微生物土壤运移模型的求解及仿真软件编制
中期进展报告

陆秋文

北京化工大学生命科学与技术学院

2013 年 4 月 9 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

假定

为了建立数学模型，对过程做如下的假定：

- 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

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

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

上表的参数是按照方程

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

所表现的模型测得的，其中 C 的单位为mg/m^3。

模型

从问题中得出抽象的数学表达，得到方程 5:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \beta \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma C + \delta \tag{5}$$

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。

解对流方程

忽略掉扩散项，得到方程 6

$$R\frac{\partial C}{\partial t}+v\frac{\partial C}{\partial x}=-\mu C+\delta \tag{6}$$

是一个一阶线性偏微分方程，其定解条件为：

$$x=0,t>0,c=c_0 \tag{7}$$

$$x=\infty,t>0,c=0 \tag{8}$$

$$t=0,c=f(x)=0 \tag{9}$$

这是一个半无界问题。

将方程 6 作变换，令 $a = v/R$、$b = \mu/R$、$D = \delta/R$ 有

$$\frac{\partial C}{\partial t} + a\frac{\partial C}{\partial x} = -bC + D \tag{10}$$

令

$$\begin{cases} \xi = x - at \\ \eta = x + at \end{cases} \tag{11}$$

即

$$\begin{cases} x = \dfrac{1}{2}(\xi + \eta) \\ t = \dfrac{1}{2a}(\eta - \xi) \end{cases} \tag{12}$$

用式 11 作映射变换，即

$$\frac{\partial C}{\partial \xi} = \frac{\partial C}{\partial t}\frac{dt}{d\xi} + \frac{\partial C}{\partial x}\frac{dx}{d\xi} = -\frac{1}{2a}\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial x} \tag{13}$$

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = \frac{\partial C}{\partial t}\frac{dt}{d\eta} + \frac{\partial C}{\partial x}\frac{dx}{d\eta} = \frac{1}{2a}\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial x} \tag{14}$$

我们再看方程 10，在变换 11 下有

$$2a\frac{\partial C}{\partial \eta} = -bC + D \tag{15}$$

是比较简单的偏微分方程，它的通解为

$$C = C_1(\xi)e^{-\frac{b}{2a}\eta} + \frac{D}{b} \tag{16}$$

即

$$C(x,t) = C_1(x-at)e^{-\frac{b}{2a}(x+at)} + \frac{D}{b} \tag{17}$$

由初值条件 9，即 $C(x,t)|_{t=0} = f(x)$，有

$$C_1(x) = e^{\frac{b}{2a}}\left(f(x) - \frac{D}{b}\right) \quad (x > 0) \tag{18}$$

由边界条件 7，即 $C(x,t)|_{x=0} = c_0$，有

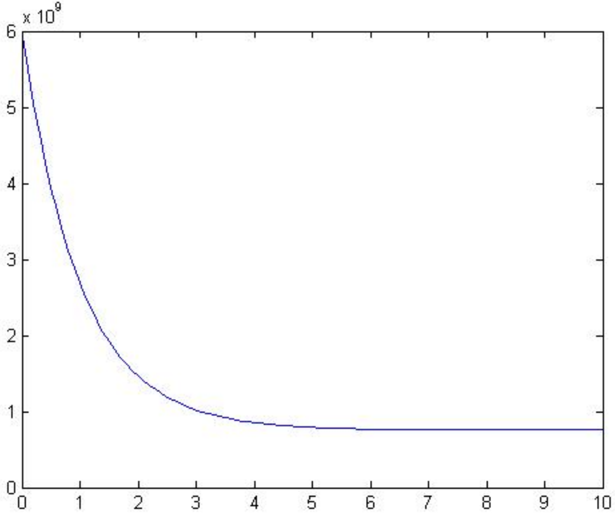
$$C_1(x) = \left(c_0 - \frac{D}{b}\right) e^{-b\frac{b}{2a}x} \quad (x < 0) \tag{19}$$

整理得

$$C(x,t) = \begin{cases} \left(f(x) - \frac{D}{b}\right) e^{-bt} + \frac{D}{b} & x - at > 0 \\ \left(c_0 - \frac{D}{b}\right) e^{-\frac{b}{a}x} + \frac{D}{b} & x - at < 0 \end{cases} \tag{20}$$

是对流方程 10 的解。

图象



解扩散方程

考虑这样的一个方程，即方程 21

$$\frac{\partial C}{\partial t} - a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \tag{21}$$

它的定解条件为

$$\begin{aligned} C(x=0,t) &= 0 \\ \left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=L} &= 0 \end{aligned} \tag{22}$$

$$C(x,t)|_{t=0} = \psi(x) \tag{23}$$

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

$$C(x,t) = X(x)T(t) \tag{24}$$

代入方程 21、 22，得

$$\frac{\partial^2 X}{\partial x} + \lambda X = 0 \tag{25}$$

$$X(0) = 0, X'(l) = 0 \tag{26}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \lambda a^2 T = 0 \tag{27}$$

考虑 λ 为实数的情况，当 $\lambda<0$ 时，方程 25 的解为

$$X(x) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x} \tag{28}$$

积分常数 C_1 和 C_2 由条件 22 确定，解得 $X(x) = 0$，这是没有意义的。

同样，当 $\lambda=0$ 时 $X(x) = 0$，没有意义，我们来看 $\lambda>0$ 时的情况，方程 25 的解为

$$X(x) = C_1 \cos \sqrt{\lambda} x + C_2 \sin \sqrt{\lambda} x \tag{29}$$

积分常数 C_1 和 C_2 由条件 22 确定，即

$$\begin{aligned} C_1 &= 0 \\ C_2\sqrt{\lambda}\cos\sqrt{\lambda}l &= 0 \end{aligned} \tag{30}$$

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

$$\lambda = \frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2}{l^2} = \frac{(2k+1)^2\pi^2}{4l^2} \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{31}$$

给出了本征值，其本征函数为

$$X(x) = C_2\sin\frac{(2k+1)\pi}{2l}x \quad (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{32}$$

我们来看关于 T 的方程，根据式 31，有

$$\frac{\partial T}{\partial t}+\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2}{l^2}a^2T=0 \tag{33}$$

解为

$$T_k(t)=Ce^{-\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2a^2}{l^2}t}\quad (k=0,1,2,\cdots) \tag{34}$$

这样，$C(x,t)$ 的解应是

$$u(x,t)=\sum_{k=0}^{\infty}C_k e^{-\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)^2\pi^2a^2t}{l^2}}\sin\frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)\pi x}{l} \tag{35}$$

将方程 21 代入方程 23 中，有

$$\sum_{k=0}^{\infty} C_k \sin \frac{\left(k+\frac{1}{2}\right)\pi x}{l} = \psi(x) \quad (0 < x < l) \tag{36}$$

确定了系数 C_k.

解对流扩散反应方程

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。

简单对流扩散方程的中心差分格式

考虑一个简单的对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{37}$$

其中 a、ν 为常数，$\nu > 0$，给定初值

$$u(x,0) = g(x) \tag{38}$$

构成了对流扩散方程的初值问题。

将方程 37 差分，有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = \nu\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} \tag{39}$$

其截断误差为 $O(\tau + h^2)$。

稳定性分析

我们给出用于判断差分格式稳定性的 **von Neumann** 定理，即

von Neumann 定理

差分格式

$$u_j^{n+1} = C(x_j, \tau) u_j^n \tag{40}$$

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

$$|\lambda_j(G(\tau, k))| \le 1 + M\tau, \quad j = 1, 2, \cdots, p, \tag{41}$$

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

下面来分析差分格式 39 的稳定性，令

$$\lambda = a\frac{\tau}{h} \qquad \mu = \nu\frac{\tau}{h^2} \tag{42}$$

则差分格式 39 改写为

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}\lambda(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \mu(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \tag{43}$$

式 43 的增长因子为

$$G(\tau, k) = 1 - 2\mu(1 - \cos kh) - i\lambda \sin kh \tag{44}$$

模的平方为

$$|G(\tau, k)|^2 = 1 - (1 - \cos kh)[4\mu - 4\mu^2(1 - \cos kh) - \lambda^2(1 + \cos kh)] \tag{45}$$

差分格式稳定的充分条件为

$$4\mu - 4\mu^2(1-\cos kh) - \lambda^2(1+\cos kh) \geq 0 \tag{46}$$

即

$$(2\lambda^2 - 8\mu^2)\frac{1-\cos kh}{2} + 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0 \tag{47}$$

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

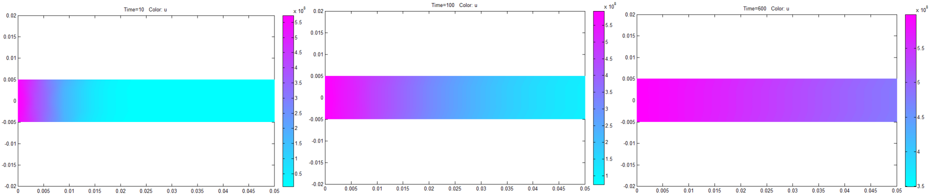
$$(2\lambda^2 - 8\mu^2) + 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0, \quad 4\mu - 2\lambda^2 \geq 0 \tag{48}$$

由此得到差分格式 39 的稳定性限制为

$$\tau \leq \frac{2\nu}{a^2} \tag{49}$$

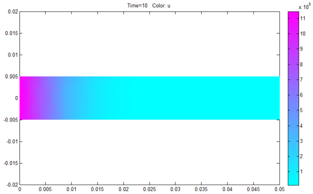
$$\nu\frac{\tau}{h^2} = \frac{1}{2} \tag{50}$$

巨大芽孢杆菌

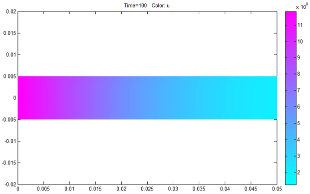


(a) $t = 10$　(b) $t = 100$　(c) $t = 600$

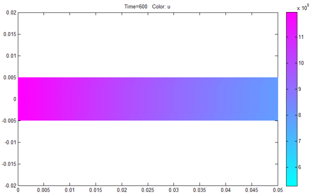
假单胞菌



(d) $t = 10$

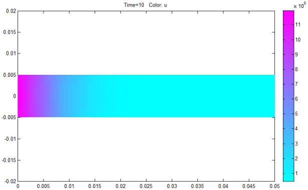


(e) $t = 100$

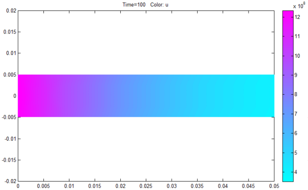


(f) $t = 600$

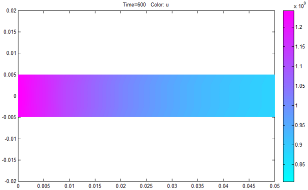
大肠杆菌



(g) $t = 10$

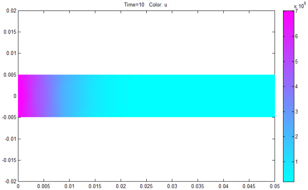


(h) $t = 100$

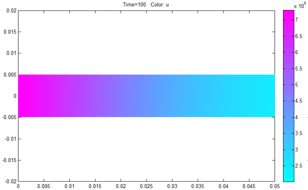


(i) $t = 600$

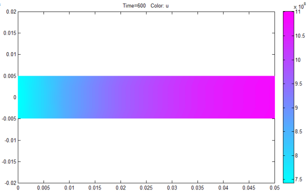
枯草芽孢杆菌



(j) $t = 10$

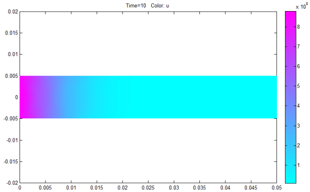


(k) $t = 100$

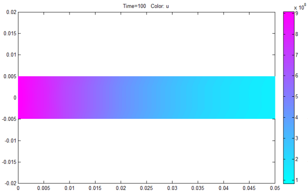


(l) $t = 600$

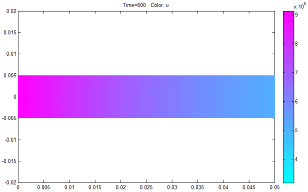
金黄色葡萄球菌



(m) $t = 10$

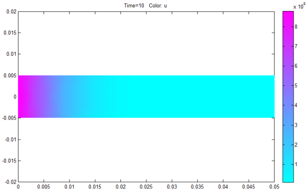


(n) $t = 100$

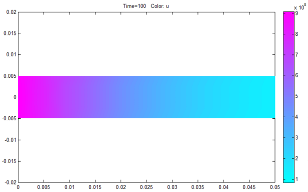


(o) $t = 600$

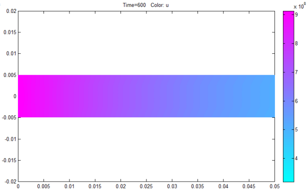
微球菌



(p) $t = 10$



(q) $t = 100$



(r) $t = 600$

需要完成的工作

- 对流占优问题的差分方法
- 三维模型的建立与求解
- 仿真系统的编制

进度计划

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

谢谢！

欢迎提问