基于 MATLAB 的四维水质模型仿真

刘晓鑫
(河海大学 计算机与信息学院, 江苏 南京 211100)

摘要: 为了更好的反应污染物在流体中的扩散过程,在一维的水质模型的基础上提出了四维水质模型。根据扩散时的质量守恒定律,经过三维的傅立叶变换,建立起污染物扩散的微分方程,再进行合理的简化,得出污染物在水体中各点浓度随时间变化的解析式,并通过一个实例在 MTALAB 平台上得到仿真结果。实验结果表明,使用 MATLAB 比其他软件更加形象、直观的反应四维水质模型,同时验证了四维模型比一维更具有先进性。

关键词: 水质模型; 质量守恒; 傅立叶变换; 微分方程; MATLAB

中图分类号: TP311 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-6236(2011)23-0029-05

Simulation of 4-dimention water quality model based on MATLAB

LIU Xiao-xin
(*Department of Computer and Information*, *Hohai University*, *Nanjing* 211100, *China*)

Abstract: In order to describe the spreading process of pollutants in fluid better, four-dimention water quality model is proposed on the base of one-dimention water quality model. Through 3-dimention fourier transformation, the pollutant dispersion equation is established according to the law which is called the conservation of mass diffusion. By reasonable simplification, the water time-varying analytic is made up to the point of concentration of pollutants. The result comes out on the MATLAB platform through an example. The result shows that four-dimention water quality model can be described by MATLAB directly and vividly and at the same time four-dimensional model is more advanced than the one-dimensional.

Key words: water quality model; conservation of mass; fourier transform; differential equations; MATLAB

水质模型(water quality model)是根据物质守恒原理用数学的语言和方法描述参加水循环的水体中水质组分所发生的物理、化学、生物化学和生态学诸方面的变化、内在规律和相互关系的数学模型。

水质模型可按其空间维数、时间相关性、数学方程的特征以及所描述的对象、现象进行分类和命名。从空间维数上可分为零维、一维、二维和三维模型;从是否含有时间变量可分为动态和稳态模型; 从模型的数学特征可分为随机性、确定性模型和线性、非线性模型;从描述的水体、对象、现象、物质迁移和反应动力学性质可分为河流、湖泊、河口、海湾、地下水模型;溶解氧、温度、重金属、有毒有机物、放射性模型;对流、扩散模型以及迁移、反应、生态学模型等。

水质模型可按其空间维数、时间相关性、数学方程的特征以及所描述的对象、现象进行分类和命名。从空间维数上可分为零维、一维、二维和三维模型;从是否含有时间变量可分为动态和稳态模型; 从模型的数学特征可分为随机性、确定性模型和线性、非线性模型;从描述的水体、对象、现象、物质迁移和反应动力学性质可分为河流、湖泊、河口、海湾、地下水模型;溶解氧、温度、重金属、有毒有机物、放射性模型;对流、扩散模型以及迁移、反应、生态学模型等。

研究水质模型的目的主要是为了描述环境污染物在水中的运动和迁移转化规律,为水资源保护服务。它可用于实现水质模拟和评价,进行水质预报和预测,制订污染物排放标准和水质规划以及进行水域的水质管理等,是实现水污染控制的有力工具。

1 连续点源一维扩散模型简介

假设在某种情况下,河流水运动的时间尺度很大,在这样的一个时间尺度下的污染物浓度的平均值保持在一种稳定的状态。这时,可以通过取时间平均值,将问题按稳态来处理。这将可以简化模型的复杂程度。这种平均的水流状态可以用稳态模型来描述。因为,排入河流水体中的污染物质能够与水介质相融合,具有相同的、流体力学性质。所以可将污染物质点与水流一起计算[1]。

假定只在 x 方向上存在污染物的浓度梯度,则稳态的一维模型:

$$D_x\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}-u_x\frac{\partial c}{\partial x}-Kc=0 \tag{1}$$

这是一个二阶线性偏微分方程,其特征方程为:

$$D_x\lambda^2-u_x\lambda-K=0 \tag{2}$$

由此可以求出特征根为:$\lambda_{12}=u_x\lambda-K=0$

收稿日期:2011-08-22 **稿件编号:**201108079

作者简介:刘晓鑫(1988—),男,江苏南京人,硕士研究生。研究方向:信号与信息处理,嵌入式系统开发。

式中：$m=\sqrt{1+\frac{4KD_x}{u_x}}$

对于保守和衰减的污染物，λ 不应取正值，若给定初始条件为：$x=0, c=c_0$。上式解为：$c=c_0\exp\left[\frac{u_x x}{2D_x}\left(1-\sqrt{1+\frac{4KD_x}{u_x}}\right)\right]$

对于一般条件下的河流，推流形式的污染物迁移作用要比弥散作用大得多，在稳态条件下，弥散作用可以忽略，则有：

$$c=c_0\exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \tag{3}$$

式中的 c_0 可以按下式计算：

$$c_0=\frac{Qc_1+qc_2}{Q+q} \tag{4}$$

式中：Q 为河流的流量；c_1 为河流中污染物的本底浓度；q 为排入河流的污水的流量；c_2 为污水中的某污染物浓度；c 为污染物的浓度；D_x 为纵向弥散系数；U_x 为断面平均流速；K 为污染物衰减速度常数。

2 四维水质模型的准备

以上是污染物在 x 方向上扩散的模型，这种模型还不够完善，只能简单的反应在一条直线上污染物是怎么扩散，若要更加清晰地描述污染物在空间里的扩散细节，便需要在 x，y，z 方向上同时给出污染物随时间的扩散情况，在建立此空间模型之前，需要用到关于三维傅立叶变换和微分方程的知识[2]。

2.1 三维傅立叶变换的性质

1)傅立叶变换

$$\hat{C}(\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}C(x,y,z,t)e^{-i(x\omega_x,y\omega_y,z\omega_z)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=F(C) \tag{5}$$

2)线性性质

$$F[\alpha C_1(x,y,z,t)+\beta C_2(x,y,z,t)]=\alpha F(C_1)+\beta F(C_2) \tag{6}$$

该性质说明函数和的傅立叶变换等于其对应函数的傅立叶变换之和。

3)微分性质[3]

$$F[C_x(x,y,z)]=i\omega_x F(C)=i\omega_x\hat{C}(\omega_x,\omega_y,\omega_z) \tag{7}$$

2.2 一阶线性微分求解通式

形如 $\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}t}+P(t)C=Q(t)$ 公式叫做一阶线性微分方程，其通解式为

$$C=e^{-\int p(t)\mathrm{d}t}\left(\int Q(t)e^{\int P(t)\mathrm{d}t}\mathrm{d}t+\mathrm{const}\right) \tag{8}$$

其中，const 为常量。

2.3 MATLAB 三维矩阵

在本模型中，最后的数据是通过 MATLAB 软件进行处理的，所以其中必用到 MATLAB 三维矩阵的知识，但对于三维矩阵理解起来还是有一定的难度的，可以把三维矩阵中的第一项指标看成是“行”，第二项指标看成是“列”，第三项指标看成是“页”。另外，在进行模拟四维水质模型之前，也需要掌握一定的 MATLAB 绘图技术。

3 条件假设与符号约定

在建立河流的水质模型前，首先要做出如下假设与符号约定：

1) 河流的雷诺数已经达到一定的阈值(>2 000)，河流流动的方式为紊流而不是层流；

2) 任取河流上一闭曲面 S 所围成水域 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) 因为河流都有吐故纳新、自我净化的能力，假设自我降解系数为 $K(K>0)$；

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。

4 四维水质模型的组建

如下为四维水质模型的推导：

由多重积分的意义可知，通过闭曲面 S 从时刻 t 到时刻 $t+\Delta t$ 流入 Ω 的污染物质量可以求出来，其中 $\cos\alpha,\cos\beta,\cos\gamma$ 为 S 的外法向余弦。

并由高斯定理可知：

$$M_1=\int_t^{t+\Delta t}\iiint_\Omega\left(D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_y\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+D_z\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t \tag{9}$$

由于河水自我降解，从 t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻 Ω 水域的污染物减少量为：

$$M_2=\int_t^{t+\Delta t}\iiint_\Omega[KC(x,y,z,t)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t \tag{10}$$

由于河流是不断流动的，污染物从 t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻流出 S 的质量为：

$$M_3=\int_t^{t+\Delta t}\oint\!\!\int_S[u_xC(x,y,z,t)\cos\alpha+u_yC(x,y,z,t)\cos\beta$$
$$+u_zC(x,y,z,t)\cos\gamma]\mathrm{d}S\mathrm{d}t \tag{11}$$

闭曲面 S 内从 t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻污染物排放量为：

$$M_4=\int_t^{t+\Delta t}\iiint_\Omega\theta(x,y,z,t)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t \tag{12}$$

从另一个角度看，由于浓度的变化引起 Ω 内质量的增加量为：

$$M_5=\iiint_\Omega[C(x,y,z,t+\Delta t)-C(x,y,z,t)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$=\int_t^{t+\Delta t}\iiint_\Omega\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t \tag{13}$$

由质量守恒定理得：

$$M_5=M_1-M_2-M_3+M_4 \tag{14}$$

所以河流水质污染的 4D 数序模型即四维水质模型为[4]：

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_y\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+D_z\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$$

$$-u_x\frac{\partial C}{\partial x}-u_y\frac{\partial C}{\partial y}-u_z\frac{\partial C}{\partial z}-KC+\theta(x,y,z,t) \tag{15}$$

初始条件为：

$$C(x,y,z,0)=\lambda(x,y,z) \tag{16}$$

5 模型求解

对四维水质模型左右两边同时进行傅立叶变换再合并同类项，解此线性微分方程并对左右两边进行傅立叶逆变换可得：

$$C\ (x,y,z,t)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-(D_x\omega_x^2+D_y\omega_y^2+D_z\omega_z^2+i\omega_xu_x+i\omega_yu_y+i\omega_zu_z+K)t}\times$$

$$[\int_0^t\hat{\theta}(\omega_x,\omega_y,\omega_z,t)\times e^{(D_x\omega_x^2+D_y\omega_y^2+D_z\omega_z^2+i\omega_xu_x+i\omega_yu_y+i\omega_zu_z+K)t}\mathrm{d}t+\mathrm{const}]\mathrm{d}\omega_x\mathrm{d}\omega_y\mathrm{d}\omega_z \tag{17}$$

对于上述 $C(x,y,z,t)$表达式，如果单纯用人工求解的方式进行求解是很难精确解出其解析式的，所以可以尝试用 MATLAB 符号工具箱命令 Int 把多重积分化累次积分的方法进行求解，或用三重积分数值求解命令 triplequad 并结合一重积分求解命令 quadl 求解（符号$-\infty$，$+\infty$ 分别用极小和极大的实数代替）。MATLAB 7.0 Version 不能求出 $C(x,y,z,t)$的值，$C(x,y,z,t)$表达式还需要进行适当的简化。实际上，$C(x,y,z,t)$表达式过于复杂不仅给计算机的数值求解带来沉重负担，同时，现实河流水域中绝大部分情况用不到这样面面俱到的模型。数学的精髓之一在于抽象，抓住最本质的东西即可。以下对四维水质模型 $C(x,y,z,t)$积分表达式进行适当简化并分解成 2 种情况讨论：

1）连续污染点源四维扩展模型

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，实际上相当于对上式进行时间区间上的积分：

$$C(x,y,z,t)=\int_0^t\frac{C_q q}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}}\sqrt{D_xD_yD_z}}$$

$$\exp[-\frac{(x-u_xt)^2}{4D_xt}-\frac{(y-u_yt)^2}{4D_yt}-\frac{(z-u_zt)^2}{4D_zt}]\exp(-Kt)\mathrm{d}t \tag{18}$$

其中，C_q 和 q 分别表示河流污染物排放的浓度以及污水的流量（单位时间释放的水量）。

2）连续污染点源三维扩散稳态模型

当连续稳定的污染点源释放污染物的时间足够长，这时，污染物浓度可以看做将不再随时间的变化而变化，而只会随三维空间位置的不同而发生改变，其三维稳态模型的解析式是：

$$C\ (x,y,z)=\frac{C_qq}{4\pi x\sqrt{D_yD_z}}\exp\left(-\frac{u_xy^2}{4D_yx}-\frac{u_xz^2}{4D_zx}\right)\exp\left(-K\frac{x}{u_x}\right) \tag{19}$$

6 计算机模拟情境

下面给出在工程应用中水质模型的一个具体实例。

已知某河流某区段某污染物降解速率常数 K=4.2 d^{-1}（d 表示天），河流的横向流速为 u_x=1.5 m/s，纵向流速 u_y=0.2 m/s，竖直方向的流速 u_z=0.1 m/s，横向扩散系数 D_x=50 m^2/s，纵向扩散系数 D_y=5 m^2/s，竖直方向的扩散系数 D_z=2 m^2/s，河宽 B=200 m，河水平均深度 H=20 m（提供河深是为了让污染物的扩散有边界限制），河流流量 q=30 000 m^3/s

情形一：如果瞬时向平直的河流中心投放质量为 200 400 g 的污染物，求下游污染物的浓度三维变化。若用 MATLAB 进行求解，并拟合出浓度的变化图，关键在于对于水体内某一点在 x，y，z 方向上梯度的求解，其核心代码如下[5]：

```
grad_x=-1./16.*M./pi.^6./t.^7./(Dx.*Dy.*Dz).^ (1./2).* (x-ux.*t)./Dx.*exp(-1./4.*(x-ux.*t).^2./Dx./t-1./4.*(y-uy.*t).^2./Dy./t-1./4.*(z-uz.*t).^2./Dz./t).*exp(-K.*t);
grad_y=-1./16.*M./pi.^6./t.^7./(Dx.*Dy.*Dz).^ (1./2).* (y-uy.*t)./Dy.*exp(-1./4.*(x-ux.*t).^2./Dx./t-1./4.*(y-uy.*t).^2./Dy./t-1./4.*(z-uz.*t).^2./Dz./t).*exp(-K.*t);
grad_z=-1./16.*M./pi.^6./t.^7./(Dx.*Dy.*Dz).^(1./2).*(z-uz.*t)./Dz.*exp(-1./4.*(x-ux.*t).^2./Dx./t-1./4.*(y-uy.*t).^2./Dy./t-1./4.*(z-uz.*t).^2./Dz./t).*exp(-K.*t);
```

求解出各个方向上的梯度以后，再经过 MATLAB 的绘图函数可以描绘出“10 秒至 50 秒 XOY 切面扩散梯度流锥图”和“时间 T=20 秒时 3D 扩散梯度向量图”，该仿真结果如图 1 所示。

由图 1 可以看出，随着时间的推移，XOY 水平面（也包括其他切面）扩散的速度在不断减弱，达到一定的时间以后，污染物的扩散速度不再明显变化，即达到一个稳定的水质结构。在一定的时间内，污染物的扩散形态是：在扩散原点附近，污染物扩散不活跃，这是因为位于污染源附近的污染物浓度过大，污染物浓度达到饱和或过饱和状态，各个污染物分子间相互抑制，不容易发生溶解和水解，沿着 x，y，z 3 个方向的扩散速度是先增大后减小。

情形二：如果连续向该平直河流中心投放污染物，并已知此污染物形成的排放浓度 C_q=6.66 mg/L，那么连续污染排放源扩散的四维时空分布是怎样的呢。同样，第二种情境要用到第一种情境的结论，在 MATLAB 中进行编程，其 m 文件的入口参数是时间 t，核心代码如下：

```
global xx yy zz;
xmin =-500;dx =10;xmax =500;ymin =-100;dy =5;ymax =100;zmin=-10;dz=1;zmax=10;
Cxyz_t ((xmax-xmin)/dx+1,(ymax-ymin)/dy+1,(zmax-zmin)/dz+1)=0;
ii=0;jj=0;kk=0;
for zz=zmin:dz:zmax;kk=kk+1;
  for yy=ymin:dy:ymax;jj=jj+1;
    for xx=xmin:dx:xmax;ii=ii+1;
      Cxyz_t(ii,jj,kk)=quadl(@fun3D,1,t);
    end
```

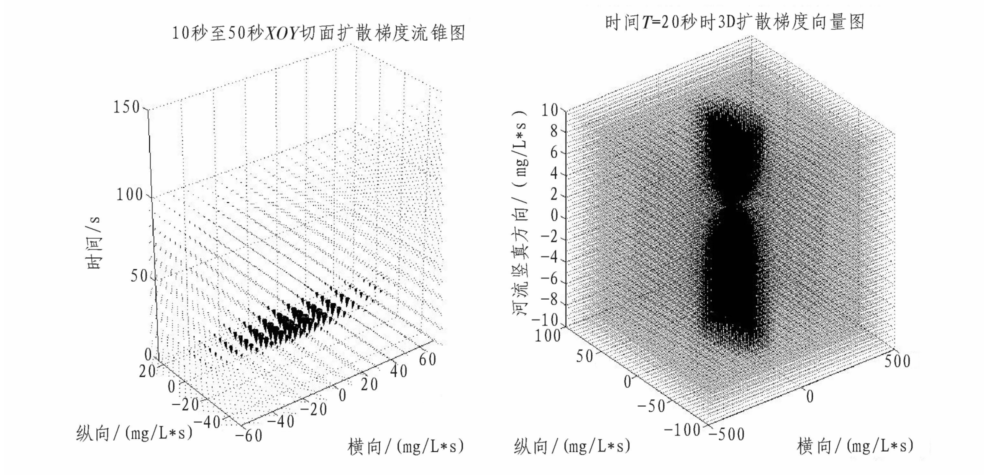
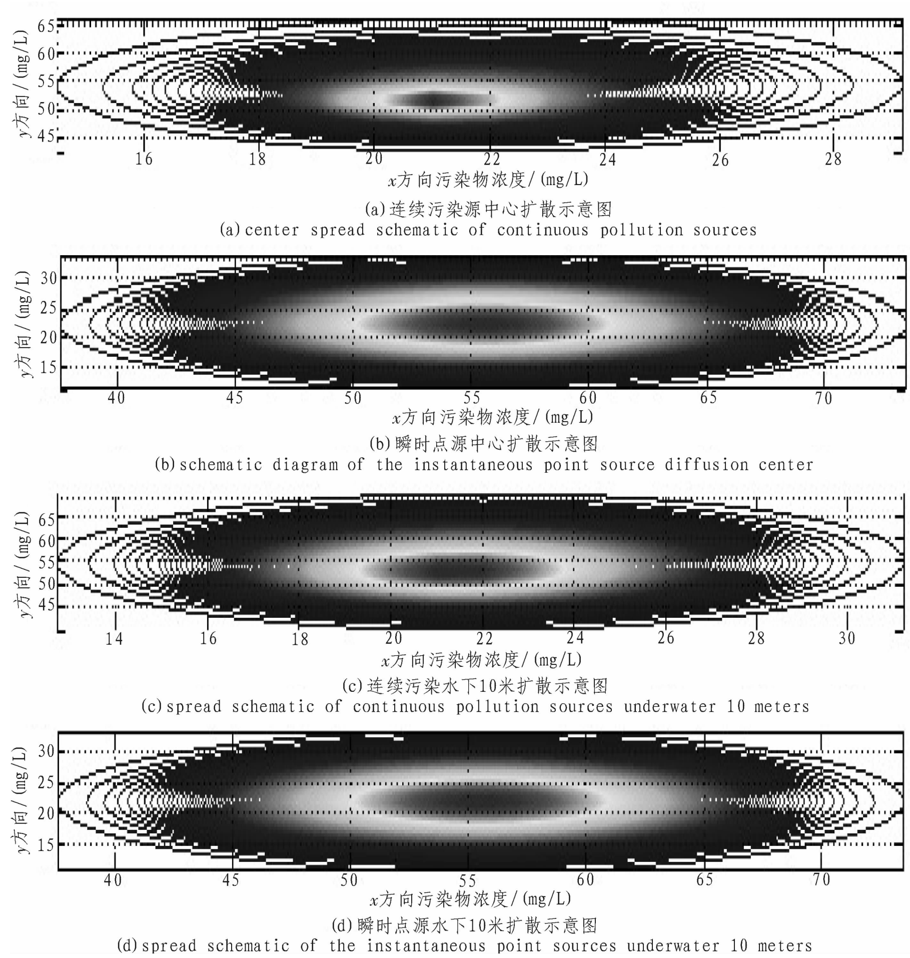


图 1　瞬时污染源计算机模拟结果

Fig. 1　The result of computer simulation to instantaneous polution source

```
        ii=0;
    end
        jj=0;
end
Cxyz_tt2=Cxyz_t;
```

依然可以仿照瞬时污染点源的模拟，利用 MATLAB 绘图函数可以描绘出 30 s 后污染源扩散和 170 s 后污染源扩散的示意图[6]，分别如图 2 和图 3 所示。



(a)连续污染源中心扩散示意图

(a)center spread schematic of continuous pollution sources

(b)瞬时点源中心扩散示意图

(b)schematic diagram of the instantaneous point source diffusion center

(c)连续污染水下10米扩散示意图

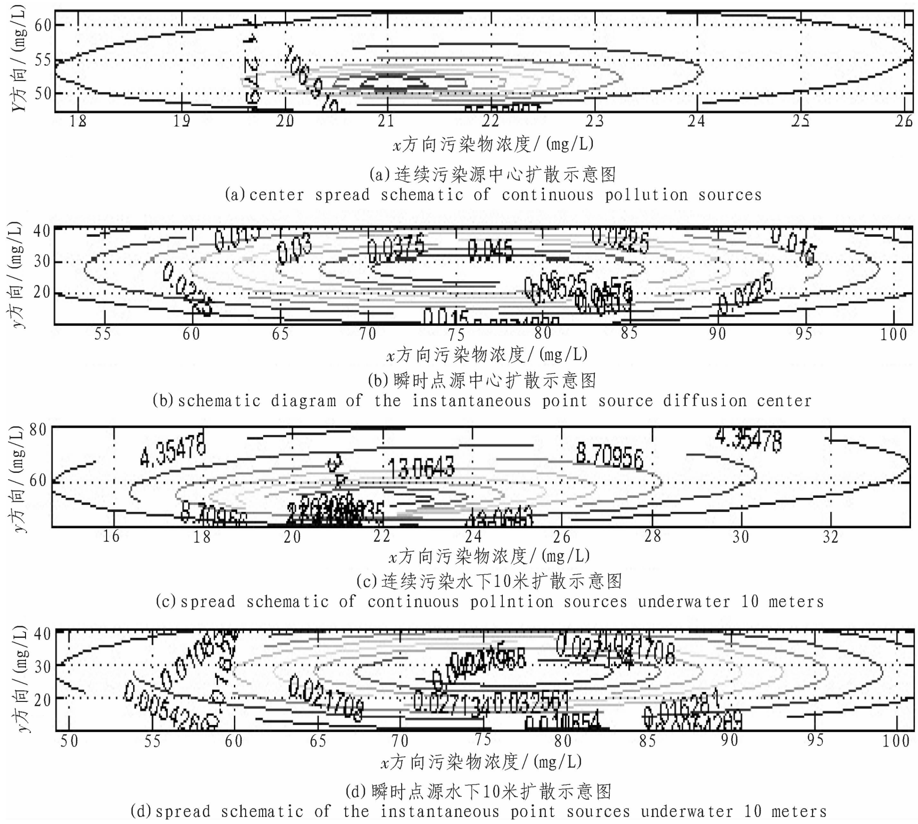
(c)spread schematic of continuous pollution sources underwater 10 meters

(d)瞬时点源水下10米扩散示意图

(d)spread schematic of the instantaneous point sources underwater 10 meters

图 2　30 s 后污染源扩散示意图

Fig. 2　The spreading diagram of pollution source after 30 s



(a)连续污染源中心扩散示意图
(a)center spread schematic of continuous pollution sources

(b)瞬时点源中心扩散示意图
(b)schematic diagram of the instantaneous point source diffusion center

(c)连续污染水下10米扩散示意图
(c)spread schematic of continuous pollntion sources underwater 10 meters

(d)瞬时点源水下10米扩散示意图
(d)spread schematic of the instantaneous point sources underwater 10 meters

图 3　170 s 后污染源扩散示意图

Fig. 3　The spreading diagram of pollution source after 170 s

对于模拟过程来说，最关键的就是运用 quadl 函数对参数进行处理，另外还要用到子程序 fun3D，比较图 2 和图 3，可以得到以下 4 个结论：

1）瞬时污染点源的污染物质量与单位时间内连续污染排放源排放的污染物质量相等，则连续污染源污染的范围比污染点源要大。

2）经过一定的时间，瞬时污染点源沿竖直方向的同一 *XOY* 切面(其他切面亦类似)的浓度变化不大，而连续污染源则变化较大。

3)瞬时污染点源沿着水流方向，污染范围基本不发生变化，但是污染中心却随着水流方向变化。

4)连续污染源沿着水流方向，污染范围不断扩大，但是污染源中心不会发生变化。

7　结束语

水质模型至今已有 70 多年的历史。最早的水质模型是于 1925 年在美国俄亥俄河上开发的斯特里特–菲尔普斯模型。它是一个 DO–BOD 模型。之后，经诸多学者改进，逐步完善。水质模型具有非常精妙对称的美学形式，这个模型对于数学应用也有很大的裨益。水质模型不仅可以应用于大气和水污染，事实上，谣言讹传、疾病传染、电磁波电磁场辐射等都可以看成广义的“水污染扩散模型”。

众所周知，一维的水质模型具有很大的局限性，上述案例将一维的模型升级变成四维水质模型，具体的分析了在水体中污染物浓度随时间的变化情况，通过 MATLAB 软件强大的计算和绘图功能，使得模拟结果更加形象直观，与其他软件相比节约了时间，提高了效率，从而也为实际工程应用中的一些河流的水质评价，分析和预测提出了一个创新的思路。

参考文献：

[1] 张纪华.河流污染一维扩散模型可视化实现[J].计算机技术与发展，2008，18(3)：240–244.
ZHANG Ji-hua. Realization of 1-dimension river polluted model visualization [J]. Computer Technology and Development，2008，18(3): 240–244.

[2] 卓金武. MATLAB在数学建模中的应用[M]. 北京：北京航空航天大学出版社，2011.

[3] 苏变萍，陈东立.复变函数与积分变换[M]. 北京：高等教育出版社，2003.

[4] 刘仁云.数学建模方法与数学实验[M]. 北京：中国水利水电出版社，2011.

[5] 张葛祥.MATLAB仿真技术与应用[M]. 北京：清华大学出版社，2003.

[6] 张德丰.MATLAB数值计算方法[M]. 北京：机械工业出版社，2010.