



چارچوب‌های مدل‌سازی THMC در محیط‌های متخلخل: مبانی، کاربردها و توسعه روش ناپیوستگی جابجایی در محیط کوپل ترمو هیدرومکانیکی

ابوالفضل عبدالمهی پور^{۱*}، علیرضا کارگر^۱

۱- دانشکده مهندسی معدن، دانشکده‌گان فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران.

دریافت: ۱۴۰۵/۰۳/۰۷؛ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۳/۳۱

(abdollahipour@ut.ac.ir) *نویسنده مسئول

چکیده

مدل‌سازی فرآیندهای حرارتی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی (THMC) در محیط‌های متخلخل و دارای شکستگی، یکی از چالش‌های اصلی در بسیاری از مسائل مهندسی زیرسطحی از جمله ذخیره‌سازی زمین‌شناسی CO_2 ، دفع پسماندهای هسته‌ای، سامانه‌های زمین‌گرمایی، مخازن نامتعارف و بهره‌برداری از هیدرات‌های گازی محسوب می‌شود. در این مقاله، مبانی نظری کوپلینگ THMC، معادلات حاکم، روش‌های عددی متداول، راهبردهای مختلف کوپلینگ، روش‌های اعتبارسنجی و حوزه‌های اصلی کاربرد این مدل‌ها به صورت جامع مرور و ارزیابی شده‌اند. نوآوری اصلی این مطالعه، علاوه بر ارائه یک مرور منسجم از مدل‌سازی THMC، معرفی و تشریح یک چارچوب ترمو-هیدرو-مکانیکی مبتنی بر روش ناپیوستگی جابجایی (DDM) برای محیط‌های متخلخل دارای شکستگی است که در آن، علاوه بر ناپیوستگی‌های مکانیکی، ناپیوستگی‌های شار سیال و شار حرارتی نیز در قالب یک فرمول‌بندی کوپل شده وارد شده‌اند. در این چارچوب، میدان‌های تنش، فشار منفذی و دما با استفاده از توابع گرین و معادلات انتگرالی محاسبه شده و عملکرد مدل با داده‌های میدانی، حل‌های تحلیلی و مسائل معیار اعتبارسنجی شده است. نتایج نشان می‌دهد که چارچوب پیشنهادی قادر است رفتار وابسته به زمان محیط‌های پوروالاستیک، تکامل فشار منفذی و پاسخ‌های ترموالاستیک را با دقت مناسبی بازتولید کند. این چارچوب بر پایه فرض رفتار ترمو-پوروالاستیک خطی، محیط همگن، اعتبار قانون داری و کوپلینگ یک‌طرفه حرارتی توسعه یافته است؛ از این رو، توسعه آن به مدل‌های کامل THMC با در نظر گرفتن رفتارهای غیرخطی، محیط‌های ناهمگن و انتقال واکنشی، مسیر اصلی پژوهش‌های آینده خواهد بود.

کوپل THMC؛ مدل‌سازی چند-فیزیک؛ معادلات حاکم؛ روش ناپیوستگی جابجایی؛ محیط متخلخل شکسته

واژگان کلیدی

۱- مقدمه

فرآیندها را بیش از پیش آشکار ساخته است. کاربردهایی نظیر ذخیره‌سازی زمین‌شناختی دی‌اکسید کربن، استخراج انرژی زمین‌گرمایی، دفع پسماندهای پرتوزا، تولید از مخازن نفت و گاز نامتعارف، بهره‌برداری از هیدرات‌های گازی و ارزیابی پایداری نواحی منجمد دائمی، از جمله مسائلی هستند که رفتار آن‌ها توسط برهم‌کنش پیچیده میدان‌های گرمایی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی کنترل می‌شود [۱-۳].

فرآیندهای گرمایی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی به طور هم‌زمان در بسیاری از سامانه‌های زیرسطحی رخ داده و نقش تعیین‌کننده‌ای در رفتار کوتاه‌مدت و بلندمدت محیط‌های زمین‌شناختی ایفا می‌کنند. در دهه‌های اخیر، توسعه فناوری‌های مرتبط با انرژی، محیط‌زیست و مدیریت منابع زیرسطحی، نیاز به درک و مدل‌سازی اندرکنش میان این

پیشرفته‌ترین ابزارهای تحلیل و پیش‌بینی رفتار سامانه‌های پیچیده زیرسطحی تبدیل شده‌اند و نقش محوری در طراحی، ارزیابی عملکرد و تحلیل ایمنی پروژه‌های مرتبط با انرژی و محیط‌زیست ایفا می‌کنند [۲، ۱۴].

با وجود پیشرفت‌های چشمگیر در توسعه مدل‌های توأمان حرارتی-هیدرولیکی-مکانیکی-شیمیایی (*THMC*)، همچنان چالش‌های بنیادینی در زمینه فرمول‌بندی معادلات حاکم، توسعه مدل‌های رفتاری، کوپلینگ فرآیندهای چندفیزیکی، روش‌های حل عددی، اعتبارسنجی مدل‌ها و انتقال نتایج از مقیاس آزمایشگاهی به مقیاس میدان وجود دارد. این چالش‌ها در محیط‌های دارای شکستگی به دلیل ناهمگنی شدید، هندسه پیچیده شبکه‌های شکستگی و وابستگی زمانی پاسخ هیدرومکانیکی و حرارتی، ابعاد گسترده‌تری پیدا می‌کنند. از سوی دیگر، تنوع روزافزون نرم‌افزارها، روش‌های عددی و چارچوب‌های محاسباتی مورد استفاده در شبیه‌سازی فرآیندهای *THMC*، انتخاب رویکرد مناسب برای هر کاربرد مهندسی را با پیچیدگی قابل توجهی مواجه ساخته است. از این‌رو، ارائه یک مرور جامع و به‌روز از مبانی نظری، روش‌های محاسباتی و کاربردهای مدل‌های *THMC*، همراه با بررسی راهکارهای نوین مدل‌سازی محیط‌های شکستگی‌دار، ضروری به نظر می‌رسد.

هدف این مقاله، ارائه مروری جامع بر مبانی نظری، روش‌های عددی، بسترهای محاسباتی، مطالعات اعتبارسنجی و حوزه‌های کاربردی مدل‌های *THMC* در ژئومکانیک است. بدین منظور، ابتدا معادلات حاکم بر میدان‌های حرارتی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی و سازوکارهای مختلف کوپلینگ میان آن‌ها تشریح می‌شوند. سپس مهم‌ترین روش‌های گسسته‌سازی عددی، راهبردهای حل سامانه‌های کوپل شده *THMC* و نرم‌افزارهای متداول این حوزه مورد بررسی و مقایسه قرار می‌گیرند. همچنین نقش برنامه‌های بین‌المللی محک‌زنی و مقایسه بین‌کدی در ارزیابی قابلیت اطمینان مدل‌ها مرور شده و کاربردهای کلیدی مدل‌های *THMC* در دفع زمین‌شناختی پسماندهای هسته‌ای، ذخیره‌سازی زمین‌شناختی CO_2 ، سامانه‌های زمین‌گرمایی پیشرفته، شکست هیدرولیکی، بهره‌برداری از هیدرات‌های متان و کرایوژئومکانیک مورد بحث قرار می‌گیرد. افزون بر این،

در چنین سامانه‌هایی، تغییر در هر یک از میدان‌های فیزیکی یا شیمیایی می‌تواند موجب تغییر در سایر میدان‌ها شده و زنجیره‌ای از بازخوردهای متقابل را ایجاد کند. برای مثال، تزریق سیال سرد به یک مخزن زمین‌گرمایی داغ یا یک مخزن ذخیره‌سازی دی‌اکسید کربن، علاوه بر تغییر میدان دما، می‌تواند تنش‌های حرارتی، تغییرات فشار منفذی و تغییر شکل سنگ را ایجاد کرده و در نهایت موجب تغییر در تخلخل، نفوذپذیری و مسیرهای جریان شود [۴-۶]. از سوی دیگر، واکنش‌های شیمیایی نظیر انحلال و رسوب‌گذاری کانی‌ها قادرند ساختار منفذی محیط را دگرگون کرده و به تبع آن، ویژگی‌های هیدرولیکی و مکانیکی سنگ را تغییر دهند. به طور مشابه، در سامانه‌های دفع زمین‌شناختی پسماندهای پرتوزا، گرمای ناشی از واپاشی هسته‌ای موجب ایجاد گرادیان‌های حرارتی و هیدرولیکی شده و در بلندمدت رفتار شیمیایی و مکانیکی مصالح مهندسی نظیر بنتونیت و سنگ میزبان را تحت تأثیر قرار می‌دهد. بنابراین، استفاده از مدل‌های تک‌فیزیکی یا حتی مدل‌های با کوپلینگ محدود، در بسیاری از موارد قادر به بازنمایی صحیح این بازخوردهای پیچیده نبوده و می‌تواند به پیش‌بینی‌های غیرواقعی از عملکرد سامانه منجر شود.

پایه‌های نظری مدل‌سازی فرآیندهای کوپل شده در محیط‌های متخلخل به توسعه نظریه پوروالاستیسیته بیو بازمی‌گردد [۷]؛ نظریه‌ای که برای نخستین بار رفتار مکانیکی محیط متخلخل و جریان سیال را در قالب یک چارچوب هیدرومکانیکی یکپارچه توصیف کرد. در ادامه، توسعه نظریه‌های ترموالاستیسیته و ترموپوروالاستیسیته امکان لحاظ اثرات حرارتی را فراهم ساخت و مدل‌های توأمان گرمایی-هیدرولیکی (*TH*) و گرمایی-هیدرولیکی-مکانیکی (*THM*) به تدریج در طیف وسیعی از مسائل ژئومکانیکی به کار گرفته شدند [۸-۱۳]. با پیشرفت مدل‌های انتقال واکنشی [۱]، توسعه ترمودینامیک محیط‌های متخلخل و افزایش توان محاسباتی، چارچوب‌های توأمان گرمایی-هیدرولیکی-مکانیکی-شیمیایی (*THMC*) شکل گرفتند که قادرند اندرکنش‌های دوطرفه میان انتقال حرارت، جریان سیال، تغییر شکل مکانیکی و واکنش‌های شیمیایی را در یک چارچوب واحد شبیه‌سازی کنند. امروزه مدل‌های *THMC* به یکی از

برای جریان چندفازی (مانند آب، گاز، CO_2 فوق بحرانی)، معادله برای اشباع و فشار هر جزء حل می‌شود. موازنه جرم سیال در فاز α به صورت زیر است:

$$\frac{\partial(\phi S_{\alpha} \rho_{\alpha})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}) = q_{\alpha} \quad (2)$$

که در آن ϕ تخلخل، S_{α} اشباع، ρ_{α} چگالی، v_{α} شار داری است که برابر است با $\mathbf{v}_{\alpha} = -\frac{k k_{ra}}{\mu_{\alpha}} (\nabla P_{\alpha} - \rho_{\alpha} \mathbf{g})$ ، k تراوایی ذاتی، k_{ra} تراوایی نسبی و μ ویسکوزیته است. در شرایط غیرهمدم، خواص سیال (چگالی، ویسکوزیته) به دما وابسته هستند. در جریان غیراشباع، اغلب از معادله ریچاردز (موازنه جرم فاز مایع با روابط فشار موئینگی) استفاده می‌شود. برای تزریق گاز (CO_2)، یک معادله حالت (مانند EOS- CO_2) یا رابطه حلالیت، فشار، دما و تغییرات فاز را کوپل می‌کند [۱۵، ۱۶].

۲-۳- میدان مکانیکی (M)

موازنه اندازه حرکت جامد (با فرض شبه‌ایستا) به دست می‌دهد:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} = 0 \quad (2)$$

که در آن تنش کل از طریق قانون تنش مؤثر بيو: $(\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}' - \alpha(P_p - P_{ref})\mathbf{I})$ به فشار منفذی مرتبط می‌شود. در اینجا $\boldsymbol{\sigma}'$ تنش مؤثر بر اسکلت جامد، α ضریب بيو و P_p فشار منفذی است. برای موارد غیرهمدم/واکنشی، P_{ref} ممکن است شامل فشار سیال مرجع یا پتانسیل شیمیایی باشد. رفتار ماده (تنش-کرنش) می‌تواند پوروالاستیک خطی (قانون هوک بسط‌یافته با ضریب تنش مؤثر بيو) یا الاستو-پلاستیک باشد. پورو مکانیک غیرخطی تغییرات تخلخل/تراوایی ناشی از تسلیم یا آسیب را در نظر می‌گیرد. ضرایب انبساط گرمایی کرنش حجمی اضافی به شکل زیر ایجاد می‌کند:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1 + \nu}{E} [\boldsymbol{\sigma}' - b P_p \mathbf{I}] - \alpha_T \Delta T \mathbf{I} \quad (3)$$

که در آن α_T انبساط گرمایی خطی است. اثرات شیمیایی (مانند تورم یا انقباض کانی) می‌تواند جمله‌ای بصورت $-\beta \Delta C$ (کرنش شیمیایی) اضافه می‌کند. برای مواد دارای رفتار خزشی مانند سنگ نمک، رئولوژی‌های ویسکوالاستیک یا ویسکوپلاستیک قابل در نظر گرفتن هستند.

یک چارچوب ترمو-هیدرو-مکانیکی مبتنی بر روش ناپیوستگی جابجایی (DDM) برای محیط‌های متخلخل دارای شکستگی معرفی و مبانی نظری، فرمول‌بندی عددی، رفتار وابسته به زمان و نتایج اعتبارسنجی آن ارائه می‌شود. در نهایت، چالش‌های موجود، شکاف‌های دانشی و مسیرهای آینده توسعه مدل‌های چندفیزیکی THMC، به‌ویژه در ارتباط با مدل‌سازی محیط‌های شکستگی‌دار و سامانه‌های کوپل شده در مقیاس مخزن، مورد ارزیابی قرار می‌گیرند.

۲-۲ معادلات حاکم بر فرآیندهای THMC

یک مدل THMC معادلات بقای انرژی، جرم، اندازه حرکت و گونه‌های شیمیایی را در یک محیط متخلخل تغییرشکل‌پذیر ترکیب می‌کند [۴، ۵]. ما معادلات هر میدان را در زیر خلاصه می‌کنیم:

جدول ۱ مروری بر متغیرها و پارامترها ارائه می‌دهد.

۱-۲- میدان گرمایی (T)

جریان گرما در محیط متخلخل توسط بقای انرژی کنترل می‌شود. شکل کلی معادله جریان گرما بصورت معادله (۱) است:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_f c_f \mathbf{v}_f \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q_{lat} + Q_{mech} \quad (1)$$

که در آن ρc ظرفیت گرمایی حجمی توده سیستم جامد-سیال، $\rho_f c_f$ ظرفیت گرمایی سیال، v_f سرعت داری، k تانسور هدایت گرمایی، و Q جمله چشمه ۲ (شامل گرمای نهان، اصطکاک، کار مکانیکی و واکنش‌های شیمیایی) است. در شرایط فشار-دمای بالا (HPHT) مانند زمین‌گرمایی و نمک‌های عمیق، گرمای نهان ناشی از تغییر فاز کانی‌ها یا انجماد/ذوب می‌تواند قابل توجه باشد. همچنین انتقال حرارت جابجایی از طریق جمله همرفت $\rho_f c_f \mathbf{v}_f \cdot \nabla T$ وارد می‌شود. انبساط گرمایی جامد و سیال (کوپل با مکانیک) یک جمله تنش ترموالاستیک مؤثر در موازنه مکانیکی معرفی می‌کند.

۲-۲- میدان هیدرولیکی (H)

بقای جرم برای فازهای سیال، منجر به ارائه معادله ریچاردز برای جریان غیراشباع و قانون داری تعمیم‌یافته می‌شود.

³ Equation of State for CO_2

² Source

۲-۴- میدان شیمیایی (C)

انتقال گونه‌های شیمیایی و واکنش‌ها توسط معادلات همرفت-پراکندگی-واکنش توصیف می‌شود. برای گونه i معادله (۴) مطرح می‌شود:

$$\frac{\partial(\phi S_i c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (v_i c_i - \phi S_i D \nabla c_i) = R_i(c_i, T, P) \quad (4)$$

که در آن c_i غلظت در فاز مایع، D تانسور پراکندگی^۴ و R_i نرخ واکنش (تعادلی یا جنبشی) را نشان می‌دهد. واکنش‌ها

شامل تعادل اسید/باز، اکسایش-کاهش، کمپلکس‌سازی و انحلال/رسوب کانی هستند. واکنش‌های شیمیایی تخلخل را تغییر می‌دهند: به عنوان مثال $\frac{d\phi}{dt} = \sum_i v_i (V_m^i)^{-1} r_i$ که در آن r_i نرخ واکنش حجمی کانی i با حجم مولی V_m^i است. تغییر تخلخل به جریان از طریق رابطه (ϕ, k) و به مکانیک از طریق کاهش/افزایش ماتریس جامد بازخورد می‌دهد [۱۷-۲۲]. محدودیت‌های حلالیت و قوانین جنبشی (وابستگی آرنیوس به دما و سطح واکنشی) لحاظ می‌شوند.

جدول ۱- خلاصه معادلات حاکم و کلیدی و متغیرها برای هر میدان در مدل‌های THMC

میدان	معادله حاکم	متغیرهای اصلی	پارامترها / روابط ساختاری کلیدی
حرارتی (T)	بقای انرژی: $\left(\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_f c_f v_f \cdot \nabla T = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q_{lat} + Q_{mech}\right)$	دما (T)	هدایت حرارتی (k)، ظرفیت حرارتی حجمی (ρc)، گرمای نهان (L)
هیدرولیکی (H)	بقای جرم: $\frac{\partial(\phi S \rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = q$ قانون دارسی: $v = -\frac{k k_r}{\mu} (\nabla P - \rho g)$	اشباع (S)، فشار (P)	تراوایی (k)، تراوایی نسبی ($k_r(S)$ ، ویسکوزیته ($\mu(T)$ ، چگالی ($\rho(T)$ ، فشار موئینگی
مکانیکی (M)	تعادل مومنوم: $(\nabla \cdot \sigma + \rho g = 0)$ با در نظر گرفتن اصل تنش مؤثر: $\sigma = \sigma' - b P_p I$	جابجایی (u)	مدول‌های الاستیک ((E, ν))، ضریب بوی (α)، ضریب انبساط حرارتی ($\alpha(T)$)، ضریب انبساط یا تورم شیمیایی (β_c)
شیمیایی (C)	انتقال گونه‌های شیمیایی: $\frac{\partial(\phi S c_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (v c_i - \phi S D \nabla c_i) = R_i(c, T)$	غلظت گونه شیمیایی i (c_i)	ضریب پخش و پراکندگی (D)، نرخ واکنش‌ها (ثابت‌های سینتیکی $k(T)$ و ثابت‌های تعادلی)، حجم مولی کانی‌ها (V_m)

۳- سازوکارهای توامان و مدل‌های ماده

کوپل THMC از طریق چندین مسیر مرتبط رخ می‌دهد. هر مسیر ($M \leftrightarrow C, H \leftrightarrow C, H \leftrightarrow M, T \leftrightarrow C, T \leftrightarrow M, T \leftrightarrow H$) در زیر همراه با سازوکار فیزیکی و مدل‌سازی ماده آن شرح داده می‌شود.

۳-۱- کوپل گرمایی-هیدرولیکی (T↔H)

گرایان دما جریان سیال را از طریق شناوری و تغییرات خواص سیال به حرکت درمی‌آورد. برای مثال، گرم کردن یک

مخزن، ویسکوزیته سیال را کاهش می‌دهد و می‌تواند همرفت^۵ طبیعی را القا کند. برعکس، همرفت سیال^۶ گرما را حمل می‌کند (جمله همرفت گرمایی^۷ در معادله انرژی). دما همچنین چگالی سیال را تغییر می‌دهد (مثلاً CO_2 فوق بحرانی هنگام گرم شدن چگالی کمتری پیدا می‌کند) که بر الگوهای جریان تأثیر می‌گذارد. به طور اساسی، انبساط گرمایی سیال‌ها (تراکم‌پذیری سیال‌ها) T را در معادلات جریان کوپل می‌کند [۲۳-۲۵].

⁶ Advection⁷ Thermal Convection⁴ Dispersion tensor⁵ Convection

۳-۲- کوپل گرمایی-مکانیکی ($T \leftrightarrow M$)

تغییرات دما از طریق انبساط گرمایی جامدات تنش ایجاد می‌کند. در پورومکانیک، این امر یک جمله αTAT به کرنش حجمی اضافه می‌کند. افزایش دما در شرایط تنش ثابت منجر به انبساط شده و فشار منفذی را کاهش می‌دهد (تغییر تخلخل گرمایی). برعکس، کار تغییر شکل (فرآیندهای مکانیکی) می‌تواند گرما تولید یا اتلاف کند (جمله Q_{mech}). بسیاری از مدل‌های ماده شامل یک ضریب ترموالاستیک (α_T) هستند که به نوع کانی‌های تشکیل‌دهنده سنگ وابسته است [۲۹-۲۶]. رفتار حرارتی سنگ‌های میزبان نیز در ارزیابی عملکرد بلندمدت سامانه‌های ذخیره‌سازی اهمیت ویژه‌ای دارد. نتایج مطالعات آزمایشگاهی اخیر نشان داده‌اند که افزایش دما و تکرار چرخه‌های گرم‌شدن و سردشدن می‌تواند موجب کاهش مقاومت فشاری، افت مدول الاستیک و افزایش آسیب در سنگ نمک شود؛ موضوعی که ضرورت در نظر گرفتن اثرات حرارتی وابسته به زمان را در تحلیل‌های THM مربوط به مخازن نمکی و سامانه‌های دفع پسماند هسته‌ای دوجندان می‌کند [۳۰].

۳-۳- کوپل گرمایی-شیمیایی ($T \leftrightarrow C$)

دما به شدت بر نرخ واکنش‌های شیمیایی (وابستگی آرنیوس) و تعادل تأثیر می‌گذارد. شرایط گرم تر، انحلال/رسوب را تسریع کرده و ساختار منفذی را تغییر می‌دهد [۳۱-۳۳]. در کاربردهای زمین‌گرمایی و CO_2 ، واکنش‌های گرمازا گرما آزاد می‌کنند و T را تغییر می‌دهند. پسماند گرمایی (مانند تغییر فاز یخ-آب) می‌تواند بر رفتار انجماد-ذوب تأثیر بگذارد که توسط گرمای نهان کنترل می‌شود. به طور اساسی، سینتیک شیمیایی $ki = ki0 \exp(-Ea/RT)$ وارد معادلات انتقال واکنشی می‌شود.

۳-۴- کوپل هیدرولیکی-مکانیکی ($H \leftrightarrow M$)

تغییرات فشار منفذی از طریق اصل تنش مؤثر بيو ($\sigma' = \sigma - \alpha P_p$) مستقیماً بر میدان تنش مؤثر حاکم بر رفتار سنگ تأثیر گذاشته و در نتیجه موجب تغییر شکل محیط متخلخل می‌شود. به عنوان مثال، افزایش فشار منفذی در طی فرآیندهای تزریق می‌تواند تنش مؤثر را کاهش داده و شرایط لازم برای آغاز شکست، گسترش ترک‌ها یا فعال‌سازی مجدد گسل‌ها را فراهم کند. در مقابل، تغییر شکل سنگ نیز بر ویژگی‌های هیدرولیکی محیط اثرگذار است؛ به گونه‌ای که

تراکم ناشی از بارگذاری مکانیکی با کاهش حجم فضاهای منفذی، تخلخل و در بسیاری از موارد تراوایی را کاهش می‌دهد. این برهم‌کنش متقابل معمولاً در چارچوب مدل‌های پوروالاستیک و هیدرومکانیکی توصیف می‌شود که در آن پارامترهایی نظیر ضریب بيو α و ضریب اسکمپتون نقش کلیدی دارند. در محیط‌های متخلخل الاستوپلاستیک، تغییرات برگشت‌ناپذیر ساختار سنگ ناشی از کرنش‌های غیرالاستیک نیز می‌تواند موجب تحول قابل توجه در تخلخل و تراوایی شود که این اثرات غالباً از طریق روابط تجربی یا نیمه تجربی مبتنی بر ارتباط تخلخل-کرنش مدل‌سازی می‌شوند.

۳-۵- هیدرولیکی-شیمیایی ($H \leftrightarrow C$)

جریان سیال نقش اصلی را در انتقال واکنش‌دهنده‌ها و محصولات واکنش ایفا کرده و از این طریق توزیع گونه‌های محلول در محیط متخلخل را کنترل می‌کند. برای نمونه، همرفت شوراب غنی از CO_2 می‌تواند انحلال کانی‌های کربناته را در نواحی پایین‌دست جریان تسریع کند. از سوی دیگر، واکنش‌های شیمیایی با مصرف یا تولید جرم سیال، ترکیب و ویژگی‌های آن را تغییر داده و هم‌زمان موجب تحول در ساختار فضای متخلخل، از جمله تخلخل و تراوایی، می‌شوند. در چارچوب معادلات حاکم بر جریان، این اثرات معمولاً به صورت جملات چشمه و چاه ناشی از تبادل جرم بین فاز سیال و ماتریس سنگ در نظر گرفته می‌شوند. علاوه بر این، روابط بازخوردی تخلخل-تراوایی، نظیر مدل کوزنی-کارمن مبتنی بر تغییرات تخلخل، برای توصیف تأثیر فرآیندهای شیمیایی بر خواص هیدرودینامیکی محیط مورد استفاده قرار می‌گیرند [۳۲، ۳۴].

۳-۶- مکانیکی-شیمیایی ($M \leftrightarrow C$)

برهم‌کنش‌های مکانیکی و شیمیایی به‌طور متقابل بر تکامل ساختار سنگ و رفتار آن حاکم هستند. تنش و تغییر شکل می‌توانند از طریق تغییر هندسه فضای منفذی، میزان دسترسی سیال به سطوح واکنش‌پذیر و ایجاد سطوح تازه شکست، بر نرخ و الگوی واکنش‌های شیمیایی اثر بگذارند. به عنوان مثال، ایجاد شکستگی یا اتساع ترک‌ها موجب آشکار شدن سطوح جدید کانی‌ها شده و در نتیجه سطح ویژه واکنش را افزایش می‌دهد که می‌تواند به تسریع فرآیندهای انحلال یا رسوب‌گذاری منجر شود. از سوی دیگر، افزایش تنش مؤثر و

۴- روش‌های عددی برای حل سیستم‌های THMC

۴-۱- روش‌های گسسته‌سازی

۴-۱-۱ روش اجزاء محدود (FEM)

انعطاف‌پذیری FEM در مدل‌سازی هندسه‌های پیچیده، شرایط مرزی متنوع و رفتارهای ماده‌ای پیشرفته، این روش را به یکی از پرکاربردترین چارچوب‌های عددی در تحلیل مسائل چندفیزیکی تبدیل کرده است. میدان‌های اصلی—جابجایی، فشار منفذی، دما و غلظت—با استفاده از توابع شکل در گره‌های المان تقریب زده می‌شوند. در مسائل هیدرومکانیکی، رعایت شرایط پایداری و به‌کارگیری فرمول‌بندی‌های مختلط از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. نرم‌افزارهایی نظیر OGS ، $COMSOL$ و $Abaqus$ از شناخته‌شده‌ترین بسترهای مبتنی بر FEM در این حوزه به شمار می‌روند [۲۵،۴۰،۴۱].

۴-۱-۲ روش حجم محدود (FVM)

تضمین بقای جرم، انرژی و اندازه حرکت در سطح حجم کنترل، FVM را به گزینه‌ای مناسب برای شبیه‌سازی جریان سیال، انتقال حرارت و انتقال واکنشی تبدیل کرده است. خانواده نرم‌افزارهای $TOUGH$ و $PFLTRAN$ از جمله مهم‌ترین پیاده‌سازی‌های این روش در ژئومکانیک محیط متخلخل هستند. البته باید توجه داشت که توسعه فرمول‌بندی‌های مکانیکی پیشرفته در چارچوب FVM نسبت به FEM دشوارتر است؛ از این رو، در بسیاری از کاربردهای ژئومکانیکی، حلگرهای FVM برای بخش جریان با حلگرهای مکانیکی مبتنی بر FEM به‌صورت ترکیبی استفاده می‌شوند [۴۲،۴۳].

۴-۱-۳ روش تفاضل محدود (FDM)

سادگی پیاده‌سازی و کارایی محاسباتی، FDM را در بسیاری از شبیه‌سازی‌های مخزن و ژئومکانیک—از جمله $FLAC3D$ —به کاربردی نموده است. با این حال، وابستگی این روش به شبکه‌های منظم، کاربرد آن را در هندسه‌های پیچیده و مسائل چندفیزیکی پیشرفته محدود می‌کند [۴۳،۴۴].

۴-۱-۴ روش المان مرزی (BEM)

BEM با تبدیل معادلات حاکم به معادلات انتگرالی مرزی، نیاز به گسسته‌سازی کل دامنه را حذف کرده و تنها

بسته‌شدن منافذ و شکستگی‌ها ممکن است تراوایی را کاهش داده و انتقال واکنش‌دهنده‌ها و محصولات واکنش را محدود کند [۲۰-۲۲،۳۵-۳۷].

در مقابل، واکنش‌های شیمیایی نیز می‌توانند رفتار مکانیکی سنگ را به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار دهند. برای نمونه، انحلال کانی‌ها با کاهش حجم فاز جامد و تضعیف ساختار سنگ همراه است، در حالی که تورم کانی‌های رسی می‌تواند منجر به ایجاد تنش‌های داخلی و تغییر شکل قابل ملاحظه در محیط متخلخل شود. به منظور توصیف این برهم‌کنش‌ها، مدل‌های شیمیایی—مکانیکی معمولاً از قوانین رفتاری استفاده می‌کنند که در آن پارامترهای مکانیکی نظیر مقاومت، آستانه تسلیم یا معیارهای آسیب تابعی از ترکیب شیمیایی، غلظت گونه‌های واکنش‌گر یا میزان پیشرفت واکنش در نظر گرفته می‌شوند. در مدل‌های پیشرفته‌تر $THMC$ ، این روابط اغلب بر مبنای نظریه مخلوط‌ها یا اصول ترمودینامیک غیرتعادلی توسعه یافته و امکان توصیف مستقیم کوپلینگ میان میدان‌های تنش، کرنش و پتانسیل شیمیایی را فراهم می‌کنند.

در تمامی این فرمول‌بندی‌ها، رعایت سازگاری ترمودینامیکی از اهمیت اساسی برخوردار است؛ به‌گونه‌ای که روابط کوپل شده باید هم‌زمان بقای جرم، انرژی و تولید آنتروپی را ارضا کنند. از متداول‌ترین چارچوب‌های نظری مورد استفاده می‌توان به نظریه پوروالاستیسیته بیو و بسط‌های حرارتی و شیمیایی آن، و همچنین رویکردهای مبتنی بر نظریه مخلوط‌ها اشاره کرد [۸]. برای مثال، در مدل‌های ترموپوروالاستیک، اثرات انبساط حرارتی و وابستگی پارامترهای مؤثر ماده به دما در روابط سازنده وارد می‌شوند، در حالی که گرادینان‌های پتانسیل شیمیایی می‌توانند به‌عنوان نیروی محرکه انتقال جرم در معادلات موازنه ظاهر شوند. در پیاده‌سازی‌های عددی، این برهم‌کنش‌ها معمولاً از طریق به‌روزرسانی افزایشی متغیرهای حالت نظیر تخلخل، تراوایی و سایر پارامترهای ماده مدل‌سازی می‌شوند [۳۸،۳۹]؛ به‌گونه‌ای که تغییرات تخلخل می‌تواند به‌صورت تابعی از کرنش حجمی، تغییرات شیمیایی و سایر فرآیندهای مؤثر در ساختار محیط متخلخل مانند معادله (۵) بیان شود.

$$\phi = \phi_0 + (\alpha \Delta \varepsilon_v) - \frac{\beta_c}{\kappa} \Delta C \quad (5)$$

پارامترهای مکانیکی ترک (بازشدگی و لغزش)، توانمندی بالایی در مدل‌سازی شکستگی‌ها از خود نشان داده است [۴۵]. جدول ۲ خلاصه‌ای از انواع کوپل و تاثیر آن بر روابط ساختاری را نشان می‌دهد.

مرزهای مسئله را مشخص می‌کند. این کاهش بعد مسئله، BEM را به روشی کارآمد برای تحلیل محیط‌های نیمه‌بی‌نهایت، مسائل الاستیک و تمرکز تنش در ژئومکانیک تبدیل کرده است. در این میان، روش ناپیوستگی جابجایی (DDM) به‌عنوان یکی از مهم‌ترین توسعه‌های مبتنی بر BEM، با بازنمایی مستقیم ناپیوستگی‌ها و توصیف طبیعی

جدول ۲- مسیرهای توانان و اثرات ماده

نوع کوپل	سازوکار	اثرات در روابط ساختاری	مثال‌ها
$T \leftrightarrow H$ (حرارتی-) (هیدرولیکی)	دما بر چگالی و ویسکوزیته سیال اثر می‌گذارد و جریان سیال نیز از طریق همرفت، گرما را منتقل می‌کند.	وجود جمله انتقال حرارت جابجایی در معادله انرژی؛ وابستگی چگالی ($\rho(T)$) و ویسکوزیته ($\mu(T)$) به دما در معادلات جریان.	همرفت حرارتی در مخازن ژئوترمال.
$T \leftrightarrow M$ (حرارتی-مکانیکی)	انبساط یا انقباض حرارتی فاز جامد موجب ایجاد تغییر شکل و تنش‌های حرارتی می‌شود.	حضور کرنش حرارتی ($\alpha T \Delta T$) در روابط تنش-کرنش؛ تغییر تنش مؤثر ناشی از فشار منفذی حرارتی.	ایجاد شکست‌های حرارتی و سردشدگی دیواره چاه در فرآیندهای ازدیاد برداشت با CO_2 .
$T \leftrightarrow C$ (حرارتی-شیمیایی)	دما نرخ واکنش‌ها و شرایط تعادل شیمیایی را تغییر می‌دهد (مانند روابط آرنیوس و تغییرات حلالیت) و واکنش‌ها نیز می‌توانند گرما آزاد یا جذب کنند.	وابستگی ثابت سرعت واکنش ($k(T)$) به دما؛ حضور گرمای نهان ($Q_{lat}(T)$) در معادله انرژی.	افزایش دما و تسریع فرآیند به‌دام‌اندازی معدنی CO_2 در مخازن ذخیره‌سازی.
$H \leftrightarrow M$ (هیدرولیکی-) (مکانیکی)	تغییرات فشار منفذی موجب تغییر تنش مؤثر (قانون بیو) می‌شود و تغییر شکل سنگ نیز تخلخل و تراوایی را تغییر می‌دهد.	روابط ساختاری پوروالاستیک مبتنی بر ضریب بیو α ؛ روابط تخلخل-کرنش و تراوایی-تخلخل (مانند مدل کوزنی-کارمن).	شکست هیدرولیکی (افزایش فشار $\leftarrow$ ایجاد یا گسترش شکستگی)؛ تراکم مخزن و فرونشست سطح زمین (کاهش فشار $\leftarrow$ تراکم).
$H \leftrightarrow C$ (هیدرولیکی-) (شیمیایی)	جریان سیال گونه‌های واکنش‌گر را جابه‌جا می‌کند و واکنش‌های شیمیایی نیز جرم سیال، تخلخل و تراوایی را تغییر می‌دهند.	معادلات انتقال-پخش-واکنش؛ روابط بازخوردی تخلخل-تراوایی ناشی از واکنش‌های شیمیایی (برای مثال) $\phi = \phi_0 + \Delta\phi_{chem}$	انحلال کانی‌های کربناته در امتداد مسیرهای جریان در پروژه‌های ذخیره‌سازی CO_2 و تغییر تراوایی محیط.
$M \leftrightarrow C$ (مکانیکی-شیمیایی)	تنش و تغییر شکل، هندسه فضای منفذی و سطح واکنش‌پذیر را تغییر می‌دهند و واکنش‌های شیمیایی نیز با تغییر حجم فاز جامد می‌توانند تنش و تغییر شکل ایجاد کنند (مانند تورم).	قوانین کوپل شیمیایی-مکانیکی؛ کرنش ناشی از فرآیندهای شیمیایی ($\beta_e \Delta C$)؛ نرخ واکنش وابسته به تنش.	تورم رس‌ها در محیط‌های حائل (اثر شیمیایی $\leftarrow$ تنش و تغییر شکل)؛ افزایش سطح واکنش‌پذیر در شکستگی‌ها تحت تأثیر تنش و تغییر شکل.

توجهی برای مدل سازی فرآیندهای شکست در محیط های چندفیزیکی از خود نشان داده اند.

۲-۴- راهبردهای کوپلینگ در مسائل چندفیزیکی THMC

انتخاب راهبرد کوپلینگ میان معادلات حاکم نقش تعیین کننده ای در پایداری عددی، دقت و هزینه محاسباتی دارد. در رویکرد کوپل کامل (مونولیتیک)، تمامی میدان ها در یک سیستم یکپارچه به صورت هم زمان حل می شوند که بالاترین سطح پایداری را در حضور کوپلینگ های قوی فراهم می کند، اما هزینه محاسباتی و حافظه مورد نیاز آن قابل توجه است. نمونه های این رویکرد را می توان در حلگرهای مونولیتیک OGS و مدل های DDM توسعه یافته برای محیط های پوروالاستیک مشاهده کرد [۸,۴۸,۴۹].

در رویکردهای تفکیک شده، هر میدان با حلگر مستقل خود حل شده و تبادل اطلاعات میان زیرسیستم ها به صورت تکراری یا ترتیبی انجام می گیرد. این انعطاف پذیری امکان بهره گیری از حلگرهای تخصصی تک فیزیکی را فراهم می کند؛ اما در مسائل با کوپلینگ قوی، کنترل دقیق همگرایی ضروری است. در کاربردهای عملی THMC، اغلب از راهبردهای ترکیبی استفاده می شود که در آن ها بخش هایی مانند جریان و شیمی به صورت جفت شده حل شده و میدان مکانیکی به صورت ترتیبی به روزرسانی می گردد. جدول ۳ خلاصه ای از این راهبردها و مصالحه های مرتبط با آن ها را ارائه می دهد.

جدول ۳- راهبردهای کوپلینگ: مصالحه های دقت و بازدهی

معايب	مزایا	توضیح	راهبرد
سیستم های خطی بسیار بزرگ؛ هزینه محاسباتی و حافظه بالا.	دقت بالا و پایداری مناسب در کوپلینگ های قوی	حل هم زمان تمامی معادلات THMC در قالب یک سیستم واحد.	کوپل کامل
مشکلات همگرایی در کوپلینگ های قوی؛ نیازمند کنترل دقیق تکرار.	امکان استفاده مجدد از حلگرهای تخصصی؛ مقیاس پذیری بهتر.	حل زیرسیستم ها به صورت متناوب (مثلاً HMC سپس MC) همراه با تکرارهای داخلی برای همگرایی.	تفکیک شده (تکراری)
احتمال ناپایداری و خطای تأخیری؛ نیاز به گام زمانی کوچک.	ساده و سریع در هر گام زمانی.	حل متغیرهای میدان به صورت متوالی و تنها یک بار در هر گام زمانی (بدون تکرار داخلی).	تفکیک شده (ترتیبی (صریح)

مانند ارزیابی پسماند هسته ای، حتی از فرضیات شبه ایستا در مقیاس های زمانی دهه ای تا سده ای استفاده می شود.

در مقیاس مکانی، ناهمگنی های فیزیکی و شیمیایی از مقیاس حفره ای (میکرون) تا مقیاس مخزن (کیلومتر) گسترده اند. حل مستقیم این ناهمگنی ها در مقیاس میدان عملاً ناممکن است و بنابراین روش های همگن سازی و افزایش مقیاس —با بهره گیری از مفهوم حجم نماینده المان— (REV) ضروری می شوند. برای محیط های شکسته، مدل های دو-تخلخلی/دو-تراوایی و روش های شبکه شکستگی گسسته

زمانی که مسائل به سمت کوپلینگ های چندفیزیکی پیچیده حرکت می کنند، حضور فرآیندهای حجمی مستلزم وارد کردن انتگرال های دامنه یا استفاده از فرمول بندی های ترکیبی است. با وجود این محدودیت، توسعه چارچوب های DDM در دهه های اخیر مسیر جایگزینی فیزیکاً سازگار برای مدل سازی شکستگی محور ارائه داده است. شبیه سازی انتشار شکست هیدرولیکی از چاه [۴۶]، توسعه فرمول بندی های مرتبه بالا برای ارتقاء دقت عددی [۴۷]، و مدل سازی رشد ترک وابسته به زمان در محیط های پوروالاستیک [۴۸,۴۹] از جمله پیشرفت های اساسی در این حوزه بوده اند. با این حال، یک خلأ مهم باقی است: چارچوب های BEM/DDM هنوز به صورت کامل برای کوپلینگ هم زمان THMC توسعه نیافته اند. ماهیت کاهش بعدی این روش ها، نمایش مستقیم ناپیوستگی ها بدون مش بندی حجمی، و شفافیت فیزیکی در توصیف مکانیزم شکست، آن ها را به گزینه ای بالقوه برای توسعه مدل های شکستگی محور THMC تبدیل می کند.

۵-۱-۴ روش های بدون شبکه و XFEM

در XFEM، فضای تقریب استاندارد FEM با توابع غنی سازی ناپیوسته تکمیل می شود تا انتشار ترک بدون باز تولید مش ممکن گردد. روش های بدون شبکه نظیر پریدینامیک و SPH نیز امکان شبیه سازی تغییر شکل های بزرگ و شکست های پیچیده را فراهم می کنند. اگرچه این روش ها هنوز به اندازه FEM در تحلیل های THMC فراگیر نشده اند، ظرفیت قابل

۳-۴- چالش های چندمقیاسی در مدل سازی THMC

پدیده های THMC طیفی گسترده از مقیاس های زمانی و مکانی را در بر می گیرند. از یک سو، فرآیندهای انتقال حرارت و تنظیم فشار منفذی نسبتاً سریع هستند، در حالی که فرآیندهای ژئوشیمیایی —انحلال، رسوب گذاری و به دام اندازی معدنی— در بازه های زمانی بسیار طولانی تکامل می یابند. این عدم تطابق مقیاس زمانی اغلب به کارگیری طرح های ضمنی با گام های زمانی تطبیقی را ضروری می کند. در مسائل بلندمدت

[۵۰]. در این زمینه، پروژه بین‌المللی *DECOVALEX* از مهم‌ترین برنامه‌های مرجع به شمار می‌رود که از سال ۱۹۹۲ مسائل مرتبط با پسماند هسته‌ای، شامل رفتار بنتونیت، مهاجرت گاز، گرمایش و تغییر شکل محیط‌های رسی را مورد بررسی قرار داده است [۱۴، ۵۱، ۵۲]. در کنار آن، مجموعه مسائل محک ارائه‌شده در چارچوب *OpenGeoSys (OGS)* و سایر منابع مرجع *THMC*، بستری استاندارد برای آموزش، ارزیابی و مقایسه کدهای عددی فراهم کرده‌اند [۳۲]. همچنین ابتکاراتی نظیر *CO2BENCH*، برنامه‌های *IAEA* و مطالعات مقایسه‌ای بین‌کدی، از طریق مسائل ایده‌آل‌شده‌ای مانند تزریق CO_2 ، گرمایش محیط‌های متخلخل و مهاجرت گاز، نقش مهمی در ارزیابی عملکرد مدل‌ها و تحلیل حساسیت پارامترها ایفا کرده‌اند. نتایج این برنامه‌ها نشان می‌دهد که توسعه مدل‌های قابل اعتماد *THMC*، به‌ویژه برای کاربردهای حساسی مانند ذخیره‌سازی CO_2 و دفع پسماند هسته‌ای، نیازمند محک‌زنی استاندارد، مقایسه بین‌کدی و همکاری‌های بین‌المللی است.

۵- حوزه‌های کلیدی کاربرد

مدل‌سازی *THMC* در طیف گسترده‌ای از مسائل زیرسطحی کاربرد دارد که در تمامی آن‌ها برهم‌کنش متقابل فرآیندهای حرارتی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی رفتار سامانه را کنترل می‌کند. جدول ۵ کاربردهای عمده مدل‌های *THMC* را ارائه می‌دهد. در سامانه‌های دفع پسماند هسته‌ای، عملکرد بلندمدت موانع مهندسی‌شده به رفتار ترموهیدرومکانیکی بنتونیت و واکنش‌های ژئوشیمیایی وابسته است؛ در حالی که در ذخیره‌سازی زمین‌شناسی CO_2 ، تغییرات فشار، دما و واکنش‌های انحلال-رسوب نقش تعیین‌کننده‌ای در پایداری مخزن و سنگ‌پوش دارند. در سیستم‌های زمین‌گرمایی بهبودیافته نیز تکامل شکستگی‌ها و انتقال حرارت، بهره‌وری انرژی و مخاطرات لرزه‌ای را کنترل می‌کنند.

در کاربردهایی نظیر شکست هیدرولیکی، تولید از هیدرات‌های متان و کرایوژئومکانیک، وجود تغییرات شدید خواص ماده، رشد ناپیوستگی‌ها و فرآیندهای تغییر فاز، نیاز به مدل‌های کاملاً کوپل و چندمقیاسی را برجسته می‌سازد. با وجود پیشرفت قابل توجه مدل‌های عددی، چالش‌هایی نظیر پیش‌بینی رفتار بلندمدت، مدل‌سازی شکستگی‌های در حال تکامل، کاهش عدم قطعیت پارامترهای ماده و هزینه محاسباتی بالای شبیه‌سازی‌های *THMC* همچنان از مهم‌ترین موضوعات پژوهشی در این حوزه محسوب می‌شوند.

(*DFN*) از جمله رویکردهای متداول در این زمینه‌اند.

یکی از چالش‌های اساسی، برقراری نداشت سازگار میان مقیاس‌های مختلف است؛ به‌طوری‌که فرآیندهای ریزمقیاس مانند انحلال در ریزترک‌ها بتوانند رفتار کلان-نظیر تغییرات تراوایی-را به‌درستی کنترل کنند. روش‌های مبتنی بر مرز، به‌ویژه *DDM*، با بهره‌گیری از پاسخ‌های تحلیلی برای بازنمایی ناپیوستگی‌ها، ضمن کاهش قابل توجه ابعاد مسئله، می‌توانند به‌عنوان چارچوبی کارآمد برای غلبه بر گلوگاه‌های محاسباتی در شبیه‌سازی‌های بزرگ‌مقیاس و بلندمدت *THMC* مطرح شوند.

۴-۴- بسترهای محاسباتی برای مدل‌سازی THMC

در سال‌های اخیر، بسترهای محاسباتی متعددی برای شبیه‌سازی فرآیندهای *THMC* توسعه یافته‌اند که هر یک بر اساس روش عددی، سطح کوپلینگ، قابلیت مدل‌سازی انتقال واکنشی و نحوه نمایش شکستگی‌ها، دارای حوزه‌های کاربردی متفاوتی هستند. جدول ۴، مقایسه‌ای خلاصه از مهم‌ترین این کدها ارائه می‌دهد. به طور کلی، کدهای مبتنی بر روش اجزاء محدود (مانند *OpenGeoSys*، *COMSOL*، *MOOSE/FALCON* و *CODE_BRIGHT*) انعطاف‌پذیری بالایی در توسعه مدل‌های چندفیزیکی و کوپلینگ‌های قوی دارند، در حالی که کدهای مبتنی بر حجم محدود (مانند *TOUGHREACT* و *PFLOTRAN*) عمدتاً برای جریان چندفازی، انتقال واکنشی و شبیه‌سازی‌های بزرگ‌مقیاس توسعه یافته‌اند. از سوی دیگر، *FLAC3D* به دلیل مدل‌های پیشرفته ژئومکانیکی و قابلیت تحلیل رفتار غیرخطی سنگ و خاک، در مسائل مکانیک سنگ و مهندسی معدن کاربرد گسترده‌ای دارد، در حالی که *Abaqus* بیشتر به عنوان یک بستر عمومی برای توسعه مدل‌های سفارشی و تحلیل شکست مورد استفاده قرار می‌گیرد. با وجود پیشرفت چشمگیر این نرم‌افزارها، هنوز هیچ‌یک چارچوبی کاملاً یکپارچه برای مدل‌سازی همزمان فرآیندهای *THMC* در محیط‌های شکسته همراه با نمایش صریح رشد شکستگی ارائه نمی‌کنند؛ موضوعی که همچنان یکی از مهم‌ترین چالش‌های پژوهشی این حوزه به شمار می‌رود.

۴-۵- ابتکارات محک‌زنی و مقایسه کدها

اعتبارسنجی مدل‌های *THMC* به مسائل محک استاندارد و مقایسه‌های بین‌کدی وابسته است که امکان ارزیابی صحت فرمول‌بندی‌ها و کاهش عدم قطعیت‌ها را فراهم می‌کنند. علاوه بر مسائل محک، اعتبارسنجی آزمایشگاهی نیز نقش مهمی در ارزیابی مدل‌های عددی دارد. نتایج مطالعات مبتنی بر نمونه‌های چاپ سه‌بعدی نشان داده‌اند که مدل‌های عددی می‌توانند رفتار جریان در شکستگی‌های زبر را با دقت مناسب بازتولید کرده و مبنای قابل اعتمادی برای تحلیل مسائل پیچیده‌تر فراهم کنند.

جدول ۴- مقایسه کدهای عمده THMC

کد	روش عددی	کوپلینگ THM	انتقال واکنشی	نمایش شکستگی	کاربردهای شاخص	مهم ترین مزیت	محدودیت اصلی
OpenGeoSys (OGS)	اجزاء محدود (FEM)	بومی (مونولیتیک و تفکیک شده)	بله	<i>Embedded</i> و <i>DFN, Fracture</i> مدل های گسسته	مسائل عمومی THMC، ذخیره سازی CO ₂ ، ژئوترمال، پسماند هسته ای	چارچوب چندفیزیکی کامل	هزینه محاسباتی بالا
TOUGH3 / TOUGHREACT	حجم محدود (FVM)	ندارد (کوپل خارجی با مکانیک)	بسیار قوی	محیط معادل (بدون نمایش صریح شکستگی)	جریان چندفازی، ژئوشیمی، CCS، انتقال واکنشی	بهترین انتقال واکنشی	فاقد مکانیک داخلی
FLAC3D	تفاضل محدود لاگرانژی (FDM)	بومی THM (محدود)	ندارد	<i>Joint / Contact Elements</i>	ژئومکانیک، معدن، نشست، شکست هیدرولیکی	ژئومکانیک پیشرفته	ژئوشیمی محدود
COMSOL Multiphysics	اجزاء محدود (FEM)	تعریف شده توسط کاربر	بله	<i>Phase- Level-Set, XFEM Field, (غیرمستقیم)</i>	توسعه مدل های مفهومی و پژوهشی THMC	انعطاف پذیری بسیار بالا	مقیاس پذیری محدود
CODE BRIG HT	اجزاء محدود (FEM)	بومی (تمرکز بر THM)	محدود	نمایش ضمنی محیط پیوسته	پسماند هسته ای، محیط های غیراشباع، بنتونیت	بسیار مناسب مواد غیراشباع	تمرکز کمتر بر شکست
PFLOTRAN	حجم محدود (FVM) مبتنی بر PETSc	محدود (جریان)	بسیار قوی	محیط معادل	انتقال واکنشی، محاسبات HPC، مدل های زمین سیستمی	محاسبات موازی بسیار بزرگ	فاقد ژئومکانیک کامل
MOOSE / FALCON	اجزاء محدود (FEM)	بومی (کوپل کامل)	در حال توسعه (ماژولار)	ماژول های شکست و <i>Phase-Field</i>	توسعه چارچوب های پیشرفته THMC، ژئوترمال	توسعه پذیری و کوپل کامل	نیاز به برنامه نویسی و توسعه
Abaqus	اجزاء محدود (FEM)	از طریق زیرروال های کاربر (UMAT/UEL و ...)	محدود	<i>Cohesive XFEM, UEL Zone,</i>	تحلیل شکست، توسعه مدل های ساختاری، ژئومکانیک	مکانیک شکست پیشرفته	انتقال واکنشی بومی ندارد

جدول ۵- حوزه‌های کاربردی مدل‌های کوپل THMC در ژئومکانیک

حوزه کاربرد	فرآیندهای غالب THMC	مهم‌ترین پیامدها و چالش‌ها
دفع زمین‌شناسی پسماند هسته‌ای	گرمایش بافر بنتونیتی، اشباع مجدد، فشار تورمی، مهاجرت گاز، واکنش‌های ژئوشیمیایی	کاهش ظرفیت تورمی بنتونیت، تنش‌های حرارتی، ایجاد مسیرهای ترجیحی جریان و عدم قطعیت در مدل‌های رفتاری بلندمدت
ذخیره‌سازی زمین‌شناسی CO_2 و CCUS	افزایش فشار منفذی، اثرات حرارتی تزریق، انحلال و رسوب کانی‌ها	تغییر تخلخل و تراوایی، خطر نشست، فعال‌سازی مجدد گسل‌ها و لرزه‌خیزی بالقوی
سیستم‌های زمین‌گرمایی بهبودیافته (EGS)	گردش سیال، انتقال حرارت، تکامل شکستگی‌ها و واکنش‌های شیمیایی	افت بهره‌وری حرارتی، تغییر تراوایی شکستگی‌ها و مدیریت لرزه‌خیزی بالقوی
شکست هیدرولیکی و مخازن نامتعارف	انتشار ترک، جریان سیال، تغییر تنش مؤثر و برهم‌کنش سیال-سنگ	پیش‌بینی رشد ترک، پایداری بلندمدت شکستگی‌ها و تأثیر فرآیندهای حرارتی و شیمیایی بر عملکرد مخزن
بهره‌برداری از هیدرات متان	تفکیک هیدرات، جریان چندفازی، تغییر فاز و ژئومکانیک	کاهش مقاومت مکانیکی، افزایش تخلخل، نشست زمین و پایداری سازند
کرایوژئومکانیک (خاک‌های یخ‌زده)	انجماد و ذوب، انتقال حرارت، جریان آب و تشکیل لیزهای یخی	تورم ناشی از یخ‌زدگی، نشست پس از ذوب، تغییر هدایت هیدرولیکی و ناهمگنی شدید محیط

استفاده می‌شوند. این وضعیت در محیط‌های زمین‌شناسی ناهمگن، به‌ویژه در حضور شبکه‌های شکستگی پیچیده و غیرقابل پیش‌بینی، تشدید می‌شود.

۲-۶- مقیاس‌افزایی و همگن‌سازی

یکی از چالش‌های بنیادین در مدل‌سازی THMC، انتقال سازگار بین مقیاس‌های ریز و کلان است. بسیاری از فرآیندهای کلیدی مانند تله‌اندازی معدنی یا واکنش‌های شیمیایی در مقیاس آزمایشگاهی (روزها تا هفته‌ها) رخ می‌دهند، در حالی که در مقیاس میدان (دهه‌ها تا قرن‌ها) رفتار سیستم به‌طور قابل توجهی متفاوت است. این اختلاف زمانی و مکانی باعث محدودیت جدی در استفاده مستقیم از داده‌های آزمایشگاهی در مدل‌های میدانی می‌شود.

مدل‌سازی شبکه‌های شکستگی گسسته (DFN) نیز در این زمینه چالش‌برانگیز است؛ زیرا نمایش صریح تمام شکستگی‌ها از نظر محاسباتی بسیار پرهزینه بوده، در حالی که مدل‌های دوتخلخلی یا پیوسته معادل، جزئیات مهم هندسی و هیدرولیکی را حذف می‌کنند. بنابراین، رویکردهای چندمقیاسی تطبیقی که در آن نواحی بحرانی (مانند اطراف شکستگی‌ها یا چاه‌ها) با تفکیک بالا و سایر نواحی با مدل‌های درشت‌تر حل می‌شوند، به‌عنوان مسیر اصلی توسعه مطرح هستند. همچنین جفت‌سازی دقیق بین شکستگی‌های

۶- چالش‌های جاری و شکاف‌های تحقیقاتی

۶-۱- محدودیت‌های محاسباتی

شبیه‌سازی کامل THMC در مقیاس میدانی همچنان از نظر محاسباتی بسیار سنگین است. مدل‌های سه‌بعدی با تفکیک مکانی بالا و گام‌های زمانی کوچک برای حفظ پایداری عددی ضروری‌اند، که این امر نیازمند استفاده گسترده از زیرساخت‌های HPC است. حتی در بسترهای موازی پیشرفته مانند PFLOTRAN و MOOSE، حل مسائل THMC همراه با ژئوشیمی می‌تواند از چند روز تا چند هفته زمان محاسباتی برای بازه‌های زمانی بلندمدت نیاز داشته باشد.

علاوه بر هزینه محاسباتی، رفتار غیرخطی شدید ناشی از کوپلینگ‌های قوی (به‌ویژه در حضور آستانه‌های واکنشی یا تغییر فاز) می‌تواند موجب مشکلات همگرایی یا توقف حلگرهای غیرخطی شود. از سوی دیگر، عدم قطعیت در پارامترهای ماده—مانند ضرایب نرخ واکنش، پارامترهای انبساط حرارتی رس‌ها و روابط تخلخل-تراوایی—پیچیدگی تحلیل را افزایش می‌دهد. در نتیجه، روش‌های تحلیل عدم قطعیت و چارچوب‌های بیزی به دلیل هزینه بالای محاسباتی هنوز به‌صورت محدود در مسائل THMC بزرگ‌مقیاس

مش بندی صریح را کاهش دهند. با این حال، کاربرد کامل $PINN$ ها در مسائل پیچیده $THMC$ همچنان یک چالش محسوب می شود. علاوه بر این، یادگیری ماشین می تواند در تخمین پارامترهای ناشناخته از داده های میدانی (مانند تراوایی یا ضرایب واکنش) از طریق تطبیق تاریخچه نیز نقش مهمی ایفا کند.

۷- چارچوب کوپل THM مبتنی بر DDM برای محیط های متخلخل دارای

شکستگی

۷-۱- چارچوب نظری و فرمول بندی DDM-THM

روش های مبتنی بر گسسته سازی دامنه نظیر FEM و FVM با وجود موفقیت گسترده در تحلیل مسائل کوپل $THMC$ ، در مدل سازی شبکه های پیچیده شکستگی و شبیه سازی رشد ترک با محدودیت هایی همچون وابستگی به کیفیت مش، نیاز به بازتولید شبکه در حین رشد شکستگی و هزینه محاسباتی بالا مواجه هستند. در این راستا، یک چارچوب مبتنی بر روش ناپیوستگی جابجایی (DDM) برای تحلیل محیط های ترمو-پوروالاستیک دارای شکستگی پیشنهاد می شود که ضمن حفظ دقت فیزیکی، امکان مدل سازی کارآمد شبکه های شکستگی را فراهم می کند.

در این چارچوب، سنگ میزبان به صورت یک محیط پیوسته ترمو-پوروالاستیک در نظر گرفته شده و شکستگی ها به عنوان سطوح ناپیوستگی درون محیط مدل می شوند. معادلات حاکم شامل تعادل تنش، نفوذ سیال و انتقال حرارت بوده و از روابط ساختاری ترمو-پوروالاستیک، قانون دارسی و قانون فوریه تبعیت می کنند [۸]. روابط ساختاری کوپل شده THM به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\sigma_{ij} = 2G e_{ij} + \left(K - \frac{2G}{3}\right) \delta_{ij} e - \alpha \delta_{ij} p + \alpha_d \delta_{ij} T \quad (6)$$

$$p = M(-\alpha e + \zeta + \beta_e T) \quad (7)$$

$$T = \frac{1}{m_d}(\alpha_d e + \beta_e p + s) \quad (8)$$

معادله (۶) رابطه تنش- کرنش- فشار- دما را بیان

گسسته و محیط پیوسته الاستوپلاستیک همچنان یک مسئله باز و فعال در تحقیقات $THMC$ محسوب می شود.

۶-۳- اعتبارسنجی مدل

یکی از مهم ترین محدودیت ها در مدل سازی $THMC$ ، فقدان داده های میدانی بلندمدت و کامل است. بسیاری از سامانه های طبیعی مانند مخازن زمین گرمایی یا سایت های پسماند هسته ای در بازه های زمانی طولانی (دهه ها تا قرن ها) عمل می کنند، در حالی که داده های مشاهده ای موجود عمدتاً کوتاه مدت یا محدود به مقیاس های آزمایشگاهی هستند.

به عنوان مثال، در سایت های پسماند هسته ای یا پروژه های زمین گرمایی عمیق، داده های کافی برای اعتبارسنجی کامل فرآیندهایی مانند خزش بلندمدت، تله اندازی معدنی^۸ یا تکامل تدریجی شکستگی ها وجود ندارد. آزمایش های آزمایشگاهی (مانند تست های بخاری در گرانیات یا رس) تنها می توانند بخش محدودی از رفتار کوتاه مدت سیستم را بازتولید کنند. بنابراین، هم مقیاس سازی بین داده های آزمایشگاهی و میدانی یک مسئله کلیدی و حل نشده باقی مانده است. در این میان، پایش بلادرنگ سیستم هایی مانند EGS از طریق داده های دمایی و لرزه خیزی خرد، فرصت جدیدی برای کالیبراسیون مدل ها فراهم کرده است.

۶-۴- هوش مصنوعی و یادگیری ماشین

روش های مبتنی بر یادگیری ماشین به تدریج به عنوان ابزار مکمل در مدل سازی $THMC$ مطرح شده اند. مدل های جانشین^۹ می توانند تحلیل حساسیت و عدم قطعیت را به طور قابل توجهی تسریع کنند. در این راستا، مدل هایی مانند مدل های جانشین مبتنی بر رگرسیون فرآیند گاوسی^{۱۰} و شبکه های عصبی آموزش دیده بر روی داده های شبیه سازی، امکان پیش بینی سریع پاسخ سیستم های $THMC$ را فراهم می کنند.

همچنین شبکه های عصبی آگاه از فیزیک ($PINNs^{11}$) در حال توسعه برای حل مستقیم معادلات دیفرانسیل جفت شده هستند که در صورت موفقیت می توانند نیاز به

¹⁰ Gaussian Process Regression

¹¹ Physics-Informed Neural Networks

⁸ Mineral Trapping

⁹ Reduced-order models

در توسعه THM این روش، علاوه بر ناپیوستگی‌های مکانیکی، ناپیوستگی‌های مربوط به شار سیال و شار حرارتی نیز تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} D_f &= q_f(x, 0^-) - q_f(x, 0^+) \\ D_T &= q_T(x, 0^-) - q_T(x, 0^+) \end{aligned} \quad (14)$$

بدین ترتیب، عبور سیال و انتقال حرارت در امتداد شکستگی‌ها به طور مستقیم در فرمول‌بندی لحاظ می‌شود. پاسخ سیستم از طریق توابع گرین محیط ترمو-پوروالاستیک و هسته‌های منبع مربوط به میدان‌های مکانیکی، هیدرولیکی و حرارتی محاسبه شده و دستگاه نهایی به صورت زیر مونتاژ می‌شود:

$$\begin{aligned} \sigma_n &= A_{ns} D_s + A_{nn} D_n + A_{nf} D_f \\ &\quad + A_{nT} D_T \\ \sigma_s &= A_{ss} D_s + A_{sn} D_n + A_{sf} D_f \\ &\quad + A_{sT} D_T \\ p &= A_{fs} D_s + A_{fn} D_n + A_{ff} D_f \\ &\quad + A_{fT} D_T \\ T &= A_{TT} D_T \end{aligned} \quad (15)$$

که در آن ضرایب تأثیر A^{ij} از انتگرال‌گیری توابع گرین بین المان چشمه و نقطه مشاهده به دست می‌آیند. حل این دستگاه میدان‌های تنش، فشار منفذی و دما را به صورت هم‌زمان تعیین می‌کند. مهم‌ترین مزیت این رویکرد، کاهش بعد مسئله از سه به دو در مسائل سه‌بعدی و از دو به یک در مسائل دوبعدی است که موجب افزایش چشمگیر کارایی محاسباتی در تحلیل شبکه‌های بزرگ شکستگی می‌شود.

۲-۷- رفتار وابسته به زمان و اعتبارسنجی مدل

یکی از ویژگی‌های مهم محیط‌های متخلخل، وابستگی زمانی پاسخ مکانیکی ناشی از نفوذ سیال است. برخلاف محیط الاستیک که در آن ضریب شدت تنش (SIF) به صورت آنی تعیین می‌شود، در محیط پوروالاستیک انتشار تدریجی فشار منفذی موجب تغییر زمان‌مند میدان تنش در اطراف ترک می‌شود [۴۸]. شکل ۱ تغییرات ضریب شدت تنش را برای یک ترک تحت فشار داخلی ۵۷ مگاپاسکال در یک محیط متخلخل نامتناهی طی ۴۵۰ ثانیه نشان می‌دهد. کاهش تدریجی SIF بیانگر افت فشار مؤثر در نوک ترک و انتقال تدریجی سیال به محیط اطراف است. این رفتار نشان

می‌کند. جمله $-\alpha \delta_{ij} p$ اثر اسکلت جامد را از فشار سیال جدا کرده (کوپل هیدرومکانیکی از طریق ضریب α) و جمله $\alpha_d \delta_{ij} T$ انبساط حرارتی جامد را لحاظ می‌کند (کوپل گرمامکانیکی). معادله (۷) بر اساس مکانیک پوروالاستیک بیو، فشار منفذی را به کرنش حجمی e ، تغییر محتوای سیال ζ و تغییر دمای T مرتبط می‌سازد؛ M مدول بیو است. معادله (۸) رابطه ساختاری دما را در چارچوب ترموپوروالاستیک بیان می‌کند، که در آن s تغییر آنتروپی حجمی، m_d ضریب گرمایی در کرنش و فشار ثابت (متناسب با $\rho c_v / T_0$) و α_d و β_e ضرایب کوپلینگ گرمامکانیکی و گرماهیدرولیکی هستند. این معادله نشان می‌دهد که توزیع دما در محیط پوروالاستیک نه تنها از میدان حرارتی، بلکه از تغییرشکل مکانیکی و تغییرات فشار منفذی نیز تأثیر می‌پذیرد.

در بسیاری از کاربردهای ژئومکانیکی، سهم گرمایی از اتلاف مکانیکی در مقایسه با انتقال حرارت ناچیز بوده و قابل صرف‌نظر کردن است. در نتیجه، معادله انرژی به صورت مستقل حل شده و میدان دما به عنوان یک بارگذاری حرارتی وارد دستگاه هیدرومکانیکی می‌شود. این فرض که به کوپلینگ یک‌طرفه حرارتی معروف است، مبنای بسیاری از حل‌های تحلیلی و نیمه‌تحلیلی موجود در ادبیات محسوب می‌شود [۵۳].

معادلات تعادل، جریان سیال، انتقال حرارت و بقای جرم به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$\sigma_{ij,j} = -F_i \quad (9)$$

$$q_i = -k \nabla p \quad (10)$$

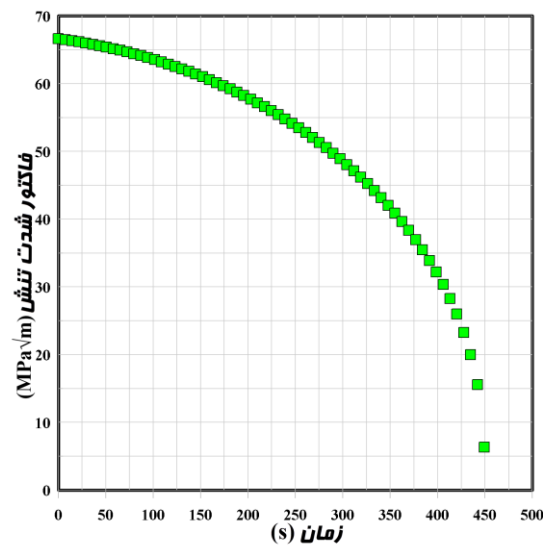
$$q_i^T = -k_T \nabla T \quad (11)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + q_{i,i} = g \quad (12)$$

برای محیط‌های نامتناهی، شرایط دور دست به صورت $e = p = T = 0$ فرض می‌شود که امکان استفاده از توابع گرین و توسعه فرمول‌بندی انتگرالی را فراهم می‌کند.

در روش DDM تنها سطوح ناپیوستگی گسسته می‌شوند و نیازی به مش‌بندی کل دامنه وجود ندارد. ناپیوستگی جابجایی روی سطوح شکستگی به صورت اختلاف جابجایی دو سطح ترک تعریف می‌شود:

$$\begin{aligned} D_x &= u_x(x, 0^-) - u_x(x, 0^+) \\ D_y &= u_y(x, 0^-) - u_y(x, 0^+) \end{aligned} \quad (13)$$

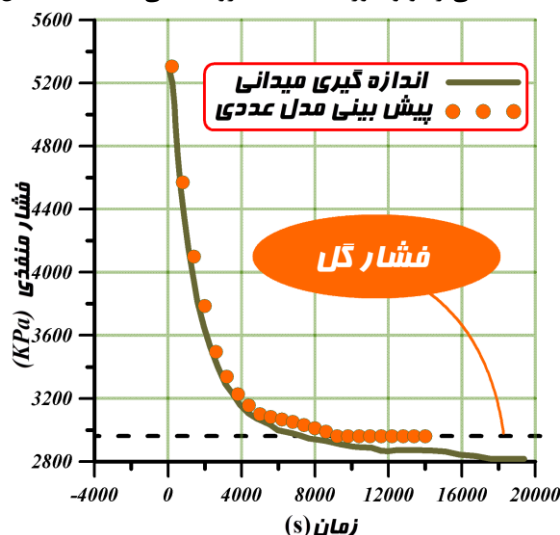


شکل ۱- تغییرات فاکتور شدت تنش در زمان برای یک ترک در فضای بی‌نهایت و تحت فشار داخلی

[۵۴] مقایسه شد. این داده‌ها از اندازه‌گیری‌های انجام‌شده در عمق ۴۰۰ متری یک سازند رسی استخراج شده‌اند. همان‌گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، روند تغییرات فشار منفذی در مدل عددی و داده‌های میدانی به سمت فشار گل حفاری (۲۹۶۰ کیلوپاسکال) همگرا می‌شود [۴۹]. هرچند مدل عددی زمان رسیدن به حداکثر فشار را اندکی بیشتر از داده‌های واقعی پیش‌بینی می‌کند، اما تطابق کلی روند پاسخ نشان‌دهنده قابلیت مناسب مدل در بازتولید رفتار هیدرومکانیکی محیط متخلخل است.

می‌دهد که پایداری شکستگی‌ها در محیط‌های متخلخل به تاریخچه زمانی بارگذاری و ویژگی‌های هیدرولیکی سنگ وابسته است. استفاده از المان‌های ثابت (CEP-DDM) امکان ردیابی دقیق نوک ترک را بدون نیاز به بازتولید شبکه فراهم می‌کند که یکی از مزیت‌های اصلی این روش در مقایسه با روش‌های دامنه‌محور محسوب می‌شود.

به منظور اعتبارسنجی بخش هیدرومکانیکی مدل، نتایج پیش‌بینی فشار منفذی با داده‌های میدانی ریتو و امورا

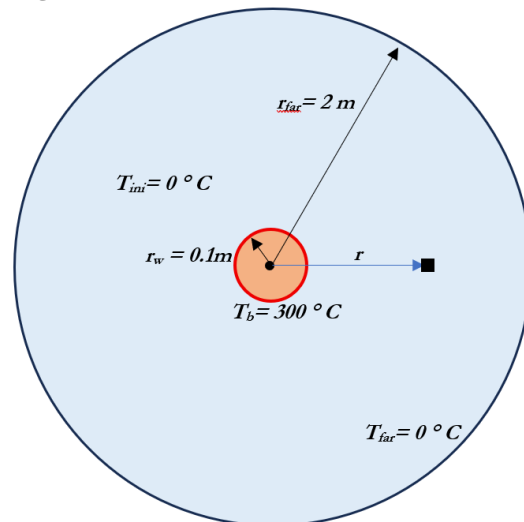


شکل ۲- مقایسه تغییرات فشار منفذی در زمان: داده‌های میدانی در برابر نتایج عددی

انتقال حرارت در یک استوانه توخالی از مسائل کلاسیک ترموالاستیسیته است که حل تحلیلی آن توسط

اولیه محیط صفر درجه سانتی‌گراد فرض شده و دمای دیواره چاه به طور ناگهانی به ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد افزایش یافته و سپس ثابت نگه داشته می‌شود.

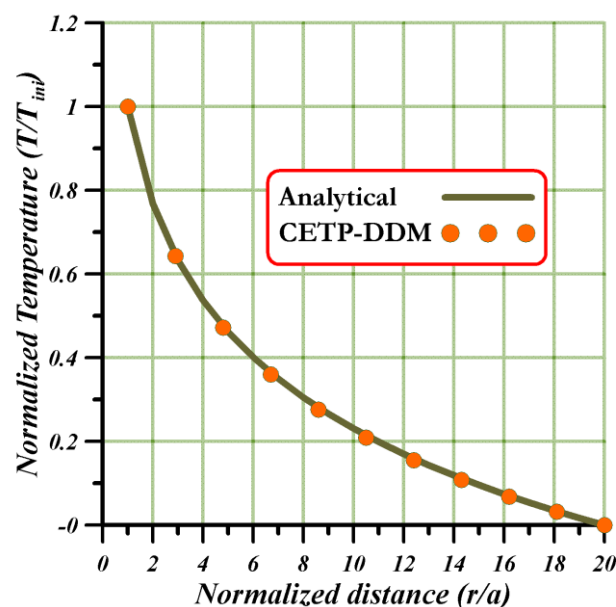
Nowacki ارائه شده است [۲۶]. از این مسئله برای ارزیابی صحت کوپلینگ حرارتی-مکانیکی مدل استفاده می‌شود. شکل ۳ هندسه مسئله را نشان می‌دهد. در این مسئله دمای



شکل ۳- انتقال حرارت در یک استوانه توخالی با دمای اولیه ۰ °C تحت بخار ۳۰۰ °C

دمای نرمال‌شده در محیط را پس از رسیدن به تعادل حرارتی نشان می‌دهد. تطابق بسیار خوب پاسخ عددی و حل تحلیلی، دقت مدل در شبیه‌سازی انتقال حرارت را تأیید می‌کند.

برای نمایش خالص اثرات حرارتی، تنش‌های اولیه محیط صفر در نظر گرفته شده‌اند؛ بنابراین تمام تنش‌های محاسبه‌شده ناشی از تغییرات دما هستند. شکل ۴ توزیع



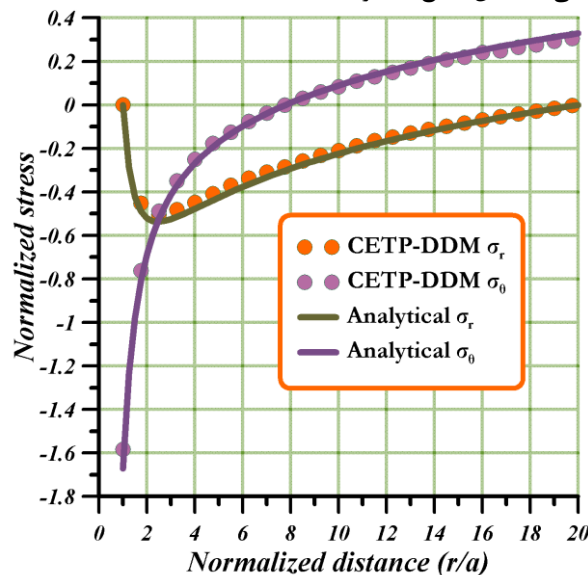
شکل ۴- توزیع دما در راستای شعاعی از مرکز چاه پس از رسیدن به تعادل حرارتی

در هر دو مؤلفه تنش تطابق بسیار خوبی دارند. تنش محیطی در مجاورت چاه فشاری است، با افزایش فاصله کاهش

شکل ۵ توزیع تنش‌های شعاعی و مماسی القاشده توسط انتقال حرارت را نشان می‌دهد. نتایج عددی و تحلیلی

تولنایی مدل در بازتولید صحیح پاسخ ترموالاستیک و تنش‌های ناشی از بارگذاری حرارتی هستند.

می‌یابد، در نواحی دورتر به حالت کششی تغییر می‌کند و در مرز دوردست به صفر میل می‌نماید. تنش شعاعی نیز روندی منطبق با پاسخ تحلیلی نشان می‌دهد. این نتایج بیانگر



شکل ۵- توزیع تنش‌های القایی شعاعی و مماسی در امتداد فاصله شعاعی نرمال شده از مرکز چاه پس از رسیدن به تعادل حرارتی

متمرکز باشد، بر بهبود میانی فیزیکی، توسعه روابط ساختاری معتبر و کاهش عدم قطعیت‌های موجود تمرکز کند. یکی از مهم‌ترین چالش‌ها، برقراری ارتباط میان فرآیندهای رخ داده در مقیاس حفره و دانه با رفتار مؤثر محیط در مقیاس مخزن و میدان است؛ موضوعی که نیازمند توسعه روش‌های پیشرفته همگن‌سازی و چارچوب‌های چندمقیاسی کارآمد خواهد بود. همچنین، مدل‌سازی اندرکنش میان شکستگی‌های طبیعی و القایی در محیط‌های ناهمگن و چندمقیاسی، به‌ویژه در کاربردهایی نظیر ذخیره‌سازی دی‌اکسید کربن، سامانه‌های زمین‌گرمایی پیشرفته و مخازن نامتعارف، همچنان یکی از مسائل حل نشده در ژئومکانیک باقی مانده است.

علاوه بر این، اعتبارسنجی مدل‌های THMC در شرایط واقعی میدان همچنان یکی از مهم‌ترین محدودیت‌های موجود به شمار می‌رود. بسیاری از فرآیندهای شیمیایی و ژئومکانیکی در بازه‌های زمانی بسیار طولانی رخ می‌دهند و داده‌های میدانی کافی برای ارزیابی عملکرد مدل‌ها در دسترس نیست. در نتیجه، توسعه آزمایش‌های بلندمدت،

علاوه بر این، نسخه‌های مختلف مدل DDM در سه حالت پوروالاستیک، ترموالاستیک و ترمو-هیدرومکانیکی با حل‌های تحلیلی و نتایج آزمایشگاهی اعتبارسنجی شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که حداکثر بازشدگی ترک (COD) تحت اثرات حرارتی می‌تواند با تأخیر زمانی قابل توجهی رخ دهد و در برخی شرایط این تأخیر به حدود یک سال می‌رسد. این پدیده ناشی از انتشار تدریجی میدان حرارتی در محیط متخلخل و برهم‌کنش آن با پاسخ مکانیکی سنگ است و اهمیت استفاده از مدل‌های کاملاً کوپل THM را در مسائل مهندسی نظیر تزریق بخار، سامانه‌های زمین‌گرمایی و دفع پسماند هسته‌ای برجسته می‌سازد.

۸- جهت‌های تحقیقاتی آینده

با وجود پیشرفت‌های چشمگیر در توسعه مدل‌های THMC طی سه دهه گذشته، همچنان چالش‌های بنیادی متعددی مانع از دستیابی به پیش‌بینی‌های کاملاً قابل اعتماد در مقیاس میدان می‌شوند. از این رو، انتظار می‌رود تحقیقات آینده بیش از آنکه بر افزودن پیچیدگی‌های جدید به مدل‌ها

علاوه بر ناپیوستگی‌های مکانیکی، ناپیوستگی‌های متناظر با شار سیال و شار حرارتی نیز در فرمول‌بندی وارد شده‌اند و میدان‌های تنش، فشار منفذی و دما با استفاده از توابع گرین و معادلات انتگرالی به‌صورت هم‌زمان محاسبه می‌شوند. این رویکرد ضمن حفظ مزیت اصلی *DDM* در کاهش بعد مسئله و حذف نیاز به مش‌بندی کامل دامنه، امکان تحلیل کارآمد شبکه‌های پیچیده شکستگی و مسائل وابسته به زمان را فراهم می‌سازد.

اعتبارسنجی چارچوب پیشنهادی با استفاده از داده‌های میدانی، حل‌های تحلیلی و مسائل معیار نشان داد که مدل قادر است رفتار وابسته به زمان محیط‌های پوروالاستیک، تکامل فشار منفذی، تغییرات ضریب شدت تنش و پاسخ‌های ترموالاستیک را با دقت مناسبی بازتولید کند. نتایج همچنین نشان داد که انتشار تدریجی میدان حرارتی می‌تواند پاسخ مکانیکی شکستگی‌ها را در بازه‌های زمانی طولانی کنترل کرده و زمان وقوع بیشینه بازشدگی ترک را به‌طور قابل توجهی به تأخیر اندازد؛ موضوعی که در کاربردهای نظیر تزریق بخار، سامانه‌های زمین‌گرمایی و دفع پسماندهای هسته‌ای از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

با این وجود، چارچوب ارائه‌شده بر پایه چند فرض ساده‌کننده است؛ از جمله فرض رفتار ترمو-پوروالاستیک خطی، همگنی محیط، اعتبار قانون دارسی، خواص ثابت مواد و استفاده از کوپلینگ یک‌طرفه حرارتی. همچنین اثر فرآیندهای شیمیایی، تغییرات تکاملی تخلخل و تراوایی، رفتارهای غیرخطی مصالح و رشد دینامیکی شکستگی‌ها به‌صورت صریح در فرمول‌بندی حاضر لحاظ نشده‌اند. بنابراین، نتایج این مطالعه عمدتاً در محدوده این فرضیات معتبر بوده و تعمیم آن به مسائل پیچیده‌تر مستلزم توسعه بیشتر مدل است.

در مجموع، نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که روش *DDM*، به دلیل کاهش بعد مسئله، دقت مناسب در مدل‌سازی شکستگی‌ها و قابلیت توسعه به مسائل چندفیزیکی، ظرفیت بالایی برای تحلیل محیط‌های متخلخل دارای شکستگی دارد. توسعه هسته‌های بنیادی کامل *THMC*، تلفیق *DDM* با مدل‌های انتقال واکنشی، گسترش چارچوب به محیط‌های ناهمگن و غیرخطی، و بهره‌گیری از روش‌های چندمقیاسی و مدل‌های جانشین مبتنی بر

برنامه‌های بین‌المللی مقایسه کدها و استفاده از داده‌های پایش میدانی برای کالیبراسیون و ارزیابی مدل‌ها اهمیت فزاینده‌ای خواهد داشت. از سوی دیگر، افزایش توان محاسباتی و گسترش معماری‌های موازی، امکان حل مدل‌های بزرگ‌تر و واقع‌گرایانه‌تر را فراهم خواهد کرد و به توسعه چارچوب‌های کاملاً یکپارچه برای شبیه‌سازی هم‌زمان فرآیندهای گرمایی، هیدرولیکی، مکانیکی و شیمیایی کمک خواهد نمود. در کنار این پیشرفت‌ها، توسعه کدهای متن‌باز، ایجاد مسائل محک استاندارد و بهره‌گیری از روش‌های داده‌محور و یادگیری ماشین برای کاهش هزینه‌های محاسباتی و تحلیل عدم قطعیت، می‌تواند نقش مهمی در ارتقای قابلیت اطمینان و کاربرپذیری مدل‌های *THMC* در مسائل پیچیده زیرسطحی ایفا کند.

۹- نتیجه‌گیری

مدل‌سازی فرآیندهای کوپل حرارتی-هیدرولیکی-مکانیکی-شیمیایی (*THMC*) در محیط‌های متخلخل و دارای شکستگی، به یکی از مهم‌ترین موضوعات پژوهشی در ژئومکانیک، مهندسی مخزن، ذخیره‌سازی زمین‌شناسی CO_2 ، سامانه‌های زمین‌گرمایی، دفع پسماندهای هسته‌ای و سایر کاربردهای مهندسی زیرسطحی تبدیل شده است. پیچیدگی این مسائل ناشی از برهم‌کنش هم‌زمان میدان‌های دما، فشار، تنش و واکنش‌های شیمیایی است که به‌طور مستقیم بر تکامل تخلخل، تراوایی، پایداری مکانیکی و عملکرد بلندمدت سامانه اثر می‌گذارند. از این‌رو، توسعه چارچوب‌های عددی دقیق و کارآمد برای تحلیل این فرآیندها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

در این مقاله، مبانی نظری مدل‌سازی *THMC*، معادلات حاکم، روش‌های عددی متداول، راهبردهای مختلف کوپلینگ، روش‌های اعتبارسنجی و مهم‌ترین حوزه‌های کاربرد این مدل‌ها به‌صورت جامع مرور و تحلیل شد. همچنین مزایا، محدودیت‌ها و قابلیت‌های روش‌های مبتنی بر گسسته‌سازی دامنه و روش‌های مرزی در حل مسائل چندفیزیکی مورد مقایسه قرار گرفت.

نوآوری این مطالعه، ارائه یک چارچوب ترمو-هیدرو-مکانیکی مبتنی بر روش ناپیوستگی جابجایی (*DDM*) برای محیط‌های متخلخل دارای شکستگی است. در این چارچوب،

یادگیری ماشین، از مهم‌ترین مسیرهای پژوهشی آینده برای
افزایش دقت و کارایی این رویکرد در کاربردهای پیچیده

۱۰- منابع

- [1] Zhang R, Winterfeld PH, Yin X, Xiong Y, Wu YS. Sequentially coupled THMC model for CO₂ geological sequestration into a 2D heterogeneous saline aquifer. *J Nat Gas Sci Eng* 2015;27:579–615. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.09.013>.
- [2] Yu J, Zhao J, Soga K, Zhao S, Liang W. A fully coupled THMC-MPM framework for modeling phase transition and large deformation in methane hydrate-bearing sediment. *J Mech Phys Solids* 2026;206. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2025.106368>.
- [3] Samala R, Chaudhuri A. Coupled THMC modeling of dissociation induced deformation of gas hydrate bearing media. *Comput Geosci* 2022;166. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2022.105162>.
- [4] Xu H, Liu G, Zhao Z, Ma F, Wang G, Chen Y. Coupled THMC modeling on chemical stimulation in fractured geothermal reservoirs. *Geothermics* 2024;116:102854. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2023.102854>.
- [5] Xu H, Liu G, Zhao Z, Ma F, Wang G, Chen Y. Coupled THMC modeling on chemical stimulation in fractured geothermal reservoirs. *Geothermics* 2024;116. <https://doi.org/10.1016/j.geothermics.2023.102854>.
- [6] Wu H, Liu Y, Zeng F, Ji J, Dahi A, Zhang K, et al. Fracture flow channeling in enhanced geothermal systems: THMC feedback mechanisms and mitigation strategies. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2026;237:117013. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2026.117013>.
- [7] Biot MA. General theory of three-dimensional consolidation. *J Appl Phys* 1941;12:155–64.
- [8] Abdollahipour A, Fatehi-Marji M. A thermo-hydromechanical displacement discontinuity method to model fractures in high-pressure, high-temperature environments. *Renewable Energy* 2020;153:1488–503.
- [9] Li S, Feng X-T, Zhang D, Tang H. Coupled thermo-hydro-mechanical analysis of stimulation and production for fractured geothermal reservoirs. *Appl Energy* 2019;247:40–59. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2019.04.036>.
- [10] Wei X, Feng Z, Zhao Y. Numerical simulation of thermo-hydro-mechanical coupling effect in mining fault-mode hot dry rock geothermal energy. *Renew Energy* 2019;139:120–35. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.02.070>.
- [11] Liu H, Maghoul P, Shalaby A, Bahari A. Thermo-Hydro-Mechanical Modeling of Frost Heave Using the Theory of Poroelasticity for Frost-Susceptible Soils in Double-Barrel Culvert Sites. *Transportation Geotechnics* 2019;100251. <https://doi.org/10.1016/j.trgeo.2019.100251>.
- [12] Mahmoodpour S, Singh M, Bär K, Sass I. Thermo-hydro-mechanical modeling of an enhanced geothermal system in a fractured reservoir using carbon dioxide as heat transmission fluid- A sensitivity investigation. *Energy* 2022;254:124266. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2022.124266>.
- [13] Rutqvist J, Tsang CF. A fully coupled three-dimensional THM analysis of the FEBEX in situ test with the ROCMAS Code: Prediction of THM behavior in a bentonite barrier. In: Stephansson O, Hudson A. J, Jing L, editors. *Coupled Thermo-Hydro-Mechanical-Chemical Processes in Geo-Systems*, vol. 2, Elsevier; 2004.
- [14] Tsang CF. Introductory editorial to the special issue on the DECOVALEX-THMC project. *Environmental Geology* 2009;57:1217–9. <https://doi.org/10.1007/S00254-008-1626-0>.
- [15] GUSTAFSON G, LINDBLOM ULF, SÖDER CO. Hydrogeological and hydromechanical aspects of gas storage. 7th ISRM Congress 1991.
- [16] Rutqvist J, Stephansson O. The role of hydromechanical coupling in fractured rock engineering. *Hydrogeol J* 2003.
- [17] Yu M, Chenevert ME, Sharma MM. Chemical-mechanical wellbore instability model for shales: Accounting for solute diffusion. *J Pet Sci Eng* 2003;38:131–43. [https://doi.org/10.1016/S0920-4105\(03\)00027-5](https://doi.org/10.1016/S0920-4105(03)00027-5).
- [18] Fink JK. *Hydraulic Fracturing Chemicals and Fluids Technology*. Elsevier; 2013.

- <https://doi.org/10.1016/C2012-0-02544-6>.
- [19] Biot poroelasticity of a chemically active shale. *Proc R Soc Lond A Math Phys Sci* 1993;440:365–77. <https://doi.org/10.1098/RSPA.1993.0021>.
- [20] Stringfellow WT, Domen JK, Camarillo MK, Sandelin WL, Borglin S. Physical, chemical, and biological characteristics of compounds used in hydraulic fracturing. *J Hazard Mater* 2014;275:37–54.
- [21] Dusseault MB. Coupled Thermo-Mechano-Chemical Processes in Shales: The Petroleum Borehole, 2004, p. 573–80. [https://doi.org/10.1016/S1571-9960\(04\)80101-0](https://doi.org/10.1016/S1571-9960(04)80101-0).
- [22] Bensted J, Brough AR, Page MM. Chemical degradation of concrete, in *Durability of Concrete and Cement Composites*. Woodhead Publishing Limited; 2007.
- [23] Sibson RH. Seismogenic Framework for Hydrothermal Transport and Ore Deposition. *Structural Controls on Ore Genesis*, Society of Economic Geologists; 2001, p. 25–50. <https://doi.org/10.5382/Rev.14.02>.
- [24] Principles of Structural Control on Permeability and Fluid Flow in Hydrothermal Systems. *Structural Controls on Ore Genesis*, Society of Economic Geologists; 2001, p. 1–24. <https://doi.org/10.5382/Rev.14.01>.
- [25] Chang C, Luo G. The Coupled THMC finite-element modeling of hydrothermal systems: Insights into the Jiama porphyry metallogenic system. *Ore Geol Rev* 2021;138:104404. <https://doi.org/10.1016/j.oregeorev.2021.104404>.
- [26] Nowacki W. Thermoelasticity. England: Pergamon Press; 1962.
- [27] Biot MA. Thermoelasticity and irreversible thermodynamics. *J Appl Phys* 1956;27:240–53.
- [28] Kurashige M. A thermoelastic theory of fluid-filled porous materials. *Int J Solids Structures* 1989;25:1039–52.
- [29] Mukherjee YX, Shah K, Mukherjee S. Thermoelastic fracture mechanics with regularized hypersingular boundary integral equations. *Eng Anal Bound Elem* 1999;23:89–96.
- [30] Kalantari Dehaghi A, Farrokh E, Molladavoodi H. Evaluation of the effect of temperature and number of heating-cooling cycles on the damage of rock salt. *JOURNAL OF ROCK MECHANICS* 2026;9:73–91. <https://doi.org/10.22034/IRSRM.2026.739361.1083>.
- [31] Liu CH, Massarweh O, Abushaikh AS. Numerical simulation on geosystem Thermal-Hydro-Mechanical-Chemical coupling: A review. *Geoenergy Science and Engineering* 2025;254. <https://doi.org/10.1016/j.geoen.2025.214059>.
- [32] Poulet T, Karrech A, Regenauer-Lieb K, Fisher L, Schaub P. Thermal-hydraulic-mechanical-chemical coupling with damage mechanics using ESCRIPTRT and ABAQUS. *Tectonophysics* 2012;526–529:124–32. <https://doi.org/10.1016/j.tecto.2011.12.005>.
- [33] Taron J, Elsworth D. Thermal-hydrologic-mechanical-chemical processes in the evolution of engineered geothermal reservoirs. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2009;46:855–64. <https://doi.org/10.1016/J.IJRMMS.2009.01.007>.
- [34] Bénézech P, Ménez B, Noiriél C, Boschi C, Dini A, Dallai L, et al. Enhanced CO₂-mineral sequestration by cyclic hydraulic fracturing and Si-rich fluid infiltration into serpentinites at Malenrata (Tuscany, Italy). *Chem Geol* 2009;265:209–26.
- [35] Zeynali ME. Mechanical and physico-chemical aspects of wellbore stability during drilling operations. *J Petrol Sci Eng* 2012;82–83:120–4.
- [36] Chen G. A study of wellbore stability in shales including porelastic, chemical and thermal effects. Univ. of Texas at Austin, 2001.
- [37] Hosseinzadehsadati S, Amour F, Hajiabadi MR, Nick HM. Thermo-hydro-mechanical-chemical coupling in chalk reservoirs: Impact on fluid flow and deformation during water injection. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2023;170:105514. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2023.105514>.
- [38] McNair SAM, Srisuriyachot J, Omole S, Connolly T, Rhead A, Lunt AJG. The effect of porosity on strain evolution and failure of soldered, small-diameter, thin-walled metallic pipes. *Journal of Materials Research and Technology* 2023;22:2409–24. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.12.088>.
- [39] Nousiou A, Pimentel E, Anagnostou G. Experimental investigation into the effect of porosity on the strains developing during anhydrite to gypsum transformation. *Geomechanics for Energy and*

- the Environment 2024;40. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2024.100601>.
- [40] Xia Z, Sun X, Zhao T, Wei H, Nian T, Wang L. A COMSOL-based particle finite element framework for multi-physics modeling of large deformation problems. *Comput Geotech* 2026;195. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2026.108088>.
- [41] Yin S, Dusseault MB, Rothenburg L. Coupled THMC modeling of CO₂ injection by finite element methods. *J Pet Sci Eng* 2011;80:53–60. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2011.10.008>.
- [42] Rinaldi AP, Rutqvist J, Luu K, Blanco-Martín L, Hu M, Sentís ML, et al. TOUGH3-FLAC3D: a modeling approach for parallel computing of fluid flow and geomechanics. *Comput Geosci* 2022;26:1563–80. <https://doi.org/10.1007/s10596-022-10176-0>.
- [43] Rutqvist J. Status of the TOUGH-FLAC simulator and recent applications related to coupled fluid flow and crustal deformations. *Comput Geosci* 2011;37:739–50. <https://doi.org/10.1016/j.cageo.2010.08.006>.
- [44] Weber F, Konietzky H. Concept to proof long-term safety of abandoned salt mines by hydro-mechanical coupled simulations with FLAC3D and Ansys Fluent. *Deep Resources Engineering* 2025;2:100201. <https://doi.org/10.1016/j.deepr.2025.100201>.
- [45] Abdollahipour A. Crack propagation mechanism in hydraulic fracturing procedure in oil reservoirs. University of Yazd, 2015.
- [46] Abdollahipour A, Fatehi Marji M, Yarahmadi-Bafghi A, Gholamnejad J, Yarahmadi Bafghi A, Gholamnejad J. Simulating the propagation of hydraulic fractures from a circular wellbore using the Displacement Discontinuity Method. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences* 2015;80:281–91. <https://doi.org/10.1016/j.ijrmms.2015.10.004>.
- [47] Abdollahipour A. Crack Analysis Using a Dislocation-Based Displacement Discontinuity Method: Derivation of Higher-Order Elements, Numerical Implementation, and Accuracy Analysis. *Comput Geotech* 2024.
- [48] Abdollahipour A, Marji MF, Bafghi AY, Gholamnejad J, Fateh-Marji M, Yarahmadi-Bafghi A, et al. Time-dependent crack propagation in a poroelastic medium using a fully coupled hydromechanical displacement discontinuity method. *Int J Fract* 2016;199:71–87. <https://doi.org/10.1007/s10704-016-0095-9>.
- [49] Abdollahipour A, Marji MF, Yarahmadi-Bafghi A, Gholamnejad J, Fatehi Marji M, Yarahmadi Bafghi A, et al. A complete formulation of an indirect boundary element method for poroelastic rocks. *Comput Geotech* 2016;74:15–25. <https://doi.org/10.1016/j.compgeo.2015.12.011>.
- [50] Rahmani Shahrki A, Baghbanan A, Azhari A, Askarpour Kabir A, Vahedi A, Mirzabeig S. Validation of Numerical Simulation of Fluid Flow Through Rough Rock Fractures Using Physical Modeling Based on 3D Printing (In Persian). *JOURNAL OF ROCK MECHANICS* 2024;8:53–64. <https://doi.org/https://doi.org/10.22034/IRSRM.2025.530650.1063>.
- [51] Birkholzer JT, Graupner BJ, Harrington J, Jayne R, Kolditz O, Kuhlman KL, et al. DECOVALEX-2023: An international collaboration for advancing the understanding and modeling of coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) processes in geological systems. *Geomechanics for Energy and the Environment* 2025;42. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2025.100685>.
- [52] Birkholzer JT, Graupner BJ, Harrington J, Jayne R, Kolditz O, Kuhlman KL, et al. DECOVALEX-2023: An international collaboration for advancing the understanding and modeling of coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) processes in geological systems. *Geomechanics for Energy and the Environment* 2025;42. <https://doi.org/10.1016/j.gete.2025.100685>.
- [53] Cheng AH-D. Poroelasticity. Vol. 27. Switzerland: Publishing, Springer International; 2016.
- [54] Rito F, Emura T. Sampling method and pore water pressure measurement in the great depth (-400m). *Proceedings of the 18th International Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering*, Paris: 2013, p. 607–10.



THMC Modeling Frameworks in Porous Media: Fundamentals, Applications, and Development of the Displacement Discontinuity Method in Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Environments

Abolfazl Abdollahipour^{1*}, Alireza Kargar¹

1. School of Mining Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran

Received: 28 May 2026 Accepted: 21 June 2026

(*Corresponding author: abdollahipour@ut.ac.ir)

Keywords

Final Extended Abstract
THMC coupling
Multiphysics modeling
Governing equations
Displacement Discontinuity Method
Fractured porous media

Final English Extended Abstract

Summary

This paper reviews the theoretical foundations of thermo–hydro–mechanical–chemical (THMC) coupling in porous and fractured media, including governing equations, numerical methods, coupling strategies, validation approaches, and engineering applications. Beyond the review, the main contribution is the presentation of a thermo–hydro–mechanical (THM) framework based on the Displacement Discontinuity Method (DDM) for fractured porous media. The proposed formulation extends the conventional

DDM by incorporating hydraulic and thermal flux discontinuities together with mechanical displacement discontinuities within a coupled boundary integral framework.

Introduction

THMC processes govern the response of many subsurface engineering systems, including geological CO₂ storage, nuclear waste disposal, enhanced geothermal systems, unconventional reservoirs, and gas hydrate production. Their numerical simulation remains challenging because of the strong interactions among thermal, hydraulic, mechanical, and chemical fields, particularly in fractured formations. Although various domain-based numerical methods have been developed, boundary-based formulations capable of efficiently handling complex fracture networks remain limited. This study combines a comprehensive review of THMC modeling with the development of a DDM-based THM framework for fractured porous media.

Methodology and Approaches

The governing equations, constitutive relationships, numerical discretization methods, and coupling strategies used in THMC simulations are first reviewed and compared. Subsequently, a coupled THM formulation based on DDM is introduced. Green's functions and boundary integral equations are employed to calculate stresses, pore pressure, temperature, and displacement fields while accounting for coupled thermo-hydraulic-mechanical interactions. The formulation assumes linear thermo-poroelastic behavior, homogeneous porous media, Darcy flow, constant material properties, and one-way thermal coupling, while chemical reactions and heat generation due to mechanical dissipation are neglected.

Results and Conclusions

Validation against field observations, analytical solutions, and benchmark problems demonstrates that the proposed framework accurately reproduces transient poroelastic behavior, pore-pressure evolution, stress intensity factor variations, and thermoelastic responses. The results also indicate that thermal diffusion may significantly delay fracture deformation under thermal loading. By reducing the problem dimension and eliminating full-domain meshing, the proposed DDM framework provides an efficient and accurate tool for modeling fractured porous media. Future work should focus on extending the formulation to nonlinear heterogeneous media and fully coupled THMC analyses incorporating reactive transport
