

## تأثیر نفوذپذیری و پخشیدگی مولکولی بر الگوی جریان همرفتی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار

مرضیه مال میر<sup>۱</sup>، مجید خلقی<sup>۲\*</sup>، حمیدرضا ناصری<sup>۳</sup>، عبدالحسین هورفر<sup>۴</sup>

۱. دانشجوی دکتری مهندسی منابع آب، دانشکده مهندسی و فناوری کشاورزی، پردیس کشاورزی و منابع طبیعی

دانشگاه تهران

۲. استاد، دانشکده مهندسی و فناوری کشاورزی، پردیس کشاورزی و منابع طبیعی دانشگاه تهران

۳. دانشیار، دانشکده علوم زمین، دانشگاه شهید بهشتی

۴. استاد، دانشکده مهندسی و فناوری کشاورزی، پردیس کشاورزی و منابع طبیعی دانشگاه تهران

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۳/۱۰/۲۳ - تاریخ تصویب: ۱۳۹۴/۱/۲۲)

### چکیده

تغییرات مکانی در چگالی سیال، نقش مهمی در حمل آلودگی ایفا می‌نماید. مطالعه و رفتارسنجی جریان و حمل املاح با چگالی متغیر در محیط‌های متخلخل درز و شکاف دار، به منظور درک پدیده‌هایی مثل حمل آلاینده‌هایی با چگالی بالا، ضروری است. در این مقاله، اثر نفوذپذیری به عنوان مشخصه‌ای از محیط متخلخل و پخشیدگی مولکولی به عنوان خصوصیتی از املاح بر روی جریان همرفتی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار، با استفاده از مدل‌سازی‌های عددی به وسیله مدل FRAC3DVS/HydroGeoSphere (HGS) مطالعه شده است. مدل مفهومی به صورت محیطی متخلخل دارای درز و شکاف‌های منظم عمودی و افقی در نظر گرفته شده است. چهار سناریوی مدل‌سازی با مقادیر متفاوت نفوذپذیری ماتریکس متخلخل و ضریب پخشیدگی مولکولی در نظر گرفته شد. نتایج، نشان دهنده الگوی‌های متفاوت گسترش املاح در سناریوهای مختلف می‌باشد، به صورتی که در سناریوی اول، سناریو با ضریب پخشیدگی مولکولی بالا، املاح به صورت متقارن از درز و شکاف‌ها به داخل ماتریکس متخلخل وارد می‌شود، و در سناریوی دوم، سناریو با ضریب پخشیدگی پایین، املاح به عمق بیشتری از محدوده مدل منتقل می‌شود و برخلاف جهت ورود آلاینده و از پایین به بالا از درز و شکاف به داخل ماتریکس متخلخل وارد می‌شود. در سناریوی سوم، با افزایش نفوذپذیری ماتریکس متخلخل، سرعت جریان افزایش می‌یابد و این امر منجر به جریان همرفتی بیشتری در داخل ماتریکس متخلخل می‌شود. افزایش بیشتر نفوذپذیری ماتریکس در سناریوی چهارم، به علت کاهش اختلاف بین نفوذپذیری ماتریکس و درز و شکاف، از تأثیر درز و شکاف بر روی الگوی جریان همرفتی می‌کاهد و الگوی جریان مشابه با محیط متخلخل همگن می‌شود.

**کلید واژگان:** محیط متخلخل درز و شکافدار، جریان و حمل املاح وابسته به چگالی، جریان همرفتی، مدل‌سازی عددی، مدل FRAC3DVS/HydroGeoSphere (HGS).

### مقدمه

حجم آب موجود در آبخوان‌هایی با سازندهای درز و شکافدار به‌عنوان یکی از ظرفیت‌های اصلی باقی‌مانده منابع آب زیرزمینی در برنامه‌ریزی آب کشور مطرح می‌باشد.

از طرف دیگر رشد جمعیت و صنعتی شدن شهرها و به موجب آن برداشت بیش از حد و افزایش ورود آلاینده‌های گوناگون به سفره‌های زیرزمینی، زمینه افزایش آلودگی آبخوان‌ها و مشکلات جدی در زمینه مسائل زیست‌محیطی مرتبط با آن‌ها را فراهم کرده است. لازم به ذکر است که گرادیان‌های چگالی سیال نیز نقش بسیار مؤثری در حمل املاح در سیستم‌های آب زیرزمینی ایفا می‌نمایند و بدین ترتیب در صورتی که غلظت ماده آلاینده تفاوت بیشتری با محیط پیرامون خود داشته باشد،

آبخوان‌های متشکل از سنگ‌های درز و شکافدار بخش قابل توجهی از آبخوان‌های شناخته شده دنیا را به خود اختصاص داده‌اند. با وجود آن که آبخوان‌های سازندی از ظرفیت آبدهی کمتری نسبت به آبخوان‌های آبرفتی برخوردار می‌باشند، اما فراوانی آن‌ها، ظرفیت هنگفت آن‌ها به عنوان منابع آبی با گستره جهانی را آشکار می‌سازد. در ایران نیز گسترش این نوع آبخوان‌ها در اکثر مناطق کشور قابل ملاحظه است و با توجه به افت شدید کمی و کیفی آبخوان‌های آبرفتی در سال‌های اخیر،

یک محیط متخلخل، گسترش توده‌های چگال را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد، به طوری که در ناهمگنی در هم ریخته، گرایش به سمت از بین رفتن همرفت به وسیله اختلاط و در نتیجه کاهش ناپایداری‌های توده آلاینده می‌باشد. در مدل‌سازی‌های عددی انجام شده توسط Simmons et al. (2001) شرایط رشد در مناطق قائم با نفوذپذیری بالا افزایش یافته است، به علت این که ساختارهای قائم مجاور با نفوذپذیری کم، میزان اختلاط افقی - انتشاری را محدود کرده‌اند. این نتایج به صورت آشکار نشان می‌دهند که هندسه مناطق با نفوذپذیری ناهمگن، عامل تعیین‌کننده‌ای در شروع، رشد و زوال جریان همرفتی آزاد می‌باشد.

Prasad and Simmons (2003) نیز نظرات Simmons et al. (2001) را تأیید کردند. آن‌ها شبیه‌سازی‌های عددی حمل

املاح وابسته به چگالی را در یک محیط متخلخل ناهمگن اجرا نمودند و دریافتند که افزایش حضور ساختارهای افقی با نفوذپذیری کم، جریان عمودی رو به بالا و رو به پایین سیال را کاهش داده و در نتیجه درجه ناپایداری را تنزل می‌دهد.

Nield and Simmons (2007) بحث جامعی را در مورد

موضوع همرفت آزاد در محیط‌های متخلخل ناهمگن، به ویژه محیط‌های دارای ناهمگنی‌های قائم (تغییر در جهت قائم) و افقی، ارائه داده‌اند و موضوعات بسیاری که دربرگیرنده بحث‌های مداوم در زمینه به‌کارگیری عدد رایلی (معیار عددی معرف ظهور ناپایداری که دربخش بعد معرفی شده است) در محیط‌های متخلخل ناهمگن می‌باشند، را روشن کرده‌اند. در این تحقیق ناهمگنی‌ها به دو دسته ناهمگنی خفیف و شدید تقسیم شده است (میزان تغییر در مقدار پارامترهایی مثل نفوذپذیری در مقایسه با مقدار میانگین، تعیین کننده خفیف یا شدید بودن ناهمگنی می‌باشد). آن‌ها نتیجه‌گیری کردند که ناهمگنی خفیف نقش تأثیرگذاری بر مقدار بحرانی عدد رایلی (که بر حسب خصوصیات میانگین تعریف شده است) ندارد، هم‌چنین در این نوع از ناهمگنی تفاوت چشم‌گیری بین اثرات ناهمگنی قائم و افقی نمی‌باشد. در مورد ناهمگنی شدید، آن‌ها معیاری را برای شرط شروع فرآیند همرفت آزاد ارائه داده‌اند.

به منظور صحت‌سنجی توسعه تحلیل‌های سنتی بر مبنای عدد رایلی، مراحل ارزیابی قابلیت کاربرد عدد رایلی میانگین به عنوان معیاری برای شروع همرفت در مجموعه تحقیقاتی شامل Kuznetsov و Neild and Kuznetsov (2007 a, b, c, d, 2008) and Neild (2008) انجام گرفته است. این محققین اثرات ترکیبی ناهمگنی خفیف قائم و افقی را در حالت دو بعدی بررسی کرده‌اند. در همین راستا، در زمینه ناهمگنی شدید نیز

محیط متخلخل به مراتب آلوده‌تر خواهد شد، که لزوم توجه به این پدیده را ضروری می‌نماید.

در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار لزوم توجه به جلوگیری از گسترش آلودگی دو چندان می‌شود، زیرا از یک طرف درز و شکاف‌های موجود در محیط به علت نفوذپذیری بسیار بالا نقش بسیار مؤثری در گسترش و پخش آلودگی دارند و از طرف دیگر در صورت آلوده شدن محیط، امکان پالایش و رفع آلودگی از ماتریکس متخلخل، به علت نفوذپذیری پایین آن، به شدت کاهش می‌یابد. بنابراین به دلیل حساسیت بسیار بالای آبخوان‌های متشکل از محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار در برابر آلودگی، مدیریت صحیح کمی و کیفی این آبخوان‌ها از اهمیت بسیار قابل توجهی برخوردار می‌باشد.

در این راستا، پس از شناخت خصوصیات زمین‌شناختی آبخوان‌های متشکل از محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار، اولین اقدام به منظور مدیریت کمی و کیفی مناسب این آبخوان‌ها، آگاهی از چگونگی گسترش جریان و حمل املاح در آن‌ها است.

در قرن گذشته، مدل‌سازی جریان و حمل املاح وابسته به چگالی توسط Rayleigh (1916) پایه‌ریزی شد. او اصول حاکم بر شروع ناپایداری‌هایی که به وسیله تغییرات چگالی سیال در اثر اختلاف دما، در محیط متخلخل ایجاد می‌شود را به صورت ریاضی فرمول‌بندی نمود. پس از آن، تحقیقات مختلف و گوناگونی در زمینه مدل‌سازی جریان و حمل املاح به صورت آزمایشگاهی و عددی در محیط‌های متخلخل همگن صورت پذیرفت. Diersch and Kolditz (2002) با مرور این مدل‌ها بحث جامعی را ارائه نموده‌اند.

در زمینه محیط‌های متخلخل ناهمگن، Schincariol and Schwartz (1990) پیشگامان تحقیقات آزمایشگاهی جریان و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های لایه‌بندی شده و عدسی‌وار بوده‌اند. آن‌ها دریافتند که (۱) الگوی حمل املاح در لایه‌ها نسبت به هدایت هیدرولیکی، به شدت حساس می‌باشد و (۲) ناهمگنی در محیط عدسی‌وار، انتشار نسبتاً بزرگی را ایجاد می‌کند که موجب از بین رفتن ناپایداری‌ها می‌شود.

Schincariol et al. (1997) و Schincariol (1998) نتیجه‌گیری کردند که ناهمگنی نقش‌های متضادی را در تولید و رشد ثانویه ناپایداری ایفا می‌نماید. از یک سو، ناهمگنی در ابتدا یک توده آلاینده را آشفته می‌سازد، در حالی که از سوی دیگر، وقتی که ناپایداری به وجود آمد، ناهمگنی افزایش آن را احتمالاً در تمامی مقیاس‌های مکانی، کاهش می‌دهد. Simmons et al. (2001) نشان دادند که نوع ناهمگنی در

چگونگی ساختار آن‌ها می‌تواند جریان همرفتی را کاهش یا افزایش دهد.

در اکثر تحقیقات ذکر شده، از عدد رایلی به عنوان معیاری تنها برای ظهور ناپایداری استفاده شده است و الگوی جریان همرفتی مورد بررسی قرار نگرفته است. در این تحقیق، این فرضیه مطرح می‌شود که خصوصیات محیط متخلخل درز و شکاف‌دار و هم‌چنین املاح در نظر گرفته شده به عنوان دو عامل از عوامل تأثیرگذار در عدد رایلی، می‌تواند الگوی جریان را تحت تأثیر قرار دهد. در واقع، این پرسش مطرح می‌شود که تأثیر خصوصیات ماتریکس متخلخل و املاح در الگوی جریان همرفتی چگونه است. در این مقاله، به منظور پاسخ به این پرسش، تأثیر نفوذپذیری ماتریکس متخلخل به عنوان یک مشخصه از ماتریکس متخلخل، و ضریب پخشیدگی مولکولی به عنوان مشخصه‌ای از املاح مورد بررسی قرار گرفته است.

### مواد و روش‌ها

الف) معادلات حاکم بر جریان و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار

در مدل‌سازی جریان و حمل املاح در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار، سه رویکرد اصلی شامل محیط متخلخل معادل (Equivalent Porous Medium- EPM)، پیوستار چندگانه (Multi- Continuum) مثل مدل‌های تخلخل دوگانه (Dual- DP (Porosity- و مدل‌های گسسته درز و شکاف و ماتریکس (Discrete Fracture Matrix- DFM)، وجود دارد. مدل‌های EPM و DP نسبت به DFM، دارای محدودیت‌هایی در پیش‌بینی حمل املاح می‌باشند و با تغییر شرایط به واسنجی مجدد نیازمند می‌باشند (Blessent et al., 2014). بنابراین بهتر است در مدل‌سازی حمل املاح در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار، از رویکرد DFM استفاده نمود. در ادامه معادلات حاکم بر جریان و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار در قالب رویکرد DFM تشریح گردیده است.

جریان سیال و حمل املاح وابسته به چگالی به ترتیب به وسیله دو معادله ذیل شرح داده می‌شوند (Therrien et al., 2009):

$$\frac{\partial(\phi\rho)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\phi\rho\mathbf{v}) \pm \Gamma_{\text{fluid}} \quad (\text{رابطه ۱})$$

$$\frac{\partial(\phi C)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \pm \Gamma_{\text{solute}} \quad (\text{رابطه ۲})$$

که در آن  $\phi$  (بدون بعد) تخلخل ماتریکس،  $\rho$  [ML<sup>-3</sup>] چگالی سیال،  $\mathbf{v}$  [LT<sup>-1</sup>] بردار سرعت میانگین سیال،  $C$  [ML<sup>-3</sup>] غلظت املاح،  $t$  [T] زمان،  $\nabla$  [L<sup>-1</sup>] عملگر دیورژانس و  $\mathbf{J}$  [ML<sup>-2</sup>T<sup>-1</sup>]

تحقیقاتی توسط (Nield et al., 2009) و (Kuznetsov et al., 2010) و (Neild et al., 2010) انجام شده است.

(Post and Simmons 2010) با استفاده از آزمایشات مخزن شنی و مدل‌های عددی، فرآیندهای انتقال املاح مربوط به همرفت آزاد را در لایه‌هایی گسسته با نفوذپذیری کم مورد بررسی قرار داده‌اند و به این ترتیب در مورد نقش هندسه محیط متخلخل تحقیق نموده‌اند. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که دو فرآیند همرفت آزاد در مقیاس‌های متفاوت مکانی و زمانی اتفاق می‌افتد، در مناطق دارای نفوذپذیری بالا، فرآیند شوری سریع بوده و عمدتاً به وسیله جریان همرفتی آزاد در پیرامون بلوک‌های دارای نفوذپذیری پایین اتفاق می‌افتد (همرفت میان لایه‌ای، Inter-layer convection). هم‌چنین میدان همرفتی آزادی نیز به صورت هم‌زمان در عدسی‌های دارای نفوذپذیری پایین ایجاد می‌شود (همرفت درون لایه‌ای، Intra-layer convection). این بررسی‌ها بیان می‌کنند که جریان وابسته به چگالی در چنین محیط‌هایی تابع پیچیده‌ای از هندسه توزیع نفوذپذیری و تفاوت نفوذپذیری بین مناطق دارای نفوذپذیری بالا و پایین می‌باشد.

(Shikaze et al., 1998) اولین محققینی هستند که جریان و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های با درز و شکاف گسسته را به صورت عددی شبیه‌سازی کرده‌اند. آن‌ها دریافتند که وجود درز و شکاف‌های قائم حتی با بازشدگی به مقدار اندک ۵۰ میکرومتر حمل آلودگی را نسبت به موردی که درز و شکافی وجود ندارد، به صورت معنی‌داری افزایش می‌دهد. هم‌چنین نشان داده شده است که توده‌های چگال املاح ممکن است به شکلی بسیار نامنظم توسعه یابند به صورتی که پیش‌بینی آن‌ها بسیار مشکل باشد.

(Graf 2005) در تحقیق دکتری خود مدل عددی FRAC3DVS/HydroGeoSphere را به منظور حل جریان و حمل املاح چگالی متغیر در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار اصلاح کرده است. مجموعه مدل‌سازی‌های عددی و نتایج تحقیقات ایشان در (Graf and Therrien 2005, 2007 a, b, 2008 a, b, 2009) آمده است.

(Simmons et al., 2008) انواع همرفت آزاد را در لایه‌ای درز و شکاف‌دار با نفوذپذیری کم در نظر گرفتند و نشان دادند که وجود درز و شکاف‌های گسسته، نقش تعیین‌کننده‌ای در کنترل شرایط شروع همرفت آزاد دارد.

(Vujevic et al., 2014) تأثیر ساختار هندسی درز و شکاف‌ها را بر جریان همرفتی مورد بررسی قرار داده‌اند. نتایج تحقیق ایشان نشان می‌دهد وجود درز و شکاف‌ها بر حسب

### ب) مدل FRAC3DVS/HydroGeoSphere

مدل FRAC3DVS/HydroGeoSphere مدل عددی سه بعدی جریان آب زیرزمینی و حمل املاح چند جزئی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار در شرایط اشباع و غیر اشباع است که توسط Graf (2005) به منظور حل جریان و حمل املاح چگالی متغیر اصلاح شده است. مدل FRAC3DVS در حال حاضر تنها مدل مطرح در مدل‌سازی جریان‌های وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار با استفاده از مدل‌های گسسته درز و شکاف و ماتریکس (Discrete Fracture Matrix - DFM) می‌باشد و به این علت مورد استفاده قرار گرفته است. این مدل در زمینه مدل‌سازی جریان‌های وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار دارای محدودیت‌های اندکی است. از آن جمله در نظر نگرفتن تغییرات لزجت دینامیکی با تغییر چگالی سیال، و برخی از محدودیت‌ها در اعمال شرایط مرزی می‌باشد.

در این مدل، از روش اجزاء محدود به منظور گسسته‌سازی مکانی معادلات جریان و حمل املاح استفاده می‌شود. ماتریکس متخلخل دارای نفوذپذیری کم با بلوک‌های سه بعدی منظم و درز و شکاف‌های دارای نفوذپذیری زیاد با صفحات مستطیلی دو بعدی نمایش داده می‌شوند. معادلات جریان و حمل املاح برای ماتریکس متخلخل و درز و شکاف‌ها حل می‌شوند. حل مذکور، پدیده‌های انتقال، پخشیدگی مولکولی و انتشار مکانیکی در درز و شکاف‌ها و ماتریکس را نیز در بر می‌گیرد.

درز و شکاف‌های دو بعدی قائم، افقی و مایل به وسیله اضافه شدن اجزاء شکاف‌های دو بعدی به اجزاء بلوکی منظم سه بعدی، در داخل شبکه‌ای سه بعدی جای داده می‌شوند. سطوح درز و شکاف و بلوک‌های ماتریکس در طول دیواره‌های درز و شکاف دارای گره‌های مشترکی می‌باشند. در نتیجه گره‌های واقع بر مکان‌های درز و شکاف‌ها، سهم‌های سیال و جرم را هم از اجزای بلوک و هم از سطوح درز و شکاف دریافت می‌نمایند. به علاوه، برای این گره‌های دو طرفه، ارتفاع هیدرولیکی و غلظت در سطح مشترک درز و شکاف/ماتریکس، به منظور اطمینان از پیوستگی این متغیرها بین درز و شکاف‌ها و ماتریکس، یکسان در نظر گرفته می‌شود.

معادلات جریان و حمل املاح وابسته به چگالی به هم متصل می‌باشند. تغییرات کوچک چگالی موجب اندکی غیر خطی شدن معادله جریان می‌شود. در مدل عددی، معادلات جریان و حمل املاح با رویکرد تکراری ترتیبی (Sequential iterative approach) (SIA) که تکرار پیکارد (Picard) نیز نامیده می‌شود، متصل شده‌اند. این رویکرد در طول هر گام

شار جرمی املاح یعنی مجموع شارهای جرمی انتقالی و انتشاری- پخشیده می‌باشد. ورودی و خروجی سیال و جرم املاح به ترتیب با  $\Gamma_{fluid}$  و  $\Gamma_{solu}$  [ $ML^{-3}T^{-1}$ ] نمایش داده شده‌اند.

به منظور مدل‌سازی جریان سیال و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکافدار، می‌توان از ارتفاع آب شیرین معادل،  $h_0$  [L]، که به صورت زیر تعریف می‌شود، استفاده کرد:

$$h_0 = \frac{P}{\rho_0 g} + z \quad (\text{رابطه ۳})$$

که در آن  $P$  [ $ML^{-1}T^{-2}$ ] فشار دینامیک سیال،  $\rho_0$  [ $ML^{-3}$ ] چگالی سیال مرجع،  $g$  [ $LT^{-2}$ ] شتاب گرانشی و  $z$  [L] ارتفاع از سطح مبنا می‌باشد. با استفاده از ارتفاع آب شیرین معادل، شار داری،  $q = \phi v$  [ $LT^{-1}$ ]، در محیط‌های متخلخل و درز و شکافدار به شکل عددی (اسکالر)، به صورت ذیل بیان می‌شود:

$$q_i = -K_{ij}^0 \left( \frac{\partial h_0}{\partial x_j} + \gamma c \eta_j \right), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (\text{رابطه ۴})$$

$$q_i^{fr} = -K_0^{fr} \left( \frac{\partial h_0}{\partial x_j} + \gamma c \eta_j \cos \phi \right), \quad i, j = 1, 2 \quad (\text{رابطه ۵})$$

که در آن  $\phi$  شیب درز و شکاف می‌باشد، به طوری که  $\phi = 0^\circ$  معرف درز و شکافی قائم و  $\phi = 90^\circ$  معرف درز و شکافی افقی است. با فرض ثابت بودن لزجت سیال، هدایت هیدرولیکی آب شیرین در دو محیط،  $K_{ij}^0$  و  $K_0^{fr}$  [ $LT^{-1}$ ]، به صورت ذیل شرح داده می‌شود:

$$K_{ij}^0 = \frac{k_{ij} \rho_0 g}{\mu} \quad (\text{رابطه ۶})$$

$$K_0^{fr} = \frac{(2b)^2 \rho_0 g}{12\mu} \quad (\text{رابطه ۷})$$

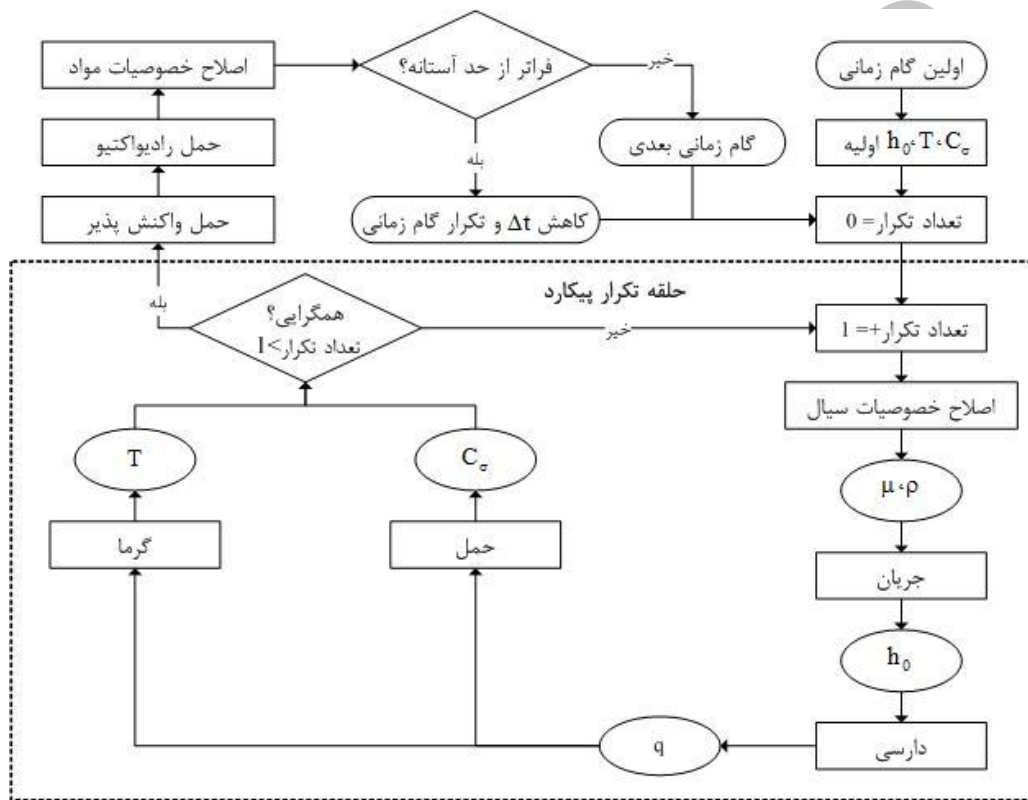
که در آن  $k_{ij}$  [ $L^2$ ] نفوذپذیری ماتریکس،  $g$  [ $LT^{-2}$ ] شتاب گرانشی،  $\mu$  [ $ML^{-1}T^{-1}$ ] لزجت سیال و  $(2b)$  [L] میزان بازشدگی درز و شکاف است. غلظت نسبی بدون بعد،  $c = C/C_{max}$ ، برای چگالی‌های  $\rho$  [ $ML^{-3}$ ] که بین  $\rho_0$  (آب شیرین) و  $\rho_{max}$  (آب شور) تغییر می‌کند، بین صفر و یک متغیر است. جهت جریان با  $\eta_j$  [-] نمایش داده شده است، به صورتی که  $\eta_j = 0$  معرف جهت افقی است در حالی که  $\eta_j = 1$  معرف جهت غیر افقی (قائم و مایل) می‌باشد. مقدار ثابت بدون بعد  $\gamma$  حداکثر چگالی نسبی سیال است و به صورت ذیل بیان می‌شود:

$$\gamma = \frac{\rho_{max}}{\rho_0} - 1 \quad (\text{رابطه ۸})$$

دیگر، خصوصیات سیال پس از هر تکرار در حلقه پیکارد اصلاح می‌شود، در حالی که خصوصیات مواد به جای هر تکرار، پس از هر گام زمانی اصلاح می‌شود (شکل ۱). فرآیند محاسبه مجدد پارامترهای مواد در انتهای هر گام زمانی، تقریب حالت شبه پایدار (Quasi-stationary state approximation) نامیده می‌شود. استفاده از میزان واکنش در سطح زمانی  $L+1$  (شمای وزن دهی ضمنی زمانی، Implicit time weighting scheme) به منظور تجدید تمامی پارامترهای مدل، پایداری عددی را تضمین می‌نماید (Graf, 2005).

زمانی، دو معادله حاکم را به صورت متناوب، تا دستیابی به همگرایی حل می‌کند (شکل ۱).

در جریان و حمل املاح واکنش‌پذیر، انحلال و رسوب مواد معدنی تأثیری مستقیم بر نوع خصوصیات مواد در طول فرآیند شبیه‌سازی دارد. تغییر در تخلخل و میزان بازشدگی درز و شکافها بر سطوح فعال و به دنبال آن میزان واکنش مؤثر است. تغییر چنین پارامترهایی به صورت ذاتی با جریان، انتقال حرارت، و حمل املاح نیز مرتبط می‌باشند. اما این تغییرات بسیار آهسته‌تر از غلظت املاح در سیال اتفاق می‌افتد. بنابراین در مدل عددی FRAC3DVS، مشابه با مدل‌های ژئوشیمیایی



شکل ۱- روند نمای تکرار پیکارد (Graf, 2005)

نفوذپذیری محیط متخلخل،  $H$  [L] ارتفاع محدوده،  $n$  [-] تخلخل،  $\tau$  [-] پیچاپیچی (Tortuosity) محیط متخلخل،  $D_0$  [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>] ضریب پخش مولکولی در محلول (Free-solution diffusion coefficient)، و  $\mu$  [MT<sup>-1</sup>L<sup>-1</sup>] لزجت دینامیکی سیال می‌باشد.

(د) مدل مفهومی

محدوده‌ای که به منظور مدل‌سازی در نظر گرفته شده است، برشی عمودی و دو بعدی از یک محیط متخلخل درز و شکافدار با طول‌های ۱۴۰ و ۱۰۰ متر به ترتیب در راستای  $x$  و  $z$  می‌باشد، که درز و شکاف‌های عمودی و افقی به فاصله دو

(ج) عدد رایلی (Rayleigh number)

عدد بی بعد رایلی برابر با نسبت نیروی شناوری به پخشیدگی (Diffusion) است. نیروی شناوری، همرفت آزاد را تشدید و پخشیدگی، آن را کاهش می‌دهد. مقادیر بالای عدد رایلی، معرف ناپایداری و همرفتی بودن جریان می‌باشد. این عدد به صورت ذیل تعریف می‌شود.

$$Ra = \frac{(\rho_2 - \rho_1)gkH}{n\tau D_0 \mu} \quad \text{(رابطه ۹)}$$

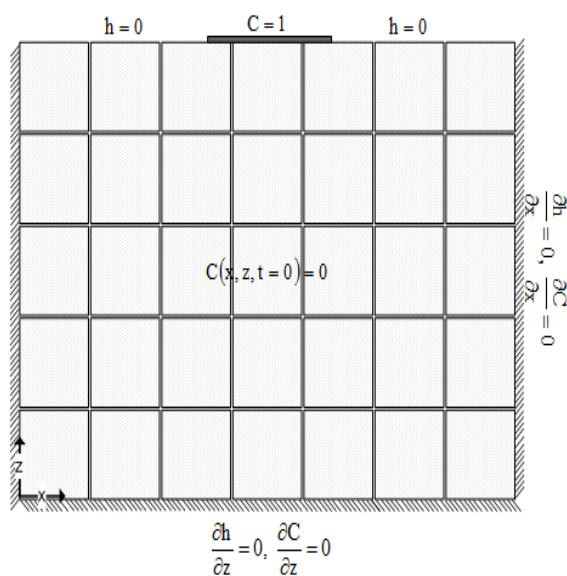
که در آن،  $\rho_1$  و  $\rho_2$  [ML<sup>-3</sup>] به ترتیب بیشترین و کمترین چگالی سیال در محیط،  $g$  [LT<sup>-2</sup>] شتاب جاذبه،  $k$  [L<sup>2</sup>]

می‌باشد و برای بکارگیری در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار بایستی اصلاح شود. به این منظور، مقدار ثابت نفوذپذیری محیط متخلخل در عدد رایلی، برای محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار، معمولاً به صورت نفوذپذیری حجمی معادل در نظر گرفته می‌شود. در این مقاله، نفوذپذیری حجمی معادل در محیط متخلخل درز و شکاف‌دار، به این ترتیب استخراج شده است که ابتدا با توجه به میزان بازشدگی درز و شکاف، نفوذپذیری معادل آن از رابطه ۷ بدست آمده است و سپس هر درز و شکاف با محیط متخلخل همگن و یکنواخت معادلی، به همان صورتی که در شکل ۲ آورده شده است، جایگزین شده است. پس از آن، از میانگین حسابی برای محاسبه نفوذپذیری در جهت جریان و میانگین همساز (هارمونیک) در جهت عمود بر جریان استفاده شده است و به این ترتیب میانگین نفوذپذیری حجمی معادل محیط متخلخل درز و شکاف‌دار بر حسب نفوذپذیری ماتریکس متخلخل و میزان بازشدگی درز و شکاف، به منظور بکارگیری آن در عدد رایلی بدست آمده است.

سناریوی یک به عنوان سناریوی پایه در نظر گرفته شده است. در سناریوی دو، مقدار ضریب پخشیدگی مولکولی در محلول ده برابر کاهش یافته است و به دنبال آن عدد رایلی نسبت به سناریوی یک، ده برابر افزایش یافته است. در سناریوی سه، میزان نفوذپذیری ماتریکس متخلخل ده برابر مقدار آن در سناریوی یک است و عدد رایلی در صورتی که با نفوذپذیری ماتریکس متخلخل محاسبه شود، ده برابر مقدار آن در سناریوی یک و برابر با مقدار آن در سناریوی دو می‌باشد. در سناریوی چهارم، میزان نفوذپذیری ماتریکس متخلخل به گونه‌ای در نظر گرفته شده است که نفوذپذیری معادل محیط متخلخل درز و شکاف‌دار، ده برابر میزان آن در سناریوی دوم باشد. در نتیجه با در نظر گرفتن اختلاف ده برابری ضریب پخشیدگی مولکولی در این دو سناریو، مقادیر عدد رایلی آن‌ها با لحاظ نمودن نفوذپذیری معادل محیط متخلخل درز و شکاف‌دار یکسان است. مدت شبیه‌سازی در تمامی سناریوها، ۱۰ سال و اندازه گام زمانی برابر با مقدار ثابت یک ماه در نظر گرفته شده است. ابعاد سلول‌های مدل‌سازی نیز با توجه به معیار گسسته‌سازی برای شبیه‌سازی جریان همرفتی آزاد (Kooi et al. 2000) برابر با ۰/۰۵ متر در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است نتایج مدل‌سازی با استفاده از این ابعاد سلول، مستقل از شبکه (Grid independent) است، به گونه‌ای که در نتایج حاصل از آن در مقایسه با نتایج مدل‌سازی با ابعاد سلول کوچک‌تر، تغییرات محسوسی در کل محدوده مدل مشاهده نشده است.

متری از هم در آن قرار گرفته‌اند (شکل ۲). همگی مرزهای محدوده مدل‌سازی به جز مرز بالایی نسبت به جریان و حمل املاح نفوذناپذیر می‌باشند (شرط مرزی نیومن) و در مرز بالایی ارتفاع هیدرولیکی ثابت و برابر با صفر در نظر گرفته شده است و در وسط آن به فاصله پنج و نیم متری از کناره‌ها، املاح با حداکثر غلظت نسبی بر روی محیط متخلخل قرار گرفته است (شرط مرزی دیریکله). ارتفاع هیدرولیکی و غلظت نسبی املاح نیز در زمان شروع مدل‌سازی برابر صفر در نظر گرفته شده‌اند. به این ترتیب، شیب هیدرولیکی در محدوده مدل برابر صفر می‌باشد و در نتیجه جریان همرفتی اجباری ناشی از اختلاف ارتفاع هیدرولیکی حذف می‌شود، و در نتیجه حمل املاح تنها در اثر همرفت آزاد ناشی از تغییرات مکانی و زمانی چگالی انجام می‌پذیرد.

کل محدوده مدل، اشباع و ماتریس متخلخل، همگن و یکنواخت فرض شده است.



شکل ۲- مدل مفهومی محیط متخلخل درز و شکاف‌دار، شرایط مرزی و اولیه

### ه) سناریوهای مدل‌سازی

به منظور بررسی تأثیر نفوذپذیری ماتریکس متخلخل و پخشیدگی مولکولی سیال بر الگوی جریان همرفتی، چهار سناریوی مدل‌سازی در نظر گرفته شده است. تفاوت سناریوها در مقادیر نفوذپذیری ماتریکس و پخشیدگی مولکولی است و بقیه مقادیر ثابت مدل عددی در همه سناریوها یکسان در نظر گرفته شده است. این مقادیر در سناریوی یک منطبق بر Shikaze et al. (1998) است و در جدول ۱ آورده شده است. به منظور مقایسه این سناریوها از عدد رایلی استفاده شده است.

لازم به ذکر است، طبق Vujevic et al. (2014) عدد رایلی تنها برای محیط‌های همگن و یکنواخت قابل کاربرد

جدول ۱- مقادیر ثابت مورد استفاده در سناریوهای مدل سازی

| ۱۰ m  |                                     |                                      |                                     | ارتفاع محدوده مدل سازی (H)                            |
|---|-------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------|---|
| $9/81 \text{ ms}^{-2}$                                |                                     |                                      |                                     | شتاب جاذبه (g)  |
| $1/1 \times 10^{-7} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ |                                     |                                      |                                     | لزجت دینامیکی سیال ( $\mu$ )                          |
| $1200 \text{ kg m}^{-2}$                              |                                     |                                      |                                     | چگالی حداکثر سیال ( $\rho_{\max}$ )                   |
| $1000 \text{ kg m}^{-2}$                              |                                     |                                      |                                     | چگالی مرجع سیال ( $\rho_0$ )                          |
| ۱   |                                     |                                      |                                     | غلظت نسبی حداکثر سیال ( $C_{\max}$ )                  |
| ۰/۳۵  |                                     |                                      |                                     | تخلخل ماتریکس متخلخل (n)                              |
| ۰/۱   |                                     |                                      |                                     | پسچاپیجی ماتریکس متخلخل ( $\tau$ )                    |
| ۰/۱ m   |                                     |                                      |                                     | انتشارپذیری طولی ( $\alpha_L$ )                       |
| ۰/۰۰۵ m   |                                     |                                      |                                     | انتشارپذیری عرضی ( $\alpha_T$ )                       |
| $50 \mu\text{m}$                                      |                                     |                                      |                                     | میزان بازشدگی درز و شکاف ( $\gamma_b$ )               |
| سناریوی چهار  | سناریوی سه                          | سناریوی دو                           | سناریوی یک                          | سناریوهای مدل سازی                                    |
| $5 \times 10^{-9} \text{ m s}^{-2}$                   | $5 \times 10^{-9} \text{ m s}^{-2}$ | $5 \times 10^{-10} \text{ m s}^{-2}$ | $5 \times 10^{-9} \text{ m s}^{-2}$ | ضریب پخشیدگی مولکولی در محلول ( $D_0$ )               |
| $4/87 \times 10^{-14} \text{ m}^2$                    | $10^{-14} \text{ m}^2$              | $10^{-15} \text{ m}^2$               | $10^{-15} \text{ m}^2$              | نفوذپذیری ماتریکس متخلخل ( $k_m$ )                    |
| $5/31 \times 10^{-14} \text{ m}^2$                    | $1/43 \times 10^{-14} \text{ m}^2$  | $5/31 \times 10^{-15} \text{ m}^2$   | $5/31 \times 10^{-15} \text{ m}^2$  | نفوذپذیری معادل محیط متخلخل درز و شکاف دار ( $k_b$ )  |
| ۴۹۵۸/۶۳   | ۱۰۱۸/۲۰                             | ۱۰۱۸/۲۰                              | ۱۰۱/۸۲                              | عدد رایلی- نفوذپذیری ماتریکس متخلخل                   |
| ۵۴۱۰/۰۰۰  | ۱۴۵۷/۵۲                             | ۵۴۱۰/۰۰                              | ۵۴۱/۰۰                              | عدد رایلی- نفوذپذیری معادل محیط متخلخل درز و شکاف دار |

## نتایج

نتایج حاصل از مدل سازی عددی سناریوهای معرفی شده در پایان سال های دوم، پنجم، و دهم مدل سازی، در شکل های ۳ الی ۶ آورده شده است.

در سناریوی اول، ابتدا املاح به دو درز و شکاف عمودی میانی محدوده مدل وارد می شود و با رسیدن به اولین درز و شکاف های افقی در آن ها پخش می شود. با گذشت زمان، املاح هم در راستای عمودی و هم افقی در درز و شکاف های میانی محیط پخش می شوند و کم کم به داخل ماتریکس متخلخل در راستای عمود بر درز و شکاف به صورت تقریباً متقارن پخش می شوند. در این سناریو، بیشترین غلظت املاح در نزدیکی مرز بالایی و همان قسمت ورودی املاح می باشد.

در سناریوی دوم، املاح با سرعت بیشتری در داخل درز و شکاف های عمودی و افقی حرکت می کنند، اما سرعت پخش املاح کمتر می باشد. به گونه ای که نسبت به سناریوی اول، سرعت حرکت در درز و شکاف ها بیشتر و سرعت پخش در ماتریکس متخلخل کمتر می باشد. در این سناریو، املاح در مدت زمان کمتری به مرز پایینی محیط می رسند. حرکت املاح از درز و شکاف به ماتریکس متخلخل نیز غیر متقارن و عمدتاً از درز و شکاف به سمت ماتریکس بالایی می باشد. هم چنین با

گذشت زمان، غلظت در نیمه پایینی محدوده مدل بیشتر از نیمه بالایی می شود.

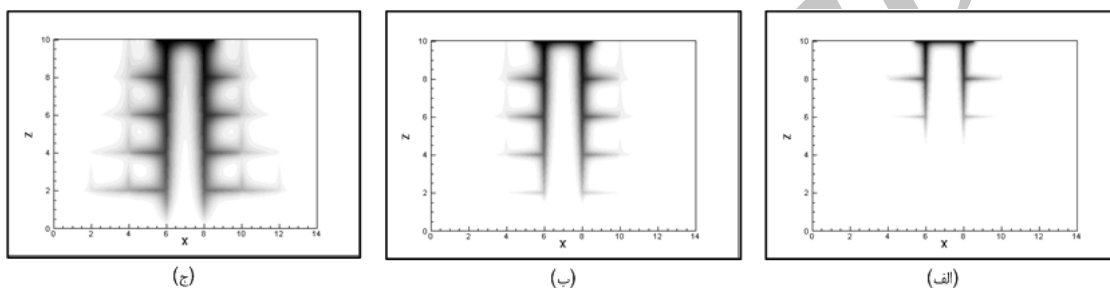
در سناریوی سوم، املاح عمدتاً به موازات دو درز و شکاف عمودی میانی مدل از بالا به پایین منتقل می شوند و با رسیدن به درز های افقی در آن ها پخش می شوند، سرعت پخش در درز و شکاف ها تقریباً مشابه با سناریوی یک می باشد، اما مقدار املاح منتقل شده به داخل ماتریکس ها به صورت چشم گیری از سناریوی یک و دو بیشتر است.

در سناریوی چهارم، با افزایش نفوذپذیری ماتریکس متخلخل، نقش درز و شکاف ها در حمل املاح کاهش یافته است، اما هم چنان نفوذپذیری آن ها از ماتریکس متخلخل بیشتر است. املاح از دو طرف انتهایی منبع خطی آلاینده، به صورت شاخه ای وارد محیط می شود و با رسیدن به مرز پایینی به موازات آن حرکت می کند و جریان همرفتی رو به بالایی تشکیل می دهد. به این ترتیب دو حلقه همرفتی در محیط قابل شناسایی می باشد. در این سناریو، مقدار املاح منتقل شده به مراتب از تمامی سناریوهای دیگر بیشتر است.

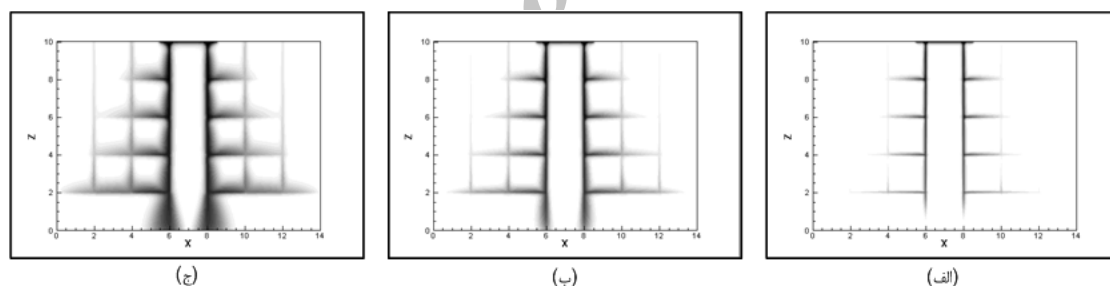
در مقایسه سناریوی اول و دوم می توان این گونه نتیجه گیری نمود که در سناریوی اول پخشیدگی مولکولی، به علت بالا بودن ضریب پخشیدگی مولکولی، نقش مهمی در حمل املاح از درز و شکاف به داخل ماتریکس متخلخل ایفا نموده

شکاف افقی به داخل ماتریکس‌های مجاور دو امکان شامل حرکت به سمت ماتریکس بالایی و پایینی وجود دارد، اما ترجیح جریان بیشتر به سمت ماتریکس بالایی می‌باشد. چون در این صورت، سیال چگال در هر ماتریکس در زیر سیالی با چگالی کمتر قرار می‌گیرد، اما در صورتی که املاح به سمت ماتریکس پایینی حرکت کنند، سیال چگال در هر ماتریکس، بالای سیالی با چگالی کمتر واقع می‌شود. این نوع قرارگیری دو سیال، حالتی ناپایدار می‌باشد، در صورتی که در هر سامانه ناپایدار تمایل به سمت پایدار است. بنابراین در حرکت املاح به داخل ماتریکس‌های مجاور، انتقال به سمت ماتریکس بالایی حالتی ارجح می‌باشد.

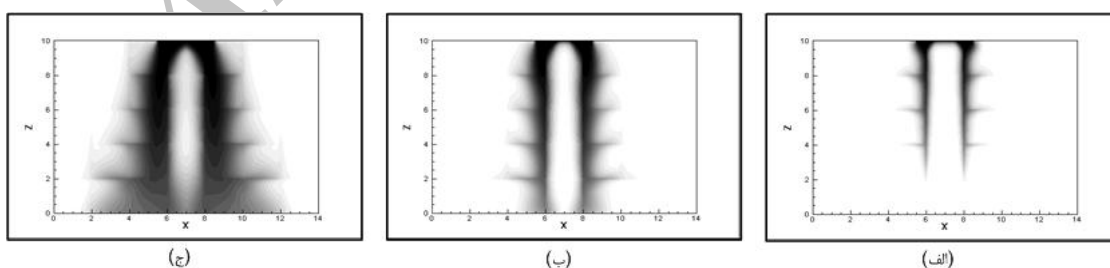
است و در نتیجه املاح تقریباً به صورت متقارن به ماتریکس‌های مجاور بالایی و پایینی وارد شده‌اند. اما در سناریوی دوم میزان پخشیدگی مولکولی کم بوده است و در نتیجه مقدار کمتری از املاح از درز و شکاف به ماتریکس‌های مجاور بر اثر پخشیدگی مولکولی نفوذ کرده است و غلظت املاح در درز و شکاف‌ها بیشتر بوده است. در نتیجه اختلاف چگالی بین سیال موجود در درز و شکاف‌ها و ماتریکس‌های مجاور هر درز و شکاف بیشتر بوده است. بنابراین، نیروی شناوری ناشی از اختلاف چگالی تأثیر بیشتری بر حمل املاح داشته است. همان‌طور که قبلاً نیز اشاره شد، در اثر نیروی شناوری املاح از درز و شکاف عمده‌تاً به سمت ماتریکس بالایی حرکت کرده است. این پدیده را این چنین می‌توان توجیه نمود که در انتقال املاح موجود در یک درز و



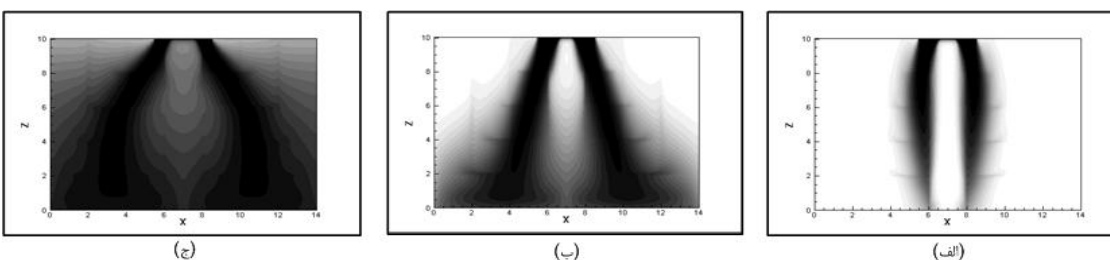
شکل ۳- سناریوی یک مدل سازی - چگونگی توزیع املاح پس از الف) دو سال، ب) پنج سال، و ج) ده سال



شکل ۴- سناریوی دو مدل سازی - چگونگی توزیع املاح پس از الف) دو سال، ب) پنج سال، و ج) ده سال



شکل ۵- سناریوی سه مدل سازی - چگونگی توزیع املاح پس از الف) دو سال، ب) پنج سال، و ج) ده سال



شکل ۶- سناریوی چهار مدل سازی - چگونگی توزیع املاح پس از الف) دو سال، ب) پنج سال، و ج) ده سال



## نتیجه گیری

نفوذپذیری ماتریکس متخلخل و ضریب پخشیدگی مولکولی، اثرات متفاوتی در الگوی جریان همرفتی دارند.

در سناریوی اول، املاح از درز و شکاف به داخل ماتریکس متخلخل در راستای عمود بر درز و شکاف به صورت تقریباً متقارن پخش می‌شوند. در حالی که در سناریوی دوم، حرکت املاح از درز و شکاف به سمت ماتریکس غیر متقارن و عمدتاً از درز و شکاف به سمت ماتریکس بالایی می‌باشد. این الگوی جریان همرفتی، تاکنون در مقالات مربوط به جریان وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار گزارش نشده است. بالا بودن ضریب پخشیدگی در سناریوی اول، منجر به افزایش پخشیدگی از درز و شکاف‌ها به داخل ماتریکس متخلخل مجاور می‌شود. در نتیجه، درز و شکاف‌ها از املاح تخلیه و نیروی شناوری در داخل درز و شکاف‌ها کم‌تر می‌شود. برعکس، در سناریوی دوم، پایین بودن ضریب پخشیدگی، منجر به کمتر شدن پخشیدگی در ماتریکس می‌شود، پس مقدار غلظت و شیب آن در درز و شکاف‌ها، بالا باقی می‌ماند، و حمل املاح مبتنی بر نیروی شناوری و ناشی از پخشیدگی در داخل درز و شکاف‌ها افزایش می‌یابد. بنابراین در سناریو با ضریب پخشیدگی مولکولی بالا، انتقال املاح به داخل ماتریکس متخلخل بیشتر می‌شود، در حالی که، در سناریو با ضریب پخشیدگی پایین، املاح به عمق بیشتری از محدوده مدل منتقل می‌شوند. در سناریوی سوم، با افزایش نفوذپذیری ماتریکس متخلخل، سرعت جریان افزایش می‌یابد و این امر منجر به جریان همرفتی بیشتری در داخل ماتریکس متخلخل می‌شود. افزایش بیشتر نفوذپذیری ماتریکس، در سناریوی چهارم، به علت کاهش اختلاف بین نفوذپذیری ماتریکس و درز و شکاف، از تأثیر درز و شکاف بر روی الگوی جریان همرفتی می‌کاهد.

محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار به علت وجود درز و شکاف، نسبت به محیط‌های متخلخل خاک‌دانه‌ای، حساسیت بیشتری در برابر گسترش و پخش آلودگی دارند و در صورت آلوده شدن محیط، به علت نفوذپذیری پایین ماتریکس متخلخل، امکان پالایش و رفع آلودگی آن‌ها کمتر است. بنابراین آگاهی از چگونگی گسترش جریان و حمل املاح در آن‌ها اهمیت دوچندانی دارد. از طرف دیگر، چگالی سیال نیز، خود، تأثیر قابل توجهی در گسترش آلودگی دارد. از این رو، بررسی الگوی جریان و حمل املاح وابسته به چگالی در محیط‌های متخلخل درز و شکاف‌دار، می‌تواند مبحثی قابل تأمل و بررسی باشد.

در تحقیقات انجام شده در این زمینه، الگوی جریان همرفتی با خصوصیات متفاوت محیط متخلخل و املاح کمتر مورد بررسی قرار گرفته است. در این مقاله، این فرضیه مطرح شد که خصوصیات محیط متخلخل درز و شکاف‌دار و همچنین املاح در نظر گرفته شده به عنوان دو عامل از عوامل تأثیرگذار، می‌تواند الگوی جریان را تحت تأثیر قرار دهد.

به منظور بررسی این فرضیه، از مدل‌سازی‌های عددی به وسیله مدل (HGS) FRAC3DVS/HydroGeoSphere استفاده شد و مدل مفهومی به صورت محیطی متخلخل دارای درز و شکاف‌های منظم عمودی و افقی در نظر گرفته شد. با در نظر گرفتن چهار سناریوی مدل‌سازی، اثر نفوذپذیری ماتریکس متخلخل و ضریب پخشیدگی مولکولی املاح بر الگوی جریان همرفتی مورد بررسی قرار گرفت. سناریوی اول به عنوان سناریوی پایه در نظر گرفته شد. در سناریوهای دوم، سوم، و چهارم اعداد رایلی دو به دو مشابه، اما خصوصیات ماتریکس متخلخل و سیال متفاوت در نظر گرفته شد. نتایج نشان می‌دهد در اعداد رایلی یکسان،

## REFERENCES

- Blessent, D., P. R. Jorgensen., and R. Therrien., 2014, Comparing Discrete Fracture and Continuum Models to Predict Contaminant Transport in Fractured Porous Media, *GroundWater*, 52 (1), 84-95.
- Diersch, H. J. G., and O. Kolditz, 2002, Variable-density flow and transport in porous media: Approaches and challenges, *Advances in Water Resources* 25, 899-944.
- Graf, T., 2005, Modeling coupled thermohaline flow and reactive solute transport in discretely-fractured porous media. PhD thesis, Université Laval, Québec, Canada, 209 pp.
- Graf, T., and R. Therrien, 2005, Variable-density groundwater flow and solute transport in porous media containing nonuniform discrete fractures, *Advances in Water Resources* 28, 1351-1367.
- Graf, T., and R. Therrien, 2007, Coupled thermohaline groundwater flow and single-species reactive solute transport in fractured porous media, *Advances in Water Resources* 30, 742-771.
- Graf, T., and R. Therrien, 2007, Variable-density groundwater flow and solute transport in irregular 2d fracture networks, *Advances in Water Resources* 30, 455-468.
- Graf, T., and R. Therrien, 2008, A method to discretize non-planar fractures for 3d subsurface flow and transport simulations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 56, 2069-2090.
- Graf, T., and R. Therrien, 2008, A test case for the simulation of three-dimensional variable-density flow and solute transport in discretely-fractured porous media, *Advances in Water Resources* 31, 1352-1363.

- Graf, T., and R. Therrien, 2009, Stable-unstable flow of geothermal fluids in fractured rock, *Geofluids* 9, 138-152.
- Kooi H., J. Groen, and A. Leijnse, 2000, Modes of seawater intrusion during transgressions, *Water Resources Research* 36, 3581-3589.
- Kuznetsov, A. V., and D. A. Nield, 2008, The effects of combined horizontal and vertical heterogeneity on the onset of convection in a porous medium: Double diffusive case, *Transport in Porous Media* 72, 157-170.
- Kuznetsov, A. V., D. A. Nield, and C. T. Simmons, 2010, The effect of strong heterogeneity on the onset of convection in a porous medium: Periodic and localized variation, *Transport in Porous Media* 81, 123-139.
- Nield, D. A., and A. V. Kuznetsov, 2007, The effects of combined horizontal and vertical heterogeneity on the onset of convection in a porous medium, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50, 1909-1915.
- Nield, D. A., and A. V. Kuznetsov, 2007, The effect of combined vertical and horizontal heterogeneity on the onset of convection in a bidisperse porous medium, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 50, 3329-3339.
- Nield, D. A., and A. V. Kuznetsov, 2007, The effects of combined horizontal and vertical heterogeneity and anisotropy on the onset of convection in a porous medium, *International Journal of Thermal Sciences* 46, 1211-1218.
- Nield, D. A., and A. V. Kuznetsov, 2007, The onset of convection in a shallow box occupied by a heterogeneous porous medium with constant flux boundaries, *Transport in Porous Media* 67, 441-451.
- Nield, D. A., and A. V. Kuznetsov, 2008, The effects of combined horizontal and vertical heterogeneity on the onset of convection in a porous medium: Moderate heterogeneity, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 51, 2361-2367.
- Nield, D. A., A. V. Kuznetsov, and C. T. Simmons, 2009, The effect of strong heterogeneity on the onset of convection in a porous medium, *Transport in Porous Media* 77, 169-186.
- Nield, D. A., A. V. Kuznetsov, and C. T. Simmons, 2010, The effect of strong heterogeneity on the onset of convection in a porous medium: 2d/3d localization and spatially correlated random permeability fields, *Transport in Porous Media* 83, 465-477.
- Nield, D. A., and C. T. Simmons, 2007, A discussion on the effect of heterogeneity on the onset of convection in a porous medium, *Transport in Porous Media* 68, 413-421.
- Post, V. E. A., and C. T. Simmons, 2010, Free convective controls on sequestration of salts into low-permeability strata: Insights from sand tank laboratory experiments and numerical modelling, *Hydrogeology Journal* 18, 39-54.
- Prasad, A., and C. T. Simmons, 2003, Unstable density-driven flow in heterogeneous porous media: A stochastic study of the elder 1967b "Short heater" problem, *Water Resources Research* 39.
- Rayleigh, L., 1916, On convection currents in a horizontal layer of fluid when the higher temperature is on the underside. *Philos. Mag., Ser. 6* 32, 529-546. J.W. Strutt.
- Schincariol, R. A., and F. W. Schwartz, 1990, An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media, *Water Resources Research* 26, 2317-2329.
- Schincariol, R. A., F. W. Schwartz, and C. A. Mendoza, 1997, Instabilities in variable density flows: Stability and sensitivity analyses for homogeneous and heterogeneous media, *Water Resources Research* 33, 31-41.
- Schincariol RA., 1998, Dispersive mixing dynamics of dense miscible plumes: natural perturbation initiation by local-scale heterogeneities. *Journal of Contaminant Hydrology*. 34:247-71.
- Shikaze, S. G., E. A. Sudicky, and F. W. Schwartz, 1998, Density-dependent solute transport in discretely-fractured geologic media: Is prediction possible?, *Journal of Contaminant Hydrology* 34, 273-291.
- Simmons, C. T., T. R. Fenstemaker, and J. M. Sharp, 2001, Variable-density groundwater flow and solute transport in heterogeneous porous media: Approaches, resolutions and future challenges, *Journal of Contaminant Hydrology* 52, 245-275.
- Simmons, C. T., J. M. Sharp, and D. A. Nield, 2008, Modes of free convection in fractured low-permeability media, *Water Resources Research* 44.
- Therrien R, RG McLaren, E. A. Sudicky, and SM. Panday, 2009, HYDROGEOSPHERE – A three-dimensional numerical model describing fully-integrated subsurface and surface flow and solute transport. Universite' Laval, University of Waterloo, 275 pp.
- Vujevic, K., T. Graf, C. T. Simmons, and A. Werner, 2014, Impact of fracture network geometry on free convective flow patterns, *advances in water resources* 71, 65-80.