

DOI: 10.11779/CJGE20221288

考虑土-膨润土化学相容性的阻隔墙长期服役性能研究

黄 博^{1,2}, 曹林峰^{*1,2}, 李育超^{1,2}

(1. 浙江大学岩土工程研究所, 浙江 杭州 310000; 2. 超重力研究中心, 浙江 杭州 310000)

摘要: 考虑到填埋场渗滤液中较高 Na^+ 和 Ca^{2+} 浓度会让土-膨润土的渗透系数显著增大, 从而加速高危害性污染物击穿土-膨润土阻隔墙, 建立了 Na^+ 和 Ca^{2+} 作用下土-膨润土阻隔墙-含水层系统中有机物污染物运移数值模型。该模型可以考虑渗透系数和水动力弥散系数等参数随 Na^+ 和 Ca^{2+} 浓度的变化。利用有限差分法, 获得了该模型的数值解。通过将所建模型的计算结果分别与已有解析解计算结果和 COMSOL 软件计算结果进行对比分析, 验证了模型的正确性。最后基于所建数值模型, 以甲苯作为代表性有机污染物分析和讨论了考虑和未考虑土-膨润土化学相容性、水头差和膨润土掺量对阻隔墙长期服役性能的影响。结果表明: 考虑土-膨润土化学相容性之后, 阻隔墙从不会被击穿变成了服役 75 a 后被击穿, 服役寿命大幅缩短; 降低阻隔墙两侧水头差, 能够有效延缓污染物的击穿时间; 阻隔墙膨润土掺量的下限值应在原先防渗要求的基础上适当提高, 以应对污染物作用下墙体防污阻隔性能的削弱。

关键词: 化学相容性; 阻隔墙; 污染物运移; 数值模型; 长期服役性能

中图分类号: TU443 文献标识码: A 文章编号: 1000-4548(2024)02-0282-09

作者简介: 黄 博(1973—), 女, 博士, 教授, 主要从事地下污染物迁移与土体渗流等方面的科研工作。E-mail: cehuangbo@zju.edu.cn。

Long-term service performance of cutoff walls considering chemical compatibility of soil-bentonite

HUANG Bo^{1,2}, CAO Linfeng^{1,2}, LI Yuchao^{1,2}

(1. Institute of Geotechnical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310000, China; 2. Center for Hypergravity Experimental and Interdisciplinary Research, Hangzhou 310000, China)

Abstract: Considering the high concentrations of Na^+ and Ca^{2+} in the leachate of landfills, the hydraulic conductivity of soil-bentonite will increase significantly, thereby accelerating the high-risk pollutants to break through the soil-bentonite cutoff wall. A numerical model for the transport of organic contaminants in the soil-bentonite cutoff wall-aquifer system under the action of Na^+ and Ca^{2+} is established. This model can consider the changes in parameters such as hydraulic conductivity and hydrodynamic dispersion coefficient with the concentrations of Na^+ and Ca^{2+} . The numerical solution of the model is obtained by the finite difference method. The correctness of the model is verified by comparing its calculated results with the existing analytical solutions and those of the COMSOL software. Finally, based on the established numerical model, the effects of chemical compatibility of soil-bentonite, water head difference and bentonite content on the long-term service performance of the cutoff wall are analyzed and discussed with toluene as a representative organic pollutant. The results show that after considering the chemical compatibility of soil-bentonite, the cutoff wall changes from never breaking down to breaking down after 75 years of service, and the service life is significantly reduced. Reducing the water head difference at both sides of the cutoff wall can effectively delay the breakthrough time of contaminant. The lower limit of the bentonite content of the cutoff wall should be appropriately increased on the basis of the original anti-seepage requirements to deal with the decrease of anti-fouling barrier performance of the cutoff wall under the action of contaminants.

Key words: chemical compatibility; cutoff wall; contaminant transport; numerical model; long-term service performance

0 引言

中国早期的垃圾填埋场大多未修建衬垫及渗滤液收集系统, 仅依靠天然土层阻隔污染物, 逐渐成为重大的环境安全隐患^[1-2]。在场地外围修建竖向隔离屏障

基金项目: 国家重点研发计划课题(2018YFC1802304); 国家自然科学基金项目(51988101); 浙江省自然科学基金项目(LCZ19E080002)

收稿日期: 2022-10-18

*通信作者(E-mail: 1152358617@zju.edu.cn)

成为治理此类简易填埋场污染问题的常用方法^[3-4]。其中, 土-膨润土(SB)阻隔墙因成本低廉、施工方便、渗透系数低和拥有自愈合性能, 而备受关注^[5]。其施工步骤是: 先开挖沟槽, 同时采用泥浆护壁, 再将开挖出来的土层与膨润土按比例混合均匀, 最后回填形成柔性墙体。SB阻隔墙的渗透系数是影响其防污阻隔性能的关键因素, 实际工程一般要求小于 10^{-9} m/s^[6]。

然而, 大量SB材料化学相容性(化学相容性在环境岩土工程领域中, 泛指各类工程屏障材料抵抗污染作用对其工程性质造成不利影响的能力)试验表明, 土体孔隙水中的有机物和阳离子分别会影响孔隙溶液的介电常数和阳离子浓度, 从而使膨润土颗粒双电层厚度压缩, 并最终导致SB材料渗透系数显著增大^[1-2, 7-13]。因此在评估SB阻隔墙的服役寿命时, 有必要考虑填埋场渗滤液中污染物对SB材料的影响。中国垃圾填埋场渗滤液中的典型污染物主要有有机污染物(COD)、持久性有机物(PAHs、DDT、PCBs等)、无机盐(Na、Ca、Mg等)和重金属(Cu、Zn、Pb等), 它们的质量浓度范围如表1所示。有机物中极高浓度的COD对SB材料的影响较大, 然而COD在土中的分解速率极快(半衰期为10~30 d)^[15], 到达阻隔墙时, 浓度可以忽略不计。阳离子中无机盐(Na、Ca、Mg等)的浓度较高, 特别是Na⁺和Ca²⁺远超其它阳离子^[2]。根据Stern-Guoy模型^[16], 双电层的厚度与离子强度I($I = 0.5 \sum c_k z_k^2$, 其中 c_k 和 z_k 是第k个阳离子的浓度和化合价)的平方根成反比, 渗滤液中极高浓度的Na⁺和Ca²⁺对SB材料的影响较大。综合以上分析, 阳离子Na⁺和Ca²⁺将成为影响SB材料化学相容性的关键污染物。Na⁺和Ca²⁺由于环境危害性较小, 故一般不作为指示污染物用于SB阻隔墙服役寿命的评估^[17-19], 但其较高的浓度, 足以影响SB阻隔墙的防渗性能, 从而加快其他高危害性物质溢出, 如加快持久性有机物的溢出。因此, 在评估SB阻隔墙的长期服役性能时, 考虑Na⁺和Ca²⁺对墙体材料渗透系数的影响十分重要。

表1 垃圾填埋场渗滤液中典型污染物质量浓度^[2, 14]

Table 1 Typical pollutant mass concentrations in landfill leachate^[2, 14]

污染物类型	质量浓度范围/(mg·L ⁻¹)
COD	8000~20000
PAHs、DDT、PCBs等持久性有机物	0.01~0.1
Na、Ca、Mg等无机盐	1000~4000
Cu、Zn、Pb等重金属	0.01~2.00

对于污染状态下饱和SB渗透系数的预测, 大量学者基于试验数据, 提出了各种经验公式。例如Castelbaum等^[20]基于膨润土孔隙比计算砂-膨润土的渗透系数, 刘松玉^[6]给出改进黏粒孔隙比用于预测砂-

黏性土-膨润土的渗透系数。但上述经验公式与试验结果拟合的判定系数R²分别为0.157和0.660, 拟合结果较为一般。Xu等^[2]通过有效孔隙率评估不同膨润土掺量砂-膨润土的渗透系数, 判定系数R²达到了0.969。该理论认为膨润土颗粒双电层内的胶凝状结合水(主要为弱结合水), 会堵塞土体中的渗流通道, 而在阳离子作用下, 双电层厚度减小, 结合水含量降低, 从而让土体孔隙增大, 并最终导致SB渗透系数上升, 如图1所示。其中有效孔隙率为土体孔隙体积减去结合水体积之后占总体积的百分比。目前, 考虑SB化学相容性的阻隔墙长期服役性能研究较少, 有必要开展这方面的研究以更为准确地评估阻隔墙的服役寿命。

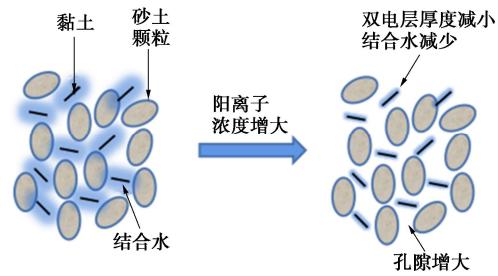


图1 有效孔隙率理论示意图

Fig. 1 Theoretical schematic diagram of effective porosity

针对以上研究情况, 本文在已有研究的基础上, 建立了考虑Na⁺和Ca²⁺作用下SB阻隔墙-含水层系统中有机物污染物运移数值模型, 并采用有限差分法对该模型进行了求解。通过将数值模型的计算结果分别与Li等^[21]所求解析解的计算结果、有限元软件的模拟结果进行对比分析, 验证了所建模型的正确性。最后基于所建的数值模型, 分析了相关参数变化对有机物运移过程以及阻隔墙长期服役性能的影响。

1 一维阻隔墙-含水层系统污染物运移模型

1.1 计算简图

图2为SB阻隔墙-含水层系统中污染物运移模型的计算简图。图2中, 从左到右依次为渗滤液、上游含水层、SB阻隔墙、下游含水层和江河或河流。假定上游含水层、SB阻隔墙和下游含水层始终处于饱和状态, 厚度分别为L_{ua}、L_w和L_{da}, 坐标轴x由上游含水层左边界垂直向右。h_w为SB阻隔墙两侧的水头差, C_{p,0}(t)、C_{n,0}和C_{c,0}分别为渗滤液中有机物、Na⁺和Ca²⁺浓度, 其中有机物由于生物分解随时间逐渐减少^[23]。随着污染物向右侧运移, SB阻隔墙内的Na⁺和Ca²⁺浓度逐渐升高, 导致土体结合水含量下降, 有效孔隙率增大, 渗透系数变大, 最终加速了有机物的运移。

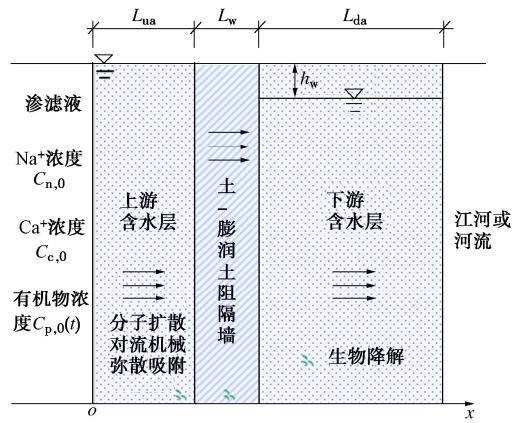


图2 阻隔墙-含水层系统中污染物一维运移模型计算简图

Fig. 2 Calculation diagram for transport of contaminants in cutoff wall-aquifer system

1.2 基本假定

本文一维阻隔墙-含水层系统污染物运移模型的建立基于以下5点假设^[1-2, 17-18, 22]: ①SB阻隔墙和含水层皆是均质各向同性的，并处于饱和状态。同时，土中液相在模型各层的对流属于稳态流，且满足Darcy定律。②有机污染物在土层中的运移方式考虑分子扩散、对流、机械弥散和吸附。而土体对Na⁺和Ca²⁺的吸附以静电吸附为主，吸附量较少，因此它们的运移方式仅考虑分子扩散、对流和机械弥散。由于研究区域内有机物的浓度较低，土体对其的吸附遵循一阶Henry定律。③有机污染物在渗滤液、阻隔墙和含水层中自然衰减随时间的关系满足一阶降解模型。④Na⁺和Ca²⁺作用下SB的渗透系数采用有效孔隙率理论计算，而其有效孔隙率随Na⁺和Ca²⁺浓度的变化关系则依靠试验拟合获得。⑤考虑到SB中的结合水为胶凝状物质，会堵塞渗流通道，使用扣除结合水的有效孔隙作为污染物和流体的输运通道，即在污染物运移控制方程中，使用有效孔隙率替代孔隙率。

1.3 控制方程

有机物在阻隔墙-含水层系统中的运移控制方程为^[19, 22]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[n_{\text{eff},i} C_{p,i} + (1-n_i) \rho_i K_{d,i} C_{p,i} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left(n_{\text{eff},i} D_{p,i} \frac{\partial C_{p,i}}{\partial x} - n_{\text{eff},i} v_{s,i} C_{p,i} \right) - \lambda_i C_{p,i} \quad (1)$$

Na⁺的运移控制方程为

$$\frac{\partial (n_{\text{eff},i} C_{n,i})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n_{\text{eff},i} D_{n,i} \frac{\partial C_{n,i}}{\partial x} - n_{\text{eff},i} v_{s,i} C_{n,i} \right) \quad (2)$$

Ca²⁺的运移控制方程为

$$\frac{\partial (n_{\text{eff},i} C_{c,i})}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n_{\text{eff},i} D_{c,i} \frac{\partial C_{c,i}}{\partial x} - n_{\text{eff},i} v_{s,i} C_{c,i} \right) \quad (3)$$

式中： $i = ua, w, da$ (ua 表示上游含水层， w 表示SB阻隔墙， da 表示下游含水层，下同)； $C_{p,i}$ ， $C_{n,i}$ 和 $C_{c,i}$ 分别为土体中有机物、Na⁺和Ca²⁺的浓度； $n_{\text{eff},i}$ 为土体的有效孔隙率，其中含水层一般不含有黏土颗粒，因此其有效孔隙率与孔隙率一致，而SB阻隔墙的有效孔隙率会随着Na⁺和Ca²⁺浓度的变化而变化； n_i 为土体的孔隙率，考虑到SB阻隔墙和含水层的孔隙率在污染物作用下变化极小^[1-2]，认为其不发生变化； ρ_i 为土体的土颗粒密度； $K_{d,i}$ 为土体的分配系数； $D_{p,i}$ ， $D_{n,i}$ 和 $D_{c,i}$ 分别为有机物、Na⁺和Ca²⁺在土体中的水动力弥散系数； $v_{s,i}$ 为土体中孔隙水的实际流动速度， $v_{s,i} = v_d / n_{\text{eff},i}$ ， v_d 为土体中孔隙水的达西流速； λ_i 为有机物在土体中的衰减因子。

有机物、Na⁺和Ca²⁺在土体中的水动力弥散系数 $D_{j,i}$ ($j = p, n, c$) 可表示为有效分子扩散系数 $D_{j,i}^*$ 和机械弥散系数 $D_{L,i}$ 之和^[23]:

$$D_{j,i} = D_{j,i}^* + D_{L,i} \quad (4)$$

污染物有效分子扩散系数 $D_{j,i}^*$ 与土体孔隙率有关^[24]，考虑到结合水的存在，将孔隙率替换为有效孔隙率：

$$D_{j,i}^* = n_{\text{eff},i}^{m_i} D_{0,j} \quad (5)$$

式中： m_i 为经验指数； $D_{0,j}$ 为污染物自由扩散系数。

污染物机械弥散系数 $D_{L,i}$ 与土体孔隙水流速有关：

$$D_{L,i} = \alpha_{L,i} v_{s,i} \quad (6)$$

式中， $\alpha_{L,i}$ 为纵向弥散系数。

1.4 墙体化学相容性参数计算理论

Na⁺和Ca²⁺作用下墙体运移参数的基本计算思路总结如下：①基于SB化学相容性试验，拟合得到Na⁺和Ca²⁺浓度和有效孔隙率的关系；②根据有效孔隙率理论，求解SB的渗透系数；③最后通过阻隔墙渗透系数的调和平均数计算达西流速，从而获得其它流速相关运移参数的表达式。

SB的有效孔隙率会随阳离子浓度的升高而增大，并最终趋于稳定^[1-2]，Xu等^[2]测定了膨润土掺量分别为5%，6%，7%时砂-膨润土在不同Ca²⁺浓度下的有效孔隙率。参照砂土的相对密实度，对不同膨润土掺量砂-膨润土的有效孔隙率做归一化处理：

$$R_{\text{eff}} = \frac{n_{\text{eff},w}^s - n_{\text{eff},w}^t}{n_{\text{eff},w}^s - n_{\text{eff},w}^u} \quad (7)$$

式中： R_{eff} 为相对有效密实度； $n_{\text{eff},w}^s$ 为SB稳定时的有效孔隙率； $n_{\text{eff},w}^t$ 为未污染时SB的有效孔隙率。

由图3可知不同膨润土掺量的砂-膨润土 R_{eff} 的自然对数值与Ca²⁺浓度成正比：

$$\ln R_{\text{eff}} = \eta C_{c,w} \quad (8)$$

式中, η 为相对有效密实度拟合系数。

并且 R_{eff} 与 Ca^{2+} 浓度拟合直线的斜率与膨润土掺量也呈正比, 如图 4 所示。当膨润土掺量为 0 时, 拟合直线的斜率为 0, 代表土体有效孔隙率不随污染物浓度的变化而变化, 这是因为此时土体只包含砂颗粒, 不存在双电层和结合水:

$$\eta = \mu \zeta \quad (9)$$

式中: μ 为斜率拟合系数; ζ 为膨润土含量。

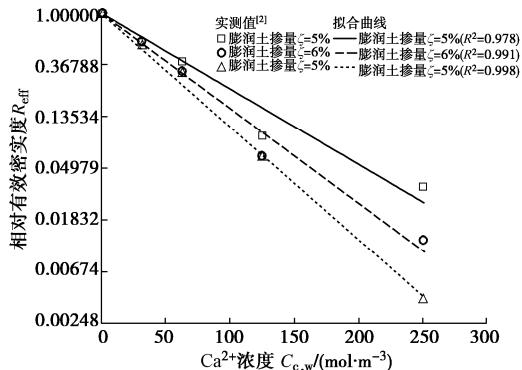


图 3 R_{eff} 与 Ca^{2+} 浓度的关系

Fig. 3 Relationship between R_{eff} and concentration of Ca^{2+}

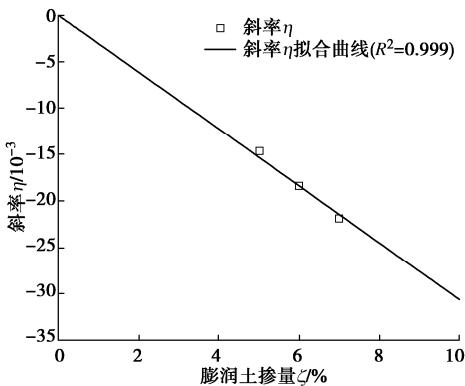


图 4 拟合直线斜率 η 与膨润土掺量 ζ 的关系

Fig. 4 Relationship between slope of fitted straight line and content of bentonite

结合式(7)~(9)可获得不同膨润土掺量砂-膨润土的有效孔隙率与 Ca^{2+} 浓度的关系:

$$n_{\text{eff},w} = (n_{\text{eff},w}^t - n_{\text{eff},w}^s) \exp(\mu \zeta C_{c,w}) + n_{\text{eff},w}^s \quad (10)$$

根据 Stern-Gouy 模型^[16], 相同离子强度的不同阳离子对膨润土颗粒双电层的影响一致, 并且 Xu 等^[2]试验也证明了在相同离子强度下, Ca^{2+} 与 $\text{Ca}^{2+}\text{-Na}^+\text{-Zn}^{2+}$ 混合离子对 SB 的作用效果几乎一致。因此可将土体孔隙水中 Na^+ 和 Ca^{2+} 转化为相同离子强度的 Ca^{2+} , 并代入式(10)计算混合离子作用下不同膨润土掺量砂-膨润土的有效孔隙率:

$$n_{\text{eff},w} = (n_{\text{eff},w}^t - n_{\text{eff},w}^s) \exp \left[\mu \zeta \left(C_{c,w} + \frac{C_{n,w}}{4} \right) \right] + n_{\text{eff},w}^s \quad (11)$$

SB 材料的渗透系数 $k_{v,w}$ 会随着有效孔隙率的升高而增大^[1-2], 参考 Xu 等^[2]研究, 假定 SB 的渗透系数与有效孔隙率的变化关系为

$$k_{v,w} = \alpha n_{\text{eff},w}^\beta \quad (12)$$

式中: α 为渗透系数拟合系数; β 为渗透系数拟合指数。

根据 SB 材料的渗透系数 $k_{v,w}$ 可计算阻隔墙渗透系数的调和平均数 k_w 为

$$k_w = \frac{L_w}{\int_{L_{ua}}^{L_w+L_{ua}} \frac{1}{k_{v,w}} dx} \quad (13)$$

则达西流速 v_d 为

$$v_d = \frac{h_w}{L_w} k_w \quad (14)$$

基于上述推导分析, 可以发现 Na^+ 和 Ca^{2+} 在 SB 阻隔墙-含水层系统中的运移会影响阻隔墙的运移参数, 而运移参数的变化反过来又会影响 Na^+ 、 Ca^{2+} 和持有机物的运移, 因此这是一个十分复杂的耦合问题, 并且涉及多种污染物的运移。考虑到 Na^+ 和 Ca^{2+} 的环境危害性较小, 阻隔墙服役寿命评估的指示污染物仅为有机物。

1.5 初始条件和边界条件

假定在初始时刻, 系统中各种污染物浓度为 0, 因此, 相应的初始条件可写为

$$C_{j,i}(x, 0) = 0 \quad (15)$$

渗透液中 Na^+ 和 Ca^{2+} 浓度保持不变, 而有机物浓度由于生物分解会随时间衰减, 因此系统的左边界可写为

$$\left. \begin{array}{l} C_{n,ua}(0, t) = C_{n,0} \\ C_{c,ua}(0, t) = C_{c,0} \\ C_{p,ua}(0, t) = C_{p,0} \exp(-\lambda_L t) \end{array} \right\} \quad (16)$$

式中, λ_L 为有机物在渗透液中的衰减因子。

系统的右边界为江河或湖海, 该处的污染物会很快被稀释带走, 因而对应的右边界为

$$C_{j,da}(L_{ua} + L_w + L_{da}, t) = 0 \quad (17)$$

在 SB 阻隔墙和含水层的交界面, 各种污染物满足浓度连续和通量连续条件, 考虑到系统中的达西流速相同, 且界面处的渗流满足浓度连续性条件, 因而界面处的运移通量连续条件作了相应的简化, 则有

上游含水层和 SB 阻隔墙界面:

$$\left. \begin{array}{l} C_{j,ua}(L_{ua}, t) = C_{j,w}(L_{ua}, t) \\ n_{\text{eff},ua} D_{j,ua} \frac{\partial C_{j,ua}(L_{ua}, t)}{\partial x} \\ = n_{\text{eff},w} D_{j,w} \frac{\partial C_{j,w}(L_{ua}, t)}{\partial x} \end{array} \right\} \quad (18)$$

SB 阻隔墙和下游含水层界面:

$$\left. \begin{aligned} C_{j,w}(L_{ua} + L_w, t) &= C_{j,da}(L_{ua} + L_w, t), \\ n_{eff,w} D_{j,w} \frac{\partial C_{j,w}(L_{ua} + L_w, t)}{\partial x} \\ &= n_{eff,da} D_{j,da} \frac{\partial C_{j,da}(L_{ua} + L_w, t)}{\partial x}. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

2 模型有限差分解

在对所建模型进行有限差分求解时,首先需要对空间和时间进行步长划分,令 Δx 和 Δt 分别为计算的空间步长和时间步长,并将空间坐标和时间坐标分别进行 E 等分和 F 等分,则有 $x_e = e\Delta x$, $e = 0, 1, 2, \dots, E_1, \dots, E_2, \dots, E$, $E_1\Delta x = L_{ua}$, $E_2\Delta x = L_{ua} + L_w$, $t_f = f\Delta t$, $f = 0, 1, 2, \dots, F$ 。

令 $R_{d,i} = 1 + (1 - n_i)\rho_i K_{d,i} / n_{eff,i}$,则式(1)可简化为

$$\frac{\partial [n_{eff,i} R_{d,i} C_{p,i}]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n_{eff,i} D_{p,i} \frac{\partial C_{p,i}}{\partial x} - n_{eff,i} v_{s,i} C_{p,i} \right) - \lambda_i C_{p,i}. \quad (20)$$

控制方程式(20)的Crank-Nicholson型隐式差分格式可写为

$$\begin{aligned} &[n_{eff,i}(x_e, t_{f+1}) R_{d,i}(x_e, t_{f+1}) C_{p,i}(x_e, t_{f+1}) - \\ &n_{eff,i}(x_e, t_f) R_{d,i}(x_e, t_f) C_{p,i}(x_e, t_f)] / \Delta t \\ &= n_{eff,i}(x_{e+1/2}, t_f) D_{p,i}(x_{e+1/2}, t_f) \frac{C_{p,i}(x_{e+1}, t_{f+1}) - C_{p,i}(x_e, t_{f+1})}{\Delta x^2} + \\ &n_{eff,i}(x_{e+1/2}, t_f) D_{p,i}(x_{e+1/2}, t_f) \frac{C_{p,i}(x_{e-1}, t_{f+1}) - C_{p,i}(x_e, t_{f+1})}{\Delta x^2} - \\ &[n_{eff,i}(x_{e+1}, t_f) v_{s,i}(x_{e+1}, t_f) C_{p,i}(x_{e+1}, t_{f+1}) - \\ &n_{eff,i}(x_{e-1}, t_f) v_{s,i}(x_{e-1}, t_f) C_{p,i}(x_{e-1}, t_{f+1})] / 2\Delta x - \lambda_i C_{p,i}(x_e, t_{f+1}). \end{aligned} \quad (21)$$

控制方程式(2)和(3)的Crank-icholson型隐式差分格式可写为(此处 $j = (n, c)$):

$$\begin{aligned} &\frac{n_{eff,i}(x_e, t_f) C_{j,i}(x_e, t_{f+1}) - n_{eff,i}(x_e, t_f) C_{n,i}(x_e, t_f)}{\Delta t} \\ &= n_{eff,i}(x_{e+1/2}, t_f) D_{j,i}(x_{e+1/2}, t_k) \frac{C_{j,i}(x_{e+1}, t_f) - C_{j,i}(x_e, t_f)}{\Delta x^2} \\ &n_{eff,i}(x_{e+1/2}, t_f) D_{j,i}(x_{e+1/2}, t_f) \frac{C_{j,i}(x_{e-1}, t_f) - C_{j,i}(x_e, t_f)}{\Delta x^2} - \\ &[n_{eff,i}(x_{e+1}, t_f) v_{s,i}(x_{e+1}, t_f) C_{j,i}(x_{e+1}, t_{f+1}) - \\ &n_{eff,i}(x_{e-1}, t_f) v_{s,i}(x_{e-1}, t_f) C_{j,i}(x_{e-1}, t_{f+1})] / 2\Delta x. \end{aligned} \quad (22)$$

相应的初始条件可写为

$$C_j(x_{e+1}, 0) = 0. \quad (23)$$

左侧边界条件可写为

$$\left. \begin{aligned} C_n(x_0, t_{f+1}) &= C_{n,0}, \\ C_c(x_0, t_{f+1}) &= C_{c,0}, \\ C_p(x_0, t_{f+1}) &= C_{p,0} \exp(-\lambda_L t_{f+1}). \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

右侧边界条件可写为

$$C_j(x_E, t_{f+1}) = 0. \quad (25)$$

界面间连续性条件可写为

$$\left. \begin{aligned} C_{j,ua}(x_{E_1}, t_{f+1}) &= C_{j,w}(x_{E_1}, t_{f+1}) \\ n_{eff,ua}(x_{E_1}, t_{f+1}) D_{j,ua}(x_{E_1}, t_{f+1}) \times \\ C_{j,ua}(x_{E_1}, t_{f+1}) - C_{j,ua}(x_{E_1-1}, t_{f+1}) \\ \Delta x \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

$$\left. \begin{aligned} C_{j,w}(x_{E_2}, t_{f+1}) &= C_{j,da}(x_{E_2}, t_{f+1}) \\ n_{eff,w}(x_{E_2}, t_{f+1}) D_{j,w}(x_{E_2}, t_{f+1}) \times \\ C_{j,w}(x_{E_2}, t_{f+1}) - C_{j,w}(x_{E_2-1}, t_{f+1}) \\ \Delta x \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

$$= n_{eff,da}(x_{E_2}, t_{f+1}) D_{j,da}(x_{E_2}, t_{f+1}) \times$$

$$C_{j,da}(x_{E_2+1}, t_{f+1}) - C_{j,da}(x_{E_2}, t_{f+1}) \quad .$$

根据上述差分格式方程式以及相应的求解条件,利用 MATLAB 软件可进行编程求解本文建立的数值模型。

3 模型验证

3.1 与 Li 等^[21]的解析解对比

针对污染物在双层介质中的运移问题,Li 等^[21]推导得到了污染物在双层介质中一维运移解析解。尽管本模型所研究的是三层结构体中污染物的运移问题,但当假设上游含水层和 SB 阻隔墙的物理性质相同,且忽略阳离子对土体物理性质的改变以及有机污染物的生物分解时,本文所建模型亦可与 Li 等^[21]解析解相比。考虑到甲苯是渗滤液中常见的有机污染物,这里以甲苯为例。在开展比较分析时,假定渗滤液中 Na^+ 和 Ca^{2+} 浓度为 0,有机物在各处的衰减因子为 0,上游含水层的计算参数与 SB 阻隔墙一致,同时它们的厚度变为 SB 阻隔墙原来厚度的一半,其它参数见表 2,3。

图 5 为本文所建模型与解析解的比较情况。两种方法计算所得的甲苯浓度随时间的变化情况较为一致,证明本文所建模型可用于分析污染物在 3 层土体中的运移过程。

表 2 污染物计算参数^[19, 25]

Table 2 Parameters for contaminants

计算参数	渗滤液中浓度 $C_{j,0}/(\text{mol} \cdot \text{m}^{-3})$	自由扩散系数 $D_{0,j}/(10^{-10} \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	渗滤液中衰减因子 $\lambda_L/(10^{-2} \text{a}^{-1})$
甲苯	0.11	8.47	0.693
Na^+	150.41	13.30	—
Ca^{2+}	47.38	7.93	—

表3 系统中SB阻隔墙和含水层计算参数^[2, 19]
Table 3 Parameters of SB cutoff wall and aquifers in system

计算参数	厚度 L_{il} m	纵向 弥散度 $\alpha_{L,i}/m$	有效孔隙率 $n_{eff,i}/\%$	孔隙率 n_i	经验指数 m	分配系数 $K_{d,i}/(mL \cdot g^{-1})$	土颗粒密度 $\rho_i/(kg \cdot m^{-3})$	甲苯衰减因子 $\lambda_i/(10^{-2}a^{-1})$	稳态有效孔隙率 $n_{eff,w}^s/\%$	未污染有效孔隙率 $n_{eff,w}^t/\%$	膨润土掺量 $\zeta/\%$	斜率拟合系数 $\mu/(m^3 \cdot mol^{-1})$	渗透系数拟合系数 $\alpha/(m \cdot s^{-1})$	渗透系数拟合指数 β	水头差 h_w/m
上游含水层	2	0.04	47	0.47	1/3	0	2640	0.693	—	—	—	—	—	—	—
SB阻隔墙	1	0.01	$n_{eff,w}(t)$	0.2	1/3	0.54	2640	0.693	15.45	13.21	5	-0.306	4090	14.45	0.3
下游含水层	10	1	47	0.47	1/3	0	2640	0.693	—	—	—	—	—	—	—

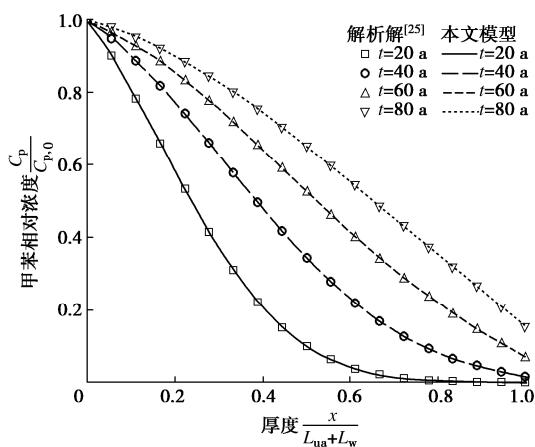


图5 本文模型与Li等^[21]解析解计算结果的对比

Fig. 5 Comparison between calculated results by proposed model and analytical ones by Li and Cleall^[21]

3.2 与 COMSOL 软件计算结果对比

COMSOL 是一款有限元分析和求解软件, 适用于各种物理和工程应用, 特别是多物理场耦合求解问题。因此, 为更加全面验证本文所建模型的正确性, 可将本文所建模型计算结果与 COMSOL 软件计算结果对比。在进行比较分析时, 表 2, 3 中的所有计算参数均被采用, COMSOL 模型建模方法参考张志红等^[26]的方法。

图 6 显示了所建模型计算结果和 COMSOL 软件计算结果的对比情况。由图 6 可知, 基于有限差分法和有限元法所得的甲苯浓度随时间的变化情况有良好的一致性, 这进一步证明了本文所建模型的合理性。

4 计算分析和讨论

为认识考虑 SB 材料化学相容性情况下, 有机物在含水层-阻隔墙系统的运移特性, 本节以表 2, 3 中所示的计算参数为例, 分析考虑(本文模型)和未考虑(传统模型)SB 化学相容性对阻隔墙服役寿命的影响。此外, 本节还将利用本文模型计算不同工况条件下(水头差和膨润土掺量)阻隔墙的服役寿命, 为实际工程中阻隔墙的设计施工提供理论指导。

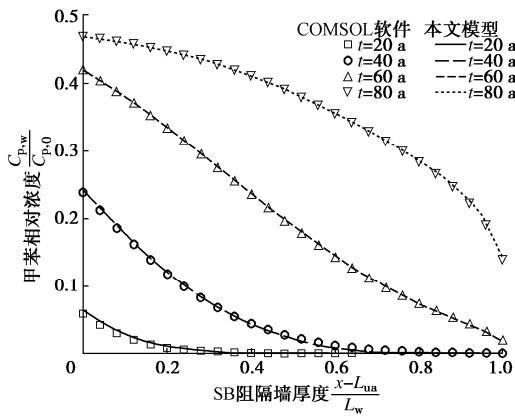


图6 本文模型与 COMSOL 软件计算结果的对比

Fig. 6 Comparison between calculated results by proposed model and those of COMSOL software

4.1 考虑和未考虑化学相容性对阻隔墙服役寿命的影响

图 7 展示了滤液中阳离子浓度为实测值(表 2)和零情况下, 阻隔墙下游侧甲苯浓度随时间的变化规律。图 7 中情况 1 表示考虑化学相容性, 情况 2 表示未考虑化学相容性。可以发现, 在两种情况下, 甲苯浓度随时间都先上升后下降, 并且在同一时刻, 情况 1 中阻隔墙下游测($x = L_{ua} + L_w$, 下同)甲苯的浓度要远高于情况 2。参考美国饮用水条例, 以饮用水甲苯浓度上限值 $1 g/m^3$ ^[27] ($0.011 mol/m^3$) 作为阻隔墙的击穿标准, 则情况 1 中阻隔墙的服役寿命为 75 a, 而情况 2 中, 阻隔墙下游测甲苯浓度则能在 300 a 内一直低于饮用水甲苯浓度上限值。

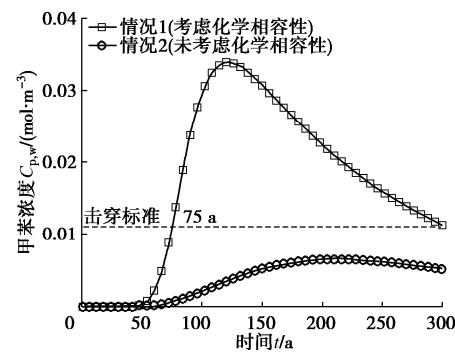


图7 化学相容性对阻隔墙服役寿命的影响

Fig. 7 Effects of chemical compatibility on service life of cutoff wall

出现上述规律的原因在于：孔隙水中阳离子不仅会提高阻隔墙的渗透系数，还会增大墙体的有效孔隙率，前者加强了污染物运移的对流和机械弥散作用，后者加强了分子扩散作用，导致情况 1 中阻隔墙服役寿命相对较低。而在情况 2 中，阻隔墙的渗透系数和有效孔隙率未发生变化，始终处于较低水平，让阻隔墙能够有效阻滞甲苯的运移，直到甲苯浓度随生物分解降低。因此，实际工程中要考虑 SB 材料化学相容性对污染物运移过程的影响^[1-2, 7-13]。

4.2 水头差对阻隔墙服役寿命的影响

图 8 给出了不同水头差 h_w 情况下，阻隔墙下游侧甲苯浓度随时间的变化规律。

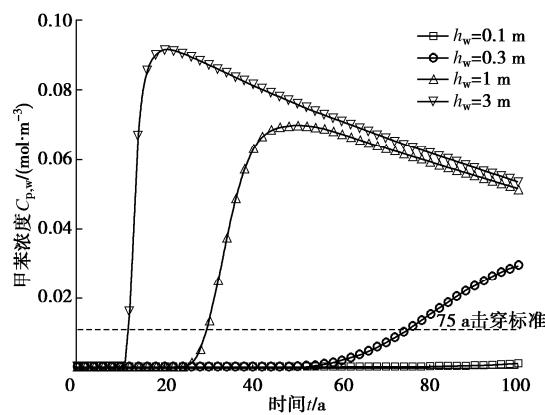


图 8 水头差 h_w 对甲苯运移的影响

Fig. 8 Effects of water head on toluene transport

从图 8 中可以看出，在同一时刻，甲苯浓度随着水头差的增加而增大，这是因为高水头差不仅增强了甲苯运移的对流和机械弥散作用，还加速了阳离子运移速度，缩短了其到达 SB 阻隔墙的时间，导致阻隔墙的防污阻隔性能在服役的早期阶段（此时甲苯浓度较高）就开始降低。上述两种机理使得阻隔墙服役寿命从 $h_w = 0.3 \text{ m}$ 时的 75 a，减少到了 $h_w = 1 \text{ m}$ 时的 30 a 和 $h_w = 3 \text{ m}$ 时的 12 a。而当 $h_w = 0.1 \text{ m}$ 时，阻隔墙下游测甲苯浓度则始终能低于击穿标准。

上述规律表明，阻隔墙两侧较大的水头差，会显著缩短 SB 阻隔墙的服役寿命，并造成更为严重的危害，因此在实际工程中，调控阻隔墙两侧水头差，让其始终位于低位十分必要^[28]。

4.3 膨润土掺量对阻隔墙服役寿命的影响

实际工程中阻隔墙膨润土掺量 ζ 应满足竖向屏障的防渗要求，同时兼顾经济性，因此膨润土掺量的选择有其下限值（墙体渗透系数为 10^{-9} m/s 时的膨润土掺量）。图 9(a) 给出了膨润土掺量 ζ 分别为 5%，6%，7% 时，阻隔墙渗透系数的调和平均数 k_w 随时间的变化规律。从图 9(a) 可知，3 种膨润土掺量的阻隔墙 k_w 在初始时刻都 $\leq 10^{-9} \text{ m/s}$ ，满足竖向屏障的防渗要求，

但随着时间推移阻隔墙 k_w 在 Na^+ 和 Ca^{2+} 作用下逐渐升高，甚至超出防渗要求（ $\zeta = 5\%$ 和 $\zeta = 6\%$ 时）。5%，6% 和 7% 膨润土掺量的阻隔墙 k_w 相较初始时分别升高了 4.37 倍、1.79 倍和 1.48 倍，因此使用更高掺量的 SB 可降低化学相容性对阻隔墙服役寿命的影响。

阻隔墙渗透系数变化情况下，阻隔墙下游侧甲苯浓度随时间的变化规律如图 9(b) 所示。可以发现，膨润土掺量 ζ 对阻隔墙服役寿命有显著影响，当膨润土掺量增加 1% 时，阻隔墙服役寿命增加了 96%，而当膨润土掺量增加 2% 时，阻隔墙下游侧甲苯浓度则能始终低于击穿标准。

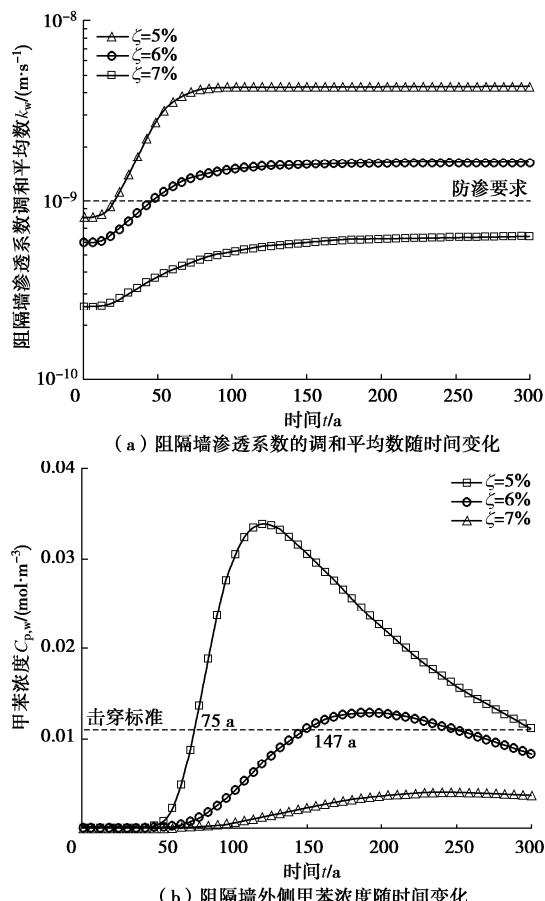


图 9 膨润土掺量 ζ 对阻隔墙服役寿命的影响

Fig. 9 Effects of bentonite content on service life of cutoff wall

出现上述运移规律的原因是，随着膨润土掺量 ζ 的增大，SB 材料中带有结合水的黏粒含量也随之提高。虽然在相同阳离子作用下，不同掺量 SB 中膨润土的双电层厚度一致，但黏粒含量越高墙体的孔隙通道越小，从而让高膨润土掺量墙体渗透系数的值和变化幅度小于低膨润土掺量，这导致了阻隔墙服役寿命随膨润土掺量的升高而增加。上述分析结果表明，阻隔墙膨润土掺量的下限值应在原先防渗要求的基础上适当提高，以应对污染物作用下墙体防污阻隔性能的削弱。

5 结 论

本文考虑到填埋场渗滤液中较高 Na^+ 和 Ca^{2+} 浓度会显著增大 SB 阻隔墙的渗透系数, 从而加速高危害性有机物的运移, 建立了 Na^+ 和 Ca^{2+} 作用下 SB 阻隔墙-含水层系统中有机物污染物运移数值模型, 并采用有限差分法对该模型进行了求解。该模型可以考虑土-膨润土化学相容性、生物分解、吸附等因素对有机物污染物运移的影响。通过将所建模型的计算结果分别与其它理论模型计算结果和 COMSOL 软件计算结果进行对比性分析, 验证了模型的正确性。最后, 基于所建数值模型, 通过某一算例分析了相关参数变化对甲苯运移过程以及阻隔墙长期服役性能的影响, 得到了以下 3 点结论。

(1) 未考虑土-膨润土化学相容性时, 阻隔墙外侧土体中有机物的含量始终能低于击穿标准, 而当考虑土-膨润土化学相容性之后, 阻隔墙的服役寿命大幅降低, 这是因为土-膨润土在 Na^+ 和 Ca^{2+} 作用下, 渗透系数和有效孔隙率上升, 加速了有机污染物运移, 因此实际工程中要考虑土-膨润土材料化学相容性对阻隔墙长期服役性能的影响。

(2) 阻隔墙两侧水头差的增大不仅增强了污染物运移的对流和机械弥散作用, 还提前了阻隔墙防污阻隔性能降低的时间, 导致阻隔墙服役寿命显著减少。

(3) 膨润土掺量会显著影响阻隔墙的服役寿命, 当膨润土掺量提高 1% 时, 阻隔墙服役寿命增加了 96%, 而当膨润土掺量增加 2% 时, 阻隔墙下游侧甲苯浓度则能始终低于击穿标准。因此阻隔墙膨润土掺量的下限值应在原先防渗要求的基础上适当提高, 以应对污染物作用下墙体防污阻隔性能的削弱。

参考文献:

- [1] 朱伟, 徐浩青, 王升位, 等. CaCl_2 溶液对不同黏土基防渗墙渗透性的影响[J]. 岩土力学, 2016, 37(5): 1224-1230, 1236. (ZHU Wei, XU Haoqing, WANG Shengwei, et al. Influence of CaCl_2 solution on the permeability of different clay-based cutoff walls[J]. Rock and Soil Mechanics, 2016, 37(5): 1224-1230, 1236. (in Chinese))
- [2] XU H Q, SHU S, WANG S W, et al. Studies on the chemical compatibility of soil-bentonite cut-off walls for landfills[J]. Journal of Environmental Management, 2019, 237: 155-162.
- [3] CHEGENIZADEH A, KERAMATIKERMAN M, DALLA SANTA G, et al. Influence of recycled tyre amendment on the mechanical behaviour of soil-bentonite cut-off walls[J]. Journal of Cleaner Production, 2018, 177: 507-515.
- [4] ZHAN L T, YOU Y Q, ZHAO R, et al. Centrifuge modelling of lead retardation in soil-bentonite cut-off walls[J]. International Journal of Physical Modelling in Geotechnics, 2023, 23(4): 166-179.
- [5] D'APPOLONIA D J. Soil-bentonite slurry trench cutoffs[J]. Journal of the Geotechnical Engineering Division, 1980, 106(4): 399-417.
- [6] 刘松玉. 污染场地测试评价与处理技术[J]. 岩土工程学报, 2018, 40(1): 1-37. (LIU Songyu. Geotechnical investigation and remediation for industrial contaminated sites[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2018, 40(1): 1-37. (in Chinese))
- [7] MISHRA A K, OHTSUBO M, LI L, et al. Effect of salt concentrations on the permeability and compressibility of soil-bentonite mixtures[J]. Journal of the Faculty of Agriculture, Kyushu University, 2005, 50(2): 837-849.
- [8] MALUSIS M A, MCKEEHAN M D. Chemical compatibility of model soil-bentonite backfill containing multiswellable bentonite[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2013, 139(2): 189-198.
- [9] 范日东, 杜延军, 刘松玉, 等. 无机盐溶液作用下砂-膨润土竖向隔离屏障材料化学相容性试验研究[J]. 岩土力学, 2020, 41(3): 736-746. (FAN Ridong, DU Yanjun, LIU Songyu, et al. Experimental study on chemical compatibility of sand-bentonite backfills for vertical cutoff barrier permeated with inorganic salt solutions[J]. Rock and Soil Mechanics, 2020, 41(3): 736-746. (in Chinese))
- [10] FAN R D, DU Y J, LIU S Y, et al. Engineering behavior and sedimentation behavior of lead contaminated soil-bentonite vertical cutoff wall backfills[J]. Journal of Central South University, 2013, 20(8): 2255-2262.
- [11] DU Y J, FAN R D, REDDY K R, et al. Impacts of presence of lead contamination in clayey soil-calcium bentonite cutoff wall backfills[J]. Applied Clay Science, 2015, 108: 111-122.
- [12] FU X L, SHEN S Q, REDDY K R, et al. Hydraulic conductivity of sand/biopolymer-amended bentonite backfills in vertical cutoff walls permeated with lead solutions[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2022, 148(2): 04021186.
- [13] HE Y, WANG M M, WU D Y, et al. Effects of chemical solutions on the hydromechanical behavior of a laterite/bentonite mixture used as an engineered barrier[J]. Bulletin of Engineering Geology and the Environment, 2021, 80(2): 1169-1180.

- [14] 朱伟, 舒实, 王升位, 等. 垃圾填埋场渗沥液击穿防渗系统的指示污染物研究[J]. 岩土工程学报, 2016, 38(4): 619-626. (ZHU Wei, SHU Shi, WANG Shengwei, et al. Investigation of indicating pollutant for landfill leachate breaking through anti-seepage system[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2016, 38(4): 619-626. (in Chinese))
- [15] 付美云, 周立祥. 垃圾渗滤液在土壤中的生物降解动态[J]. 应用生态学报, 2007, 18(1): 118-122. (FU Meiyun, ZHOU Lixiang. Biodegradation of landfill leachate in soil[J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2007, 18(1): 118-122. (in Chinese))
- [16] MITCHELL J K, SOGA K. Fundamentals of soil behavior[M]. 3rd ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2005.
- [17] ACAR Y B, HAIDER L. Transport of low-concentration contaminants in saturated earthen barriers[J]. Journal of Geotechnical Engineering, 1990, 116(7): 1031-1052.
- [18] RABIDEAU A, KHANDELWAL A. Boundary conditions for modeling transport in vertical barriers[J]. Journal of Environmental Engineering, 1998, 124(11): 1135-1139.
- [19] 丁祥鸿, 冯世进. 固结作用下非均质隔离墙中污染物二维运移规律研究[J]. 岩土工程学报, 2022, 44(3): 584-590. (DING Xianghong, FENG Shijin. Two-dimensional migration of contaminants in non-homogeneous cutoff wall considering consolidation[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2022, 44(3): 584-590. (in Chinese))
- [20] CASTELBAUM D, SHACKELFORD C D. Hydraulic conductivity of bentonite slurry mixed sands[J]. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 2009, 135(12): 1941-1956.
- [21] LI Y C, CLEALL P J. Analytical solutions for advective-dispersive solute transport in double-layered finite porous media[J]. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, 2011, 35(4): 438-460.
- [22] 郑紫荆, 朱云海, 王巧, 等. 有机污染物在含土工膜复合隔离墙和含水层系统的运移半解析模型[J]. 岩土力学, 2022, 43(2): 453-465. (ZHENG Zijing, ZHU Yunhai, WANG Qiao, et al. A semi-analytical model for analyzing the transport of organic pollutants through the geomembrane composite cut-off wall and aquifer system[J]. Rock and Soil Mechanics, 2022, 43(2): 453-465. (in Chinese))
- [23] FETTER C W. Contaminant hydrogeology[M]. 2nd ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall, 1999.
- [24] MOTT HENRY V, WEBER W. Diffusion of organic contaminants through soil-bentonite cut-off barriers[J]. Research Journal of the Water Pollution Control Federation, 1991, 63(2): 166-176.
- [25] PARKHURST D L, APPELO C. User's guide to PHREEQC (Version 2): a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations[J]. Model Tech B, 2013, 6: 497
- [26] 张志红, 师玉敏, 朱敏. 黏土垫层水力-力学-化学耦合模型研究[J]. 岩土工程学报, 2016, 38(7): 1283-1290. (ZHANG Zhihong, SHI Yumin, ZHU Min. Coupled hydro-mechanical-chemical model for clay liner[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2016, 38(7): 1283-1290. (in Chinese))
- [27] BONAPARTE R, DANIEL D, KOERNER R M. Assessment and Recommendations for Improving the Performance of Waste Containment Systems[R]. Washington D C: EPA-Environmental Protection Agency, 2002.
- [28] 詹良通, 刘伟, 曾兴, 等. 垃圾填埋场污染物击穿竖向防渗帷幕时间的影响因素分析及设计厚度的简化计算公式[J]. 岩土工程学报, 2013, 35(11): 1988-1996. (ZHAN Liangtong, LIU Wei, ZENG Xing, et al. Parametric study on breakthrough time of vertical cutoff wall for MSW landfills and simplified design formula for wall thickness[J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2013, 35(11): 1988-1996. (in Chinese))