

# Research Progress in Transport Kinetics of Coal Gangue Leaching Pollutants

Linhong Zhang<sup>1</sup>, Bin An<sup>2</sup>, Bing Hui<sup>1</sup>, Yanzhao Li<sup>2</sup>, Guangyuan Song<sup>2</sup>, Haimin Song<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Shandong Transportation Institute, Jinan Shandong

<sup>2</sup>Construction Eighth Bureau First Construction Co., Ltd., Jinan Shandong

Email: 38239034@qq.com

Received: Mar. 2<sup>nd</sup>, 2020; accepted: Mar. 16<sup>th</sup>, 2020; published: Mar. 23<sup>rd</sup>, 2020

---

## Abstract

It is of great scientific significance to study the dynamic behavior of pollutant release and transport in coal gangue for pollutant emission reduction monitoring. This paper reviews the research progress of transport kinetics of coal gangue leaching pollutants in recent years. These mathematical models can be used to predict quantitatively the pollution intensity of coal gangue to soil and groundwater, and provide theoretical basis for the analysis of pollution mechanism of leaching solution and the proposal of pollution control measures.

## Keywords

Coal Gangue, Leaching Pollutants, Transport Kinetics, Research Progress

---

# 煤矸石淋溶污染物传输动力学研究进展

张林宏<sup>1</sup>, 安 斌<sup>2</sup>, 惠 冰<sup>1</sup>, 李艳召<sup>2</sup>, 宋光远<sup>2</sup>, 宋海民<sup>2</sup>

<sup>1</sup>山东省交通科学研究院, 山东 济南

<sup>2</sup>中建八局第一建设有限公司, 山东 济南

Email: 38239034@qq.com

收稿日期: 2020年3月2日; 录用日期: 2020年3月16日; 发布日期: 2020年3月23日

---

## 摘 要

研究煤矸石中污染物释放传输的动力学行为对污染物的减排监控具有重要的科学意义。本文回顾了近年来煤矸石淋溶污染物传输动力学研究进展。利用这些数学模型可以定量预测煤矸石中污染物对土壤和地下水污染的强度, 可为淋溶液污染机理的分析和污染防治措施的提出提供理论依据。

## 关键词

煤矸石, 淋溶污染物, 传输动力学, 研究进展

Copyright © 2019 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

煤矸石作为工业固体废渣之一, 将其应用于新建或改扩建高速公路路堤层位, 不仅具有良好的经济价值和社会效益, 而且可以实现废旧材料的循环利用[1], 最终达到保护环境和节约土地的目的。但在煤矸石填筑路基工程中, 煤矸石中存在的化学成分中包含重金属及有害物质[2], 导致路基运维期的土壤、地表水以及地下水污染。降雨可使煤矸石中的污染物淋溶并渗入到地下, 造成周围的地下水污染。研究煤矸石中污染物释放传输的动力学行为对污染物的减排监控具有重要的科学意义。煤矸石释放污染组分向环境释放传输是一个复杂物理和化学变化过程[3]。

在煤矸石与水反应的初始阶段, 矿物的分解速率要快一些, 反应液中有害离子的浓度会不断增加。随着反应的进行, 水中溶解氧的消耗, 矿物的分解速率将逐渐减慢, 溶液中污染组分的浓度将趋于平衡。污染组分进入溶液中主要的过程有: 反应物通过孔隙向煤矸石中扩散; 在扩散途中, 溶解氧与相遇到的矿物在其表面发生氧化还原反应导致矿物分解; 溶解下来的污染物向溶液中扩散; 在离开固相之前, 其中的一部分污染物会被骨架基质吸附; 在溶液中有一些污染物可能因为酸度的改变形成沉淀或被胶体和残余骨架中的有机物所吸附。其溶解反应过程不仅受到煤矸石的物理化学性质所制约, 同时也与煤矸石的岩相组成、水分含量、煤矸石的比表面积、孔隙率以及堆体内部温度等有关[4]。因此, 要弄清溶解作用、沉淀作用、离子交换和吸附作用对污染物浓度分布贡献程度, 必须建立煤矸石污染组分的水化反应动力学模型, 定量描述其反应的程度, 同时从细观角度分析温度水流耦合作用煤矸石内污染物演化的动力学特征。

煤矸石内污染物对于环境条件的变化是敏感的, 特别是温度、水分、pH 值以及煤矸石在表生环境条件下矿物发生氧化反应、吸附作用、沉淀作用、离子交换作用等一系列反应控制着污染物释放传输过程。开展煤矸石中污染物质释放传输规律的研究不仅能为煤矸石污染控制及资源化利用奠定理论基础, 而且对预防煤矸石中污染物对生态环境的影响以及环境危害性评价也具有理论指导意义和现实意义[5]。很多学者对煤矸石淋溶污染物传输动力学进行了研究, 本文从不同学者的不同角度对近年来的研究进展和成果进行综述。

## 2. 淋溶污染物迁移的耦合动力学模型

通常情况下, 煤矸石可被看成非饱和的土壤。土壤中水的流动形式属于多孔介质中流体运动。雨水通过煤矸石后会含有一定浓度的污染物, 这算是淋溶的结果。煤矸石路基淋溶所产生的污染物在土壤-水系统中存在扩散、吸附、分配以及生物降解等过程。当这些过程不能完全降解煤矸石淋溶所产生的污染物时, 污染物就会随着雨水的下渗到土壤和地下水中, 从而会给道路沿线的环境造成污染。根据污染物随水在非饱和土壤中的运动扩散规律, 建立煤矸石中污染物迁移转化的耦合动力学模型[6]。

## 2.1. 土壤水分运移数学模型的建立

淋溶煤矸石路堤所产生的污染物在土壤-水系统中进行的扩散是三维流体运动[7], 假设土壤为各向同性、均质的多孔介质, 根据淋溶煤矸石所产生的污染物随水分迁移的规律, 建立了煤矸石路堤下土壤水分运移的一维控制数学模型为:

$$\begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z}, (z, t) \in I(0, t) \\ \text{初始条件: } \theta(z, t)|_{t=0} = \theta_b, z \in I \\ \text{上边界条件: } K(\theta) \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + 1 \right) \Big|_{z=0} = -i(t), t > 0 \\ \text{下边界条件: } \theta(z, t) \Big|_{z \rightarrow \infty} = \theta_m, t \in (0, T) \end{cases} \quad (1)$$

式中:  $I = [0, \infty)$ , 但在实际计算中常取  $I = [0, L]$  ( $L$  为某一时刻或距离);  $z$  为污染物垂向运移距离, 取向向下为正, cm;  $t$  为时间, min;  $T$  为某一时刻, min;  $\theta$  为土壤含水量,  $\text{g/cm}^3$ ;  $\theta_m$  为初始含水量,  $\text{g/cm}^3$ ;  $\theta_b$  为上边界含水量,  $\text{g/cm}^3$ ;  $K(\theta)$ 、 $D(\theta)$  分别为非饱和土壤导水率和扩散率;  $i(t)$  为降雨强度, mm/min。

取  $D(\theta) = D_0 \left( \frac{\theta}{\theta_a} \right)^n$ ;  $s = a\theta^{-b}$ 。其中  $\theta_a$  为土壤饱和含水量,  $\text{g/cm}^3$ ;  $D_0$ 、 $n$ 、 $a$ 、 $b$  为经验参数;  $s$  为

土壤水吸力, kPa。由于比水容量  $C(\theta) = -\frac{d\theta}{ds} = \frac{1}{ab} \theta^{b+1}$ , 进而根据  $K(\theta) = C(\theta)D(\theta)$  可得:

$$K(\theta) = \frac{D_0 \theta_a^{b+1}}{ab} \left( \frac{\theta}{\theta_a} \right)^{n+b+1} \quad (2)$$

## 2.2. 煤矸石中污染物迁移数学模型的建立

假设稳定水流条件下, 同时考虑深度变化下的一价降解和随深度变化的线性平衡吸附时, 一维的煤矸石中污染物迁移的数学模型如下:

$$\begin{cases} \theta = \frac{\partial c}{\partial t} + \rho \frac{\partial S}{\partial t} = \theta D_z \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \theta v_z \frac{\partial c}{\partial z} - \theta v_y \frac{\partial c}{\partial y} - \mu(z) \theta c \\ S = K_D(z) c \\ \mu(z) = \mu_0 ch^{-2} \left( \frac{z}{z_0} \right) \\ K_D(z) = k_0 ch^{-2} \left( \frac{z}{z_0} \right) \end{cases} \quad (3)$$

式中:  $\rho$  为土壤密度,  $\text{g/cm}^3$ ;  $D_z$  为水动力纵向弥散系数, cm;  $c$  为土壤中污染物的浓度, mg/L;  $S$  为污染物吸附浓度, mg/L;  $v_z$ 、 $v_y$  分别为水在  $z$  和  $y$  方向的速度, cm/s;  $\mu(z)$  和  $K_D(z)$  分别为随深度变化的降解系数和吸附系数,  $\text{d}^{-1}$ ;  $\mu_0$  和  $k_0$  分别为降解系数和吸附系数的常数, 代表  $\mu(z)$  和  $K_D(z)$  的最大值,  $\text{d}^{-1}$ ;  $z_0$  为经验参数;  $ch$  为双曲余弦函数;  $y$  为污染物水平方向运移距离, 取向右为正, m。

第一类初始条件:

$$c(z, 0) = 0 \quad (4)$$

$$c(0, t) = c_0 \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} = 0 \quad (5)$$

第二类初始条件:

$$c(z,0) = 0 \quad (6)$$

$$vc(0,t) - D \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \Big|_{z=0} = vc_0 \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

式中:  $c_0$  为土壤中污染物的初始质量浓度, mg/L;  $D$  为水动力弥散系数, cm;  $c$  为土壤中污染物的浓度, mg/L。第一类初始条件考虑污染物浓度的  $z$  向迁移, 第二类初始条件考虑的是水的水力扩散和弥散。

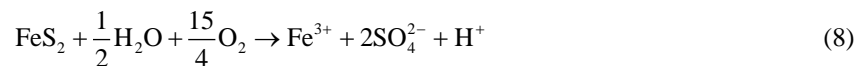
### 2.3. 数学模型的求解

土壤水分运移模型和污染物迁移模型是耦合存在的, 需要联立求解。先求解土壤水分运移模型的解定流速场, 然后将其带入污染物的迁移模型中求解, 即可得到土壤中污染物的浓度分布。土壤水分运移模型和煤矸石中污染物的迁移模型都是偏微分方程, 一般条件下无法得到解析解, 只有数值解。

利用建立的模型, 根据经验选取相应的计算参数, 可以模拟计算大气降雨淋溶煤矸石产生的污染物在土壤中的扩散迁移分布情况[8]。所建立的模型可以为评价煤矸石作为路基填料的使用而对道路沿线带来的环境污染问题提供理论依据。

### 3. 通过耗氧量耦合的动力学模型

在煤矸石反应过程中, 控制着化学反应发生的黄铁矿在氧化反应中反应生成  $\text{Fe}^{3+}$ , 同时还有  $\text{H}^+$ , 其量取决于地下水的化学成分, 同时也取决于耗氧量, 此类动力学模型[9] [10] [11]就是通过耗氧量将有关式子耦合。其反应方程为:



有关的式子为:

$$\frac{\partial \theta_m(\Psi)}{\partial \Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ K(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial K(\Psi)}{\partial x_i} \quad (9)$$

式中,  $\theta_m$  为含水率;  $t$  为时间;  $\Psi$  为负压水头,  $x_i (i=1,2)$  为空间坐标;  $K(\Psi)$  为非饱和水压传导系数, 其计算公式为

$$K(\Psi) = K_s S_e^{1/2} \left[ 1 - (1 - S_e^{1/\eta})^\eta \right]^2 \quad (10)$$

式中,  $K_s$  为饱和水压传导系数;  $S_e$  为有效饱和度, 其计算公式为

$$S_e = \frac{\theta_m - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (11)$$

其中  $\theta_s$  为容器中多孔介质的饱和含水率;  $\theta_r$  为容器中的残留含水率; 含水率  $\theta_m$  和其它参数之间的关系为

$$\theta_m(\Psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + |\alpha\Psi|^\beta)^\eta} \quad (12)$$

式中,  $\alpha, \beta$  及  $\eta = 1 - \beta$  均为经验系数。

在传输过程中, 忽略水蒸汽的弥散作用, 在平衡吸附的条件下, 二维溶质传输通过对流弥散方程表示, 即

$$\frac{\partial \theta_m C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \theta_m D_{\theta q} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C \right] + R \quad (13)$$

式中,  $C$  为微量元素在水中的浓度;  $D_{\theta q}$  为水动力学弥散系数;  $q_i$  为达西流速;  $R$  为源汇项。

$$D_{\theta q} = D_m + \alpha^* \left| \frac{q_i}{\theta_m} \right| \quad (14)$$

其中  $\alpha^*$  为弥散度;  $D_m$  为多孔介质中有效分子弥散系数。饱和、非饱和流动模型方程和微量元素传输方程之间的关系通过孔隙水流速耦合, 其控制方程为

$$q_i = \theta_m v = -K(\Psi) \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x_i} + 1 \right) \quad (15)$$

式中,  $v$  为孔隙水流速。

氧在气相中的弥散传输一维基本控制方程为

$$\theta_a \frac{\partial [O_2]_a}{\partial t} = \theta_a D_a \frac{\partial^2 [O_2]_a}{\partial x_i^2} - Q \quad (16)$$

式中,  $\theta_a$  为含气量;  $D_a$  为氧在气相中的弥散系数;  $Q$  为氧的消耗量。

通过以上模型可以预测微量元素在地下环境中的分布及扩散趋势, 再结合研究区域的水文地质资料可以有效地提出污染防治的控制措施。通过编制的计算程序可以定量分析微量元素在不同质地土壤和地下水中分布的规律, 从而来优化污染控制的技术方案和工艺参数, 这可以为污染控制提供科学的技术支持; 同时, 可以结合各种实验参数, 模拟不同污染强度条件下土壤-水环境系统中微量元素的动态变化规律, 预测污染的范围与程度, 根据预测结果, 提出防治煤矸石淋溶液污染的具体措施与治理方案。

## 4. 水分运移和重金属运移模型耦合

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[12][13]。

### 4.1. 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

$$\begin{cases} C(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x(h) \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_z(h) \frac{\partial h}{\partial z} \right) - \frac{\partial K_z(h)}{\partial z} \\ h(x, z, t) \Big|_{t=0} = h_0 \\ h(x, z, t) \Big|_{\Gamma_1} = h_1 \\ - \frac{\partial h(x, z, t)}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q \end{cases} \quad (17)$$

其中  $C(h) = d\theta/dh$  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。

### 4.2. 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:

$$\begin{cases} R_d \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_s K_A \gamma (1-S) C - \rho_s K_B \gamma S = \frac{\partial}{\partial x} \left( \theta D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qC)}{\partial z} \\ \frac{\partial S}{\partial t} = K_A (1-S_2) C - K_B S \\ C(x, z, 0) S(x, z, 0) = 0 \\ \left( qC - \theta D_x \frac{\partial C}{\partial x} - \theta D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \Big|_{\Gamma_1} = qC_0 \\ \left( -\theta D_x \frac{\partial C}{\partial x} - \theta D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \Big|_{\Gamma_2} = 0 \end{cases} \quad (18)$$

其中  $\theta$  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； $\rho_s$  土壤体积密度； $\gamma$  为最大沉淀量； $D_x$  和  $D_z$  分别为横向和纵向水力弥散系数； $q$  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

$$\begin{cases} q_x = -K_x(h) \frac{\partial h}{\partial x} \\ q_z = -K_z(h) \frac{\partial h}{\partial z} \end{cases} \quad (19)$$

### 4.3. 耦合数学模型的耦合求解

由土壤水分运移控制方程和污染物运移控制方程构成了重金属在地下环境系统中运移的数值模型。

对土壤水分运移的控制方程，令

$$r_1 = \frac{\Delta t}{\Delta z^2} \quad r_2 = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad r_3 = \frac{\Delta t}{\Delta z} \quad (20)$$

则水分控制方程的差分格式为

$$\begin{aligned} & -\left[ r_1 (K_x)_{i-1/2}^{j+1} + r_2 (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \right] h_{i-1}^{j+1} + M_i^{j+1} + r_1 \left[ (K_x)_{i+1/2}^{j+1} + (K_x)_{i-1/2}^{j+1} \right] \\ & + r_2 \left[ (K_z)_{i+1/2}^{j+1} + (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \right] h_i^{j+1} - \left[ r_1 (K_x)_{i+1/2}^{j+1} h_{i+1}^{j+1} + r_2 (K_z)_{i+1/2}^{j+1} h_{i+1}^{j+1} \right] h_{i+1}^{j+1} \\ & = M_i^{j+1} h_i^j - r_3 \left[ (K_z)_{i+1/2}^{j+1} + (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

$$\text{令 } a_i = -r_1 (K_x)_{i-1/2}^{j+1} + r_2 (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \quad (22)$$

$$b_i = M_i^{j+1} + r_1 \left[ (K_x)_{i+1/2}^{j+1} + (K_x)_{i-1/2}^{j+1} \right] + r_2 \left[ (K_z)_{i+1/2}^{j+1} + (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \right] \quad (23)$$

$$c_i = -\left[ r_1 (K_x)_{i-1/2}^{j+1} h_{i+1}^{j+1} + r_2 (K_z)_{i+1/2}^{j+1} h_{i+1}^{j+1} \right] \quad (24)$$

$$f_i = M_i^{j+1} h_i^j - r_3 \left[ (K_z)_{i+1/2}^{j+1} + (K_z)_{i-1/2}^{j+1} \right] \quad (25)$$

将上式联立可得，

$$a_i h_{i-1}^{j+1} + b_i h_i^{j+1} + c_i h_{i+1}^{j+1} = f_i \quad (26)$$

对应矩阵表达式为：

$$[T] \{h\}^{j+1} = [F] \quad (27)$$

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

$$([R_x] - [R_a])\{C\}^{j+1/2} = \{F_z\}^n + \{F_{xz}\}^n + \{F_{zx}\}^{j+1/2} - \{F_{qa}\} \quad (28)$$

$$([R_y] - [R_b])\{C\}^{j+1} = \{F_x\}^{j+1/2} + \{F_{xz}\}^{j+1} + \{F_{zx}\}^{j+1/2} - \{F_{qb}\} \quad (29)$$

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。

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, 可以再现煤矸石淋溶重金属在地下环境系统浓度分布以及演化与发展, 并可对不同质地土壤进行定量化分析, 其研究结果不仅可为煤矸石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。

## 5. 其他动力学模型

### 5.1. 淋滤液在地下水中的迁移的动力学数学模型

淋滤液在地下水中的迁移的动力学行为是由地下水流和污染物运移组成。为了进行地下水污染预测, 须同时求解地下水流控制方程和污染物在地下水中的迁移的控制方程[14]。

第四纪含水层中 $z$ 方向受到底板隔水层的限制, 所以建立了地下水在含水层中的二维运移方程,

$$K_{xx} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + K_{yy} \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (30)$$

式中,  $S_s$ ——贮水系数( $L^{-1}$ );  $h$ ——压力水头(L);  $K_{xx}$ ,  $K_{yy}$ ——分别为横向和纵向渗透系数( $LT^{-1}$ );  $t$ ——时间(T);  $q_s$ ——单位体积的源的体积流率( $T^{-1}$ )。

在综合考虑淋滤液在地下水环境体系中发生对流、弥散、吸附解吸以及存在源汇项情况下, 建立淋滤液迁移转化的控制方程:

$$R_d \frac{\partial(C)}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{q_s C_s}{\eta_e} \quad (31)$$

式中,  $\eta_e$ ——有效孔隙度;  $C$ ——溶质在地下水中的浓度( $ML^{-3}$ );  $D_L$ ,  $D_T$ ——纵向、横向弥散系数( $L^2T^{-1}$ );  $v_x$ ,  $v_y$ —— $x$ ,  $y$ 方向平均孔隙流速( $LT^{-1}$ );  $C_s$ ——源的污染物质浓度( $ML^{-3}$ );  $R_d$ ——迟滞因子。

地下水运移的定解初始条件:

$$h(x, z, t) = h_0(x, y), \quad t = 0 \quad (32)$$

边界条件:

$$h(x, y, t)|_{\Gamma_1} = h_1(x, y, t), \quad t \geq 0 \quad (33)$$

$$-K \frac{\partial h(x, y, t)}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q, \quad t \geq 0, \quad (x, y) \in \Gamma_2 \quad (34)$$

淋滤液在地下水中的迁移的定解初始条件:

$$C(x, y, t) = C_0(x, y), \quad t = 0 \quad (35)$$

边界条件:



$$C(x, y, t)|_{\Gamma_2} = C_1(x, y, t), \quad t \geq 0 \quad (36)$$

$$-D_L \frac{\partial C}{\partial x} - D_T \frac{\partial C}{\partial y} + C(v_x + v_y)|_{\Gamma_2} = C_0(v_x + v_y), \quad t \geq 0 \quad (37)$$

式中,  $h_0(x, y)$ ——初始压力水头值(L);  $h_1(x, y, t)$ ——边界压力水头值(L);  $n$ ——边界 $\Gamma_2$ 的外法线方向;  
 $q$ ——单位面积上流出的流量(LT<sup>-1</sup>);  $C_0(x, y)$ ——溶质初始浓度;  $C_1$ ——污染物在边界处的浓度。

煤矸石淋滤液在地下水中迁移的动力学数学模型,可以采用有限差分的方法对模型进行了数值求解,为量化预测、预报污染物浓度变化趋势及采取有效及时的污染防治措施提供了理论依据。

## 5.2. 孔隙 - 裂隙双重介质模型

煤矸石的淋溶液淋溶后先后经过土壤的表土层、下包气带而进入含水层,对地下水造成一定程度的污染。在含有孔隙裂隙的地下含水层中,裂隙发育的孔隙裂隙岩层中同时存在着两种不同孔隙率的渗流系统:孔隙总体积较大但渗透性相对弱的多孔岩块和总体积较小但渗透性却相对较强的分割多孔块的裂隙。岩层中的水流大部分是由体积相对较小的那部分裂隙传输的,地下水主要贮存在孔隙中,水的运动主要在裂隙中进行,为此,建立如下孔隙 - 裂隙双重介质模型[15]。

### 1) 地下水水流模型

裂隙域:

$$(I) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left( T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) = \mu \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - \Gamma_h - f_1 & (x, y) \in G, t > 0 \\ h|_{t=0} = h_0(x, y) & (x, y) \in \bar{G} \\ h|_{\Gamma_1} = h_1(x, y, t) & (x, y) \in \Gamma_2, t \geq 0 \\ \left[ T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \cos(\mathbf{n}, x) + T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \cos(\mathbf{n}, y) \right]_{\Gamma_2} = q(x, y, t) & (x, y) \in \Gamma_2, t \geq 0 \end{cases} \quad (38)$$

岩块域:

$$(II) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left( T_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( T_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) - \mu \cdot \frac{\partial h}{\partial t} - \Gamma_h - f_1 & (x, y) \in G, t > 0 \\ h|_{t=0} = h_0(x, y) & (x, y) \in \bar{G} \\ h|_{\Gamma_1} = h_1(x, y, t) & (x, y) \in \Gamma_1, t \geq 0 \end{cases} \quad (39)$$

### 2) 淋溶液污染物迁移模型

裂隙域:

$$(III) \quad \begin{cases} R' \frac{\partial c'}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D \frac{\partial c}{\partial y} \right) - Vc + \frac{dc}{dt} \Big|_{\text{滞}} + \frac{f_e}{M \cdot n} + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \Gamma_c & (x, y) \in G, t > 0 \\ c|_{\eta} = c_0(x, y) & (x, y) \in G \\ c|_{\eta} = c_0(x, y) & (x, y) \in \Gamma_1, t \geq 0 \\ (D \cdot \text{grad} c) \mathbf{n}|_{\Gamma_2} = g(x, y, t) & (x, y) \in \Gamma_2, t \geq 0 \end{cases} \quad (40)$$

岩块域:



$$(IV) \quad \begin{cases} R' \frac{\partial c'}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D' \frac{\partial c'}{\partial t} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D' \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{\text{溶}} & (x, y) \in G, t > 0 \\ c' \Big|_{t=0} = c'(x, y, t) & (x, y) \in \bar{G}' \\ c' \Big|_B = c(x, y, t) & (x, y) \in B, t \geq 0 \end{cases} \quad (41)$$

$$\Gamma_h = M \cdot \frac{a}{a+b} \cdot \sigma \cdot T' \cdot \text{grad}h' \cdot \mathbf{n} \Big|_B = \frac{a}{a+b} \cdot \sigma \cdot T' \cdot \text{grad}h' \cdot \mathbf{n} \quad (42)$$

$$V = -\frac{K}{n} \text{grad}h \quad (43)$$

式中  $G$ 、 $G'$  分别表示裂隙域和孔隙岩块域； $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$  表示裂隙域的边界； $f_1$  和  $f_2$  分别表示垂向补给裂隙和岩块域的补给强度； $h$  和  $h'$  分别表示裂隙和岩块域的水头分布； $B$  表示孔隙岩块  $G'$  边界； $\Gamma_h$  表示单位时间单位面积裂隙-岩块界面上的变换量； $M$  为含水层厚度， $n$ 、 $b$  分别为岩块厚度和裂隙宽度之半； $C$  和  $C'$  分别为裂隙域和孔隙岩块域的浓度分布； $n$  为孔隙度； $R$  和  $R'$  分别为裂隙域和孔隙岩块域的延迟系数； $dc/dt$  价表示化学动力学溶解速度； $f_c$  为含水层补给量或排泄量中的溶质浓度； $D$  和  $D'$  分别为裂隙域的弥散系数和岩块域分子扩散系数； $\mathbf{n}$  为边界  $B$  的单位外法向量； $\pi$  为特定参数。

淋溶液污染物在含水层中迁移的双重介质模型，可为淋溶液污染机理的分析提供理论依据。

## 5. 结论

在释放传输特性定量化研究方面，现在文献主要从矿物学、地球化学及模拟试验方面对煤矸石研究颇多，使得煤矸石矿环境污染综合治理上取得了较大进展，但是应考虑多场耦合条件下煤矸石内污染物释放特性，尤其需要从定量角度对煤矸石衍生环境效应的过程和机制进行研究，这是研究的一个发展方向。在溶解反应动力学研究方面，对水-岩相互作用的动力学的理论研究和数值模拟已比较透彻，但对于水-岩化学作用的非平衡态非线性动力学理论的研究还处于初始阶段，这是另一个研究的发展方向。

## 基金项目

山东省交通运输厅科技计划(2019B24)。

## 参考文献

- [1] Zhang, H.Z. and Fang, Y. (2014) An Experimental Study on Flexural-Tensile Property of Cement Stabilized Coal Gangue Road-Base Materials. *Applied Mechanics and Materials*, **638-640**, 1536-1540. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.638-640.1536>
- [2] Zhang, R., Wang, D., Zhang, Y., et al. (2018) Effects of Green Substrates Composed of Coal Gangue on the Growth of *Trifolium repens* L. and Its Resistance to Heavy Metal Pollution. *Chinese Journal of Applied and Environmental Biology*, **24**, 908-914.
- [3] Wang, Y., Zhang, Y., Zhou, Q., et al. (2018) Thermal Kinetics Analysis of Coal-Gangue Selected from Inner Mongolia in China. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, **131**, 1835-1843. <https://doi.org/10.1007/s10973-017-6642-4>
- [4] 龚龙飞. 温度-水流耦合作用下煤矸石内污染物传输动力学行为研究[D]: [硕士学位论文]. 武汉: 武汉工业学院, 2010.
- [5] 檀丽娟, 冯松宝, 程琛, 等. 淋滤作用下朱仙庄煤矸石中重金属的迁移研究[J]. 广州化工, 2019(15): 131-133.
- [6] 邓仁健, 任伯帜, 周赛军. 煤矸石淋溶污染物对高速公路沿线土壤水环境污染的仿真研究[J]. 环境污染与防治, 2008(3): 44-47, 50.
- [7] 杜勇立, 黄向京, 戚芳芳, 等. 煤矸石作路基材料对地下水硝酸盐污染的数值模拟分析[J]. 上海师范大学学报(自然科学版), 2014, 43(3): 297-303.
- [8] 靳明, 阳军生. 煤矸石淋溶微量元素对高速公路沿线土壤水环境污染的仿真研究[J]. 湖南科技大学学报(自然科学版), 2008(3): 120-124.

- [9] 刘鹏, 陈记文. 煤矸石淋溶微量元素对土壤水环境污染的仿真研究[J]. 煤炭学报, 2005, 30(s1): 84-88.
- [10] 王雪峰. 降雨条件下煤矸石淋溶微量元素传输的动力学研究[J]. 武汉轻工大学学报, 2007, 26(1): 73-75.
- [11] 王雪峰. 煤矸石淋溶微量元素污染的水动力学规律研究[D]: [硕士学位论文]. 武汉: 华中科技大学, 2006.
- [12] 薛强, 王惠芸, 梁冰. 煤矸石淋溶重金属运移过程的水动力学模型及应用[J]. 辽宁工程技术大学学报, 2005(5): 141-144.
- [13] 吴军, 梁冰. 重金属污染物在非均质储层中运移的环境预测模型[J]. 防灾减灾工程学报, 2005, 25(3): 293-296.
- [14] 梁冰, 陆海军, 肖利萍, 等. 煤矸石淋滤液对地下水污染的数值仿真研究[J]. 系统仿真学报, 2007(7): 32-34+209.
- [15] 白国良, 梁冰. 煤矸石淋溶液对地下水污染过程分析[J]. 中国科学技术大学学报, 2004, 34(s1): 470-475.