成单纯的扩散方程再来解。

目前，本项工作正在进行。

5　有限差分法求解数学模型

考虑一个简单的对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{5.1}$$

其中 a、ν 为常数，$\nu>0$，给定初值

$$u(x,0)=g(x) \tag{5.2}$$

构成了**对流扩散方程**的初值问题，在我们的模型中，它是一个对流占优的扩散问题。

将方程 5.1 差分，有

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=\nu\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2} \tag{5.3}$$

其截断误差为 $O(\tau+h^2)$。

下面来分析差分格式 5.3 的稳定性，令

$$\lambda=a\frac{\tau}{h}\quad\ \mu=\nu\frac{\tau}{h^2} \tag{5.4}$$

则差分格式 5.3 改写为

$$u_j^{n+1}=u_j^n-\frac{1}{2}\lambda(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)+\mu(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n) \tag{5.5}$$

我们给出用于判断差分格式稳定性的 **von Neumann** 定理，即

定理 5.1 (von Neumann 定理) *差分格式*

$$u_j^{n+1}=C(x_j,\tau)u_j^n \tag{5.6}$$

稳定的必要条件是当 $\tau\le\tau_0$，$n\tau\le T$，*对所有的* k *有*

$$|\lambda_j(G(\tau,k))|\le 1+M\tau,\quad j=1,2,\cdots,p, \tag{5.7}$$

其中 $|\lambda_j(G(\tau,k))|$ *表示* $G(\tau,k)$ *的特征值，*M *为常数。*

式 5.5 的增长因子为

$$G(\tau,k)=1-2\mu(1-\cos kh)-i\lambda\sin kh \tag{5.8}$$

模的平方为

$$\begin{aligned}|G(\tau,k)|^2 &= [1-2\mu(1-\cos kh)]^2+\lambda^2\sin^2 kh\\ &= 1-4\mu(1-\cos kh)+4\mu^2(1-\cos kh)^2+\lambda^2\sin^2 kh\\ &= 1-(1-\cos kh)[4\mu-4\mu^2(1-\cos kh)-\lambda^2(1+\cos kh)]\end{aligned} \tag{5.9}$$

差分格式稳定的充分条件为

$$4\mu-4\mu^2(1-\cos kh)-\lambda^2(1+\cos kh)\geq 0 \tag{5.10}$$

即

$$(2\lambda^2-8\mu^2)\frac{1-\cos kh}{2}+4\mu-2\lambda^2\geq 0 \tag{5.11}$$

注意到 $\frac{1}{2}(1-\cos kh)\in[0,1]$，上式应满足

$$(2\lambda^2-8\mu^2)+4\mu-2\lambda^2\geq 0,\quad 4\mu-2\lambda^2\geq 0 \tag{5.12}$$

由此得到差分格式 5.3 的稳定性限制为

$$\tau\leq\frac{2\nu}{a^2} \tag{5.13}$$

$$\nu\frac{\tau}{h^2}=\frac{1}{2} \tag{5.14}$$

目前工作进行到这里，下一阶段将对差分法求解模型做更加深入的研究。

6　模型仿真计算的结果

利用 MATLAB PDETool 工具箱，采用有限元法，求解模型，其结果如附图 2 、3、 4 、 5 、 6 、 7 所示。

7　接下来的工作计划

接下来的主要工作在差分算法的研究与实现，尤其是三维模型的数值算法。如表 4 所示。

表 4: 工作计划表

时间	工作内容	工作地点
2013 年 4 月	三维方程求解算法的研究	机房
2013 年 5 月	数值仿真程序的编制	机房
2013 年 6 月	完成论文	实验室

参考文献

[1] 刘法, 缪国庆, 梁昆淼. 数学物理方法 (第四版)[M]. 高等教育出版社, 2010

[2] 庞明勇. 基于离散模型的二维水波实时动态模拟方法 [J]. 水利学报. 2007, **38**(11):6

[3] 张培文. 降雨条件下饱和—非饱和土径流渗流耦合数值模拟研究 [D]. 大连, 大连理工大学, 2002

[4] 张文生. 科学计算中的偏微分方程有限差分方法 [M]. 高等教育出版社, 2006

[5] 张瑞玲. 甲基叔丁基醚的生物降解机理与微生物在地下水中的迁移 [D]. 天津, 天津大学, 2007

[6] 李焕荣. 土壤水动力系统的数值解法的分析与应用研究 [D]. 北京, 首都师范大学, 2007

[7] 杨德军. 基于 SPAC 系统的土壤水动力学模型研究 [D]. 杭州, 浙江大学建筑工程学院, 2009

[8] 王玉珉, 王印杰. 非饱和土壤 Richards 方程入渗求解探讨 [J]. 水文地质工程地质. 2004, **31**(1):6

[9] 田富强, 胡和平. 基于常微分方程求解器的 Richards 方程数值模型 [J]. 清华大学学报（自然科学版）. 2007, **47**(6):4

[10] 高琼. 大肠杆菌在土壤中的迁移特性实验研究 [D]. 天津, 天津大学, 2011

[11] 高雷阜, 齐微. 改进的粒子群算法在偏微分方程中的仿真应用 [J]. 计算机仿真. 2011, **28**(12)

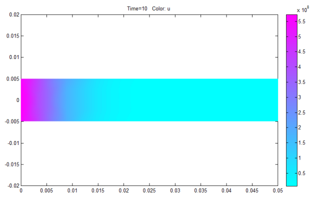
PDE 工具箱求解程序

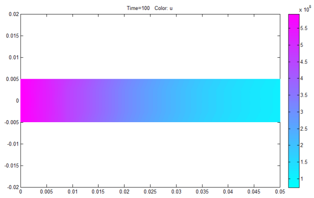
```
function pdemodel
[pde_fig,ax]=pdeinit;
pdetool('appl_cb',1);
set(ax,'DataAspectRatio',[1 0.0060000000000000001 1]);
set(ax,'PlotBoxAspectRatio',[250 166.66666666666666 50]);
set(ax,'XLim',[0 10]);
set(ax,'YLim',[-0.02 0.02]);
set(ax,'XTickMode','auto');
set(ax,'YTickMode','auto');

% Geometry description:
pderect([0 10 0.0050000000000000001 -0.0050000000000000001],'R1');
set(findobj(get(pde_fig,'Children'),'Tag','PDEEval'),'String','R1')

% Boundary conditions:
pdetool('changemode',0)
pdesetbd(4,...
'dir',...
1,...
'1',...
'6e8')
pdesetbd(3,...
'neu',...
1,...
'0',...
'0')
pdesetbd(2,...
'neu',...
1,...
```

```
'0',...
'0')
pdesetbd(1,...
'neu',...
1,...
'0',...
'0')

% Mesh generation:
setappdata(pde_fig,'Hgrad',1.3);
setappdata(pde_fig,'refinemethod','regular');
setappdata(pde_fig,'jiggle',char('on','mean',''));
pdetool('initmesh')
pdetool('refine')
pdetool('refine')

% PDE coefficients:
pdeseteq(2,...
'3.66e-6',...
'1.035e-3',...
'7.819e5',...
'1.0',...
'0:10',...
'0.0',...
'0.0',...
'[0 100]')
setappdata(pde_fig,'currparam',...
['3.66e-6 ';...
'1.035e-3';...
'7.819e5 ';...
```

```
'1.0      '])

% Solve parameters:
setappdata(pde_fig,'solveparam',...
str2mat('0','2016','10','pdeadworst',...
'0.5','longest','0','1E-4','','fixed','Inf'))

% Plotflags and user data strings:
setappdata(pde_fig,'plotflags',[1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0 11 1 0 0 0 0 1]);
setappdata(pde_fig,'colstring','');
setappdata(pde_fig,'arrowstring','');
setappdata(pde_fig,'deformstring','');
setappdata(pde_fig,'heightstring','');

% Solve PDE:
pdetool('solve')
```

附图（仿真结果）


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

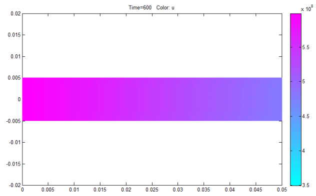
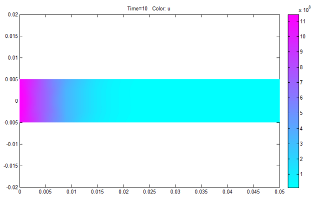
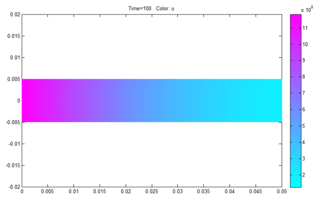

(c) $t = 600$

图 2: 巨大芽孢杆菌的仿真结果


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

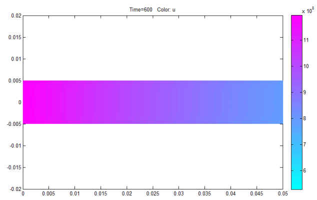
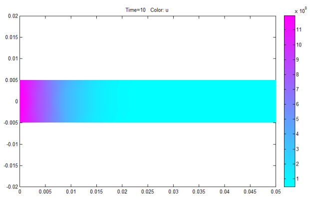
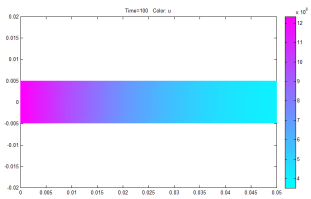

(c) $t = 600$

图 3: 假单胞菌的仿真结果


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

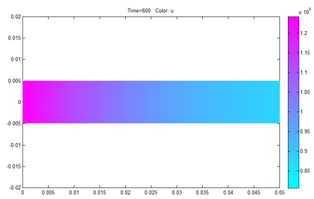
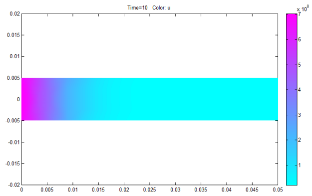
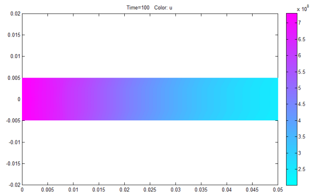

(c) $t = 600$

图 4: 大肠杆菌的仿真结果


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

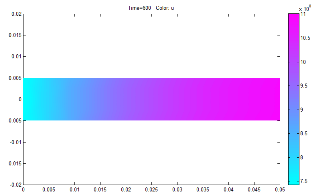
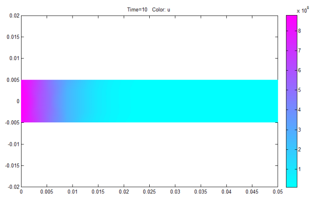
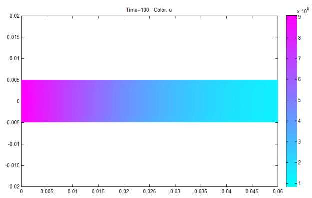

(c) $t = 600$

图 5: 枯草芽孢杆菌的仿真结果


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

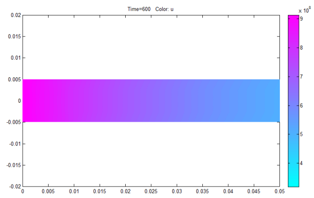
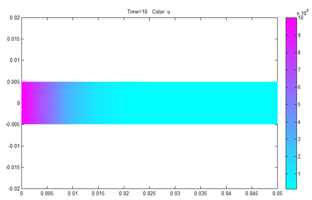
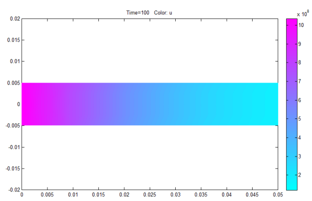

(c) $t = 600$

图 6: 金黄色葡萄球菌的仿真结果


(a) $t = 10$


(b) $t = 100$

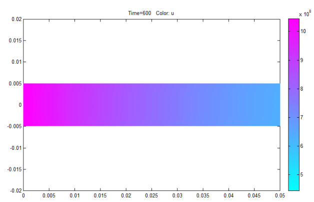

(c) $t = 600$

图 7: 微球菌的仿真结果