文章编号：1008-0562(2005)05-0763-04

煤矸石淋溶重金属运移过程的水动力学模型及应用

薛 强[1,2]，王惠芸[1]，梁 冰[3]

（1. 武汉工业学院 土木工程系 湖北 武汉 430023；2.中国科学院 武汉岩土力学研究所 湖北 武汉 430071；
3. 辽宁工程技术大学 力学与工程科学系，辽宁 阜新 123000）

摘 要：通过分析重金属污染物在地下环境系统中迁移转化特征，建立了包气带土壤水分运移模型和重金属污染物传输耦合数学模型，并分别采用隐式差分和算子劈裂方法对模型进行数值求解。数值模拟结果表明：重金属镉在地下环境系统中的浓度范围将沿地下水水流方向逐渐扩展，同一点位的浓度值呈逐渐增大的趋势，并且粘性土壤比砂性土壤对重金属具有较强的截留能力。这不仅为煤矸石在地下环境系统中迁移的动态规律，预测煤矸石堆放在周围可能造成的污染规律和污染程度提供理论指导，而且还可为对矿区开采前的规划与管理以及环境评价提供决策依据。

关键词：煤矸石；重金属污染；水动力学模型；有限差分；数值模拟

中图分类号：X 53 **文献标识码**：A

Dynamic model of heavy metal leaching from coal mine spoils and its application

XUE Qiang[1,2], WANG Hui-yun[3], LIANG Bing[3]

(1.Research Institute of Porous Mechanics, Wuhan Polytechnic University, Wuhan, 430023 ,China; 2. Research Institute of Rock and Soil Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Wuhan,430071 ,China;3. Department of Mechanics and Engineering Sciences, Liaoning Technical University, Fuxin, 123000 , China)

Abstract: A coupled mathematical model for soil moisture and heavy metal migration was developed based on analyzing the characteristics of migration and transformation of heavy metal leaching from coal waste spoils in the subsurface. Solutions to the coupled model were accomplished by finite difference method and splitting operator method. Numerical results show that the pollution range has a trend of increasing with longer time, and heavy metal concentration values increase at the same location. The clay soil has higher capability of holding heavy metal than sandy soil. The main reason is that soils with more clay tend to hold water. The coarser the texture of the soil, the greater the chance of the heavy metals reaching groundwater. It provides theoretical instruction for the dynamic law of heavy metal migration in the subsurface and the decision basis of environmental evaluation and management before mine area exploitation.

Key words: coal mine spoils; heavy metal pollution; dynamic model; finite difference; numerical simulation

0 引 言

有害废弃物堆放造成的环境污染已成为当前和今后最突出的环境问题之一，煤矸石以其量多、污染范围广、污染程度严重及可利用性低而成为当今世界各产煤大国所关注的热点，人们积极对其开展资源化研究的同时，对其引发的环境生态问题也逐渐重视起来。尤其是煤矸石释放于环境中的有害物质及其迁移归宿问题的研究是矿区生态环境研究中的一个重要课题。大量的实验研究结果表明[1,2]：煤矸石是采煤矿区及其周围土壤、沉积物和水体主要的重金属污染源。目前的大部分工作集中在定性分析和实验研究方面，定量化的研究成果并不多[3]。为此，本文采用数值模拟方法研究煤矸石淋溶后在地下环境系统中迁移的动态规律，预测预报煤矸石堆放在周围可能造成的污染规律和污染程度，为矿区开采前进行风险评价与分析，为防止煤矸石对土壤、地下水的污染及被污染地区的环境管理提供了科学依据。

1 煤矸石淋溶重金属迁移转化特征

煤矸石淋溶重金属释放后在地下环境系统中迁移转化的过程是一个复杂的物理、化学和生物过

收稿日期：2004-02-07
基金项目：国家自然科学基金资助项目（50309015,50374041）；武汉市青年科技晨光计划项目（20055003059-33）
作者简介：薛 强(1976-)，男，山东 潍坊人，博士，副教授。主要从事于环境岩土工程方面的研究。本文编校：于永江

程，因此，在研究重金属污染物迁移转化规律时，必须考虑各过程及其影响因素，其迁移的的特征主要分以下几种：

1.1 物理迁移

土壤溶液中的重金属离子或络离子可以随水迁移至地面水体，而更多的是重金属可以通过多种途径被包含于矿物颗粒内或被吸附于土壤胶体表面上，随土壤水分的流动或以尘土飞扬的形式而被机械搬运。

1.2 物理化学迁移和化学迁移

地下环境系统中的重金属污染物与土壤无机胶体结合，发生非专性吸附或专性吸附；或被土壤中有机胶体络合或整合，或者由有机胶体表面吸附；另外，重金属化合物的溶解和沉淀作用，是土壤环境中重金属元素化学迁移的重要形式。

1.3 生物迁移

土壤环境中重金属的生物迁移，主要是指植物通过根系从土壤中吸收某些化学形态的重金属，并在植物体内积累起来。另外，土壤微生物的吸收以及土壤动物啃食重金属含量较高的表土，也是重金属发生生物迁移的一种途径。

2 耦合水动力学模型及数值解

煤矸石淋溶的重金属在包气带土壤中的迁移、转化主要是由土壤水运移及重金属与土壤间的各种物理、化学吸附引起的。采用数学模型来描述重金属污染物对地下水潜在性污染过程，包括两类控制方程：一类包气带土壤水分运移；另一类是重金属污染物运移模型。为此，建立如下耦合数学模型。

2.1 土壤水分迁移的数学模型

对于土壤中水分运动可用如下数学模型

$$\begin{cases} C(h)\dfrac{\partial h}{\partial t}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(K_x(h)\dfrac{\partial h}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(K_z(h)\dfrac{\partial h}{\partial z}\right)-\dfrac{\partial K_z(h)}{\partial z} \\ h(x,z,t)\big|_{t=0}=h_0 \\ h(x,z,t)\big|_{\Gamma_1}=h_1 \\ -\dfrac{\partial h(x,z,t)}{\partial n}\Big|_{\Gamma_2}=q \end{cases} \tag{1}$$

其中 $C(h)=\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}h$ 为比水容量 K_x、K_z 分别为横向和纵向水力传导系数；h 为压力水头。

3.2 重金属污染物运移的数学模型

对于重金属污染物运移采用如下数学模型[4]

$$\begin{cases} R_d\dfrac{\partial C}{\partial t}+\rho_s K_A\gamma(1-S)C-\rho_S K_B\gamma S \\ =\dfrac{\partial}{\partial x}\left(\theta D_x\dfrac{\partial C}{\partial x}\right)+\dfrac{\partial}{\partial z}\left(\theta D_z\dfrac{\partial C}{\partial z}\right)-\dfrac{\partial(qC)}{\partial z} \\ \dfrac{\partial S}{\partial t}=K_A(1-S_2)C-K_B S \\ C(x,z,0)=S(x,z,0)=0 \\ \left(qC-\theta D_x\dfrac{\partial C}{\partial x}-\theta D_z\dfrac{\partial C}{\partial z}\right)\Big|_{\Gamma_1}=qC_0 \\ \left(-\theta D_x\dfrac{\partial C}{\partial x}-\theta D_z\dfrac{\partial C}{\partial z}\right)\Big|_{\Gamma_2}=0 \end{cases} \tag{2}$$

其中 θ 为土壤水分含量；C 为污染物在溶解相中的质量浓度；S 为污染物在吸附相中的质量浓度；ρ_s 土壤体积密度；γ 为最大沉淀量；D_x 和 D_z 分别为横向和纵向水动力弥散系数；q 为达西流速；K_A 为沉淀速率；K_B 为解沉淀速率；C_0 为初始溶解相污染物质量浓度。

水分迁移的达西流速为

$$\begin{cases} q_x=-K_x(h)\dfrac{\partial h}{\partial x} \\ q_z=-K_z(h)\dfrac{\partial h}{\partial z} \end{cases} \tag{3}$$

3.3 耦合数学模型的耦合求解

由土壤水分运移控制方程（1）和污染物运移控制方程（2）构成了重金属在地下环境系统中运移的数值模型。对于水分运移控制方程采用隐式有限差分格式进行数值离散，对于污染物运移控制方程采用笔者推导的 SOM 方法进行数值离散[5]。

对土壤水分运移的控制方程，令

$$r_1=\frac{\Delta t}{\Delta z^2}\quad r_2=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\quad r_3=\frac{\Delta t}{\Delta z} \tag{4}$$

则水分控制方程的差分格式为

$$-\left[r_1(K_x)_{i-1/2}^{j+1}+r_2(K_z)_{i-1/2}^{j+1}\right]h_{i-1}^{j+1}+\left\{\begin{matrix}M_i^{j+1}+r_1\left[(K_x)_{i+1/2}^{j+1}+(K_x)_{i-1/2}^{j+1}\right]+\\ r_2\left[(K_z)_{i+1/2}^{j+1}+(K_z)_{i-1/2}^{j+1}\right]\end{matrix}\right\} \quad (5)$$

$$h_i^{j+1}-\left[r_1(K_x)_{i+1/2}^{j+1}h_{i+1}^{j+1}+r_2(K_z)_{i+1/2}^{j+1}h_{i+1}^{j+1}\right]h_{i+1}^{j+1}=M_i^{j+1}h_i^j-r_3\left[(K_z)_{i+1/2}^{j+1}+(K_z)_{i-1/2}^{j+1}\right]$$

令 $a_i=-r_1(K_x)_{i-1/2}^{j+1}+r_2(K_z)_{i-1/2}^{j+1}$ (6)

$$b_i=M_i^{j+1}+r_1\left[(K_x)_{i+1/2}^{j+1}+(K_x)_{i-1/2}^{j+1}\right]+r_2\left[(K_z)_{i+1/2}^{j+1}+(K_z)_{i-1/2}^{j+1}\right] \quad (7)$$

$$c_i=-\left[r_1(K_x)_{i+1/2}^{j+1}h_{i+1}^{j+1}+r_2(K_z)_{i+1/2}^{j+1}h_{i+1}^{j+1}\right] \quad (8)$$

$$f_i=M_i^{j+1}h_i^j-r_3\left[(K_z)_{i+1/2}^{j+1}+(K_z)_{i-1/2}^{j+1}\right] \quad (9)$$

将（6）式－（9）式代入式（5）后可得，

$$a_ih_{i-1}^{j+1}+b_ih_i^{j+1}+c_ih_{i+1}^{j+1}=f_i \quad (10)$$

对应矩阵表达式为：

$$[T]\{h\}^{j+1}=[F] \quad (11)$$

其中$[T]$为系数矩阵；$[F]$为常数项列阵；$\{h\}$为待求的水头列阵。

对于溶质运移的控制方程对应的矩阵表达时为

$$([R_x]-[R_a])\{C\}^{j+1/2}=\{F_z\}^n+\{F_{xz}\}^n+\{F_{zx}\}^{j+1/2}-\{F_{qa}\} \quad (12)$$

$$([R_y]-[R_b])\{C\}^{j+1}=\{F_x\}^{j+1/2}+\{F_{xz}\}^{j+1}+\{F_{zx}\}^{j+1/2}-\{F_{qb}\} \quad (13)$$

其中$\{F_{xz}\}$、$\{F_{zx}\}$、$\{F_x\}$、$\{F_z\}$分别为弥散系数张量、孔隙土壤水流速系数矩阵；$[R_x]$、$[R_z]$分别为污染物结点浓度列矩阵；$\{F_{qa}\}$和$\{F_{qb}\}$为边界条件对应系数列矩阵。

4　模型的应用及分析

煤矸石从矿区开挖堆放在地表后，在长期风化、降雨、降雪淋溶和自身所载水分的作用下，发生一系列的物理、化学变化，其含有的有害杂质除了硫化物、碳酸盐类混合物以及可溶性无机盐以外，重金属汞、砷、镉和氟已成为地下水潜在性污染主要污染物。为此，以重金属镉为例，采用上述建立的数值模型模拟煤矿在开采初期堆积煤矸石对地下环境系统污染的动态，在模型计算中，假定横向和纵向水力传导系数 $K_x=K_z$，横向和纵向水动力弥散系数 $D_x=D_z$，土地下水水位在 h=-2 m，研究区域上边界取水头为第二类边界，浓度取第一类边界；在左右边界取第一类定压水头边界。模拟区域如图 1，计算结果如图 2。

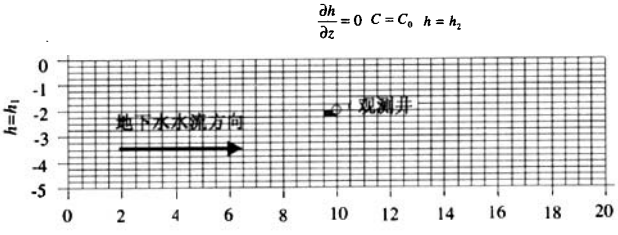


图 1　研究区域及定解条件

Fig.1 research region and boundary condition

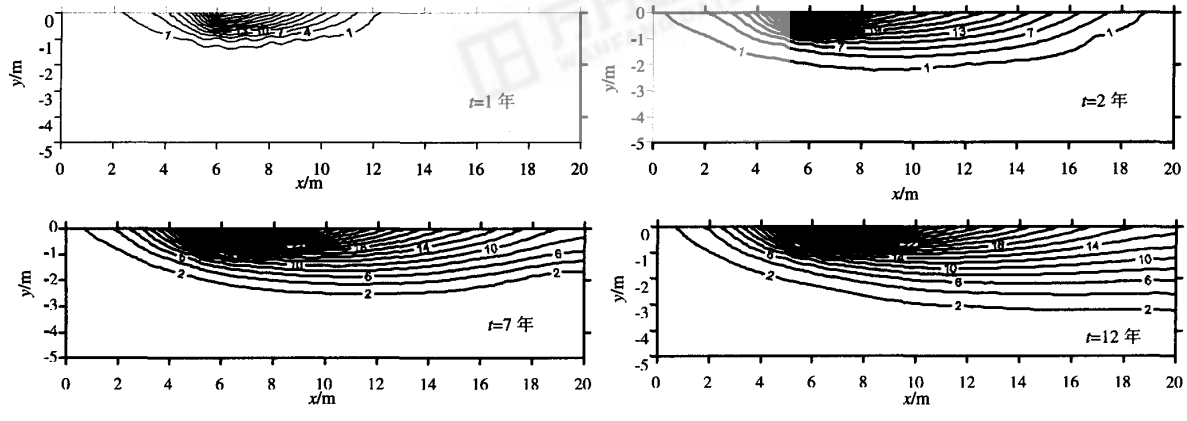


图 2　煤矸石淋溶重金属 Cd 在地下环境系统中运移的浓度分布等值线

Fig.2 contours map of heavy metal Cd concentration distribution in the subsurface (mg/ml)

图 2 模拟了煤矸石淋溶的重金属镉在地下环境系统中质量浓度分布，从图中可以看出，随着时间的延续，煤矸石重金属首先在包气带土壤中运移，在大约 4 年后将会随着地下水水流的方向发生迁移，并且同一位置污染物的质量浓度值随时间的延续呈逐渐增大的趋势，且污染物浓度范围逐渐向下游方向扩展。大约在经过 12 年后，监测井（x=10 m，y=-2 m）处的重金属镉的浓度值超过的国家饮用水的标准 10 mg/ml（Ⅲ类水质）。因此，在煤矸石排放经过几十年后，下游地区居民用井将会受到严重威胁。从煤矸石淋溶重金属在不同质地土壤中的质量浓度随时间变化曲线图 3 可以看出，黏性土壤对煤矸石释放重金属的截留效应比砂性土壤强，砂性土壤在污染 12 年后，其污染质量浓度超过国家饮用水标准，而粘性土壤大约需要 20 年的时间。其主要原因是由于黏性土中的粘土矿物颗粒大部分被吸附在土壤固体颗粒上，从而减少了重金属地下水污染的潜在性影响。因此，为了减轻煤矸石固体废物对地下环境造成的污染，在煤矸石固体废物排放选址时应尽量选择黏性土壤的地质屏障层。

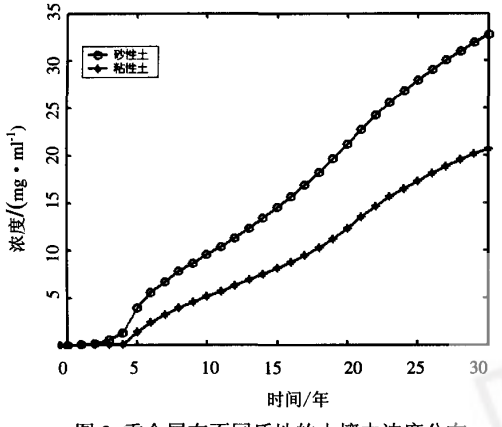


图 3 重金属在不同质地的土壤中浓度分布

Fig.3 concentration distribution of heavy metal in different soil texture

4 结 论

通过本文水分运移和重金属迁移转化耦合数值模型的研究，再现了煤矸石淋溶重金属 Cd 在地下环境系统浓度分布以及演化与发展，并对不同质地土壤进行定量化分析，其研究结果不仅可为矿区煤矸石排放所引起的地下水中污染物的运移及其对环境影响的预测、预报提供科学手段，而且还可以为矿区其他重金属污染风险评价以及管理决策部门提供参考依据。

参考文献：

[1] Dalverny. Chaiken L.E.,R.F.. Kim A.G. and Manns C.R.. Pyrite leaching from coal and coal waste[R] U.S. Department of Energy, Report of Investgation.1996.

[2] 党 志.Watts,SF. 煤矸石-水相互作用溶解动力学:Ⅱ.煤矸石微量金属元素的矿物学研究[J]. 中国科学:D 辑 地球科学.1996,26(1):16-20.

[3] 梁 冰,薛 强.矿区矸石山堆置场对地下环境污染的动力学效应[A]. 朱旺喜，王来贵.资源枯竭型城市灾害形成机理与控制战略研讨[C]. 北京: 地质出版社,2003.

[4] Nedunuri1K.V., Govindaraju1R.S..Modeling of heavy metal movement in vegetated, unsaturated soils with emphasis on geochemistry [A]. Proceedings of the 10th Annual Conference on Hazardous Waste Research [C], 1995.

[5] 薛 强,梁 冰,刘晓丽.土壤水环境中有机污染物运移的数值模拟研究[J].水利学报,2003,15 (5):48-53.