1 若干数学工具 1

1 若干数学工具

1.1 三维傅里叶变换的性质

1. 傅里叶变换

$$\hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} C(x, y, z, t) e^{-i(x\omega_x + y\omega_y + z\omega_z)} dx dy dz = F(C)$$
(1)

2. 傅里叶逆变换

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z, t) d\omega_x d\omega_y d\omega_z$$
 (2)

3. 线性性质

$$F\left(\alpha C_1\left(x, y, z, t\right) + \beta C_2\left(x, y, z, t\right)\right) = \alpha F\left(C_1\right) + \beta F\left(C_2\right) \tag{3}$$

4. 微分性质

$$F(C_x(x, y, z)) = i\omega_x F(C) = i\omega_x \hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$$

$$F(C_y(x, y, z)) = i\omega_y F(C) = i\omega_y \hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$$

$$F(C_z(x, y, z)) = i\omega_z F(C) = i\omega_z \hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z)$$
(4)

1.2 一阶线性微分求解通式

形如 $\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}+P\left(t\right)C=Q\left(t\right)$ 的公式叫做一阶线性微分方程,其通解形式用Maple求解如图1

>
$$ode := diff(C(t), t) + P(t) \cdot C(t) = Q(t)$$

 $ode := \frac{d}{dt} C(t) + P(t) C(t) = Q(t)$
> $dsolve(ode)$
 $C(t) = \left(\int Q(t) e^{\int P(t) dt} dt + CI\right) e^{\int (-P(t)) dt}$

图 1: 一阶线性偏微分方程求解

从图1可以看到其通解形式为

$$C = e^{\int -P(t)dt} \left(\int Q(t)e^{\int P(t)dt}dt + const \right)$$
 (5)

1.3 有限差分

现有连续性函数C = f(t),取相邻两点的距离均为h的横坐标点 $t_{i-2}, t_{i-1}, t_i, t_{i+1} \cdots$,将这些点的纵坐标分别标记为 $C_{i-2}, C_{i-1}, C_i, C_{i+1} \cdots$ 。在i点附近把函数C = f(t)展开为泰勒级数:

$$C = C_i + \left(\frac{dC}{dt}\right)_i (t - t_i) + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2C}{dt^2}\right)_i (t - t_i)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3C}{dt^3}\right)_i (t - t_i)^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{d^4C}{dt^4}\right)_i (t - t_i)^4 + \cdots$$
 (6)

1 若干数学工具 2

其中, $\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}\right)_i$, $\left(\frac{\mathrm{d}^2C}{\mathrm{d}t^2}\right)_i$, \cdots 分别表示各阶导数在 $t=t_i$ 处的值。 在点i-1处有 $t=t_{i-1}=x_i-h$

世点
$$i-1$$
处有 $t=t_{i-1}=x_i-h$
在点 $i+1$ 处有 $t=t_{i+1}=x_i+h$

把上述两式分别带入函数C泰勒级数展开式中,求得C在点 t_{i-1} 和 t_{i+1} 处的值分别为

$$C_{i-1} = C_i - \left(\frac{dC}{dt}\right)_i h + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2C}{dt^2}\right)_i h^2 - \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3C}{dt^3}\right)_i h^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{d^4C}{dt^4}\right)_i h^4 - \cdots$$

$$C_{i+1} = C_i + \left(\frac{dC}{dt}\right)_i h + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2C}{dt^2}\right)_i h^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3C}{dt^3}\right)_i h^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{d^4C}{dt^4}\right)_i h^4 - \cdots$$
(7)

如果h足够小可以忽略 h^3 及更高项,根据上述两式解出 $\left(\frac{dC}{dt}\right)_i, \left(\frac{d^2C}{dt^2}\right)_i$ 的值:

$$\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}\right)_{i} = \frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2h}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^{2}C}{\mathrm{d}t^{2}}\right)_{i} = \frac{C_{i+1} - 2C_{i} + C_{i-1}}{h^{2}}$$
(8)

1.4 三维矩阵的理解

可以把三维矩阵的第一项指标看成"行",第二项指标看成是"列",第三项指标看成是"页"。

1.5 通量,散度和高斯公式

1.5.1 通量

设有向量场

$$\mathbf{A}(x,y,z) = P(x,y,z)\mathbf{i} + Q(x,y,z)\mathbf{j} + R(x,y,z)\mathbf{k}$$
(9)

其中函数P、Q、R均有一阶连续偏导数, Σ 是场内的一片有向曲面,n是 Σ 在点(x,y,z)处的单位法向量,则积分

$$\iint_{\Sigma} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} dS \tag{10}$$

称为向量场A通过曲面 Σ 向着制定侧的通量(或流量)。

有两类曲面积分的关系,通量又可表达为

$$\iint_{\Sigma} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} dS = \iint_{\Sigma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \iint_{\Sigma} P dy dz + Q dz dx + R dx dy$$
(11)

1.5.2 散度

对于向量场 $\mathbf{A}(x,y,z) = P(x,y,z)\mathbf{i} + Q(x,y,z)\mathbf{j} + R(x,y,z)\mathbf{k}$, $\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} + \frac{\partial R}{\partial z}$ 叫做向量场 \mathbf{A} 的散度,记作 $\mathrm{div}\mathbf{A}$,即

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} + \frac{\partial R}{\partial z} \tag{12}$$

利用向量微分算子 ∇ , **A**的散度div**A**也可以表达为 $\nabla \cdot \mathbf{A}$, 即

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = \nabla \cdot \mathbf{A} \tag{13}$$

2 模型

1.5.3 高斯公式

设空间闭区域 Ω 是由分片光滑的闭曲面 Σ 所围成,函数P(x,y,z),Q(x,y,z),R(x,y,z)在 Ω 上具有一阶连续偏导数,则有

$$\iiint_{\Omega} \left(\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} + \frac{\partial R}{\partial z} \right) dv = \iint_{\Sigma} P dy dz + Q dz dx + R dx dy$$
(14)

或

$$\iiint_{\Omega} \left(\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial Q}{\partial y} + \frac{\partial R}{\partial z} \right) dv = \iint_{\Sigma} \left(P \cos \alpha + Q \cos \beta + R \cos \gamma \right) dS \tag{15}$$

利用向量场的通量和散度, 高斯公式可以写成如下的向量形式

$$\iiint_{\Omega} \operatorname{div} \mathbf{A} dv = \iint_{\Sigma} A_n dS \tag{16}$$

或

$$\iiint_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{A} dv = \iint_{\Sigma} A_n dS \tag{17}$$

2 模型

2.1 条件假设与符号约定

1. 河流的雷诺数已经达到一定的阈值(>2000),河水流动的方式为紊流而不是层流;

流体力学中,雷诺数(Reynolds number)是流体惯性力 $\frac{\rho v^2}{L}$ 与黏性力 $\frac{\mu v}{L^2}$ 比值的量度,它是一个无量纲量。

雷诺数较小时,黏滞力对流场的影响大于惯性力,流场中流速的扰动会因黏滞力而衰减,流体流动稳定,为层流;反之,若雷诺数较大时,惯性力对流场的影响大于黏滞力,流体流动较不稳定,流速的微小变化容易发展、增强,形成紊乱、不规则的紊流流场。

层流与紊流两种流动形态传递动量、热量和质量的方式不同:层流通过分子间相互作用,紊流主要通过质点间的混掺。紊流的传递速率远大于层流。水利工程所涉及的流动,一般为紊流。

- 2. 任取河流上一闭曲面S所围成水域为 Ω ,C(x,y,z,t)表示t时刻(x,y,z)位置点的污染物浓度;
- 3. 污染物因为河水流动和分子自由运动而发生扩散, D_x, D_y, D_z 分别表示x, y, z方向的扩散系数;
- 4. 河水中的微生物分解等作用使河水具有自我净化能力,设自我降解系数为K(0 < K < 1);
- 5. $\theta(x, y, z, t)$ 是(x, y, z)位置点t时刻单位体积单位时间污染物的排放量;
- 6. 河水沿x, y, z三方向的流动速度 u_x, u_y, u_z 在一定时间范围内是恒定的。

2.2 模型构建

为了使得公式看起来不那么臃肿,下面用 C, θ 分别代表C(x, y, z, t)和 $\theta(x, y, z, t)$ 。

1. 由多重积分的意义可知,单位时间通过闭曲面S扩散进来的 Ω 的污染物的量为

$$M_1 = \iint_{\Sigma} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \cos \alpha + D_y \frac{\partial C}{\partial y} \cos \beta + D_z \frac{\partial C}{\partial z} \cos \gamma \right) dS$$
 (18)

由高斯定理可知:

$$M_{1} = \iiint_{\Omega} \left(D_{x} \frac{\partial^{2} C}{\partial x^{2}} + D_{y} \frac{\partial^{2} C}{\partial y^{2}} + D_{z} \frac{\partial^{2} C}{\partial z^{2}} \right) dx dy dz$$
(19)

2. 由于河流是不断流动的,单位时间通过闭曲面S流出 Ω 的污染物的量为

$$M_2 = \iint_{\Sigma} (u_x C \cos \alpha + u_y C \cos \beta + u_z C \cos \gamma) \, dS$$
 (20)

同理,由高斯定理知:

$$M_2 = \iiint \left(u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) dx dy dz$$
 (21)

3. 由于河水自我降解,单位时间Ω水域的污染物减少量为

$$M_3 = \iiint_{\Omega} (KC) \, \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \tag{22}$$

4. 单位时间Ω水域的污染物的排放量为

$$M_4 = \iiint_{\Omega} \theta dx dy dz \tag{23}$$

5. 单位时间Ω水域的污染物浓度变化引起的污染物的增量为

$$M_5 = \iiint_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \mathrm{d}x \mathrm{d}y \mathrm{d}z \tag{24}$$

由质量守恒定理得

$$M_5 = M_1 - M_2 - M_3 + M_4 \tag{25}$$

将式19,21,22,23,24带入式25,得到河流水质污染的4D数学模型即四维水质模型为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - KC + \theta \tag{26}$$

3 模型求解

3.1 四维水质一般模型的求解

1. 对四维水质的一般模型,即式26左右两边同时进行傅里叶变换得

$$\frac{\mathrm{d}\hat{C}\left(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t\right)}{\mathrm{d}t} = -\left(D_{x}\omega_{x}^{2} + D_{y}\omega_{y}^{2} + D_{z}\omega_{z}^{2} + \mathrm{i}\omega_{x}u_{x} + \mathrm{i}\omega_{y}u_{y} + \mathrm{i}\omega_{z}u_{z} + K\right)\hat{C}\left(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t\right) + \hat{\theta}\left(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t\right)$$
(27)

2. 求解线性微分方程27得

$$\hat{C}(\omega_{x}, \omega_{y}, \omega_{z}, t) = e^{-\left(D_{x}\omega_{x}^{2} + D_{y}\omega_{y}^{2} + D_{z}\omega_{z}^{2} + i\omega_{x}u_{x} + i\omega_{y}u_{y} + i\omega_{z}u_{z} + K\right)t} \times \left(\int_{0}^{t} \hat{\theta}(\omega_{x}, \omega_{y}, \omega_{z}, t) \times e^{\left(D_{x}\omega_{x}^{2} + D_{y}\omega_{y}^{2} + D_{z}\omega_{z}^{2} + i\omega_{x}u_{x} + i\omega_{y}u_{y} + i\omega_{z}u_{z} + K\right)t} dt + const\right)$$
(28)

用Maple求解过程如图2

$$\begin{array}{l} \begin{subarray}{l} \begin{subarray}{l$$

图 2: 一般模型的偏微分方程求解

3. 对式28两边同时进行傅里叶逆变换得

$$C(x, y, z, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(D_x \omega_x^2 + D_y \omega_y^2 + D_z \omega_z^2 + i\omega_x u_x + i\omega_y u_y + i\omega_z u_z + K\right)t} \times \left(\int_0^t \hat{\theta}\left(\omega_x, \omega_y, \omega_z, t\right) \times e^{\left(D_x \omega_x^2 + D_y \omega_y^2 + D_z \omega_z^2 + i\omega_x u_x + i\omega_y u_y + i\omega_z u_z + K\right)t} dt + const\right) d\omega_x d\omega_y d\omega_z$$

$$(29)$$

式29中的 $\hat{\theta}(\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)$ 是关于 $\omega_x,\omega_y,\omega_z$ 的函数,但是没有具体的表达式,所以式29不能求得解析解。下面分析一般 模型的几个特殊情况,也就是一般模型的简化模型。

3.2 瞬时污染点源四维扩散模型

该模型对式26的模型进行了简化,如下

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - KC$$
(30)

$$C(x, y, z, 0) = M\delta(x)\delta(y)\delta(z) \tag{31}$$

$$\begin{cases}
\frac{\partial}{\partial t} = D_x \frac{\partial}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial}{\partial x} - u_y \frac{\partial}{\partial y} - u_z \frac{\partial}{\partial z} - KC \\
C(x, y, z, 0) = M\delta(x)\delta(y)\delta(z) \\
\lim_{x \to \pm \infty} C(x, y, z, t) = 0, \lim_{y \to \pm \infty} C(x, y, z, t) = 0, \lim_{z \to \pm \infty} C(x, y, z, t) = 0 \\
-\infty < x < +\infty, -\infty < y < +\infty, -\infty < z < +\infty, t > 0
\end{cases} \tag{30}$$

$$-\infty < x < +\infty, -\infty < y < +\infty, -\infty < z < +\infty, t > 0 \tag{33}$$

其中式31是初始条件,式32是边界条件。

1. 对式30进行傅里叶变换,得

$$\frac{\mathrm{d}\hat{C}\left(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t\right)}{\mathrm{d}t} = -\left(D_{x}\omega_{x}^{2} + D_{y}\omega_{y}^{2} + D_{z}\omega_{z}^{2} + \mathrm{i}\omega_{x}u_{x} + \mathrm{i}\omega_{y}u_{y} + \mathrm{i}\omega_{z}u_{z} + K\right)\hat{C}\left(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t\right)$$
(34)

对式31进行傅里叶变换,得

$$\hat{C}(\omega_{x}, \omega_{y}, \omega_{z}, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} M\delta(x)\delta(y)\delta(z)e^{-i(x\omega_{x}+y\omega_{y}+z\omega_{z})}dxdydz$$

$$= M \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(y)dy \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(z)dz$$

$$= M$$
(35)

2. 根据式34和式35求解得到 $\hat{C}(\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)$ 表达式

$$\hat{C}(\omega_x, \omega_y, \omega_z, t) = Me^{-Kt} \cdot e^{-\left(D_x \omega_x^2 + D_y \omega_y^2 + D_z \omega_z^2 + i\omega_x u_x + i\omega_y u_y + i\omega_z u_z\right)t}$$
(36)

用Maple求解过程如图3

图 3: 瞬时污染点模型的偏微分方程求解

3. 对式36进行逆傅里叶变换得到 $C(\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)$

$$C(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t) = Me^{-Kt} \cdot \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{C}(\omega_{x},\omega_{y},\omega_{z},t) e^{i(x\omega_{x}+y\omega_{y}+z\omega_{z})} d\omega_{x} d\omega_{y} d\omega_{z}$$

$$= Me^{-Kt} \cdot \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(D_{x}\omega_{x}^{2}+D_{y}\omega_{y}^{2}+D_{z}\omega_{z}^{2}+i\omega_{x}u_{x}+i\omega_{y}u_{y}+i\omega_{z}u_{z}\right)t+i(x\omega_{x}+y\omega_{y}+z\omega_{z})} d\omega_{x} d\omega_{y} d\omega_{z}$$

$$= Me^{-Kt} \cdot \frac{1}{(2\pi)^{3}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(D_{x}\omega_{x}^{2}+i\omega_{x}u_{x}-i\omega_{x}u_{x}\right)} d\omega_{x} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(D_{y}\omega_{y}^{2}+i\omega_{y}u_{y}-i\omega_{y}u_{y}\right)} d\omega_{y} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(D_{z}\omega_{z}^{2}+i\omega_{z}u_{z}-i\omega_{z}u_{z}\right)} d\omega_{z}$$

$$= Me^{-Kt} \cdot \frac{1}{(2\pi)^{3}} e^{-1/4\frac{(x-tu_{x})^{2}}{tD_{x}}} \sqrt{\pi} \frac{1}{\sqrt{tD_{x}}} \cdot e^{-1/4\frac{(y-tu_{y})^{2}}{tD_{y}}} \sqrt{\pi} \frac{1}{\sqrt{tD_{y}}} \cdot e^{-1/4\frac{(z-tu_{z})^{2}}{tD_{z}}} \sqrt{\pi} \frac{1}{\sqrt{tD_{z}}}$$

$$= \frac{M}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}} \sqrt{D_{x}D_{y}D_{z}}} \exp\left(-\frac{(x-tu_{x})^{2}}{4tD_{x}} - \frac{(y-tu_{y})^{2}}{4tD_{y}} - \frac{(z-tu_{z})^{2}}{4tD_{z}}\right) \exp(-Kt)$$

$$(37)$$

用Maple求解过程如图4

3.3 连续污染点源四维扩散模型

这里我首先介绍一下参考文献中的解法,然后讲一下我对这种解法的看法。

3.3.1 参考解法

如果污染物释放是以连续污染点源的方式进行,则形成的浓度相当于单位时间内连续释放的瞬时点源的积分,实际上相当于对瞬时污染点模型的解析解进行时间区间上的积分:

$$C(\omega_x, \omega_y, \omega_z, t) = \int_0^t \frac{vc}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}} \sqrt{D_x D_y D_z}} \exp\left(-\frac{(x - tu_x)^2}{4tD_x} - \frac{(y - tu_y)^2}{4tD_y} - \frac{(z - tu_z)^2}{4tD_z}\right) \exp(-Kt) dt$$
(38)

$$\begin{array}{c} \begin{subarray}{lll} \hline \begin{subarray}{lll} \begin{subar$$

图 4: 瞬时污染点模型的解析式

其中, v和c分别表示单位时间内排放的含有污染物的污水量和污染物的浓度。

3.3.2 我的理解

式38给出的方法是不精确的,下面对其进行分析:

从当前时间向前推时间T,然后将该段时间均分成N份,时间点标记为 $0=t_0< t_1< t_2\cdots< t_{N-1}< t_N=T$,且有 $t_{i+1}-t_i=h(i=0,1\cdots N-1,h=\frac{T}{N})$.假设在每个时间点都将量为hvc的污染物排放到独立的具有相同参数的水流中(由于各个水流是独立的,所以互相不影响),则当前时间各个水流中的污染物的当前浓度可以用瞬时污染点四维扩散模型(式36)来表示为

$$C(x, y, z, t_i) = \frac{M}{8(\pi t_i)^{\frac{3}{2}} \sqrt{D_x D_y D_z}} \exp\left(-\frac{(x - t_i u_x)^2}{4t_i D_x} - \frac{(y - t_i u_y)^2}{4t_i D_y} - \frac{(z - t_i u_z)^2}{4t_i D_z}\right) \exp(-Kt_i)$$
(39)

则对所有水流的浓度求和,有

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{N} C(x, y, z, t_i)$$
(40)

当 $N \to \infty$ 时,求和就变成了积分

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=0}^{N} C(x, y, z, t_i) \to \int_{t=0}^{T} C(x, y, z, t) dt$$
(41)

可以发现这就是式38。

上述分析过程存在的问题在于,它把各个水流看成了独立的,各个水流中的污染物浓度不相互影响,因而最终的浓度变成了各个时间点的当前污染物浓度的简单叠加。

好了,回头看式26发现,浓度C随时间的变化因素是 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 是受浓度本身的值的影响的,所以浓度不能简单相加。