

Simulation Study on Migration and Remediation of Organic Pollutants in Soil of a Typical Chemical Site

Sheng Xiong

Hubei Institute of Urban Geological Engineering, Wuhan, Hubei 430050, China

Abstract

The migration behavior and remediation response of organic pollutants in the soil of typical chemical sites have become an important research direction in the field of environmental engineering. This paper focuses on a contaminated chemical site. Through on-site analysis of pollutant spectra, investigation of soil physical and chemical properties, and assessment of hydrogeological conditions, a simulation model for pollutant migration and remediation is constructed to explore the migration paths and response characteristics of organic pollutants in soil layers at different depths. Based on the simulation data, analyze the influence degree of various remediation technology parameters on the pollution reduction effect, and evaluate the model adaptability and application prospects. The research results provide theoretical support and technical basis for site pollution control and have good engineering practice value.

Keywords

Chemical site Soil pollution Organic pollutants; Migration simulation Repair technology

某典型化工场地土壤中有机污染物迁移修复模拟研究

熊升

湖北省城市地质工程院, 中国 · 湖北 武汉 430050

摘要

典型化工场地土壤中有机污染物的迁移行为与修复响应已成为环境工程领域的重要研究方向。本文聚焦于某受污染化工场地, 通过现场污染物谱系分析、土壤理化性质调查以及水文地质条件评估, 构建污染物迁移与修复模拟模型, 探讨有机污染物在不同深度土层中的迁移路径及其响应特征。结合模拟数据, 分析各类修复技术参数对污染削减效果的影响程度, 评估模型适配性与应用前景。研究结果为场地污染治理提供理论支撑与技术依据, 具有良好的工程实践价值。

关键词

化工场地; 土壤污染; 有机污染物; 迁移模拟; 修复技术

1 引言

化工场地因长期工业活动导致土壤中有机污染物富集, 形成典型的多源复合污染格局, 危害周边生态系统及人类健康。传统调查方法多局限于表层定性分析, 难以准确把握污染物在地下体系中的迁移路径与累积趋势, 影响修复方案的科学性与可行性。随着数值模拟技术的发展, 基于多参数构建的迁移与修复模拟模型逐渐成为污染场地治理的重要工具。本文以某典型化工场地为研究对象, 围绕污染物迁移机制、修复路径参数及模拟适用性开展系统分析, 力图通过模型构建还原真实污染演化过程, 为修复技术优化与风险控制提供量化依据。

【作者简介】熊升 (1972-), 女, 中国湖北武汉人, 本科, 高级工程师, 从事水文地质、工程地质与环境地质工程等方面的研究。

2 研究区域概况与污染特征分析

2.1 典型化工场地的地理位置与地质背景

研究场地位于某典型化工园区腹地, 周边分布有多家有机化工及中间体制造企业, 场地面积约 6.5 公顷。地处冲积平原边缘, 地貌类型属第四系沉积覆盖区, 地质剖面结构由表层填土、粉质粘土、粉砂层及砂卵石层组成, 厚度不等。区域地下水埋深在 2 米至 6 米之间, 流向受地貌坡度与地下水补给影响呈北西向展布, 具有一定承压性。土体渗透性随深度增加而增强, 为污染物在垂向与侧向上的迁移提供了通道。场地多年累积污染形成的地下污染羽流对监测建模具有代表性, 具备开展污染迁移模拟的典型性地质基础与水文条件。

2.2 土壤有机污染物的主要类型与分布规律

场地污染物谱系主要包含苯类、酚类、多环芳烃及部分氯代烃等挥发性和半挥发性有机物, 均为工业生产过程中常见的中间产物或副产物。污染物在不同功能分区中的分布

呈现明显空间差异,车间周边土层污染浓度明显高于绿化带与道路区域。污染深度主要集中在0.5米至2米范围,局部样点可延伸至4米。部分高浓度污染物呈斑块状聚集,伴有向下迁移趋势。苯系物在浅层挥发能力较强,酚类与多环芳烃在黏性土中积聚能力较高,整体污染物分布受历史工艺布设、地形起伏及地表径流影响形成复杂的不均匀性垂向迁移结构。

3 有机污染物迁移机理模拟基础

3.1 土壤理化性质对有机污染物迁移的影响机制

土壤理化性质对污染物的迁移能力具有显著调控作用,主要体现在对有机污染物吸附能力、水分运移特性及分子扩散阻力等方面。研究场地表层土壤含有较高比例的粉质粘土,阳离子交换量大,增强了对极性有机物的吸附固定作用。中层以粉砂夹细砂为主,孔隙度大、含水率低,有利于污染物随水流迁移。深层砂砾层渗透系数大于 $1 \times 10^{-3} \text{cm/s}$,为污染物提供快速迁移路径。土壤有机质含量影响挥发性污染物的滞留时间,含量较高区域表现出较强的污染物滞留能力。综合各层特征,土壤异质性显著影响污染物在不同深度的迁移速度与累积浓度分布。

3.2 地下水动力条件与污染物迁移路径的关系

地下水流动特征对污染物迁移路径具有决定性作用。研究区域地下水主要受降水补给与地表水体侧向渗透影响,年均补给量约为180mm,地下水流速在0.05至0.2m/d之间。受地层倾角与承压条件影响,污染羽流主要沿北西方向扩展,呈羽状展布。地下水动力梯度对污染物迁移距离与方向有显著影响,梯度增大时迁移速度提升,扩散半径增大。地下水位季节性波动导致污染物在浅层土壤中发生周期性解吸与再分布,进而加剧了污染范围的波动性变化。局部存在地下障碍物及低渗透层对迁移路径产生拦截与导流作用,需在模型中进行合理参数设置以反映真实迁移规律。

3.3 有机污染物的吸附—解吸与挥发扩散行为建模

有机污染物在土壤中的迁移过程涉及吸附、解吸、挥发和扩散等多个物理化学行为,其建模需考虑污染物理化性质与土壤环境条件之间的相互作用。以苯为代表的挥发性有机物在干湿交替环境中易发生气液转化,需引入Henry常数动态调节模型模拟气液平衡行为。解吸动力学模型采用线性与非线性等温吸附方程耦合,描述污染物在吸附平衡下的滞留与释放行为。分子扩散系数与土壤孔隙结构参数共同决定污染物在气相与水相中的横向扩散能力。通过将吸附模型与质量守恒方程相结合,构建多过程耦合的迁移模拟框架,可有效提升模拟对实际污染迁移行为的拟合精度与预测能力。

4 修复技术路径与参数选取策略

4.1 模拟适配性的修复技术类型对比分析

常见有机污染土壤修复技术包括原位气体抽提、生物通气、热脱附及化学氧化等,不同技术在实际场地中适配性

受限于土壤渗透性、污染物种类与分布状态。气体抽提适用于高挥发性有机物,依赖良好的气体通透性;热脱附效率高但能耗大,适合小范围高浓度区域;化学氧化可迅速降低污染浓度但对地下水化学环境扰动较强。模拟结果显示,适配性最佳的技术往往需与现场条件协同优化,复合修复技术具有更高的适应弹性。通过对各类技术在模拟场景下的污染削减效率与操作边界进行量化比较,为修复路径优选提供科学依据与工程可行性评估支撑。

4.2 关键修复参数的敏感性与不确定性评估

修复模拟过程涉及多项参数设置,主要包括气体注入速率、氧化剂浓度、反应时间、热传导系数及降解速率常数等。这些参数在不同情境下对污染物迁移与削减的影响程度存在显著差异,需通过敏感性分析确定其关键性。采用局部扰动与全局敏感性分析相结合的方法,识别出对模拟结果波动影响最大的参数,并分析其变化范围对模拟结论的影响方向与程度。不确定性评估引入Monte Carlo法或拉丁超立方采样法进行多次模拟运行,统计污染物浓度输出区间,揭示模型预测的不确定边界。通过构建参数—响应矩阵,实现修复方案调整的风险控制与容错空间量化。

4.3 修复边界条件与输入数据的设定原则

模拟建模过程中边界条件设定对修复预测结果具有决定性影响,应依据场地实际地形、地下水流向及污染物初始分布特征合理设定。为提高模型鲁棒性,数据预处理阶段应剔除异常值并进行插值补全,确保模拟输入具备连续性与可溯源性。模型运行前进行边界条件敏感性测试,有助于识别影响主导项并指导后续修复路径优化。

5 污染物迁移与修复模拟结果分析

5.1 污染物浓度变化时空分布模拟结果解析

模拟结果表明污染物苯在第30天时0.5米深度区域的最大浓度为82.4mg/kg,第90天时下降至47.6mg/kg,分布范围由112平方米缩小至63平方米。在1.5米深度处苯的迁移前沿扩展速度为0.18米/天,受地下水水平流速控制,呈椭圆状扩展趋势。酚类污染物在第60天时2米深度检测到浓度峰值33.1mg/kg,至第150天时已降至11.5mg/kg,浓度梯度呈现垂向减缓态势。整体污染羽流在模拟周期内边界迁移距离不超过22米,且高浓度区由原中心偏移约5.4米,迁移方向与地下水流向一致。分布数据拟合表明污染物扩散过程与模拟输入参数保持高度相关,模拟空间分布与实测趋势一致。

5.2 修复过程中的污染削减效率动态评估

污染物苯在实施气体抽提修复技术的第15天时浓度平均下降率为23.5%,第60天达51.2%,第120天后趋于稳定,最终削减率达到77.8%。酚类污染物在第30天时下降幅度为19.4%,至第90天下降幅度提升至64.6%。多环芳烃类污染物在前期响应滞后,第45天开始出现明显下降,

第 120 天时平均浓度从 21.7mg/kg 降至 6.3mg/kg，削减率达 70.9%。修复动态响应表现为初期下降速率快，随后进入平缓阶段，主要受限于低渗区域污染物解吸速率缓慢。在整体修复区域内污染物平均浓度下降速率为 0.56mg/kg · d，修复效果随时间呈非线性增强趋势，部分高浓度区域仍存在滞留现象。

5.3 模拟结果对修复技术优化的反馈指导

模型输出数据显示在气体抽提技术下污染物削减效率在砂层中可达 82.3%，在粉质粘土中仅为 46.7%，存在

明显差异。热脱附技术在高浓度区域模拟平均削减效率为 91.5%，但在边缘低浓度区域存在热量传导不足问题，模拟温升幅度仅为 23.1℃，不足以维持脱附反应速率。化学氧化模拟中，氧化剂投加量在 2.5mol/m² 以下削减率不足 50%，当增至 4.1mol/m² 后可提升至 75.4%，但同时模拟地下水 pH 值下降至 4.8。模型反馈结果表明，不同技术对土层结构响应敏感性差异显著，复合修复路径可提升整体效率达 28%。模拟结果直接反映参数调整方向，为修复策略组合优化与剂量控制提供数据支撑，结果数据详见表 1。

表 1 污染物迁移与修复模拟核心数据表

	参数1	数值1	参数2	数值2	参数3	数值3
1	苯浓度(30天)	82.4 mg/kg	苯浓度(90天)	47.6 mg/kg	苯分布变化	112→63 m ³
2	苯迁移速度	0.18 m/d	酚类峰值(60天)	33.1 mg/kg	酚类浓度(150天)	11.5 mg/kg
3	苯下降率(60天)	51.2%	苯最终削减率	77.8%	多环芳烃削减率	70.9%
4	平均下降速率	0.56 mg/kg-d	抽提法效率(砂层)	82.3%	抽提法效率(粘土)	46.7%
5	热脱附效率	91.5%	氧化剂4.1mol/m ² 效率	75.4%	处理后pH	4.8

6 模拟方法的适用性与研究价值分析

6.1 模型结构的适应性与场地实际条件的耦合性

所采用模拟模型包含四层结构模块，包括土壤介质参数层、水动力运移层、污染物行为层及修复响应层，共计涉及输入参数 23 项。通过对该场地实测数据反演设置参数区间，砂层渗透系数设为 1.3×10⁻³cm/s，粘土层设为 4.2×10⁻³cm/s，孔隙度分布范围为 0.26 至 0.42，与现场钻探资料误差不超过 7%。污染物迁移路径与场地地下水等高线图吻合度达 89.6%，模型结构能够有效表达垂向非均质分布与污染物迁移边界动态变化。模型运行时间控制在每次 46 分钟以内，可进行批量情景模拟，具备良好的工程场景扩展能力。其结构适配性可支持场地不同阶段治理方案的演化迭代需求。

6.2 模拟结果与实测数据的吻合性与偏差来源

在 90 天模拟周期内模型输出污染物浓度值与 18 个监测井实测数据对比吻合率为 92.4%，最大偏差出现在浅层苯系物高浓度区域，偏差值为 9.7mg/kg。热脱附模拟中局部区域温度分布不均，导致污染物挥发率预测偏高约 15%。吸附—解吸过程模拟中采用线性模型简化处理，未完全反映复杂土壤颗粒界面效应。总体结果与实测数据呈良好耦合关系，偏差来源可通过修正边界条件与提高采样密度进一步优化。

6.3 模拟研究在风险管理与工程决策中的作用定位

模拟模型在污染风险识别中可提前标定高风险区域，污染物超标区预测精度达 91.2%，为场地分区管理提供依据。在修复技术选择中模型对比 5 种方案，在第 120 天时污染削减率差异最大达 36.8%，明确指出最优方案组合。对于工程实施阶段，模拟可用于预测修复边界突破风险与邻近地下水

源干扰范围，最大风险扩散距离为 17.4 米。在成本控制方面，通过模拟得出的最佳氧化剂投加区间为 3.2 至 3.8mol/m²，可降低投入成本约 18%。风险评估报告中模型结果被用于三次调整修复方案参数，提高方案科学性。该研究提升了场地修复的前期诊断精度与后期运行监控效率，在场地环境风险管控中具备核心决策支持价值。

7 结语

通过对某典型化工场地的土壤有机污染物迁移与修复过程开展系统模拟研究，可全面掌握污染物在不同时空尺度下的演化特征与响应规律。模拟结果不仅揭示了不同修复技术在实际工况下的适应性差异，也为关键参数的优化与治理路径的科学配置提供了数据支撑。模型与实测结果的高度吻合验证了方法的可行性与可靠性，增强了污染治理的预判能力与工程执行的精准性。本研究对推动污染场地修复从经验驱动向数据驱动转型具有现实指导意义和广泛应用前景。

参考文献

[1] 齐劭乾,张墨天,李建英,封梅青,王美丽,雒寒梦.基于元学习的土壤-地下水有机污染物迁移转化小样本分析[J].印染助剂,2025,42(04):57-61.

[2] 武路艳,卢聪,鱼涛,屈撑圉.土壤胶体对土壤中有机污染物迁移影响的研究进展[J].石油化工应用,2025,44(02):1-8.

[3] 寇诗棋,关卓,鲁旭阳,何杨,汪子微,张建强.土壤中微塑料迁移及其对有机污染物的影响研究进展[J].土壤,2024,56(03):457-470.

[4] 张帅.有机污染土壤热脱附和气相抽提修复效率预测模型[D].导师:朱利中.浙江大学,2024.