



文章栏目：固体废物处理与资源化

DOI 10.12030/j.cjee.202203082 中图分类号 X705 文献标识码 A

侯娟, 陆向前, 刘思彤, 等. 膨润土衬垫溶质扩散及渗透行为 COMSOL 模拟[J]. 环境工程学报, 2022, 16(8): 2691-2698. [HOU Juan, LU Xiangqian, LIU Sitong, et al. COMSOL simulation of solute diffusion and infiltration behavior of geosynthetic clay liner[J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2022, 16(8): 2691-2698.]

膨润土衬垫溶质扩散及渗透行为 COMSOL 模拟

侯娟^{1,2,3,*}, 陆向前¹, 刘思彤¹, 刘磊³

1. 上海大学力学与工程科学学院, 上海 200444; 2. 弗吉尼亚大学工程与应用科学学院, 美国 夏洛茨维尔 22904; 3. 中国科学院武汉岩土力学研究所, 岩土力学与工程国家重点实验室, 武汉 430071

摘要 针对填埋场膨润土衬垫(GCL)易于被化学溶质击穿的问题,研究了化学溶质在GCL中的扩散行为和破坏机理,以指导工程实际。通过COMSOL Multiphysics构建膨润土扩散柱数值模型,研究了离子种类、离子浓度、水头压力以及上覆应力等因素对化学溶质在GCL中扩散行为的影响,并研究了渗透系数与扩散系数之间的转换关系。结果表明,阴离子比阳离子的扩散衰减速率小,扩散速率随溶质扩散时间的增长而减小,化学溶质的扩散会显著增加溶质浓度梯度的变化。对于扩散系数较大的溶质,孔隙率和扩散系数能较好地表征其扩散行为。上覆压力会明显增大化学溶质在GCL中的扩散。低、中浓度初始扩散源的扩散范围较浅,而高浓度初始扩散源的扩散范围较大。因此,在垃圾填埋场工程中,应根据渗沥液浓度、离子种类以及上覆垃圾荷载等对GCL的防污性能进行安全评估,尤其应对高浓度和高应力作用下较深范围内污染物的迁移情况进行监测。本研究结果可为GCL在填埋场中的工程应用和防污安全预警提供参考。

关键词 膨润土衬垫; 扩散行为; 渗透系数; COMSOL 多物理场模拟

目前,我国每年生活垃圾无害化处理已超过 24×10^8 t^[1],卫生填埋是现阶段处理城市固体废弃物的主要手段之一^[2]。膨润土衬垫(Geosynthetic Clay Liner, GCL)由2层土工织物夹裹1层膨润土构成,是我国目前新建和扩建卫生填埋场的关键防渗材料^[3-5]。垃圾渗沥液在GCL中的扩散和运移过程是个复杂的多场耦合问题,受无机盐化学溶质和垃圾体上覆应力作用影响显著^[6]。同时,GCL的渗透特性和结构性演化会相互影响,形成互馈机制^[7]。填埋场服役过程中,GCL的渗透破坏不仅是化学和应力等多种外界复杂地质环境因素共同作用的结果,而且是渗沥液迁移过程中膨润土结构性演化的结果^[8-9]。因此,开展耦合效应下GCL的扩散行为分析,对于正确评估GCL的防渗性能具有重要的理论价值。

针对GCL防渗性能的研究主要集中在实验测试方面^[10-14]。结果表明,GCL中,起主要防渗作用的材料是膨润土,上覆应力和化学离子的扩散行为会直接影响GCL的防渗性能^[15-17]。MALUSIS等^[18]研究了 Cl^- 和 K^+ 在GCL中的扩散行为,分析了离子浓度和上覆应力对扩散行为的影响。但是,由于观测手段的限制,实验难于直接观测溶质在GCL中的扩散过程^[18]。ASHMAWY等^[19]研究了 Cl^- 、 Na^+ 、 K^+ 、 Ca^{2+} 和 Mg^{2+} 在GCL中的扩散行为,分析了离子浓度和孔隙比的影响。何俊等^[20]以 Cl^- 、 Ca^{2+} 、 Zn^{2+} 作为垃圾渗沥液的典型污染物,研究了其在GCL中的扩散行为。目前,就

收稿日期: 2022-03-13; 录用日期: 2022-05-24

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51978390; 51778353); 岩土力学与工程国家重点实验室开放研究基金资助项目(Z018007); 国家留学基金资助项目(201906895014); 中国科学院青年创新促进会项目(2017376)

第一作者: 侯娟(1975—),女,博士,副教授, juanhou@staff.shu.edu.cn; 通信作者

渗沥液水头^[21-23]、垃圾堆体上覆应力^[24-26]以及化学溶质^[27-30]复杂耦合条件下 GCL 溶质扩散行为的研究非常匮乏^[31]。

数值模拟是研究多孔介质水力特性的主要手段之一^[32]。其中, COMSOL Multiphysics 在分析多物理场耦合以及在溶质扩散和流体渗流等复杂问题方面具有明显的优势^[33]。采用 COMSOL Multiphysics 软件, 构建膨润土扩散柱的数值模型, 以研究不同溶质浓度和不同离子种类的扩散速率和扩散规律, 分析水头压力及上覆应力等因素对 GCL 中溶质扩散行为的影响, 并提出渗透系数与扩散系数之间的计算公式, 以期 GCL 在填埋场中的工程应用和防污安全预警提供参考。

1 模型建立和参数确定

COMSOL Multiphysics 以有限元为基础, 通过求解偏微分方程(单场)和方程组(多场)实现多场耦合的仿真模拟^[34], 其建模过程一般分为基本假设及几何模型建立、确定物理场控制方程并赋予物理场、网格划分及求解 3 部分。

1.1 基本假设及几何模型

依据已有研究^[10,35-36], 考虑 GCL 孔隙率和扩散系数的影响, 同时考虑美国材料与试验协会 GCL 系列测试标准 (ASTM D6766)^[37] 中膨润土基本达到饱和状态等条件, 本研究数值模型建立的基本假设为: GCL 为均一饱和介质, 离子扩散与流体渗透具有相同曲折度, 流体渗流满足达西定律。

基于膨润土扩散柱实验^[38], 同时考虑边界无限延伸的工程实际, 采用图 1 所示膨润土模拟扩散柱。其中, 模型上边界和下边界设为沿 x 方向扩展的无限边界, 上边界为膨润土柱上表面, 下边界为不透水层边界。膨润土柱 z 方向上的高度 h 为 0.040 m, 扩散源宽度 b 为 0.045 m(图 1 矩形虚线框所示)。初始扩散源均匀分布在图 1 箭头所示平面位置。

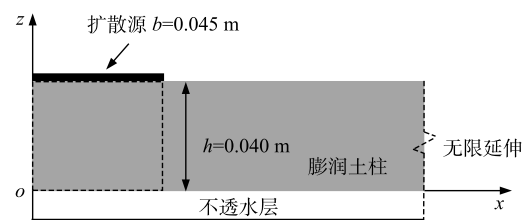


图 1 膨润土扩散柱示意图

Fig. 1 Schematic diagram of bentonite diffusion column

1.2 物理场控制方程

质量守恒时, 单位体积多孔介质的浓度随时间的变化量可以用扩散项、对流项、吸附项、源项与衰变项等表示见式(1)^[39]。

$$\frac{\partial(\theta_l C)}{\partial t} = \nabla(\theta_l D_{eff} \nabla C) - u \nabla C - \frac{\partial}{\partial t}(\rho_d C_s) + q C_R - \zeta_1 + \zeta_2 \quad (1)$$

式中: θ_l 为体积含水量, 表示为非饱和土的含水率; C 为溶质浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$; $\nabla(\theta_l D_{eff} \nabla C)$ 表示为单位体积多孔介质内受扩散系数影响随浓度变化的扩散项; $u \nabla C$ 为流速场和浓度梯度引起的对流场, u 为达西流速, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$; $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_d C_s)$ 为受干密度影响的溶质吸附项; $q C_R$ 为源项, q 为单位体积流入的源体体积流量, $1 \cdot \text{s}^{-1}$; C_R 是源体的浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$; ζ_1 和 ζ_2 分别表示为物质在过程中发生反应降解和衰变的速率, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

当 GCL 内膨润土基本达到饱和时, 式(1)左侧的 $\theta_l C$ 随时间的变化率见式(2)。

$$\frac{\partial(\theta_l C)}{\partial t} = C \frac{\partial \theta_l}{\partial t} + \theta_l \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2)$$

求解过程中溶质质量守恒且无外部溶质流入, 则有 $q = \frac{\partial \theta_l}{\partial t}$ 。同时, 考虑模型假设 GCL 为连续介质, 微元体内有 $C_R = C$ 。因此, $q C_R$ 如式(3)所示。

$$q C_R = \frac{\partial \theta_l}{\partial t} C \quad (3)$$

由于渗流过程温度恒定，同时多孔介质 GCL 为基本饱和状态，其孔隙率基本不发生变化，因此，溶质不发生衰变且有 $\theta_i=n$ 。将式 (2) 和式 (3) 代入式 (1)，则得到控制溶质浓度扩散的非稳态扩散连续性方程如式 (4) 所示。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\nabla(\theta_i D_{eff} \nabla C) - u \nabla C}{n + \rho_d \frac{\partial C_s}{\partial C}} \quad (4)$$

1.3 模型基本参数设置

Cl^- 、 Ca^{2+} 、 Zn^{2+} 是常见的垃圾填埋场渗沥液所包含的离子，参考扩散柱实验结果^[38]，本研究选择 $CaCl_2$ 、 $ZnSO_4$ 为初始扩散源溶质，研究化学溶质在 GCL 中的扩散行为，具体参数汇总如表 1 所示。参考已有实验数据^[20,40-42]，选定模型中 Cl^- 、 Ca^{2+} 、 Zn^{2+} 的扩散系数如表 2 所示。

表 1 模型基本参数^[38]

Table 1 The parameters used in the COMSOL model

扩散源	浓度/(mol·m ⁻³)	孔隙率/n	饱和度/%	扩散时间/h
CaCl ₂	150	0.86	100	144
ZnSO ₄	100	0.82	97.80	141

表 2 模型扩散系数取值

Table 2 Diffusion coefficient value in the COMSOL model

离子种类	扩散系数D/(×10 ⁻⁸ m·s ⁻¹)	参考文献
Cl ⁻	0.35~3.70	LAKE等 ^[40]
Cl ⁻	0.07~2.34	MALUSIS等 ^[41]
Ca ²⁺	3.80	何俊 ^[20]
Zn ²⁺	0.05~1.01	SHACKELFORD等 ^[42]

2 仿真结果与分析

2.1 时间对扩散系数的影响

图 2 所示为 Ca^{2+} 在不同时刻的扩散浓度分布图。比较图 2(a) 至 2(d) 可以看出，由于模型假设了 GCL 为均匀介质，因此 Ca^{2+} 浓度分别在

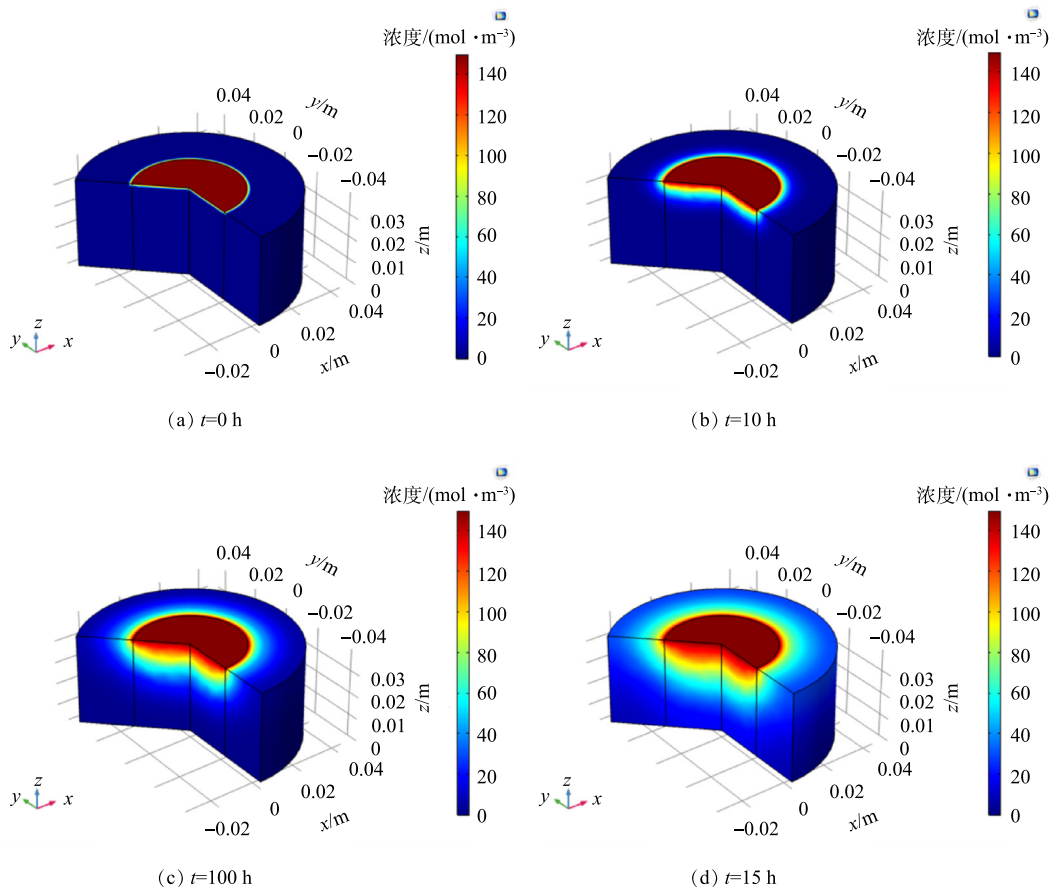


图 2 不同时刻 Ca^{2+} 扩散浓度分布图

Fig. 2 Diffusion concentration distribution of Ca^{2+} at different times

3个方向是均匀扩散的。但是, Ca^{2+} 在垂直方向(z 方向)的扩散速率明显大于水平方向的(x 和 y 方向)。这是因为垂直方向为流体渗流方向,同时,溶质浓度随化学溶质的扩散会产生一定梯降,该梯降会加速 GCL 由均匀介质向非均匀介质转换,最终使得 Ca^{2+} 在垂直方向的扩散速率最大。此外,比较图 2(a)至 2(d)可以看出, Ca^{2+} 浓度的扩散速度随时间的增长而逐渐减小。以 Ca^{2+} 扩散浓度达到 $60 \text{ mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 时为例, 10、100、150 h 后, Ca^{2+} 运移的深度分别为 0.005、0.015、0.02 m, 对应的 Ca^{2+} 平均运移速度分别为 0.005 、 1.5×10^{-4} 、 $1.3\times 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{h}^{-1}$ 。此外,从 $t=0 \text{ h}$ 至 $t=100 \text{ h}$ 时间内, Ca^{2+} 扩散浓度随深度变化较大。但是,在 $t=100 \text{ h}$ 至 $t=150 \text{ h}$ 之间, Ca^{2+} 扩散浓度随深度的增加而逐渐减小。当 $t=150 \text{ h}$, 基本达到扩散平衡^[38]。因此,下节以 $t=150 \text{ h}$ 溶质扩散基本达到平衡时为例,进一步比较分析不同离子浓度和不同离子种类在 GCL 中的扩散规律。

2.2 不同初始溶质浓度的影响

图 3 给出了 $t=150 \text{ h}$ 时, 浓度分别为 150、300、450 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的 Ca^{2+} 初始扩散源在 z 方向的浓度分布图。可以看出, 相同竖向位置处, Ca^{2+} 扩散浓度随初始扩散源浓度的增加而增大, 即溶质的扩散作用随着初始扩散源浓度的增加而增大。进一步比较浓度为 150 与 300 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的 Ca^{2+} 初始扩散源随深度方向的扩散浓度梯降发现, 溶质扩散的梯降随深度增加而逐渐减小。此外, 比较初始扩散源浓度为 150 与 300 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 、300 与 450 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的曲线可以看出, 初始扩散源处, 溶质浓度差均为 150 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 。但是, 溶质扩散后的浓度差与深度呈非线性变化关系。比如, 当 $z=0.03 \text{ m}$ 时, 初始扩散源浓度为 150 与 300 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的浓度差值大于初始扩散源浓度为 300 和 450 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的。但是, 当 $z=0.01 \text{ m}$ 时, 初始扩散源浓度为 150 与 300 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的浓度差值小于初始扩散源浓度为 300 与 450 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 的。这说明, 溶质在 GCL 中的扩散, 不仅与初始扩散源的浓度有关, 而且与扩散距离有关。扩散平衡时, 初始扩散源附近, 低浓度和中浓度的溶质影响范围较大。但远离初始扩散源处, 高浓度初始扩散源的溶质扩散衰减较慢, 因此影响范围更大。即低、中和高浓度初始扩散源的影响作用具有相反趋势。因此, 当填埋场初始溶质浓度较高时, 应尤其对较深范围可能出现的污染进行监测。

2.3 不同离子种类的影响

图 4 给出了 $t=150 \text{ h}$ 时扩散场作用下 z 方向不同种类离子扩散浓度随深度变化的模拟和实验曲线^[38]。可以看出, Ca^{2+} 、 Cl^- 、 Zn^{2+} 的模拟值与实验值均表现为离初始扩散源越远(z 值越小)离子浓度越小的规律。同时, 比较 Ca^{2+} 与 Zn^{2+} 阳离子的模拟值发现, 扩散系数越大($\text{Ca}^{2+}>\text{Zn}^{2+}$), 离子随深度方向的浓度变化也越大, 且随着扩散深度的增加, 化学浓度变化逐渐减小。此外, 整体 Ca^{2+} 浓度的变化大于 Cl^- 的, 但是, Cl^- 浓度的差值随扩散深度的增加逐渐增大。这说明, 阴离子扩散衰减的速率小于阳离子的。此外可以看出, Zn^{2+} 的模拟值较实验值偏大, 但 Ca^{2+} 的模拟值与实验值却非常接近。原因是 Zn^{2+} 扩散系数远小于 Ca^{2+} 的, 但本研究在 COMSOL 模拟过程中仅考虑了 GCL 孔隙率和扩散系数的影响, 未考虑膨润土吸湿膨胀及细观孔隙结构的影响。由此可以推测, 对于扩散系数较大的阳离子, 孔隙率和扩散系数就可以较好地表征其扩散行为。但是, 对于扩散系数较小的阳离子, 应进一步结合吸湿膨胀及细观孔隙结构演化研究其扩散行为。因此, 实际填埋场工程

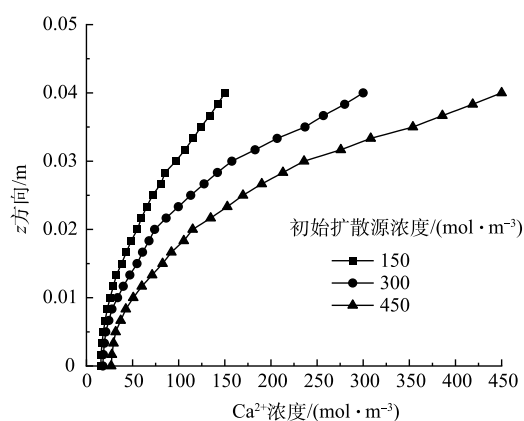


图 3 具有不同初始扩散源浓度的溶质随深度扩散变化图 (CaCl_2)

Fig. 3 Solutions with different initial diffusion source concentrations vs the depth (CaCl_2)

中，应针对不同渗沥液特征，对相应的 GCL 采取不同安全评估标准。当渗沥液中含大量 Ca^{2+} 等扩散系数较大的阳离子时，可采取常规测试 GCL 渗透系数的办法评估 GCL 的防渗性能。但当渗沥液中含大量 Zn^{2+} 等扩散系数较小的阳离子时，应进一步加强分析离子在 GCL 中的运移和扩散特征，才能更准确地评估 GCL 的防污性能。

2.4 水头高度和上覆应力的影响

扩散实验较难在水头和上覆应力耦合效应下开展，因此，本研究以 Ca^{2+} 为例，分别调整模型水头压力为 3 和 100 kPa，同时施加 0、3、25、50、100、200 和 400 kPa 等上覆应力，以研究水头和上覆应力耦合条件下 GCL 中溶质的扩散规律。

图 5(a) 所示为水头压力为 3 kPa、上覆应力分别为 0-400 kPa 时， Ca^{2+} 浓度在 z 方向的变化曲线。可以看出，仅在 3 kPa 水头作用下， Ca^{2+} 浓度的模拟值与实验值基本一致。所有上覆应力下 Ca^{2+} 浓度均随深度增加而呈逐渐减小的趋势，且随着上覆应力的增大， Ca^{2+} 扩散浓度随深度的变化逐渐减小。但是，上覆应力大于 200 kPa 时， Ca^{2+} 扩散浓度会在 $z=8.5$ 和 5.5 m 位置处出现骤降点，即 Ca^{2+} 扩散至该深度后，其扩散浓度随深度的增加而急剧减小。此外，值得注意的是，当上覆应力从 3 kPa 增加至 25 kPa 时， Ca^{2+} 扩散浓度的分布出现较大差异。以远离扩散源 $z=0$ m 处为例，当上覆应力分别为 3 和 25 kPa 时，该深度处 Ca^{2+} 扩散浓度分别 20 和 70 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ ，相差约 50 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 。而当上覆应力从 25 kPa 增加至 400 kPa 时，该处 Ca^{2+} 扩散浓度仅相差约 20 $\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$ 。这说明，一定水头作用下，一定范围内的上覆应力会在初期较明显地增大 GCL 中化学溶质的扩散效应，进而促使化学溶质迅速扩散至较深的位置。因此，工程中应尽量避免干燥 GCL 直接上覆少量垃圾的情况，以防止垃圾填埋初期 GCL 的防渗性能明显降低。

图 5(b) 所示为水头压力 100 kPa、上覆应力分别为 0-400 kPa 时， Ca^{2+} 浓度在 z 方向的变化曲线。可以看出， $z=0$ m 时，上覆应力越大，同一深度处的 Ca^{2+} 扩散浓度越大。上覆应力小于 200 kPa 时， Ca^{2+} 扩散浓度随深度变化比较均匀。而上覆应力大于 200 kPa 后，与水头压力为 3kPa 时类似， Ca^{2+} 扩散浓度会在 $z=8.5$ m 和 5.5 m 位置处出现骤降点，即 Ca^{2+} 扩散至该深度后， Ca^{2+} 扩散浓度随深

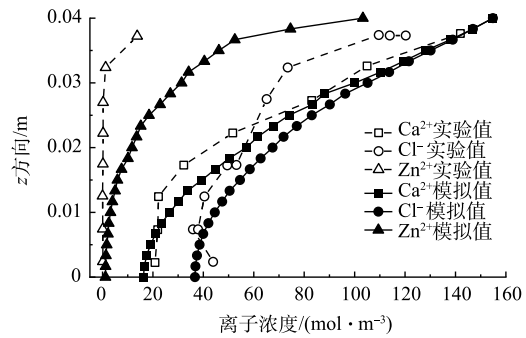


图 4 不同种类离子扩散浓度随深度变化曲线 (Ca^{2+} 、 Cl^- 、 Zn^{2+})

Fig. 4 Diffusion concentrations of vary ions vs the depth (Ca^{2+} 、 Cl^- 、 Zn^{2+})

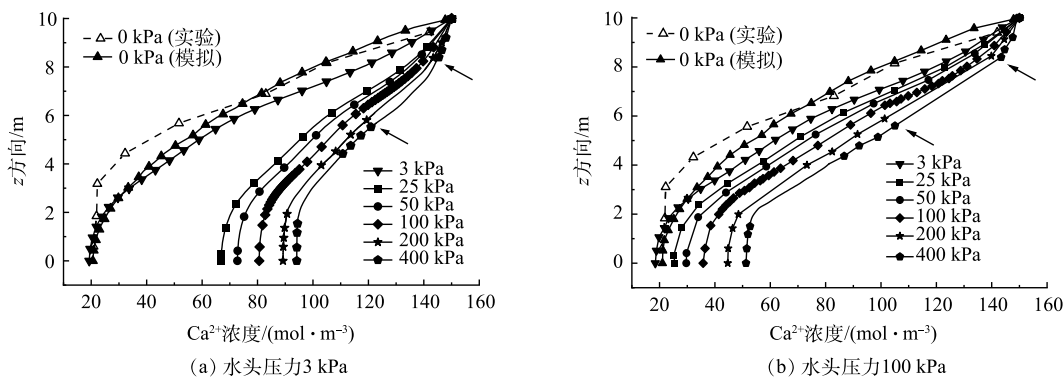


图 5 水头压力和上覆应力对 Ca^{2+} 浓度分布的影响

Fig. 5 Influence of the gradient and the confine pressure on the distribution of the Ca^{2+} concentration

度的增加而急剧减小。其原因是,较大的上覆应力使得初始扩散源附近 GCL 的有效孔隙率明显减小,进而使得其内化学扩散效应显著受限。但随着深度的增加,上覆应力的压密效应逐渐减小,使得化学浓度较大时溶质的扩散效应随渗流明显增大。当 $z=5.5\text{ m}$ 时,尽管上覆应力对有效孔隙率的减小受限,但是由于化学溶质浓度较小,因此 GCL 中溶质的扩散效应不再明显。继续增加深度后,上覆应力对有效孔隙率的减小几乎可以忽略,有效孔隙率逐渐增大,渗流的作用下,化学扩散再次趋于明显。由此也验证了 GCL 实验中,溶质的运移在化学和应力作用下存在耦合效应这一现象^[35]。

2.5 扩散系数和渗透系数关系

部分学者对膨润土的扩散系数和渗透系数及其相互关系进行了研究^[40-42]。图 6 给出了本模拟 Ca^{2+} 扩散过程中 GCL 底部边界渗透系数随时间的变化规律。可以看出,随着 Ca^{2+} 的扩散,其底部边界处的渗透系数约在 1.6×10^{-7} 至 $2.3\times 10^{-7}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 之间,当 $t=150\text{ h}$ 扩散基本平衡时,渗透系数约为 $1.94\times 10^{-7}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。

图 7 给出了本研究所得 Ca^{2+} 和 Zn^{2+} 扩散系数与渗透系数之间的模拟关系,同时汇总了 JANG 等^[43] 和 VAN 等^[44] 的实验值。可以看出, Ca^{2+} 的扩散系数和渗透系数值与相同条件下的实验结果非常接近。这说明,本模拟可以较准确地反应溶质在 GCL 中的扩散行为。同时,由于扩散系数与渗透系数在双对数坐标系下存在一定的线性关系^[44-45],因此,通过拟合模拟和实验数据,可以得到双对数坐标系下渗透系数与扩散系数之间的关系如式 (5) 所示。

$$\lg k = 9.41 \lg D + 82.5 \quad (5)$$

3 结论

1) 溶质在 GCL 中的扩散,不仅与初始扩散源的浓度有关,而且与扩散系数有关。溶质的扩散会加速溶质梯度的变化,扩散速度随着时间的增长而逐渐减小,低、中浓度和高浓度初始扩散源的影响作用具有相反的趋势。填埋场工程中当溶质浓度较高时,应尤其注意较深范围内可能出现的污染。

2) 扩散系数越大,离子随初始扩散源主扩散方向的浓度变化越大,阴离子比阳离子扩散衰减的速率小。孔隙率和扩散系数可以较好地表征扩散系数较大阳离子的扩散行为,但吸湿膨胀及细观孔隙结构演化等对扩散系数较小阳离子的扩散行为影响不可忽略。

3) 化学和应力对溶质在 GCL 中的扩散存在明显的耦合效应。一定水头作用下,上覆应力会加速 GCL 中化学溶质向较深位置扩散。填埋场工程中应尽量避免干燥 GCL 直接上覆少量垃圾的情况,以避免 GCL 的防渗性能在填埋初期明显降低。

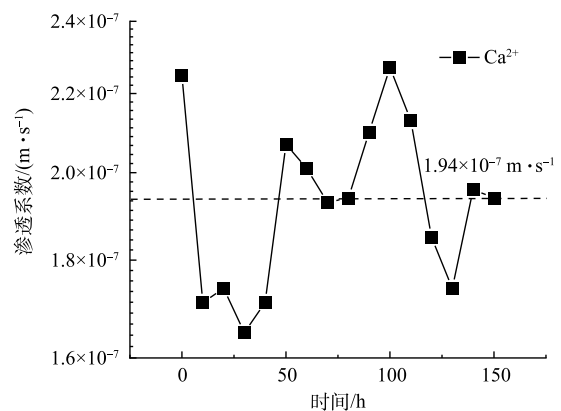


图 6 Ca^{2+} 渗透系数随扩散时长变化规律

Fig. 6 Hydraulic conductivity vs t

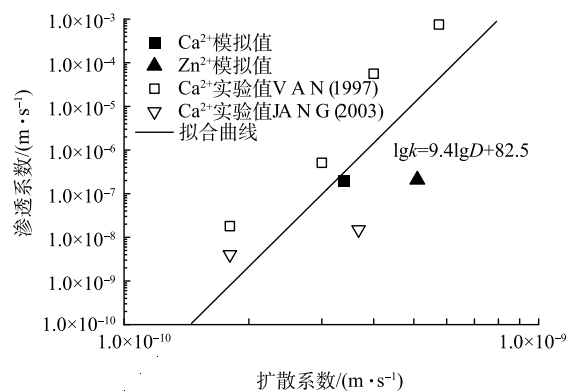


图 7 扩散系数与渗透系数关系

Fig. 7 Hydraulic conductive vs diffusion coefficient

参考文献

- [1] 中华人民共和国国家统计局. 中国统计年鉴[M]. 北京: 中国统计出版社, 2020
- [2] ZHANG P, WU Z C. Municipal sludge as landfill barrier material[J]. *Journal of Environmental Sciences*, 2002, 17(1): 474-477.
- [3] 刘磊, 薛强, 赵颖, 等. 溶质入渗土工合成衬垫的化学-渗透特性研究[J]. *岩土力学*, 2012, 33(10): 3025-3066.
- [4] 卢普伟, 万小明, 王冲, 热带地区城市垃圾填埋场防渗施工技术[J]. *施工技术*, 2020, 49(15): 96-98.
- [5] 段亚萍, 侯立兵, 石志刚, 等. 膨润土产品及制品标准化现状及发展[J]. *中国矿业*, 2019, 28(12): 167-175.
- [6] ROWE R K, BOSTWICK L, THIEL R. Shrinkage characteristics of heat-tacked GCL seams[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2010, 28(4): 352-359.
- [7] AZAD F M, EL-ZEIN A, ROWE R K, et al. Modelling of thermally induced desiccation of geosynthetic clay liners in double composite liner systems[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2012, 34: 28-38.
- [8] BOUAZZA A, GATES W P. Overview of performance compatibility issues of GCLs with respect to leachates of extreme chemistry[J]. *Geosynthetics International*, 2014, 21(2): 151-167.
- [9] BENSON C H, MEER S R. Relative abundance of monovalent and divalent cations and the impact of desiccation on geosynthetic clay liners[J]. *Journal of Geotechnical & Geoenvironmental Engineering*, 2009, 135(3): 349-358.
- [10] ROWE R K, JABIN F. Effect of prehydration, permeant, and desiccation on GCL/Geomembrane interface transmissivity[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2021, 49: 1451-1469.
- [11] 刘玉芹. 天然膨润土矿物防渗材料的性能评价与寿命预测[J]. *中国建筑防水*, 2021, 8: 50-53.
- [12] 李芹, 廖才能, 廖明旭, 等. 赤泥渗滤液对钠基膨润土黏土衬垫的渗透机理分析[J]. *环境工程*, 2021, 39(1): 148-153.
- [13] 陈永贵, 雷宏楠, 贺勇, 等. 膨润土-红黏土混合土对NaCl溶液的渗透试验研究[J]. *中南大学学报(自然科学版)*, 2018, 49(4): 910-915.
- [14] 王宝, 董兴玲. 利用膨润土的膨胀和稠度特征对GCL渗透系数进行预测的试验研究[J]. *土木建筑与环境工程*, 2015, 37(5): 66-71.
- [15] FU X L, ZHANG R, REDDY K R, et al. Membrane behavior and diffusion properties of sand/SHMP-amended bentonite vertical cutoff wall backfill exposed to lead contamination[J]. *Engineering Geology*, 2021, 284: 106037.
- [16] 张虎元, 童艳梅, 贾全全. 强碱性溶液扩散对高庙子膨润土的化学腐蚀[J]. *岩石力学与工程学报*, 2020, 39(1): 166-176.
- [17] 傅贤雷, 杜延军, 沈胜强, 等. PAC改性膨润土/砂竖向阻隔屏障回填料化学渗透膜效应及扩散特性研究[J]. *岩石力学与工程学报*, 2020, 39(S2): 3669-3675.
- [18] MALUSIS M A, KANG J B, SHACKELFORD C D. Restricted salt diffusion in a geosynthetic clay liner[J]. *Environmental Geotechnics*, 2015, 2(2): 68-77.
- [19] ASHMAWYA K, MUHAMMAD N, ELHAJJI D. Advection, diffusion, and sorption characteristics of inorganic chemicals in GCL bentonite[M]. Austin: Waste Containment and Remediation, 2005.
- [20] 何俊, 施建勇, 廖智强, 等. 膨润土中离子扩散特征试验研究[J]. *岩土力学*, 2007, 28(4): 831-835.
- [21] 侯娟, 滕宇阳, 李昊, 等. 多孔介质曲折度对膨润土衬垫渗透性能的影响[J]. *湖南大学学报(自然科学版)*, 2022, 49(1): 155-164.
- [22] LIESKE W, CHRIST F, BAILLE W, et al. Suction and crack propagation in GCLs subjected to drying and wetting in CaCl₂-solutions[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2020, 48(6): 973-982.
- [23] 侯晓萍, 樊恒辉. 基于COMSOL Multiphysics的非饱和裂隙土降雨入渗特性研究[J]. *岩土力学*, 2022, 43(2): 564-572.
- [24] 王祥云, 陈涛, 王春丽, 等. 若干重要放射性核素在北山花岗岩及高庙子膨润土中的吸附和扩散研究[J]. *中国科学:化学*, 2020, 50(11): 1585-1599.
- [25] 张文杰, 顾晨, 楼晓红. 低固结压力下土-膨润土防渗墙填料渗透和扩散系数测试[J]. *岩土工程学报*, 2017, 39(10): 1915-1921.
- [26] LORENZETTI R J, BARTELT-HUNT S L, BURNS S E, et al. Hydraulic conductivities and effective diffusion coefficients of geosynthetic clay liners with organobentonite amendments[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2005, 23(5): 385-400.
- [27] NOORUDDIN H A, HOSSAIN M E. Modified Kozeny-Carmen correlation for enhanced hydraulic flow unit characterization[J]. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2011, 80(1): 107-115.
- [28] XU P, YU B. Developing a new form of permeability and Kozeny-Carmen constant for homogeneous porous media by means of fractal geometry[J]. *Advances in Water Resources*, 2008, 31(1): 74-81.
- [29] SHACKELFORD C D, MEIRE A, SAMPLE-LORD K. Limiting membrane and diffusion behavior of a geosynthetic clay liner[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2016, 44(5): 707-718.
- [30] SHAN H Y, LAI Y J. Effect of hydrating liquid on the hydraulic properties of geosynthetic clay liners[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2002, 20(1): 19-38.
- [31] ROWE R K. Geosynthetic clay liners: Perceptions and misconceptions[J]. *Geotextiles and Geomembranes*, 2020, 48(2): 137-156.
- [32] 郭建春, 庄园, 刘超. 考虑非达西效应的酸蚀裂缝流场数值模拟[J]. *岩土力学*, 2015, 36(11): 3315-3321.
- [33] 侯会明, 胡大伟, 周辉, 等. 考虑细观等效热学参数的高放废物处置库围岩应力-渗流-温度耦合模拟方法[J]. *岩土力学*, 2019, 40(9): 3625-3634.
- [34] 杨盛. 基于COMSOL模拟开裂混凝土中的氯离子扩散行为[J]. *科技创新与应用*, 2020(6): 14-15.
- [35] 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.
- [36] SHACKELFORD C D, BENSON C H, KATSUMI T, et al. Evaluating the hydraulic conductivity of GCLs permeated with non-standard liquids[J]. *Geotextiles & Geomembranes*, 2000, 18(2/3/4): 133-161.

- [37] ASTM D6766-2018. Standard test method for evaluation of hydraulic properties of geosynthetic clay liners permeated with potentially incompatible aqueous solutions-see all versions[S]. American Society for Materials and Testing, 2018.
- [38] 何俊. 基于微观分析的填埋场GCL中运移规律的理论研究[D]. 南京: 河海大学土木工程学院, 2006: 45-76.
- [39] 李学垣. 土壤化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2001.
- [40] LAKE C B. Contaminant transport through geosynthetic clay liners and a composite liner system[D]. Ontario: The University of Western Ontario, 2001.
- [41] MALUSIS M A. Membrane behavior and coupled solute transport through a geosynthetic liner[D]. Colorado: Colorado State University, 2001.
- [42] SHACKELFORD C D, DANIEL D E. Diffusion in saturated soil. I: background[J]. *Journal of Geotechnical Engineering*, 1991, 117(3): 467-484.
- [43] JANG Y S, HONG G T. An experimental study on diffusion characteristics of hardened liner materials to inorganic chemicals[J]. *Environmental Geology*, 2003, 44(5): 599-607.
- [44] VAN H A. Properties of self-sealing and self-repairing seals[C]//Sardinia 95, International Landfill Symposium. CISA, Cagliari, 1995.
- [45] 何俊, 郝国文. 粘土衬垫中渗透系数与扩散系数的关系[J]. *煤田地质与勘探*, 2007, 35(6): 40-43.
- (责任编辑: 金曙光)

COMSOL simulation of solute diffusion and infiltration behavior of geosynthetic clay liner

HOU Juan^{1,2,3,*}, LU Xiangqian¹, LIU Sitong¹, LIU Lei³

1. School of mechanics and Engineering Sciences, Shanghai University, Shanghai 200444, China; 2. The School of Engineering and Applied Science, University of Virginia, Charlottesville, VA 22904, USA; 3. State Key Laboratory of Geomechanics and Geotechnical Engineering, Institute of Rock and Soil Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China

*Corresponding author, E-mail: juanhou@staff.shu.edu.cn

Abstract Regarding to the chemical break-down of the geosynthetic clay liner (GCL) in landfill, the diffusion behavior and the failure mechanism was numerically studied to guide engineering practice. A series of COMSOL Multiphysics numerical model was developed based on the diffusion column tests. The effects of chemical ionic species and concentrations, the water gradient and the overlying pressure on the diffusion behavior of the GCL were investigated. A relationship between the hydraulic conductivity and diffusion coefficient was explored. The results demonstrated that the decays rate of anion diffusion was lower than that of cations. The diffusion rate was gradually decreased with the time. The chemical diffusion accelerated the change of the solution gradient. The porosity and diffusion coefficient can screen well the diffusion behavior of the GCL with larger diffusion coefficients. Under a certain water gradient, the overlying pressure increased the chemical diffusion through the GCL at the initial stage, and moved to a deeper position. The low and medium concentrations influenced the area nearby the initial diffusion source. However, the initial diffusion source with high concentration influenced a larger area. Therefore, the chemical diffusion and hydraulic performance of GCL in a landfill project should be evaluated carefully according to the concentration of leachate, the type of chemical ions, and the overlying pressure. The migration of pollutants should be monitored, especially relating to the high chemical concentration and high-pressure condition. The research results provided a theoretical reference for the application of GCL in landfills, as well as the risk assessment and early warning systems.

Keywords GCL; diffusion behavior; the hydraulic conductivity; COMSOL multiphysics simulation