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

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

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \nu\frac{\partial C}{\partial}x - k_{att}\theta C + k_{det}\rho S + \sigma C \tag{1}$$

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}

对流扩散反应方程

考虑一维上的模型

对流扩散反应方程

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

$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 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;

δ 为生长项，描述物质的产生.

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

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

上两表的参数是按照方程

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

所表现的模型测得的，其中 C 的单位为mg/m^3。

参数

菌名	$\alpha(\mathrm{m}^2/\mathrm{s})$	$\beta(\mathrm{m}/\mathrm{s})$	$\gamma(\mathrm{s}^{-1})$	$\delta(\mathrm{T}^{-1})$
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

模型

从问题中得出抽象的数学表达，得到方程 4:

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

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。

解这样的一个方程是困难的，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

考虑这样的一个方程

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

它的定解条件为

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

我们采用分离变量法求解这个方程, 解表示成积分

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

结果为

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

对流方程

忽略掉扩散项，得到方程 (9)

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

是一个一阶线性偏微分方程，其定解条件为：

$$x = 0, t > 0, c = c_0 \tag{10}$$

$$x = \infty, t > 0, c = 0 \tag{11}$$

$$t = 0, c = f(x) = 0 \tag{12}$$

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

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

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

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

整理得

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

是对流方程 (9) 的解.

常系数扩散方程

考虑常系数扩散方程

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

其向前差分格式为

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

$$u_j^0=g(x_j) \tag{18}$$

向后差分格式

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

加权隐式格式

$$\frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\tau}-a\left[\theta\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}+(1-\theta)\frac{u_{j+1}^{n-1}-2u_j^{n-1}+u_{j-1}^{n-1}}{h^2}\right]=0 \tag{20}$$

常系数对流方程

考虑简单的双曲型对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \tag{21}$$

我们来建立双曲型偏微分方程的求解差分格式.

我们利用特征线方法来构造差分格式.

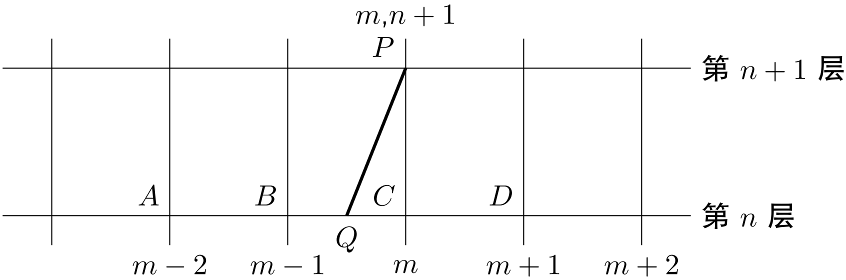


Figure: 用特征线法构造差分格式

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 $u(Q)$.

$$u_m^{n+1} = (1-ar)u_m^n + aru_{m-1}^n \tag{22}$$

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

$$\begin{aligned} u_{m+1}^n =& \frac{1}{2}(1-ar)u_{m+1}^n + \frac{1}{2}(1+ar)u_{m-1}^n \\ =& \frac{1}{2}(u_{m-1}^n + u_{m+1}^n) - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n). \end{aligned} \tag{23}$$

称为 Lax-Friedrichs 格式.

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{ar}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) + \frac{a^2r^2}{2}(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n) \tag{24}$$

为 Lax-Wendorff 格式.

对流扩散方程

考虑一个简单的对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{25}$$

其中 a、ν 为常数，$\nu > 0$，给定初值

$$u(x,0) = g(x) \tag{26}$$

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。

迎风差分格式

迎风差分格式为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{h} = \mu\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} \tag{27}$$

其截断误差为 $O(\tau + h)$. 差分格式的稳定性条件为

$$\left(\mu + \frac{ah}{2}\right)\frac{\tau}{h^2} \le \frac{1}{2} \tag{28}$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2h} = \nu\sigma\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2} \tag{29}$$

为隐式迎风差分格式，可以利用追赶法求解。

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

$$R_d\frac{\partial C}{\partial t}+v_i\frac{\partial C}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j})-\mu C+\lambda,\quad (i,j=1,2,3) \tag{30}$$

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 (30)变为

$$R_d\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial S}=\frac{\partial}{\partial S}(D_L\frac{\partial C}{\partial S})+\frac{\partial}{\partial R}(D_R\frac{\partial C}{\partial R})+\frac{\partial}{\partial T}(D_T\frac{\partial C}{\partial T})-\mu C+\lambda \quad (31)$$

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

$$R_d\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial S}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial S^2}+D_R\frac{\partial^2 C}{\partial R^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial T^2}-\mu C+\lambda \quad (32)$$

采用算子分裂法, 得

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} = -\mu C + \lambda, \qquad n\Delta t \le t \le (n+\frac{1}{3})\Delta t \tag{33}$$

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial S} = D_L\frac{\partial^2 C}{\partial S^2}, \qquad (n+\frac{1}{3})\Delta t \le t \le (n+\frac{2}{3})\Delta t \tag{34}$$

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t} = D_R\frac{\partial^2 C}{\partial R^2} + D_T\frac{\partial^2 C}{\partial T^2}, \qquad (n+\frac{2}{3})\Delta t \le t \le (n+1)\Delta t \tag{35}$$

我们采用常数变易法来求解式 (33), 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 (33)的解为

$$\begin{cases} C_{i,j,k}^{n+1/3} = (C_{i,j,k}^{n} - \dfrac{\lambda}{\mu})\exp(-\mu\Delta t/Rd) + \dfrac{\lambda}{\mu}, & (\mu \neq 0) \\ C_{i,j,k}^{n+1/3} = C_{i,j,k}^{n} + \dfrac{\lambda\Delta t}{Rd}, & (\mu = 0) \end{cases} \tag{36}$$

我们采用匹配伪弥散系数法来求解 (34)，以避免数值弥散和震荡. 与 (34) 式对应的纯对流方程为

$$\frac{1}{3}R_d\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial S}=0,\quad (n+\frac{1}{3})\Delta t\le t\le (n+\frac{2}{3})\Delta t \tag{37}$$

采用差分法, 得

$$\frac{\partial C}{\partial t}=3\theta\frac{C_{i,j,k}^{n+2/3}-C_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta t}+3(1-\theta)\frac{C_{i,j,k}^{n+2/3}-C_{i,j,k}^{n+1/3}}{\Delta t} \tag{38}$$

$$\frac{\partial C}{\partial S}=\left[\frac{C_{i,j,k}^{n+2/3}-C_{i,j,k}^{n+1/3}}{2}-\frac{C_{i,j,k}^{n+2/3}-C_{i,j,k}^{n+1/3}}{2}\right]/\Delta S_i \tag{39}$$

将式 (38) 和式 (39) 代入式 (37)，整理得

$$C_{i+1,j,k}^{n+2/3} = K_1 C_{i,j,k}^{n+1/3} + K_2 C_{i,j,k}^{n+2/3} + K_3 C_{i+1,j,k}^{n+1/3} \tag{40}$$

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 (40) 的稳定性, 要求满足

$$2 \leq Pe \leq \infty \tag{41}$$

$$1 - \frac{2}{Pe} \leq Cr \leq 1 + \frac{2}{Pe} \tag{42}$$

我们看到式 (40) 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 (35), 其交替方向差分格式为

$$R_d \frac{C_{i,j,k}^{n+5/6} - C_{i,j,k}^{n+2/3}}{\Delta t} = D_R \delta_R^2 C_{i,j,k}^{n+5/6} + D_\tau \delta_\tau^2 C_{i,j,k}^{n+2/3} \tag{43}$$

$$R_d \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+5/6}}{\Delta t} = D_R \delta_R^2 C_{i,j,k}^{n+5/6} + D_\tau \delta_\tau^2 + C_{i,j,k}^{n+1} \tag{44}$$

其中,

$$\begin{aligned}\delta_R^2 C_{i,j,k} =& [\frac{C_{i,j-1,k}}{(R_{j+1}-R_{j-1})(R_j-R_{j-1})} - \frac{C_{i,j,k}}{(R_{j+1}-R_j)(R_j-R_{j-1})} \\ &+ \frac{C_{i,j+1}}{(R_{j+1,k}-R_{j-1})(R_{j+1}-R_j)}] \\ \delta_T^2 C_{i,j,k} =& [\frac{C_{i,j,k-1}}{(T_{k+1}-T_{k-1})(T_k-T_{k-1})} - \frac{C_{i,j,k}}{(T_{k+1}-T_k)(T_k-T_{k-1})} \\ &+ \frac{C_{i,j,k+1}}{(T_{k+1}-T_{k-1})(T_{k+1}-T_k)}]\end{aligned}$$

方程 (43) 和方程 (44) 为三对角线性方程组, 用追赶法求解.

扩散方程

我们考虑这样简单的扩散方程，

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^u}{\partial x^2} + 2 & 0 < x < 1, t > 0, \\ u(0,t) = u(1,t) = 0, & t > 1, \\ u(x,0) = sin(\pi x) + x(1-x). \end{cases} \tag{45}$$

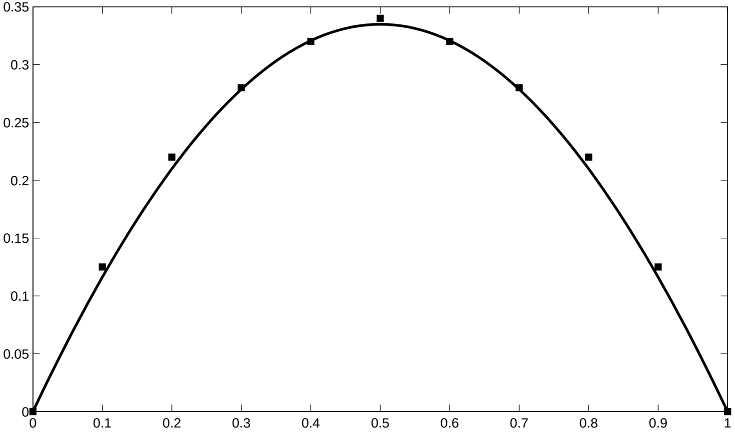


Figure: 扩散方程六点差分格式计算结果

对流扩散方程

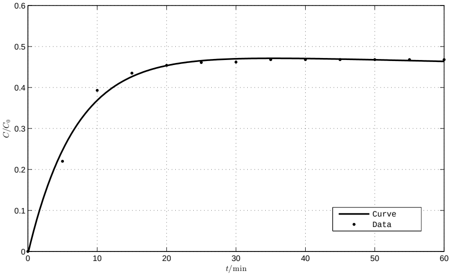
考虑对流扩散方程

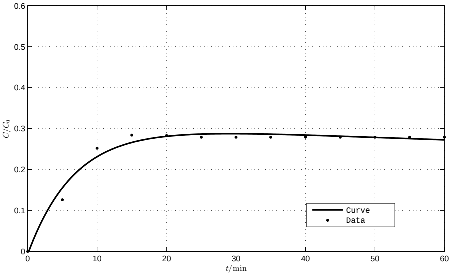
$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{46}$$

其中 a、ν 为常数，$\nu>0$，给定初值

$$u(x,0)=g(x) \tag{47}$$

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.


0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
C/C_0
0
10
20
30
40
50
60
t/min
Curve
Data

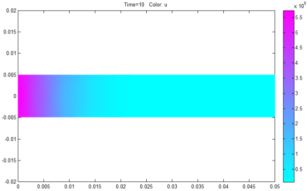

0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
C/C_0
0
10
20
30
40
50
60
t/min
Curve
Data

考虑这样的多维方程

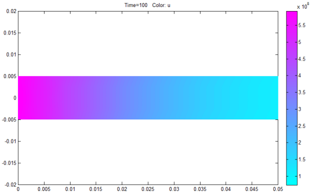
$$R_d \frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \mu C + \lambda, \quad (i, j = 1, 2) \tag{48}$$

我们采用有限元法来求解这个方程，不考虑对流项.

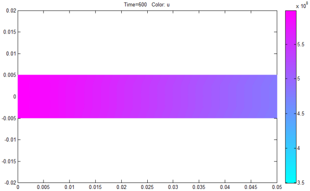
巨大芽孢杆菌



(a) $t = 10$

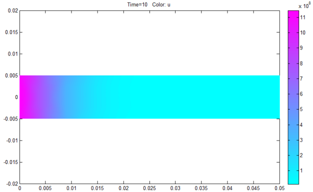


(b) $t = 100$

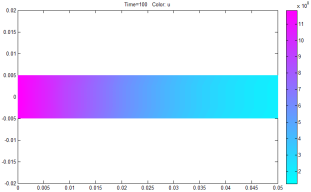


(c) $t = 600$

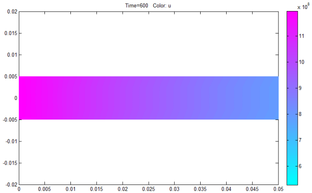
假单胞菌



(d) $t = 10$

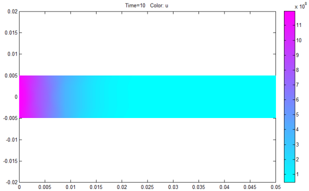


(e) $t = 100$

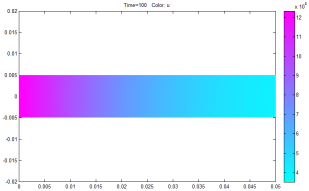


(f) $t = 600$

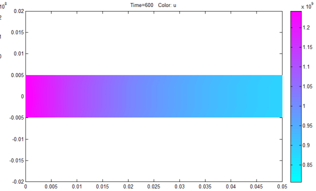
大肠杆菌



(g) $t = 10$

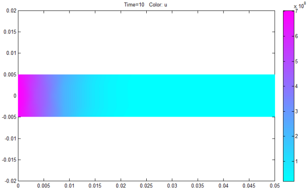


(h) $t = 100$

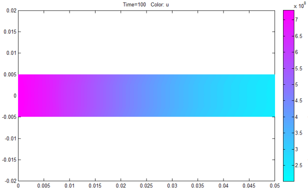


(i) $t = 600$

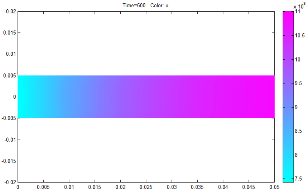
枯草芽孢杆菌



(j) $t = 10$

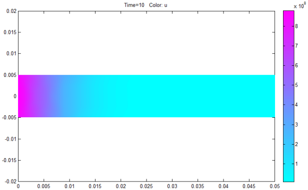


(k) $t = 100$

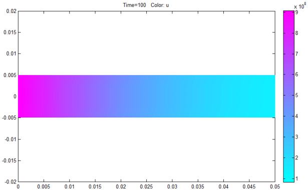


(l) $t = 600$

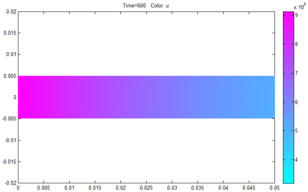
金黄色葡萄球菌



(m) $t = 10$

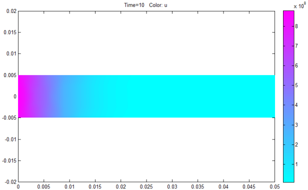


(n) $t = 100$

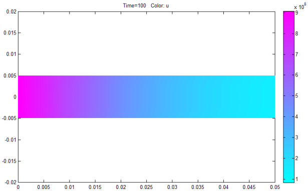


(o) $t = 600$

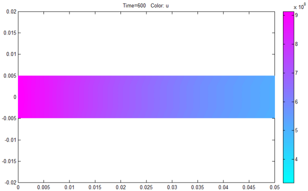
微球菌



(p) $t = 10$



(q) $t = 100$



(r) $t = 600$

总结

在本研究中，我们讨论了

- 扩散方程、对流方程、非齐次方程的精确解方法;
- 中心差分格式、迎风差分格式等差分格式及相应的隐格式的形式、稳定性、误差;
- 差分格式的求解方法;
- 算子分裂法求解复杂偏微分方程的方法.

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