警惕氯仿污染——综合实验

教学目的和要求:

通过警惕氯仿污染问题，使学生：

1. 了解可以用数学的知识来解决这种类型的重要问题；

2. 熟悉利用离散逼近法建立微分方程模型的方法；

3. 了解低微到高维，简单到复杂的扩展、叠加思想；

4. 体验综合利用高等数学和概率论的思想、方法，来分析和解决实际问题的过程；

5. 激发学生学习数学以及进行探究性学习的兴趣。

知识点： 偏导数 泰勒展开式 均值 方差 正态分布 中心极限定理

必备技能：

1. 建立微分方程模型
2. 计算随机变量的均值和方差

主要内容

1．应用场景

2．问题分析与模型建立

2.1 扩散和湍流的模型

2.2 平流的模型

3．任务

4．进一步的思考

1．应用场景

AAA级化工公司在某大学所在地附近开办了两个化工厂，新式污染检测器显示该大学上空有高浓度的氯仿聚集物。有人认为这些聚集物对身体有害，并且学生工程协会已经成立了研究小组对此进行考察。他们已经想出了许多可能的方法来减轻污染，包括搬迁化工厂、增加烟囱的高度、为化工厂添置空气污染控制设备等等。他们试图分析各种方法的成本并计算氯仿浓度的减少量。盛行风将附近几个烟囱的污染物带到了大学校园。学生们试图计算不同条件下由这些烟囱产生的校园上空的氯仿强度等级。

学生们首先查阅了关于工厂烟囱产生的空气污染物传播的相关文献资料。他们发现要计算氯仿强度等级就必须运用叠加原理。即先计算单个烟囱产生的影响，然后将所有烟囱的影响进行加和。事实上他们了解到，即使是研究单个烟囱的连续排放影响，叠加原理都是必要的。为此，他们将对所谓的“基解”做时间上的积分来解决问题。因此他们的整体想法是在尽量简单的情况下处理扩散问题，然后运用叠加原理解决后面更复杂的情形。

他们还了解到传播是由平流、扩散和湍流共同决定的。

2．问题分析与模型建立

2.1 扩散和湍流的模型

扩散和湍流的影响可以用随机游动来描述。随机游动是一个微粒在一维或n维空间内一次一步地随机移动的数学模型。运用随机游动模型做以下两件事情：

- 首先，得到扩散和湍流运动下分子浓度的偏微分方程（PDE）。
- 然后，找到偏微分方程的所有基解。这些解是由一个点处的初始单位质量产生的浓度值。

先从受扩散和湍流规律支配、分布在离散位置、可在离散时间点运动的大量微粒开始。为了简化问题，我们假设微粒在一维空间中运动。考虑分布在一维实直线的细网格上的微粒，其总质量设为M_0。虽然总质量M_0是有限的，但是我们假设这些微粒的实际数目是无限的，并且所有微粒质量相同。用

$$\ldots,\ -\mathrm{n}\Delta x,\ -(\mathrm{n}-1)\Delta x,\ \ldots,\ \Delta x, 0,\ \Delta x,\ \ldots,\ \mathrm{n}\Delta x,\ \ldots$$

表示微粒可能的位置，其中Δx是很小的量。同时，假设微粒只能在时间点

$$t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, n\Delta t, \ldots,$$

运动，其中Δt也是很小的量。对每一$x = m\Delta x$和$t = n\Delta t$，用$M(x,t)$表示在t时刻x位置的微粒的质量。因此在任意时刻t，$M(x,t)$关于所有x的和为M_0.

用C(x,t)表示t时刻x位置处的微粒的质量浓度（单位长度的质量）。离散近似得到C(x,t)=M(x,t)/Δx。令$\Delta x \to 0$，得到t时刻x位置的微粒的质量浓度C(x,t)，则对于每个t，区间[a, b]在t时刻的质量为

$$\int_a^b C(x,t)dx \tag{1}$$

可用简单的对称随机游动模型描述微粒的运动。即在每一时刻t每一微粒随机向左或向右移动Δx的距离。移动方向与此前的运动状态无关并且等概率的向左或向右。（因此，在此模型中微粒不可能保持静止。这种假设没有局限性并保持了问题的简单性。）考虑到上述假设，可得以下方程：

$$M(x,t+\Delta t) = \frac{1}{2}M(x-\Delta x,t) + \frac{1}{2}M(x+\Delta x,t)$$
$$C(x,t+\Delta t) = \frac{1}{2}C(x-\Delta x,t) + \frac{1}{2}C(x+\Delta x,t) \tag{2}$$

于是

$$\mathrm{C(x,t+\Delta t)\text{-}C(x,t)} = \frac{1}{2}C(x+\Delta x,t) - C(x,t) + \frac{1}{2}C(x-\Delta x,t) \tag{3}$$

将（3）式左端关于t进行一阶泰勒公式展开，可以近似为$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}\Delta t$。将（3）式右端关于$x$用二阶泰勒公式展开, 可以得到：

$$\frac{1}{2}(C(x,t) + \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}\frac{\Delta x^2}{2}) - C(x,t) + \frac{1}{2}(C(x,t) - \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}\frac{\Delta x^2}{2})$$

假设$\Delta t = c(\Delta x)^2$（稍后我们会发现随机游动中位置的标准差与时间的平方根成正比，即 x 与$\sqrt{t}$成正比）。因此，方程左端除以Δt，方程右端除以$c(\Delta x)^2$。得到

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}=\frac{1}{2c}(\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}) \tag{4}$$

记$k_1=(2c)^{-1}$，得到关于浓度$C(x,t)$的偏微分方程：

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}=k_1\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \tag{5}$$

其中，常量k_1称为质量扩散率，它的值由具体情况决定。

为了唯一确定浓度函数$C(x,t)$，我们不仅要知道它满足（5）式，还需要浓度 C 的其他信息。通常需要做的是给出$t=0$时的浓度的初始分布$C(x,0)$，但是这里的情况特殊。不是浓度的初始分布$C(x,0)$，而必须处理在一个点x_0处（即烟囱所在位置）的初始质量浓度。我们能否指定这种情况下的初始浓度函数？

由于一点的单位质量为正且其他位置没有初始质量，因此浓度函数（质量浓度）在 x_0 处是无穷的而其他位置为 0，它在整个数轴上对 x 的积分等于单位质量。因此，我们必须引入一个函数，此函数在某点是无穷的，但在除此点外的其他位置都是 0，并且其积分为 1。

这样的函数称为狄拉克δ函数。它不是一个真正的函数，但却是公认的行之有效的方法，因此大家把它当作一个函数。在x_0处的狄拉克δ函数的标准记法为$\delta_{x_0}(x)$。它的基本性质如下：

- $\delta_{x_0}(x)=0,当x\neq x_0$
- $\delta_{x_0}(x_0)=\infty$
- $\int_{-\infty}^{+\infty}\delta_{x_0}(x)dx=1$

对任意函数f，有$\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\delta_{x_0}(x)dx=f(x_0)$。

对应于初始狄拉克δ函数的浓度$C_{x_0}(x,t)$称为问题的基解，因为对应于一个任意的初始分布$C(x,0)=f(x)$的浓度$C(x,t)$都能用这些基解表示。事实上，如果$C_{x_0}(x,t)$是（5）的基解，对每一个x_0和x均有$C_{x_0}(x,0)=\delta_{x_0}(x)$成立，则$C(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(u)C_u(x,t)du$对

于任意的 x 均满足方程（5）式和 $C(x,0)=f(x)$。这里假设可以在积分下求导。

现在来推导对应于 $x=x_0$ 处初始质量的浓度公式，即对应于初始狄拉克 δ 函数的基解。用 $C_{x_0}(x,t)$ 表示求得的浓度。为了得到 $C_{x_0}(x,t)$ 的公式，回到上面用到的离散网格，跟踪一个微粒从 $t=0,\ \ x_0$ 点开始的运动情况。在 $t=0$ 时刻它的位置在 x_0，但是在任意确定的 $t=n\Delta t$ 时刻它的位置是随机的。为了求得 t 时刻微粒位置的概率分布，我们引入随机变量 $X_1,X_2,\ldots$，对每一 k，如果微粒在时刻 $t=k\Delta t$ 向右移动则随机变量 $X_k=+1$；如果此时刻它向左移动则 $X_k=-1$。$X_1,X_2,\ldots$ 相互独立，并且对于每一 k，X_k 的分布律为：$P(X_k=1)=0.5$，$P(X_k=-1)=0.5$。微粒在时刻 $t=n\Delta t$ 的随机位置 $S(t)$ 可以表示为：

$$S(t)=x_0+\sum_{k=1}^{n}X_k\Delta x$$

$S(t)$ 的均值是 x_0，标准差是 $\Delta x\sqrt{n}$。事实上，由概率论知识知，$X_1+\ldots X_n$ 的均值是 $X_1,\ldots,X_n$ 的均值之和。如果 $X_1,\ldots,X_n$ 相互独立，则和的方差也等于方差之和。由于对每个 k 有 $E[X_k]=0$，因此，

$$E[S(t)]=x_0+\sum_{k=1}^{n}E(X_k)\Delta x=x_0$$

同时，方差满足 $Var[S(t)]=\sum_{k=1}^{n}Var(\Delta x X_k)=n(\Delta x)^2=2k_1t$。因此 $S(t)$ 的标准差为 $\Delta x\sqrt{n}$。

根据概率论的中心极限定理，如果 n 足够大，$S(t)$ 的分布就趋近于正态分布。因此可以用一个 x 的函数来表示出 $S(t)$ 的极限密度。现在回到我们的假设，即微粒的数量是无穷的、每个微粒的质量都相同、所有微粒质量和为1，则 $S(t)$ 的极限密度即为 t 时刻在 x 的质量密度。换句话说，这个质量密度即为我们期望的解 $C_{x_0}(x,t)$。

$$C_{x_0}(x,t)=(4\pi k_1t)^{-1/2}\exp[-(x-x_0)^2/4k_1t]$$

事实上

$$\frac{\partial C_{x_0}(x,t)}{\partial t}=(4\pi k_1)^{-1/2}(-\frac{1}{2t^{3/2}}+\frac{(x-x_0)^2}{4k_1t^{5/2}})\exp[-\frac{(x-x_0)^2}{4k_1t}] \tag{6}$$

且

$$\frac{\partial^2 C_{x_0}(x,t)}{\partial x^2}=(2\pi k_1)^{-1/2}(-\frac{1}{2k_1t}+\frac{(x-x_0)^2}{4(k_1t)^2})\exp[-\frac{(x-x_0)^2}{4k_1t}] \tag{7}$$

可见C_{x_0}满足（5）。

还有一点需要验证：$C_{x_0}(x,0)$是x_0处的狄拉克δ函数。我们已经指出$C_{x_0}(x,t)$是均值为x_0，标准差为$\sqrt{2k_1t}$的正态密度函数。因此$C_{x_0}(x,t)$关于x积分为 1，并且对于无限趋向于 0 的t，$C_{x_0}(x,t)$集中在x_0附近；并在x_0附近趋向于无穷大。因此我们可以确定$C_{x_0}(x,0)$是x_0的狄拉克δ函数。 最后指出，对（5）式，初始分布是x_0处的狄拉克δ函数的正解只有一个。

2.2　平流的模型

在这部分，我们考虑风（平流）的影响。为了简单，我们假设风始终平稳的吹向同一方向。与研究扩散和湍流相同，我们也用离散近似研究平流。再次考虑细网格，但是忽略扩散和湍流的影响而只考虑平流的影响。假设正向风速为c。用如下方程来描述这种平流影响。

$$\begin{aligned} M(x,t+\Delta t)&=M(x-c\Delta t,t)\\ C(x,t+\Delta t)&=C(x-c\Delta t,t) \end{aligned} \tag{8}$$

第一个方程右边表示时刻t时在$x-c\Delta t$位置的质量。左边表示时刻$t+\Delta t$时x位置的质量。这是第一个方程；第二个方程只是在第一个方程的两边同时除以Δx得到的。

3. 课外任务

1）求在忽略扩散和湍流的影响而只考虑平流的影响时，$C(x,t)$满足的方程。

2）假设扩散和湍流的影响以及平流的影响是累加的。求在平流与湍流扩散共同作用下的浓度$D(x,t)$所满足的偏微分方程。

3)关于 $D(x,t)$ 所满足的偏微分方程基解的一个好的猜想是：运用在 2.1 得到的基解 C_{x_0}，让它以速度 c 移动：

$$D_{x_0}(x,t)=C_{x_0}(x-ct,t) \tag{9}$$

证明 $D_{x_0}(x,t)$ 是 2）得到的偏微分方程的解。

4．进一步的思考

解 D_{x_0} 是对应于初始单位质量集中在 x_0 处的浓度。现在不加证明地将得到的方程和解从一维扩展到三维。将所有的浓度都统一记为 C。用 $C_{p_0}(p,t)$ 表示 t 时刻在 $p=(x,y,z)$ 处的质量浓度，它对应的初始条件为时刻 $t=0$ 时，一个单位质量集中在 $p_0=(x_0,y_0,z_0)$ 点处（在三维空间中，密度是单位体积的质量）。假设风沿 x 正方向以恒速 c 匀速运动。得到如下方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t}+c\frac{\partial C}{\partial x}=k_1\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+k_2\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+k_3\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \tag{10}$$

基解 C_{p_0} 由下式给出：

$$C_{p_0}(p,t)=(4\pi t)^{-3/2}(k_1k_2k_3)^{-1/2}\times\exp\left(-\left(\frac{(x-x_0-ct)^2}{4k_1t}+\frac{(y-y_0)^2}{4k_2t}+\frac{(z-z_0)^2}{4k_3t}\right)\right) \tag{11}$$

现在综合考虑以解决质量初始分布在很多点，并且质量随时间而增加的问题，即与实际中烟囱产生的气体微粒相同的情况。分析中遗漏了地面的影响因素，即地面吸收气体还是反射气体？然而，烟囱是高架的，并且由于大部分运动发生在地面以上，因此在此情形下可以忽略大地的吸收和反射影响。为了从基解得到更多的通解，利用方程的线性性。因此如果 C_1、C_2 都满足方程，则它们的任意线性组合也满足方程。特别的，如果我们从 $t=0$ 时刻集中在

R^3 中的 $p_1,\ldots,p_k$ 点质量分别为 $m_1,\ldots,m_k$ 的微粒，则相应的浓度 C 由下式给出：

$$C(p,t)=\sum_{i=1}^{k}m_iC_{p_i}(p,t) \tag{11}$$

由前所述 p 向量代表 (x, y, z) 。另一方面，如果我们根据初始浓度 $f(x, y, z)$ ，从 $t = 0$ 时刻分布在 R^3 上的微粒着手，则相应的浓度 C 为：

$$C(p,t) = \int f(u,v,w) C_{(u,v,w)}(p,t) dudvdw \tag{11}$$

这种采用线性方程基解的线性组合，来得到对应于更复杂的初始状态的解的过程，称为叠加。

在应用中，我们不仅要考虑相同时刻不同点质量增加的情况，还要考虑在相同点在不同时刻质量增加的情况。我们用对时间变量的叠加来解决此问题。用 $C_{p_0}^{t_0}(p,t)$ 表示在 p 点 t 时刻的浓度，它对应于 p_0 点 t_0 时刻的单位质量微粒。那么

$$C_{p_0}^{t_0}(p,t) = C_{p_0}(p, t - t_0) \tag{12}$$

有了污染源的充足数据，就能根据叠加原理算出上面所概述的浓度 $C(x, y, z, t)$ 。然而，几个简化假设可以让计算变得更加简单。第一个简化假设是污染物的排放速率为常量 Q_0 ，于是我们得到稳态，即污染物已经排放了一段时间，浓度不再随着时间而变化。

在你的帮助下得到了计算烟囱排放的氯仿浓度的方程，然后学生们又收集了关于两个化工厂的一些数据。他们找到以下数据：

工厂 1：

- $Q_0 = 100 g/s$
- 烟囱高度 $z = 25m$
- 到学生活动中心的距离（与盛行风向平行）： $x = 4000m$
- 到学生活动中心的距离（与盛行风向垂直）： $y = 300m$

工厂 2：

- $Q_0 = 50 g/s$
- 烟囱高度 $10m$

- 到学生活动中心的距离（与盛行风向平行）：$x = 1100m$

- 到学生活动中心的距离（与盛行风向垂直）：$y = 45m$

环境工程系的学生已经进行了大气扩散的实验，并认为k_2和k_3的适当值分别为

$0.45m^2/s$和 $0.32m^2/s$。本地区的风速通常为$0.5m/s$。

任务 1

预测在盛行风影响下，由这些工厂排出的氯仿在学生活动中心周围空气中的浓度。

任务 2

假设发生了大气逆温，大量空气在此地区商中滞留了若干天。在这种情况下，风速下降到大约$0.05m/s$。计算此时的氯仿浓度。将结果与盛行风条件下的浓度进行比较。在那种情况下空气质量更高？

任务 3

为降低学校周围空气的氯仿浓度，学生们提出了若干解决办法：

1. 将每一个烟囱增高 8m。
2. 在每一个烟囱上增加污染控制装置（比如空气洗刷器）以减少$35g/s$的排放率。
3. 关闭工厂 1，将所有生产移到工厂 2 进行。
4. 将该大学搬迁。以此来让学生和教员远离氯仿污染且不停止化工厂的正常生产。估计每种办法对学生活动中心周围空气氯仿浓度的影响。从周围空气质量，成本（估算）和可行性的角度讨论每种办法(包括现已建好的化工厂)。提出一个减少氯仿排放量的建议。

任务 4

当学生们把建议向 AAA 级化工厂提出时，工厂经理们回复要求他们更科学的计算成本。经理们给学生提供了以下数据：

- 加长烟囱的成本：固定成本$30,000，每米$5,000（最大烟囱高度 40m）。

- 每个工厂污染控制装备成本：$\text{Cost}=10,000+2,000r^2$， r 是每秒减少的质量

  grams/second （每个工厂最少减少排放量$2g/s$），成本用美元记。

- 每个工厂关闭和转移生产的成本：$2,000,000。
- 迁移该大学：重建校园成本$500（百万），售卖老校园的资产可以补偿$200（百万），迁移后会吸引更多学生就读带来$100（百万）收入（以当前市值计）。

（a） 计算每个烟囱加长 40 米的收入。采用此方法后，在盛行风影响下，学生活动中心周围的氯仿浓度怎样变化？

（b） 计算每个工厂将减少 $2g/s$ 排放量的成本。采用此方法后，在盛行风影响下，学生活动中心周围的氯仿浓度怎样变化？

（c） 计算任务 3 中每一项的成本。你在任务 3 中的建议比其他的选择成本更高？基于这些成本你是否会改变最初的建议？写一篇报告比较每种选择的成本和效果。

任务 5

（a） 把一个工厂的生产移到另一个工厂的成本为$2,000,000。如果每个工厂用$1,000,000 来购置污染控制设备，每个工厂能够减少多少排放量？由此引起的学生活动中心周围的浓度会怎样变化？

（b） 用于购置污染控制设备的$2,000,000 如何在两个工厂之间分配才能达到最佳效果？答案应该建立在学生活动中心周围氯仿浓度最低的基础上。