

doi:10.11835/j.issn.1674-4764.2014.02.018

Laplace 变换求解成层土中污染物一维扩散问题

余 闻^{a,b},温灿灿^b,陈樟龙^a,蔡晓庆^a,刘俊峰^b

(温州大学 a. 建筑与土木工程学院;b. 数学与信息科学学院,浙江 温州 325035)

摘要:成层土中污染物的迁移规律较为复杂,将其简化为一维扩散模型。运用 Laplace 变换和 Laplace 数值逆变换方法进行了求解,编制了计算程序。计算结果可以退化到单层土的情况,结论与经典的理论解完全一致。通过与现有用数值软件计算结果的对比,检验了解答的正确性;采用的计算方法对一室内试验结果进行了模拟,计算结果和实测数据较为吻合,证明所提方法的可靠性。求解方法可用于求解更为复杂的边界条件下的污染物迁移问题。

关键词:污染物扩散;成层土;Laplace 变换;一维扩散模型

中图分类号:TU820.6 文献标志码:A 文章编号:1674-4764(2014)02-0115-04

Solution for One-Dimensional Contaminant Diffusion in Layered Clayey Soils Using Laplace Transforms

Yu Chuang^{a,b}, Wen Cancan^b, Chen Zhanglong^a, Cai Xiaoqing^a, Liu Junfeng^b

(a. College of Architecture and Civil Engineering;

b. College of Mathematics & Information Science, Wenzhou University, Wenzhou 325035, Zhejiang, P. R. China)

Abstract: Contaminant diffusion in layered soil is very complex. The diffusion process is simplified as a one-dimensional diffusion mode. The Laplace transformation and Laplace numerical inverse transformation are adopted. The proposed solution can be degraded to a single layer case. The obtained results are well consistent with those obtained by the classic theory. The correctness of the presented solution is verified by comparing the calculation results with the results generated by existing numerical software. One case study is conducted and the calculation results have a good agreement with measured data, which prove the reliability of the proposed method. The presented method can be used to solve more complex boundary conditions of contaminant migration.

Key words: contaminant migration; layered soil; laplace transformation; one-dimensional diffusion model

污染物在土层中的扩散问题一直是学术界研究的热点问题。近年来,国外学者对垃圾填埋场中污染物的迁移模型做了大量的研究工作,但在中国,关于这方面的研究还不多^[1-4]。

污染物在土介质中的迁移规律受很多因素的影响^[5-6],主要有:对流、弥散、分子扩散、蜕变及吸附

等。一般认为同时考虑对流、弥散和蜕变项的迁移模型^[7-9]能较好地反映实际情况,但是模型的求解难度也随考虑因素的增加而加大。Rowe 等^[10-11]用数值变换的方法求解了成层土中自由上边界条件和底部有潜水层的下边界条件下污染物的迁移问题。杨文参等^[12]利用分离变量法求解成层土中的污染物

收稿日期:2013-10-15

基金项目:国家自然科学基金(41002091、41372264);浙江省自然科学基金(LY13E080013);中国博士后科学基金面上项目(2012M521851)。

作者简介:余 闻(1977-),男,博士,教授,主要从事环境岩土、地基处理等研究,(E-mail)3945735@qq.com。

扩散问题,但由于分离变量法所要求齐次边界条件的限制,很难处理边界条件复杂的问题。然而,实际边界条件往往较为复杂^[11],这就需要有处理更加复杂边界条件的数学工具。本文运用Laplace变换和Laplace数值逆变换求解成层土中污染物一维扩散模型,模型边界条件相对简单,目的是对该问题进行初步研究,检验所提方法的可靠性,以便进一步深入分析研究。

1 污染物扩散模型

求解成层土中污染物一维扩散模型主要基于以下假设:1)成层土为均质、饱和的;2)第*i*层土介质中阻滞因子和有效扩散系数是常数,不随时间、空间变化;3)污染物的扩散是一维的,并且污染源在土层上部,不考虑其他的外部污染源;4)污染物的扩散仅有污染物的浓度梯度引起,忽略水力传导的作用,同时考虑土颗粒对污染物的线性吸附作用。

在上述基本假设的前提下,简化污染物在土壤中的迁移方程^[2],得到了成层土中污染物的一维扩散模型,如图1所示。对于成层土中第*i*层,污染物的扩散方程为

$$R_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \quad (1)$$

式中: C_i 为第*i*层土中的污染物浓度; R_i 为第*i*层土对污染物的阻滞因子; D_i 为第*i*层土中污染物扩散的扩散系数。

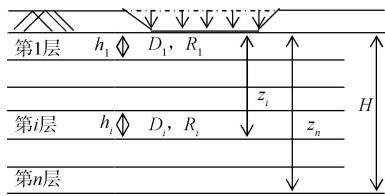


图1 污染物一维扩散剖面图

该模型的初始条件为

$$t=0; C_i(z,t)=f_i(z) (i=1,2,\dots,n) \quad (2)$$

式中, $f_i(z)$ 为第*i*层土中初始浓度分布函数,取 $f_i(z)=0$ 。

该模型的边界条件为

$$z=0; C_1(0,t)=C_0(t), t \geq 0 \quad (3)$$

$$z=H; C_n(H,t)=0, t \geq 0 \quad (4)$$

成层土交界面上的连续条件为

$$z=z_i: \begin{cases} C_i(z_i,t)=C_{i+1}(z_i,t) \\ n_i D_i \frac{\partial C_i(z,t)}{\partial z}=n_{i+1} D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}(z,t)}{\partial z} \end{cases}$$

$$t \geq 0; i=1,2,\dots,n. \quad (5)$$

2 模型求解

由于式(1)类似于Terzaghi一维固结方程,故参考文献[13]的求解方法,对式(1)进行Laplace变换:

$$\bar{SC}_i - C_i(z,0) = \frac{D_i}{R_i} \frac{\partial^2 \bar{C}_i}{\partial z^2} \quad (6)$$

$$\text{式中: } \bar{C}_i(z,s) = \int_0^\infty C_i(z,t) e^{-st} dt.$$

将式(2)代入式(6)可求解得

$$\bar{C}_i = A_{i1} \exp(r_i z) + A_{i2} \exp(-r_i z) \quad (7)$$

$$\text{式中: } r_i^2 = \frac{R_i s}{D_i}.$$

对式(3)–(5)进行拉氏变换:

$$A_{11} + A_{12} = \frac{C_0}{s} \quad (8)$$

$$A_{n1} e^{r_n H} + A_{n2} e^{-r_n H} = 0 \quad (9)$$

$$A_{i1} e^{r_i h_i} + A_{i2} e^{-r_i h_i} = A_{i+1,1} e^{r_{i+1} h_i} + A_{i+1,2} e^{-r_{i+1} h_i} \quad (10)$$

$$n_i D_i r_i (A_{i1} e^{r_i h_i} - A_{i2} e^{-r_i h_i}) = n_{i+1} D_{i+1} r_{i+1} (A_{i+1,1} e^{r_{i+1} h_i} - A_{i+1,2} e^{-r_{i+1} h_i}) \quad (11)$$

将式(10)、(11)写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} e^{r_i h_i} & e^{r_i h_i} \\ n_i D_i r_i e^{r_i h_i} & -n_i D_i r_i e^{-r_i h_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i1} \\ A_{i2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{r_{i+1} h_i} & e^{-r_{i+1} h_i} \\ n_{i+1} D_{i+1} r_{i+1} e^{r_{i+1} h_i} & -n_{i+1} D_{i+1} r_{i+1} e^{-r_{i+1} h_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i+1,1} \\ A_{i+1,2} \end{bmatrix} \quad (12)$$

根据式(12)可得下列递推关系式:

$$\begin{bmatrix} A_{i+1,1} \\ A_{i+1,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} (1 + \alpha_i) e^{(r_i - r_{i+1}) h_i} & \frac{1}{2} (1 - \alpha_i) e^{-(r_i + r_{i+1}) h_i} \\ \frac{1}{2} (1 - \alpha_i) e^{(r_i + r_{i+1}) h_i} & \frac{1}{2} (1 + \alpha_i) e^{(r_{i+1} - r_i) h_i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{i1} \\ A_{i2} \end{bmatrix} \quad (13)$$

$$\text{式中, } \alpha_i = \frac{n_i D_i r_i}{n_{i+1} D_{i+1} r_{i+1}}.$$

由式(8)、(9)可知:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = \frac{C_0}{s} \quad (14)$$

$$\begin{bmatrix} e^{r_n H} & e^{-r_n H} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n1} \\ A_{n2} \end{bmatrix} = 0 \quad (15)$$

$$\text{设 } \begin{bmatrix} A_{i+1,1} \\ A_{i+1,2} \end{bmatrix} = D_i \begin{bmatrix} A_{i1} \\ A_{i2} \end{bmatrix}, \text{ 则 } \begin{bmatrix} A_{i1} \\ A_{i2} \end{bmatrix} = D_{n-1} \cdots D_1$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = M_{n-1} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix}.$$

$$\text{式中, } M_{n-1} = D_{i-1} D_{i-2} \cdots D_1 = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}.$$

由递推公式可知

$$\begin{bmatrix} e^{r_n H} & e^{-r_n H} \end{bmatrix} M_{n-1} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = 0 \quad (16)$$

联立式(14)和式(16)可得

$$\begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{e^{r_n H} M_{12} + e^{-r_n H} M_{22}}{e^{r_n H} (M_{12} - M_{11}) + e^{-r_n H} (M_{22} - M_{21})} C_0 \\ \frac{e^{r_n H} M_{11} + e^{-r_n H} M_{21}}{e^{r_n H} (M_{11} - M_{12}) + e^{-r_n H} (M_{21} - M_{22})} C_0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

至此求得每层土中的污染物浓度拉氏变换解

$$\bar{C}_i(z, s) = \begin{bmatrix} \exp(r_i z) & \exp(-r_i z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} \quad (18)$$

由于式(18)很难通过 Laplace 逆变换得到时域解析解, 故采用数值 Laplace 逆变换方法^[14]求解。

3 模型验证分析

3.1 退化为单层解的情况

当上述解退化为单层土层时, 式(17)可简化为:

$$\begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-e^{-r_n H}}{e^{r_n H} - e^{-r_n H}} C_0 \\ \frac{e^{r_n H}}{e^{r_n H} - e^{-r_n H}} C_0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

从而可得:

$$\bar{C} = \frac{e^{-rH} e^{rz} - e^{rH} e^{-rz}}{e^{-rH} - e^{rH}} \frac{C_0}{s} = \frac{e^{-r(H-z)} - e^{r(H-z)}}{e^{-rH} - e^{rH}} \frac{C_0}{s} \quad (20)$$

对式(20)进行 Laplace 逆变换, 求解得到

$$C(z, t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \bar{C}(z, s) e^s ds \quad (21)$$

即:

$$C(z, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \text{Res}[\bar{C}(z, s) e^s] \quad (22)$$

式(27)的孤立奇点为

$$s_n = -\frac{D}{R} \frac{n^2 \pi^2}{H^2} \quad (n = 0, 1, 2, \dots, \infty) \quad (23)$$

当 $s_n = 0$ 时:

$$\text{Res}[\bar{C}(z, s) e^s, s = 0] = \lim_{s \rightarrow 0} \frac{e^{r(H-z)} - e^{-r(H-z)}}{e^{rH} - e^{-rH}} e^s C_0 =$$

$$(1 - \frac{z}{H}) C_0 \quad (24)$$

当 $s_n = -\frac{D}{R} \frac{n^2 \pi^2}{H^2}$ 时:

$$\text{Res}[\bar{C}(z, s) e^s, s_n] = -\frac{2C_0}{n\pi} \sin \frac{n\pi z}{H} e^{-\frac{D n^2 \pi^2}{R H^2} t} \quad (25)$$

得到

$$C(z, t) = (1 - \frac{z}{H}) C_0 - \frac{2C_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin \frac{n\pi z}{H} e^{-\frac{D n^2 \pi^2}{R H^2} t} \quad (26)$$

方程(26)即为文献[9]中退化为单层土的解答。

3.2 与已有成层解答对比

基于上述 Laplace 逆变换解答, 笔者编制了相应的计算程序。对于层状土中污染物的一维扩散解析解, 文献[12]假设了两层介质的物理化学性质如表 1 所示, 边界条件为顶部浓度为 1.0(常浓度), 底部为 0。同时采用著名的污染物分析软件 GAEA Pollute V7 进行了计算, 如图 2 所示, 两者所获得的结果基本保持一致, 从而说明本文解答及所编写程序的可靠性。

表 1 土层的物理化学性质参数

土层类型	孔隙率 n	扩散系数 $D/(m^2 \cdot s^{-1})$	阻滞因子 R	土层厚度 h/m
土层 1	0.3	6.5×10^{-11}	4.0	0.3
土层 2	0.5	1.3×10^{-10}	2.0	0.4

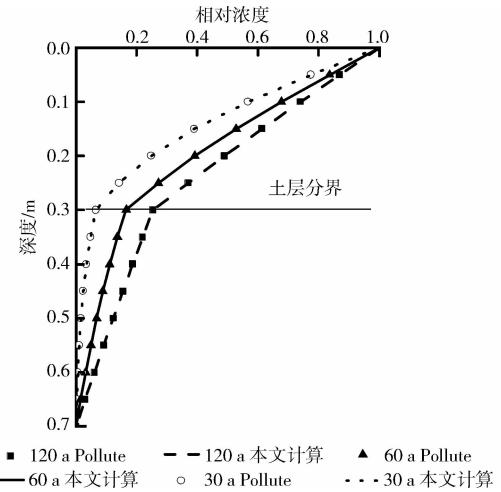


图 2 理论计算与数值分析结果对比

3.3 实验数据计算分析

Roehl 等^[15]设计了室内一维扩散模型, 分析了常浓度条件下 Cd^{2+} 在粘土中的迁移规律。粘土层厚度 5 cm, 比重 1.68 g/cm³, 含水量 17.5%, 试验温度控制在 20±8°C, 分别测试了 43 d 到 520 d 中 5 个时间段、不同深度处的 Cd^{2+} 浓度。粘土扩散系数 D 为 $6.5 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$, 阻滞因子 R 为 35, 计算结果和模型试验结果对比如图 3 所示。由此可见, 计算结果和实测数据比较一致。

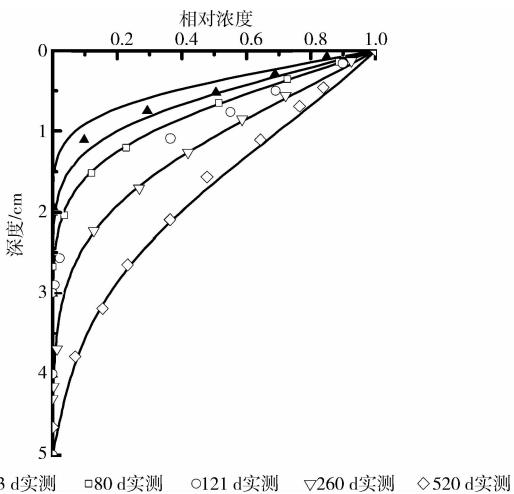


图3 理论计算与模型试验结果对比

4 结论

成层土中污染物的迁移规律较为复杂,将其简化为一维扩散模型,运用 Laplace 变换和 Laplace 数值逆变换方法进行了求解,编制了计算程序。计算结果可以退化到单层土的情况,所得结论与经典的理论解完全一致。通过与现有用数值软件 GAEA Pollute V7 计算结果的对比,两者计算结果保持一致,检验了解答的正确性;采用计算方法对一室内 Cd²⁺ 在粘土中扩散试验进行了模拟,计算结果和实测数据较为吻合,证明所提方法的可靠性。

参考文献:

- [1] 崔振东,唐益群. 地下水流与水质联合数值模拟应用研究[J]. 土木建筑与环境工程,2009,31(1):120-124.
Cui Z D, Tang Y Q. Numerical simulation of groundwater flow and quality [J]. Journal of Civil, Architectural & Environmental Engineering, 2009, 31 (1):120-124.
- [2] 杜延军,金飞,刘松玉,等. 重金属工业污染场地固化/稳定处理研究进展[J]. 岩土力学,2011,32(1): 116-124.
Du Y J, Jin F, Liu S Y. Review of stabilization/solidification technique for remediation of heavy metals contaminated lands [J]. Rock and Soil Mechanics, 2011, (1):116-124.
- [3] 席永慧,刘建航. 饱和多孔介质中污染物迁移模拟[J]. 同济大学学报:自然科学版,2005,33(5):644-648.
Xi Y H, Liu J H. Modeling of contaminant migration in saturated porous media [J]. Journal of Tongji University: Natural Science, 2005,33(5):644-648.
- [4] 查甫生,许龙,崔可锐. 水泥固化重金属污染土的强度特性试验研究[J]. 岩土力学,2012,33(3):652-657.
Zha F S, Xu L, Cui K R. Strength characteristics of heavy metal contaminated soils stabilized/solidified by cement [J]. Rock and Soil Mechanics, 2012,33(3):652-657.
- [5] 付国楷,张驰,张智,等. 污染物在人工复合生态床中的迁移转化途径[J]. 土木建筑与环境工程,2010,32(2): 122-127.
Fu G K, Zhang C, Zhang Z. Transportation and transformation of pollutants in a new type constructed wetland [J]. Journal of Civil, Architectural & Environmental Engineering, 2010,32(2):122-127.
- [6] Mathur S, Jayawardena L P. Modelling migration of contaminants from waste disposal facility [J]. International Journal of Environmental Studies, 2005,62(1): 15-34.
- [7] Rowe R K, Booker J R. A finite layer technique for modeling complex landfill history [J]. Canadian Geotechnical Journal, 1995, 32: 660-676.
- [8] Rabideau A J, Khandelwal A. Boundary conditions for modeling transport in vertical barriers [J]. Journal of Environmental Engineering, 1998, 124 (11): 1135-1139.
- [9] Jury W A, Spencer W F, Farmer W J. Behavior assessment model for trace organics in soils [J]. I. Model description [J]. J. Environ. Qual., 1983, 12 (4): 558-564.
- [10] Rowe R K, Booker J R. The analysis of pollutant migration in a non-homogeneous soil [J]. Geotechnique, 1984, 4:601-612.
- [11] Rowe R K, Booker J R. Clayey barrier system for waste disposal facilities [M]. London: E & FN Spon, 1995.
- [12] 杨文参,谢海建,陈云敏. 考虑降解时污染物在底泥及覆盖层中的迁移解[J]. 土木工程学报,2011,44(Sup 2): 181-185.
Yang W C,Xie H J,Chen Y M. Analytical solution for contaminant transport through underwater soil and overlying cap layer considering degradation [J]. China Civil Engineering Journal,2011,44(Sup 2):181-185.
- [13] 徐长节,蔡袁强,吴世明. 任意荷载下成层弹性地基的一维固结[J]. 土木工程学报,1995,17(5):80-85.
Xu C J, Cai Y Q, Wu S M. One dimensional consolidation of layered elastic soils under arbitrary loading [J]. China Civil Engineering Journal, 1995, 17 (5):80-85.
- [14] Durbin J W. Numerical inversion of Laplace transforms: an efficient improvement to Duber and Abate's method [J]. Comput Journal, 1973,17(4):371-376.
- [15] Roehl K E, Czurda K. Diffusion and solid speciation of Cd and Pb in clay liners [J]. Applied Clay Science, 1998,12:387-402.

(编辑 胡玲)