

# 微生物土壤运移模型的求解及仿真软件编制

## 毕业设计答辩

陆秋文

北京化工大学生命科学与技术学院

指导教师 周 延

2013 年 6 月 3 日

# 目录

- ① 绪论
- ② 建立模型
- ③ 精确解
- ④ 数值解
- ⑤ 数值模拟
- ⑥ 结论

- 1 绪论
- 2 建立模型
- 3 精确解
- 4 数值解
- 5 数值模拟
- 6 结论

# 研究背景与意义

土壤中微生物的运动是有规律的。在下面这些领域需要对这些规律进行研究:

- 环境工程领域，对污染的土壤进行治理;
- 石油开采，提高开采量;
- 放射性物质的携带运输.

# 影响微生物运动的因素

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, 如:

- 水文地质因素
- 微生物因素

# 研究中的数学理论

在本研究中, 需要对模型进行分析和求解, 涉及到以下数学理论:

- 线性二阶偏微分方程理论 (数学物理方程)
- 复变函数与积分变换
- 矩阵计算
- 有限差分法

- ① 绪论
- ② 建立模型
- ③ 精确解
- ④ 数值解
- ⑤ 数值模拟
- ⑥ 结论

# 基本假设

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：

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



# 微生物在饱和土壤中的迁移方程

## 迁移方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - k_{att} \theta C + k_{det} \rho S + \sigma C \quad (1)$$

$C$  为微生物在水相中的浓度,  $\text{mg}/\text{m}^3$ ;

$S$  为微生物在固体表面可逆吸附的浓度,  $\text{mg}/\text{g}$ ;

$\rho$  为土壤的容重,  $\text{g}/\text{m}^3$ ;

$D$  为水动力弥散系数,  $\text{m}^2/\text{s}$ ;

$v$  为流速,  $\text{m}/\text{s}$

$k_{att}$  为可逆吸附常数,  $\text{s}^{-1}$

$k_{det}$  为可逆解析常数,  $\text{s}^{-1}$

$\sigma$  为微生物比生长速率,  $\text{s}^{-1}$

# 对流扩散反应方程

## 考虑一维上的模型

### 对流扩散反应方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C + \delta \quad (2)$$

$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$  为扩散项，描述物质的扩散作用；

$\frac{\partial C}{\partial x}$  对流项，描述物质的对流传导作用；

$C$  为反应项，描述物质在过程中的消耗；

$\delta$  为生长项，描述物质的产生。

## 参数

初始浓度	$v(\text{cm}/\text{min})$	$D(\text{cm}^2/\text{min})$	$\mu(\text{min}^{-1})$	$R$
$10^6$	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

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

上两表的参数是按照方程

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \mu RC \quad (3)$$

所表现的模型测得的，其中  $C$  的单位为  $\text{mg}/\text{m}^3$ 。

## 参数

菌名	$\alpha(\text{m}^2/\text{s})$	$\beta(\text{m}/\text{s})$	$\gamma(\text{s}^{-1})$	$\delta(\text{T}^{-1})$
巨大芽孢杆菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$1.035 \times 10^{-3}$	$7.819 \times 10^5$
假单胞菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$1.505 \times 10^{-3}$	$1.338 \times 10^6$
大肠杆菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$5.413 \times 10^{-3}$	$4.547 \times 10^6$
枯草芽孢杆菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$5.626 \times 10^{-4}$	$2.067 \times 10^6$
金黄色葡萄球菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$2.037 \times 10^{-3}$	$9.024 \times 10^5$
微球菌	$3.66 \times 10^6$	0.0006	$2.238 \times 10^{-3}$	$1.343 \times 10^6$

- 1 绪论
- 2 建立模型
- 3 精确解
- 4 数值解
- 5 数值模拟
- 6 结论

# 模型

从问题中得出抽象的数学表达，得到方程 4:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C + \delta \quad (4)$$

这是一个对流扩散反应方程。

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。

解这样的方程是困难的，我们首先解对流方程，再尝试解对流扩散反应方程。

# 扩散方程

考虑这样的—个方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad (-\infty < x < +\infty, t > 0) \quad (5)$$

它的定解条件为

$$C|_{t=0} = \phi(x) \quad (6)$$



我们采用分离变量法求解这个方程, 解表示成积分

$$C(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(x, t, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\omega) e^{i\omega x - \omega^2 a^2 t} d\omega \quad (7)$$

结果为

$$\begin{aligned} C(x, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} c_0 \delta(\xi - x_0) \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{(x - \xi)^2}{4a^2 t}} d\xi \\ &= \frac{c_0}{2a\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{(x - x_0)^2}{4a^2 t}} \end{aligned} \quad (8)$$

# 对流方程

忽略掉扩散项, 得到方程 (9)

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = -\mu C + \delta \quad (9)$$

是一个一阶线性偏微分方程, 其定解条件为:

$$x = 0, t > 0, c = c_0 \quad (10)$$

$$x = \infty, t > 0, c = 0 \quad (11)$$

$$t = 0, c = f(x) = 0 \quad (12)$$

这是一个半无界问题.

采用变换的方法来求解, 其结果为由初值条件 (12), 即

$C(x, t)|_{t=0} = f(x)$ , 有

$$C_1(x) = e^{\frac{b}{2a}} \left( f(x) - \frac{D}{b} \right) \quad (x > 0) \quad (13)$$

由边界条件 (10), 即  $C(x, t)|_{x=0} = c_0$ , 有

$$C_1(x) = \left( c_0 - \frac{D}{b} \right) e^{-\frac{b}{2a}x} \quad (x < 0) \quad (14)$$

整理得

$$C(x, t) = \begin{cases} \left( f(x) - \frac{D}{b} \right) e^{-bt} + \frac{D}{b} & x - at > 0 \\ \left( c_0 - \frac{D}{b} \right) e^{-\frac{b}{a}x} + \frac{D}{b} & x - at < 0 \end{cases} \quad (15)$$

是对流方程 (9) 的解.

- ① 绪论
- ② 建立模型
- ③ 精确解
- ④ 数值解
- ⑤ 数值模拟
- ⑥ 结论

对于大部分的偏微分方程模型问题来说, 解得它们的解析解是比较困难的. 在大部分的情况下, 我们不能也没有要求得它们的解析解. 因此, 研究它们的数值解的求解方法是很有必要的.

我们同样从简单的方程开始解, 建立数值解的求解方法的基本体系, 然后我们再研究复杂模型的求解方法.

# 常系数扩散方程

考虑常系数扩散方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ u(x, 0) = g(x), \quad x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (16)$$

构成了初值问题, 其向前差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} - a \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} = 0, \quad (17)$$

$$u_j^0 = g(x_j) \quad (18)$$

其截断误差为  $O(\tau + h^2)$ .

考虑它的向后差分格式

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau} - a \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^{n-1}}{h^2} = 0 \quad (19)$$

其截断误差也是  $O(\tau + h^2)$ .

## 加权隐式格式

将式 (17) 改写为

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau} - a \frac{u_{j+1}^{n-1} - 2u_j^{n-1} + u_{j-1}^{n-1}}{h^2} = 0 \quad (20)$$

在式 (17) 乘以  $\theta$ , 用  $(1 - \theta)$  乘以 (20), 得到差分格式

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau} - a \left[ \theta \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + (1 - \theta) \frac{u_{j+1}^{n-1} - 2u_j^{n-1} + u_{j-1}^{n-1}}{h^2} \right] = 0 \quad (21)$$

其中,  $0 \leq \theta \leq 1$ , 这种差分格式称为加权差分格式.



我们求差分格式 (21) 的截断误差, 设  $u(x, t)$  是方程 (16) 的充分光滑的解, 在  $(x_j, t_n)$  处进行 Taylor 级数展开得

$$E = a \left( \frac{1}{2} - \theta \right) \tau \left[ \frac{\partial^3 u}{\partial x^2} \partial t \right]_j^n + O(\tau^2 + h^2)$$

当  $\theta \neq 1/2$  时, 其截断误差为  $O(\tau + h^2)$ . 当  $\theta = 1/2$  时, 其截断误差为  $O(\tau^2 + h^2)$ .

采用 Fourier 方法分析差分格式 (21) 的稳定性, 求得其增长因子为

$$G(\tau, k) = \frac{1 - 4(1 - \theta)a\lambda \sin^2 \frac{kh}{2}}{1 + 4\theta a\lambda \sin^2 \frac{kh}{2}} \quad (22)$$

要  $|G(\tau, k)| \leq 1$ , 即

$$-1 \leq \frac{1 - 4(1 - \theta)a\lambda \sin^2 \frac{kh}{2}}{1 + 4\theta a\lambda \sin^2 \frac{kh}{2}} \leq 1$$

考虑左边的不等式, 得

$$4a\lambda(1 - 2\theta) \sin^2 \frac{kh}{2} \leq 2$$

因为  $\sin^2 \frac{kh}{2} \leq 1$ , 要求化为

$$2a\lambda(1 - 2\theta) \leq 1. \quad (23)$$

这是 (21) 的稳定性要求.

# 初边值问题的处理

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, & 0 < x < 1, t > 0 \\ u(x, 0) = g(x), & 0 \leq x \leq 1 \\ u(0, t) = \phi(t), & t \geq 0 \\ u(1, t) = \psi(t), & t \geq 0 \end{cases} \quad (24)$$

其计算区域为  $x = [0, 1]$ , 因此我们分开区间

$0 = x_0 < x_1 < \cdots < x_J = 1$ , 第一边值问题的边界处理可取

$$\begin{cases} u_0^n = \phi(t_n), & n \geq 0 \\ u_J^n = \psi(t_n), & n \geq 0 \end{cases} \quad (25)$$

在初始线我们利用初始条件的离散

$$u_j^0 = g(x_j) = g_j \quad (26)$$

得到边界点上的差分格式.

# 常系数对流方程

考虑简单的双曲型对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (27)$$

我们来建立双曲型偏微分方程的求解差分格式.

首先讨论方程 (27) 的特征线, 考虑  $u$  在直线  $x - at = c$  上的方向的方向导数, 有

$$\left. \frac{du}{dt} \right|_l = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} \quad (28)$$

其中, 由方程 (27) 知  $u$  沿  $l$  的值不变, 这条直线即为方程的特征线.

我们利用特征线方法来构造差分格式.

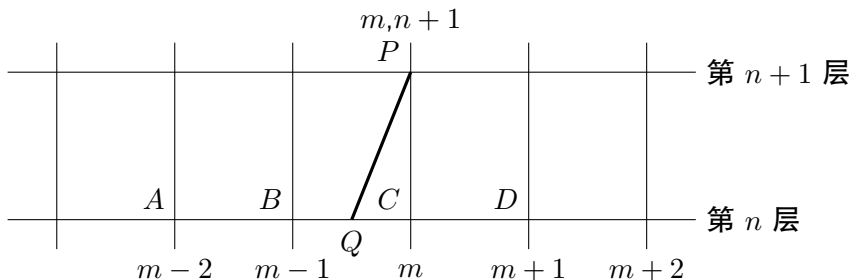


Figure: 用特征线法构造差分格式

如图 1 所示, 假定第  $n$  层的  $u_m^n$  值已知, 求  $P$  点  $(m, n+1)$  的值  $u_m^{n+1}$ . 过  $P$  作特征线与  $n$  时间层相交在  $Q$  点. 假定  $Q$  在线段  $BC$  上, 即  $u(B) = u(C)$ , 采用下面的方法求  $u(Q)$ .

$$u_m^{n+1} = (1 - ar)u_m^n + ar u_{m-1}^n \quad (29)$$

其中,  $r = \Delta t/h$ , 此格式称为迎风格式, 其截断误差为  $O(\Delta t + h)$ .

$$\begin{aligned} u_{m+1}^n &= \frac{1}{2}(1 - ar)u_{m+1}^n + \frac{1}{2}(1 + ar)u_{m-1}^n \\ &= \frac{1}{2}(u_{m-1}^n + u_{m+1}^n) - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n). \end{aligned} \quad (30)$$

称为 Lax-Friedrichs 格式.

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) + \frac{a^2 r^2}{2}(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) \quad (31)$$

为 Lax-Wendorff 格式.



# 对流扩散方程

考虑一个简单的对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (32)$$

其中  $a$ 、 $\nu$  为常数,  $\nu > 0$ , 给定初值

$$u(x, 0) = g(x) \quad (33)$$

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 (60) 差分, 有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = \nu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} \quad (34)$$

其截断误差为  $O(\tau + h^2)$ , 分析差分格式 (34) 的稳定性, 差分格式稳定的充分条件为

$$(2\lambda^2 - 8\mu^2) \frac{1 - \cos kh}{2} + 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0 \quad (35)$$

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

$$(2\lambda^2 - 8\mu^2) + 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0, \quad 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0 \quad (36)$$

由此得到差分格式 (34) 的稳定性限制为

$$\tau \leq \frac{2\nu}{a^2} \quad (37)$$

$$\nu \frac{\tau}{h^2} = \frac{1}{2} \quad (38)$$

## 迎风差分格式

根据中心显式差分格式的稳定性要求可知, 当  $\nu/a^2$  比较小时, 时间步长是比较小的. 我们在一阶空间偏导数的离散中采用单边差商, 令  $a > 0$ , 得到方程 (60) 的迎风差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \mu \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} \quad (39)$$

容易看出, 其截断误差为  $O(\tau + h)$ . 差分格式的稳定性条件为

$$\left( \mu + \frac{ah}{2} \right) \frac{\tau}{h^2} \leq \frac{1}{2} \quad (40)$$

## 隐式迎风差分格式

考虑到隐性差分格式带来的诸多好处 (如无条件稳定), 给出迎风差分格式的隐式格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a \frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = \nu \sigma \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \quad (41)$$

此格式是无条件稳定的.

现在考虑隐式差分格式的解法, 将式 (41) 化为

$$-\left(\frac{a}{2h} + \frac{\nu\sigma}{h^2}\right) u_{j-1}^{n+1} + \left(\frac{a}{2h} - \frac{\nu\sigma}{h^2}\right) u_{j+1}^{n+1} + \left(\frac{1}{2} + \frac{2\sigma}{h^2}\right) u_j^{n+1} = \frac{1}{2} u_j^n$$

令

$$A_j = -\frac{a}{2h} - \frac{\nu\sigma}{h^2} \quad B_j = \frac{1}{2} + \frac{2\sigma}{h^2}$$

$$C_j = \frac{a}{2h} - \frac{\nu\sigma}{h^2} \quad D_j = \frac{1}{2}$$

则方程可以写为

$$A_j u_{j-1}^{n+1} + B_j u_j^{n+1} + C_j u_{j+1}^{n+1} = D_j \quad (42)$$

其中,  $j = 1, 2, \dots, J-1$ . 我们令

$$u_0^{n+1} = 0, \quad u_J^{n+1} = 0 \quad (43)$$

为边界条件, 方程 (42) 和方程 (43) 构成系数为三对角矩阵的方程组, 我们可以利用追赶法求解这一方程组.

# 空间上的对流扩散反应方程

现在我们开始讨论在空间上建立和求解数学模型, 根据运动控制方程, 我们得到物质在空间上的分布为

$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \mu C + \lambda, \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (44)$$

我们考虑对上式进行变换, 将直角坐标系变换为正交曲线坐标系, 以溶质位移作为主值方向, 式 (44) 变为

$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial S} = \frac{\partial}{\partial S} \left( D_L \frac{\partial C}{\partial S} \right) + \frac{\partial}{\partial R} \left( D_R \frac{\partial C}{\partial R} \right) + \frac{\partial}{\partial T} \left( D_T \frac{\partial C}{\partial T} \right) - \mu C + \lambda \quad (45)$$

其中,  $S$  为流线方向,  $R, T$  为与  $S$  相交的方向.  $D_L, D_R$  和  $D_T$  为三个方向的系数.

我们令  $D_L, D_R$  和  $D_T$  为常数, 上式变为

$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial S} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial S^2} + D_R \frac{\partial^2 C}{\partial R^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial T^2} - \mu C + \lambda \quad (46)$$



采用算子分裂法, 得

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} = -\mu C + \lambda, \quad n\Delta t \leq t \leq (n + \frac{1}{3})\Delta t \quad (47)$$

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial S} = D_L\frac{\partial^2 C}{\partial S^2}, \quad (n + \frac{1}{3})\Delta t \leq t \leq (n + \frac{2}{3})\Delta t \quad (48)$$

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} = D_R\frac{\partial^2 C}{\partial R^2} + D_T\frac{\partial^2 C}{\partial T^2}, \quad (n + \frac{2}{3})\Delta t \leq t \leq (n + 1)\Delta t \quad (49)$$

我们采用常数变易法来求解式 (47), 该方程为线性一阶常微分方程, 初始条件为  $C^{n+1/3}|_{t=t_n} = C^n$ .

应用常数变易法求得 (47) 的解为

$$\begin{cases} C_{i,j,k}^{n+1/3} = (C_{i,j,k}^n - \frac{\lambda}{\mu}) \exp(-\mu \Delta t / Rd) + \frac{\lambda}{\mu}, & (\mu \neq 0) \\ C_{i,j,k}^{n+1/3} = C_{i,j,k}^n + \frac{\lambda \Delta t}{Rd}, & (\mu = 0) \end{cases} \quad (50)$$

我们采用匹配伪弥散系数法来求解 (48)，以避免数值弥散和震荡。  
与 (48) 式对应的纯对流方程为

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial S} = 0, \quad (n + \frac{1}{3})\Delta t \leq t \leq (n + \frac{2}{3})\Delta t \quad (51)$$

采用差分法, 得

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 3\theta \frac{C_{i,j,k}^{n+2/3} - C_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta t} + 3(1 - \theta) \frac{C_{i,j,k}^{n+2/3} - C_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta t} \quad (52)$$

$$\frac{\partial C}{\partial S} = \left[ \frac{C_{i,j,k}^{n+2/3} - C_{i,j,k}^{n+1/3}}{2} - \frac{C_{i,j,k}^{n+2/3} - C_{i,j,k}^{n+1/3}}{2} \right] / \Delta S_i \quad (53)$$

将式 (52) 和式 (53) 代入式 (51), 整理得

$$C_{i+1,j,k}^{n+2/3} = K_1 C_{i,j,k}^{n+1/3} + K_2 C_{i,j,k}^{n+2/3} + K_3 C_{i+1,j,k}^{n+1/3} \quad (54)$$

式中,

$$K_1 = \frac{Cr + 2\theta}{2 + Cr - 2\theta}, \quad K_2 = \frac{Cr - 2\theta}{2 + Cr - 2\theta}, \quad K_3 = \frac{2 - Cr - 2\theta}{2 + Cr - 2\theta}$$

其中,  $Cr = u\Delta t/(R_d\Delta S_i)$ . 对上式进行 Taylor 级数展开到二阶, 得到一个对流弥散方程. 其弥散系数来自二阶阶段误差, 其表达式为

$$D_N = u\Delta S_i(0.5 - \theta)$$

令  $D_L = D_N$ , 得  $\theta = 0.5 - (1/Pe)$ , 其中  $Pe = u\Delta S_i/D_L$ .  
考虑式 (54) 的稳定性, 要求满足

$$2 \leq Pe \leq \infty \quad (55)$$

$$1 - \frac{2}{Pe} \leq Cr \leq 1 + \frac{2}{Pe} \quad (56)$$

我们看到式 (54) 是无条件稳定的, 具有二阶的精度.

再利用交替方向差分法来求解 (49), 其交替方向差分格式为

$$R_d \frac{C_{i,j,k}^{n+5/6} - C_{i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta t} = D_R \delta_R^2 C_{i,j,k}^{n+5/6} + D_\tau \delta_\tau^2 C_{i,j,k}^{n+2/3} \quad (57)$$

$$R_d \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+5/6}}{\Delta t} = D_R \delta_R^2 C_{i,j,k}^{n+5/6} + D_\tau \delta_\tau^2 C_{i,j,k}^{n+1} \quad (58)$$

其中,

$$\delta_R^2 C_{i,j,k} = \left[ \frac{C_{i,j-1,k}}{(R_{j+1} - R_{j-1})(R_j - R_{j-1})} - \frac{C_{i,j,k}}{(R_{j+1} - R_j)(R_j - R_{j-1})} + \frac{C_{i,j+1,k}}{(R_{j+1,k} - R_{j-1})(R_{j+1} - R_j)} \right]$$

$$\delta_T^2 C_{i,j,k} = \left[ \frac{C_{i,j,k-1}}{(T_{k+1} - T_{k-1})(T_k - T_{k-1})} - \frac{C_{i,j,k}}{(T_{k+1} - T_k)(T_k - T_{k-1})} + \frac{C_{i,j,k+1}}{(T_{k+1} - T_{k-1})(T_{k+1} - T_k)} \right]$$

方程 (57) 和方程 (58) 为三对角线性方程组, 用追赶法求解.

- ① 绪论
- ② 建立模型
- ③ 精确解
- ④ 数值解
- ⑤ 数值模拟
- ⑥ 结论



# 扩散方程

我们考虑这样简单的扩散方程,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2 & 0 < x < 1, t > 0, \\ u(0, t) = u(1, t) = 0, & t > 1, \\ u(x, 0) = \sin(\pi x) + x(1 - x). \end{cases} \quad (59)$$

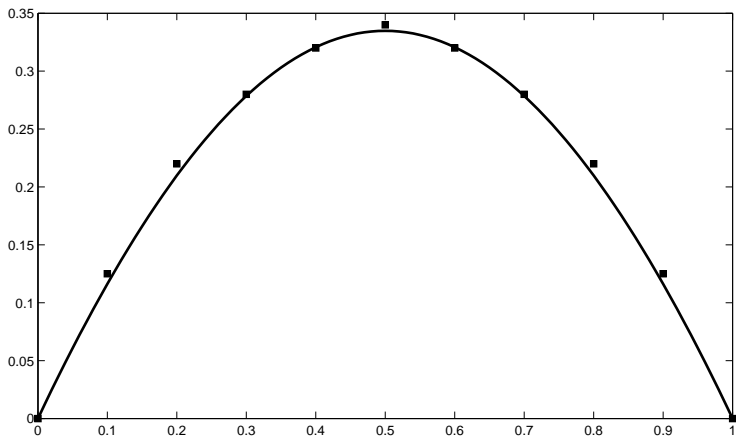


Figure: 扩散方程六点差分格式计算结果

# 对流扩散方程

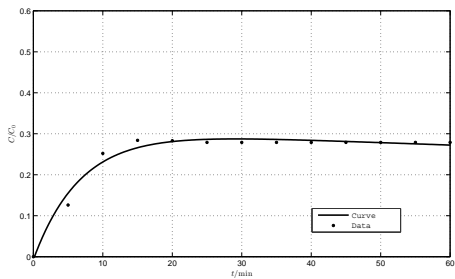
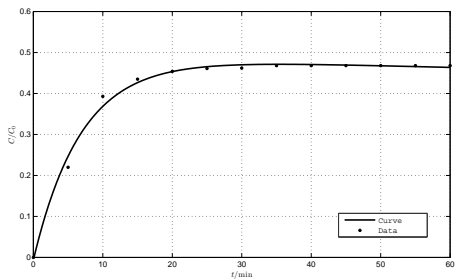
考虑对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (60)$$

其中  $a$ 、 $\nu$  为常数,  $\nu > 0$ , 给定初值

$$u(x, 0) = g(x) \quad (61)$$

我们利用差分方法得到了一组差分方程, 然后利用追赶法求解.

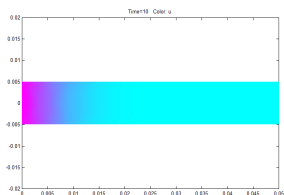


考虑这样的多维方程

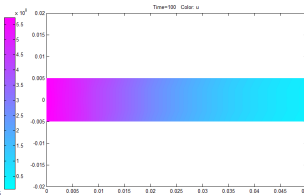
$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \mu C + \lambda, \quad (i, j = 1, 2) \quad (62)$$

我们采用有限元法来求解这个方程, 不考虑对流项.

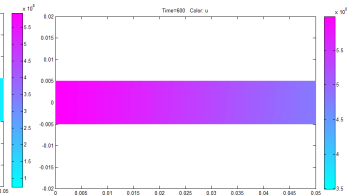
# 巨大芽孢杆菌



(a)  $t = 10$

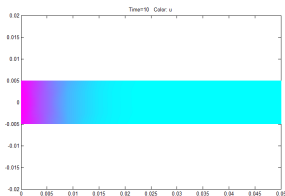
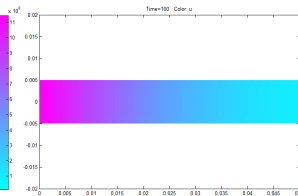
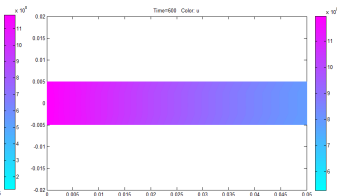


(b)  $t = 100$

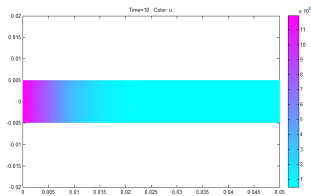


(c)  $t = 600$

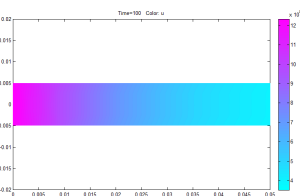
## 假单胞菌

(d)  $t = 10$ (e)  $t = 100$ (f)  $t = 600$

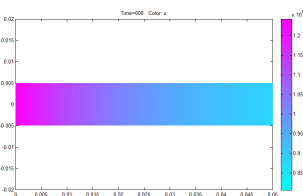
# 大肠杆菌



(g)  $t = 10$



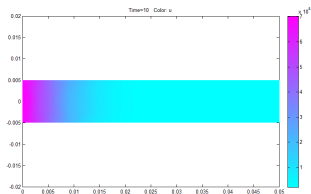
(h)  $t = 100$



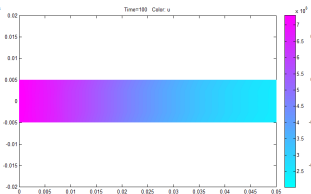
(i)  $t = 600$



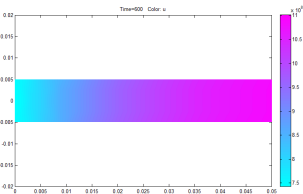
# 枯草芽孢杆菌



(j)  $t = 10$

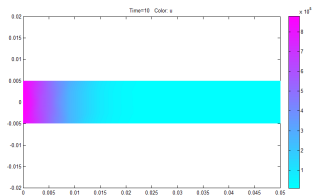
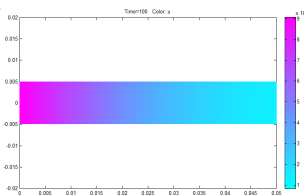
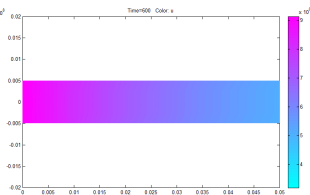


(k)  $t = 100$

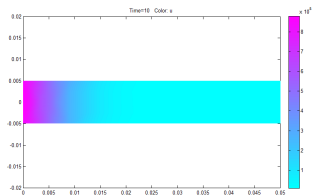


(l)  $t = 600$

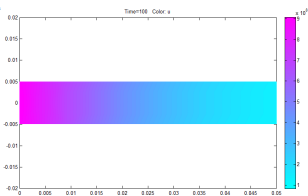
## 金黄色葡萄球菌

(m)  $t = 10$ (n)  $t = 100$ (o)  $t = 600$

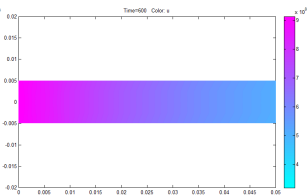
# 微球菌



(p)  $t = 10$



(q)  $t = 100$



(r)  $t = 600$

- ① 绪论
- ② 建立模型
- ③ 精确解
- ④ 数值解
- ⑤ 数值模拟
- ⑥ 结论

# 结论

在本课题中我们以此讨论了扩散方程、对流方程、对流扩散方程和对流扩散反应方程的解析解和数值解的求解方法. 同时利用算子分裂法将三维空间模型分解为简单的微分方程, 求得其数值解. 这项工作给我们了解微生物在土壤中的运移规律打下了基础.

# 展望

利用控制理论中关于分布参数系统的相关理论, 找到合适的被控变量和操纵变量, 根据数学模型推得合适的控制规律和参数, 从而对微生物的运移过程进行控制.

谢谢！  
欢迎提问