

# 基于生物降解后对流 - 弥散 - 吸附微分方程的模拟与研究

王哲<sup>1</sup>, 杨渠钊<sup>1</sup>, 卢灏<sup>1</sup>, 陈静琳<sup>1</sup>, 梁兰青<sup>2</sup>, 吴延科<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>广东海洋大学数学与计算机学院, 广东 湛江

<sup>2</sup>广东海洋大学外国语学院, 广东 湛江

收稿日期: 2023年10月19日; 录用日期: 2023年11月25日; 发布日期: 2024年1月12日

## 摘要

地下水污染中危害最大的是有机污染, 因此研究有机污染行为特征十分重要。本文分别建立有机污染物中对流、弥散及吸附的微分方程, 再基于质量守恒方程建立能够描述有机污染物浓度变化的一维对流 - 弥散 - 吸附微分方程, 再借助有限差分的数学方法求解。通过等高线图与三维图可视化初始浓度随着时间变化的情况, 发现初始时刻, 有机污染物在系统中心的浓度最高, 随着时间推移, 浓度逐渐在河流 - 地下水系统中传播、扩散和吸附而降低。

## 关键词

生物降解, 微分方程, 有限差分法, 质量守恒方程, 插值模拟

# Simulation and Study Based on Convection-Dispersion-Adsorption Differential Equation after Biodegradation

Zhe Wang<sup>1</sup>, Quchuan Yang<sup>1</sup>, Hao Lu<sup>1</sup>, Jinglin Chen<sup>1</sup>, Lanqing Liang<sup>2</sup>, Yanke Wu<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Mathematics and Computer Science, Guangdong Ocean University, Zhanjiang Guangdong

<sup>2</sup>School of Foreign Languages, Guangdong Ocean University, Zhanjiang Guangdong

Received: Oct. 19<sup>th</sup>, 2023; accepted: Nov. 25<sup>th</sup>, 2023; published: Jan. 12<sup>th</sup>, 2024

## Abstract

The most harmful groundwater pollution is organic pollution, so it is very important to study the

\*通讯作者。

文章引用: 王哲, 杨渠钊, 卢灏, 陈静琳, 梁兰青, 吴延科. 基于生物降解后对流-弥散-吸附微分方程的模拟与研究[J]. 建模与仿真, 2024, 13(1): 239-246. DOI: 10.12677/mos.2024.131023

behavioral characteristics of organic pollution. In this paper, the differential equations of convection, dispersion and adsorption of organic pollutants are established respectively, and then the one-dimensional convection-dispersion-adsorption differential equations describing the changes in the concentration of organic pollutants are established on the basis of the mass conservation equation, and then solved with the help of the finite-difference mathematical method. By visualizing the initial concentration over time through contour graphs and three-dimensional graphs, it was found that at the initial moment, the concentration of organic pollutants was highest at the center of the system. Over time, the concentration gradually decreased through propagation, dispersion and adsorption in the river-groundwater system.

## Keywords

Biodegradation, Differential Equations, Finite Difference Method, Mass Conservation Equation, Interpolation Simulation

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

河流对地下水有着直接的影响,当河流补给地下水时,河流一旦被污染,就容易导致地下水以及紧依河流分布的傍河水源地将受到不同程度的污染,这将会严重影响工农业的正常运作、社会经济的发展和饮水安全。其中,在地下水污染中最难治理和危害最大的是有机污染,因此对有机污染物在河流地下水系统中的行为特征进行研究具有十分重要的理论意义和实际价值。此外,已有研究表明在河流地下水系统中有机污染物的行为特征主要涉及对流迁移、水动力弥散、吸附及阻滞等物理过程、化学反应过程以及生物转化过程等。

生物降解是一种重要的环境过程,涉及有机物在自然界中被微生物分解和降解的过程。解流-弥散-吸附微分方程是用来描述这一过程的一种数学模型。首先,研究者需要建立适当的数学模型来描述生物降解过程。这个模型通常会涉及到对有机物在土壤或水体中的传输(流)、分散(弥散)和微生物的吸附与分解过程的数学描述。建立模型通常需要考虑多种参数,如生物降解速率、生物降解产物的生成速率等。研究需要采集实验数据来验证模型的准确性和可靠性[1]。这些实验可以包括在控制条件下监测有机物降解的速率和微生物的活动水平。实验数据通常用于模型参数的校准和验证。一旦建立了模型并获得了实验数据,研究者可以使用数值方法来模拟生物降解过程。这通常涉及到解流-弥散-吸附微分方程的数值解,以预测有机物在不同环境条件下的降解速率和分布。参数敏感性分析有助于确定哪些参数对于生物降解过程的模拟结果影响最大。这可以帮助研究者更好地理解模型的行为并优化参数值[2]。生物降解模拟的应用领域广泛,包括土壤污染修复、废水处理等。相关工作可能会关注特定应用领域,研究如何优化生物降解过程以提高有机物的去除效率。对于一些环境工程项目,需要进行环境影响评估,以确定生物降解对环境的长期影响。这可能需要进行长期的模拟和监测工作[3]。

总之,生物降解后对流-弥散-吸附微分方程的模拟与研究是一个复杂而多领域的研究领域,涉及到数学建模、实验研究和环境工程应用等多个方面。这一研究有助于更好地理解和管理环境中的生物降解过程,以减轻环境污染和改善生态系统健康。

## 2. 模型的建立

### 2.1. 对流、弥散及吸附微分方程的确立

在地下水污染中最难治理和危害最大的是有机污染，其涉及的对流、弥散及吸附作用过程具有十分重要的理论意义以及实践价值。本文通过建立有机污染浓度的一维对流、弥散及吸附微分方程模型来研究和分析污染物浓度  $C$  的变化是随着对流、弥散及吸附三种行为特征所影响，通过文献分析，这三种过程可以用一维对流、弥散及吸附的微分方程进行描述：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC \quad (1)$$

在上述公式中， $C$  表示污染物浓度， $x$  是一维空间距离， $v$  是水流速度， $t$  是时间， $D$  是弥散系数， $k$  是吸附系数。方程左边是污染物浓度  $C$  对时间  $t$  进行求导，右侧三项分别表示对流过程、弥散过程以及吸附过程对浓度变化的影响[4]。

对流项  $-v \frac{\partial C}{\partial x}$  描述了由于水流的对流作用影响，污染物在  $x$  方向上的浓度梯度产生的浓度变化。

弥散项  $D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$  描述了污染物分子的随机运动而产生的浓度变化。水流速度较小时，污染物分子运动较活跃的情况下起主导作用。

吸附项  $kC$  描述了污染物在水流中的吸附作用而减少的浓度。这项与污染物的性质和水流中的吸附物质有关。

### 2.2. 模型参数设定

本文建立数学模型之间，需要对模型参数进行设置。假设水流速度为  $v$ ，系统的空间长度为  $L$ ，时间长度为  $T$ ，弥散系数为  $D$ ，吸附系数为  $k$ ，时间离散化步数为  $N_t$ ，空间离散化点数为  $N_x$ 。因此，基于以上参数，可以计算出时间步长  $dt = T/N_t$ ，空间步长为  $dx = L/(N_x - 1)$ 。

### 2.3. 基于对流项微分方程的确立

针对河流地下水系统中有机污染物的行为特征中的对流迁移，其含义是当含水层中的地下水存在压力差时，水就会产生的流动，由压力高的地方向压力低的地方流动，这种现象称对流[5]。污染物以地下水为载体，随水流一并运动的过程就是对流迁移。经过查询相关文件，我们设置对流迁移微分方程，其公式如下：

$$-u_g \frac{\partial C_g}{\partial x} - v_g \frac{\partial C_g}{\partial y} - w_g \frac{\partial C_g}{\partial z} \quad (2)$$

其中  $u_g$ 、 $v_g$ 、 $w_g$  为地下水中的速度分量， $C_r$  为河流中污染物浓度， $C_g$  为地下水中污染物浓度。

### 2.4. 基于弥散项微分方程的确立

弥散作用是污染物在地下水中迁移转化的最主要的物理过程。弥散是指多孔介质中两种流体相接触时，某种物质从含量较高的流体中向含量较低的流体迁移，使两种流体分界面处形成过度混合带，混合带不断发展扩大，趋向于成为均质的混合物质，即为所谓的弥散现象，形成的作用称为弥散作用[6] [7] [8] [9]。经过查询相关文件，我们设置对流迁移微分方程，其公式如下：

$$D_g \left( \frac{\partial^2 C_g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_g}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_g}{\partial z^2} \right) \quad (3)$$

其中  $C_g$  为地下水中污染物浓度,  $D_g$  为地下水中的弥散系数。

## 2.5. 基于吸附项微分方程的确立

吸附作用是描述有机污染物与土壤或岩石颗粒表面之间的相互作用。吸附通常使用等温吸附模型。经过查询相关文件, 我们设置对流迁移微分方程, 其公式如下:

$$k_f(C_s - C_g) \quad (4)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C[i+1, j] - C[i, j]}{dt} \quad (5)$$

其中  $k_f$  为吸附速率常数,  $C_s$  为饱和吸附浓度,  $C_g$  为地下水中污染物浓度。

## 3. 最终微分方程模型的离散化和求解

在建立本次数学模型的过程中, 求解微分方程是该模型最重要的环节。该求解结果能够很好的揭示了有机污染物浓度在河流 - 地下水系统中的分布和变化情况[10]。本文决定采用有限差分法对对流、弥散及吸附微分方程模型进行求解。

为了对微分方程进行有限差分, 首先需要对其进行离散化, 将空间  $x$  和时间  $t$  离散化为一系列的网格点, 其中空间步长为  $dx$ , 时间步长为  $dt$ 。因此, 对于任意网格点  $(i, j)$ , 其对应空间和时间坐标分别为  $x = jdx$  和  $t = idt$ 。对此, 分别对空间和时间分别求导[11]。

对于时间导数, 采用前向差分格式, 其公式如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C[i+1, j] - C[i, j]}{dt} \quad (5)$$

对于空间导数, 采用中心差分格式, 其公式如下:

$$\frac{\partial C}{\partial x} \approx \frac{C[i, j+1] - C[i, j-1]}{2 * dx} \quad (6)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \approx \frac{C[i, j+1] - 2 * C[i, j] + C[i, j-1]}{dx^2} \quad (7)$$

$$C[i+1, j] = C[i, j] + \frac{dt * (-u * (C[i, k+1] - C[i, j-1]))}{2dx} + \frac{D * (C[i, j+1] - 2C[i, j] + C[i, j-1])}{dx} - k * C[i, j] \quad (8)$$

基于上述公式, 本文将差分格式代入方程(1), 可以得到离散方程。通过迭代方法对微分方程进行求解[12]。在每一个时间步数中, 依据上一个时间步的浓度分布, 再通过对流、弥散及吸附微分方程计算公式, 计算每个空间点上的浓度变化, 最后达到更新浓度分布的目的。具体迭代过程的递推公式如下:

$$C[i+1, j] = C[i, j] + \frac{dt * (-u * (C[i, k+1] - C[i, j-1]))}{2dx} + \frac{D * (C[i, j+1] - 2C[i, j] + C[i, j-1])}{dx} - k * C[i, j] \quad (8)$$

再将公式(6)的导数用有限差分格式来近似求解, 得到对应的离散方程。而公式(9)是求解微分方程的核心公式, 公式如下所示:

$$k(t) = k(t_i) + \frac{(k(t_{i+1}) - k(t_i)) * (t - t_i)}{t_{i+1} - t_i} \quad (9)$$

在每一个时间步数中，都会使用这个公式来更新每个空间点的浓度值。基于上述迭代公式，所需要注意的一点是该公式需要一个初始条件，即初始时刻的浓度分布。在该数学模型中，初始浓度分布其实是在中心位置设置了有机污染物浓度，其余位置设置的浓度均为 0。随着时间步数逐步增加，有机污染物会在水体中扩散，并受到河流 - 地下河中的对流和吸附的影响[13]。

基于边界条件，本文假设系统的边界是完全封闭的，意味着没有污染物能够通过系统的边界。因此，在求解微分方程的过程中保证了边界上的浓度始终为 0。

在求解过程中，本文基于 python 编程语言来编写代码，通过创建一个二维数组  $C$  来存储每一个时间步数以及每一个空间点的浓度值。最后，通过双层循环来实现公式(9)的迭代过程，其中外层循环对应于时间步，内层循环对应于空间点[14]。通过迭代求解之后，得到每个时间步和空间点的浓度值，进而通过绘制等高线图或者三维图的形式对结果进行可视化，探究污染物在河流 - 地下水系统中的分布和变化情况。

#### 4. 结果及分析

在本研究中，为了直观的观察模型的结果，本文采用等高线图来可视化污染物浓度随着空间和时间的变化情况。并且通过数值分析的方法研究三种行为特征，包括对流、弥散及吸附。研究其对污染物浓度变化的影响程度以及这些因素之间的相互作用。

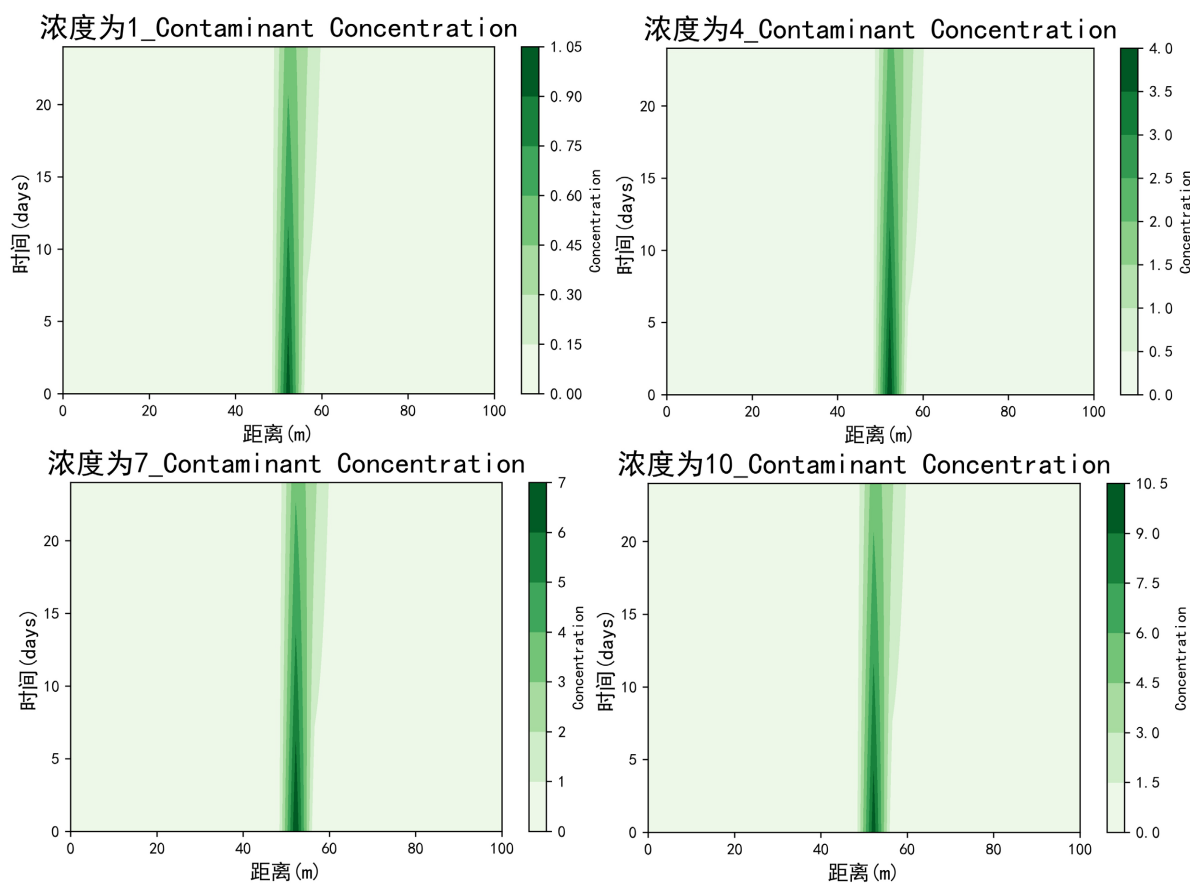


Figure 1. Contours with concentrations of 1, 4, 7, 10  
图 1. 浓度为 1、4、7、10 的等高线

在求解该微分方程的前提下，首先需要设定初始条件，在时间  $t$  为 0 的情况下，各个空间位置的污染物浓度。接着基于上述微分方程，逐步更新每个空间步长和时间步长点的污染物浓度[15]。接着以三维图形式或等高线图等方式对模型结果进行可视化，可以直观地观察污染物浓度随着空间变化和时间变化情况。分析各个因素对污染物浓度的影响。最后，为污染控制和治理提供科学依据。

总的来说，对流 - 弥散 - 吸附微分方程是一个非常重要的工具，可以帮助理解和预测有机污染物在河流 - 地下水系统中的运移以及分布。同时，也需要注意的是该微分方程模型是较理想化的一个模型，实际情况会受许多其它因素影响。如污染物的生物降解、地下水的非均质性、水流的湍流效应等各种影响。因此，基于该微分方程模型，需要结合实际情况，对模型进行适当调整和改进。

如图 1 所示，上述四个图分别表示浓度为 1、4、7、10 四种不同情况的等高线图，以浓度 1 为例，横轴表示空间位置，纵轴表示时间。颜色编码表示浓度的不同级别，其中颜色越深代表浓度越高。图片展示了模拟过程中有机污染物浓度的变化。初始时刻，有机污染物在系统中心的浓度为最高，通过时间的推移，浓度逐渐在河流 - 地下水系统中传播、扩散和吸附。较高的水流速度、较小的弥散系数和吸附系数将导致有机污染物在空间上更迅速地传输和移除。通过观察图片，可以了解有机污染物的扩散和吸附行为以及浓度随时间和空间的变化趋势。这有助于评估污染物传输的速率、范围和影响，并为环境管理和污染治理提供重要信息。

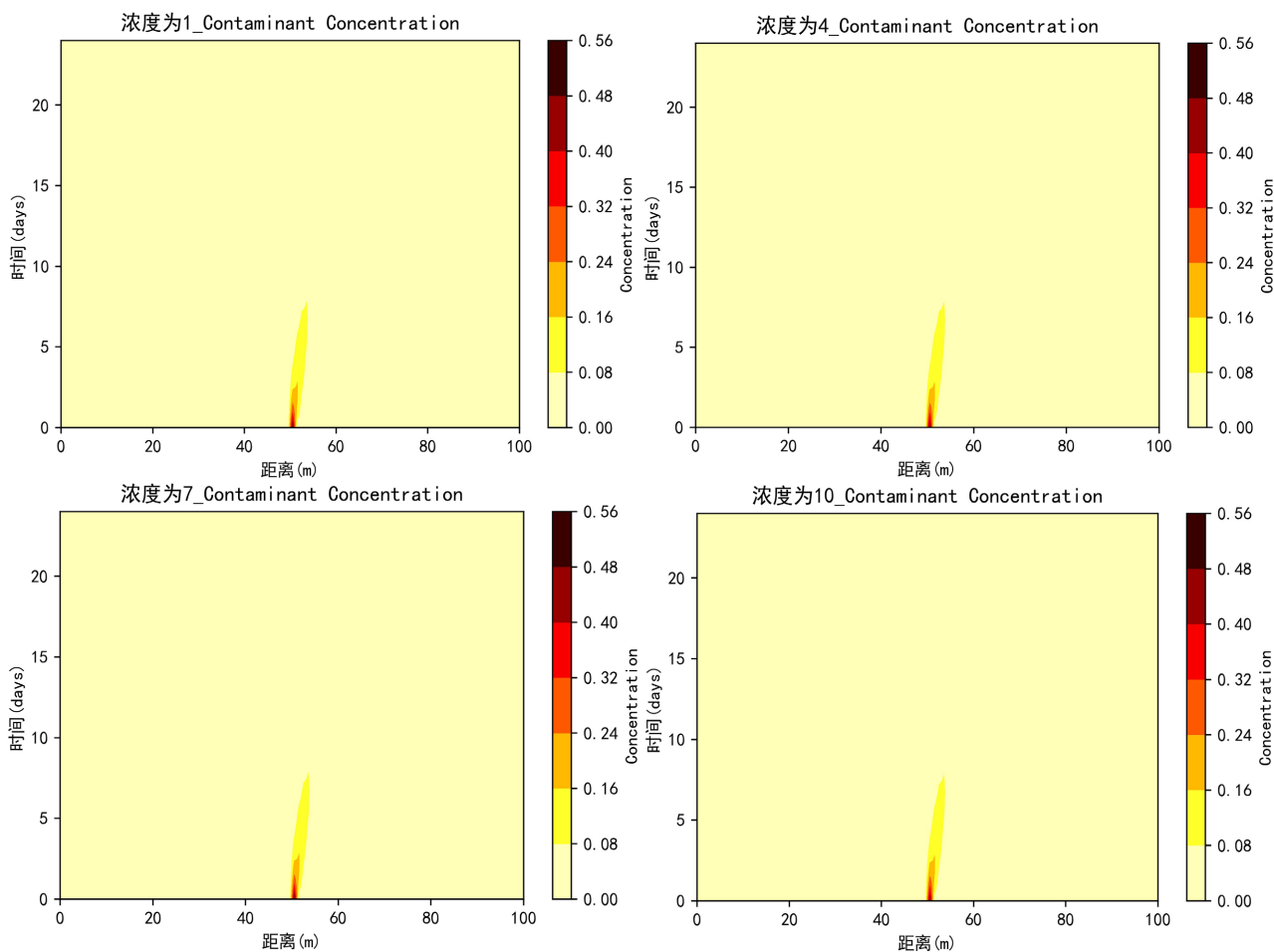


Figure 2. Three-dimensional plots for concentrations of 1, 4, 7 and 10  
图 2. 浓度为 1、4、7、10 的三维图

如图 2 所示, 上述四个图分别表示浓度为 1、4、7、10 四种不同情况的三维图, 以浓度 1 为例, x 轴表示距离, y 轴表示时间, z 轴相关程度。初始时刻, 有机污染物在系统中心的浓度为最高, 通过时间的推移, 浓度逐渐在河流 - 地下水系统中传播、扩散和吸附。通过观察三维图, 可以直观了解有机污染物的扩散和吸附行为以及浓度随时间和空间的变化趋势。这有利于评估污染物传输的速率、范围和影响以及对有机污染物的迁移和转化规律进行研究和探索。

## 5. 结论

基于生物降解后对流 - 弥散 - 吸附微分方程的模拟可以涵盖多个方面, 以进一步提高我们对这一关键环境过程的理解和应用。改进生物降解模型的准确性, 以便更好地考虑有机物的复杂性和微生物群落的多样性。这可能包括开发更复杂的模型, 考虑多种生物降解机制、生物多样性和竞争过程。将微观过程与宏观尺度的水体或土壤系统相连接, 以进行多尺度模拟。这将有助于更好地理解不同空间和时间尺度上的生物降解过程。利用高性能计算和大数据分析技术, 能够处理复杂的生物降解模型, 模拟更大规模和更长时间的情景, 以更全面地评估环境影响。进行更多的实验研究, 以验证模型的准确性和实用性。实验数据可用于校准和验证生物降解模型, 并改进参数估计的精确性。研究气候变化对生物降解过程的影响, 以了解气温、湿度、降水等环境条件的变化如何影响生物降解速率和效率。寻找和研究新的生物降解机制, 如微生物的进化和适应能力, 以及其与环境条件的相互作用。将生物降解模拟研究应用于实际环境工程项目, 如土壤污染修复、废水处理等。研究如何最好地应用模拟结果以改善环境保护和资源管理。探讨生物降解对可持续性和生态系统恢复的潜在贡献, 包括如何通过生物降解来减轻环境污染和恢复受损生态系统。考虑社会、政策和经济因素对生物降解过程的影响。研究如何更好地整合科学研究和环境政策, 以促进环境可持续性。

未来研究可以更深入地探讨生物降解过程的各个方面, 从而更好地应对环境挑战, 提高环境质量, 促进可持续发展。

## 基金项目

国家自然科学基金(No. 42275146), 广东海洋大学社科基金(No. C22825)。

## 参考文献

- [1] Wang, W., Zhao, L. and Cao, X. (2020) The Microorganism and Biochar-Augmented Bioreactive Top-Layer Soil for Degradation Removal of 2,4-Dichlorophenol from Surface Runoff. *Science of the Total Environment*, **733**, Article 139244. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.139244>
- [2] Hussein, N.Q., Muhsun, S.S., Al-Sharify, Z.T. and Hamad, H.T. (2021) Unsteady State Contaminants Transport in Sandy Mediums Using CFD Model. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, **779**, Article 012069. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/779/1/012069>
- [3] Zheng, C., Jing, G., Luo, J., Tang, Y., Liu, Y. and Zhen, Z. (2018) Using a Model to Predict the Migration and Transformation of Chemicals for Alkali-Surfactant-Polymer Flooding in Soil. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, **40**, 1657-1662. <https://doi.org/10.1080/15567036.2018.1486487>
- [4] Anlauf, R., Schaefer, J. and Kajitvichyanukul, P. (2018) Coupling HYDRUS-1D with ArcGIS to Estimate Pesticide Accumulation and Leaching Risk on a Regional Basis. *Journal of Environmental Management*, **217**, 980-990. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2018.03.099>
- [5] Dong, X., Li, W., Liu, Q. and Zeng, Z. (2023) Research on the Convection-Reaction-Diffusion Model of Contaminants in Fracturing Flowback Fluid in Non-Equidistant Artificial Fractures with Arbitrary Inclination in (3+1)-Dimensional Space-Time. *ACS Omega*, **8**, 17901-17921. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c00987>
- [6] Li, X., Sheng, J., Zhang, Z. and Wang, Z. (2022) An Analytical Solution for One-Dimensional Contaminant Transport in a Double-Layered Contaminated Soil with Imperfect Diffusion Boundaries. *Environmental Engineering Research* **2022**, **27**, Article 210058. <https://doi.org/10.4491/eer.2021.058>

- 
- [7] Geng, K., Chai, J., Qin, Y., Xu, Z., Cao, J. and Zhang, X. (2023) Material Characteristics and Pollutant Diffusion Simulation of Cutoff Walls Made of Alkali Activated Slag/Bentonite. *Developments in the Built Environment*, **15**, Article 100200. <https://doi.org/10.1016/j.dibe.2023.100200>
- [8] Shrestha, S. and Datta, A. (2015) Field Measurements for Evaluating the RZWQM and PESTFADE Models for the Tropical Zone of Thailand. *Journal of Environmental Management*, **147**, 286-296. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2014.09.017>
- [9] Jiang, J., Luo, H.H., Wang, S.F., Su, J. and Yu, Y.D. (2023) A Two-Dimensional Analytical Model for Heavy Metal Contaminants Transport in Permeable Reactive Barrier. *Water Science and Technology*, **87**, 393-406. <https://doi.org/10.2166/wst.2022.423>
- [10] Wang, X., Geng, Y., Zhou, W., Li, Y. and Luo, H. (2021) Quantification and Regionalization of the Interaction between the Doumen Reservoir and Regional Groundwater in the Urban Plains of Northwest China. *Water*, **13**, Article No. 540. <https://doi.org/10.3390/w13040540>
- [11] Xi, B., Li, J., Wang, Y., Deng, C., Li, X., Ma, Y. and Xiong, Y. (2021) Rating and Evaluation of Pollution Source Intensity for Typical Groundwater Contamination Sites. In: Wang, C.X., Ed., *Investigation and Assessment Technology for Typical Groundwater-Contaminated Sites and Application Cases*, Springer, Singapore, 33-65. [https://doi.org/10.1007/978-981-15-2845-3\\_3](https://doi.org/10.1007/978-981-15-2845-3_3)
- [12] Cai, Y., Feng, M. and Zhang, T. (2022) Review of Distribution of Nitrogen and Phosphorus in Riparian Zones of Chinese Inland Water Bodies. *Acta Ecologica Sinica*, **42**, 583-592. <https://doi.org/10.1016/j.chnaes.2021.09.010>
- [13] Nguyen, V.T., Le, B.A., Huynh, N.P.T. and Le, C.H. (2021) Levels of  $^{226}\text{Ra}$  in Some Paddy Soils in the Mekong Delta Region (Vietnam): Current Status and Long-Term Assessment. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, **329**, 829-838. <https://doi.org/10.1007/s10967-021-07870-1>
- [14] Yunus, S. (2020) Fabrication of a Prototype Membrane Filter for Drinking Water Purification Assisted by Comsol Multiphysics Simulations, Ph.D. Thesis, University of Cape Coast, Cape Town.
- [15] Zhao, Y., Mao, X., Shukla, M.K. and Li, S. (2020) Modeling Soil Water—Heat Dynamic Changes in Seed-Maize Fields under Film Mulching and Deficit Irrigation Conditions. *Water*, **12**, Article No. 1330. <https://doi.org/10.3390/w12051330>