

Molekylær modellering av oppsprekking i gasshydrater

Henrik Andersen Sveinsson

Fysisk institutt
Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet
Universitetet i Oslo

8. mai 2015

Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon

Oversikt

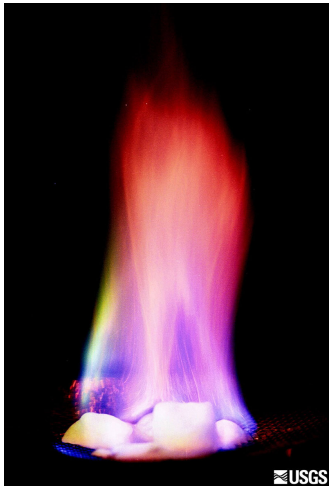
1 Introduksjon og Bakgrunn

2 Modellering og simulering

3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

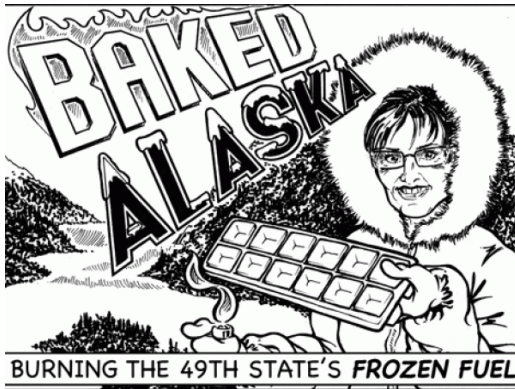
Hva er gasshydrater?



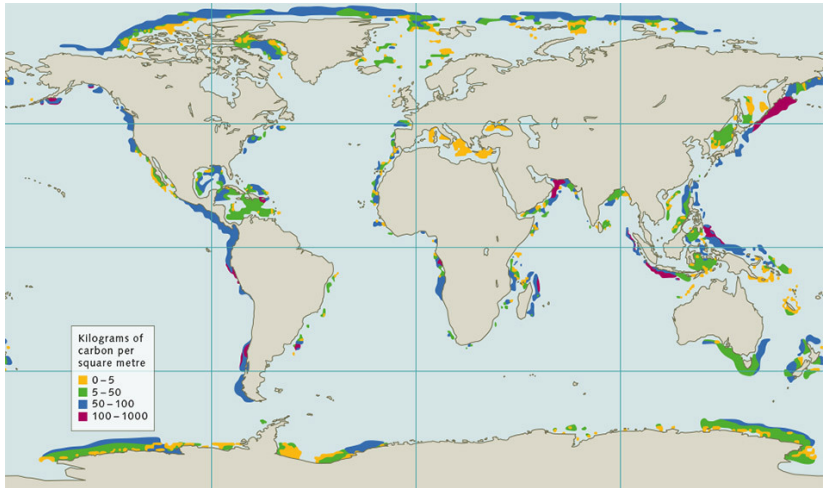
- Et isliknende stoff som inneholder molekyler av stoffer som opptrer som gasser under vanlige forhold.
- Vanligvis mener man metanhydrater når man sier gasshydrater.

Bruksområder

- Energi (brenne metan)
- CO₂-lagring



Det ligger masse gasshydrater i havet, men sannsynligvis ikke så mye som man ofte blir fortalt..



Det ligger masse gasshydrater i havet, men sannsynligvis ikke så mye som man ofte blir fortalt..

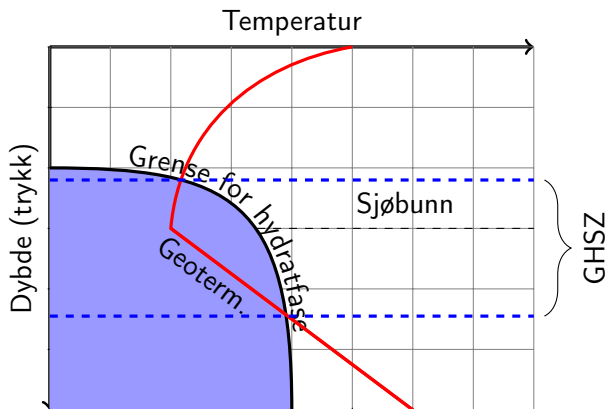
Kartet viser ca 500 gigatonn med karbon lagret i gasshydrater.
Det er mye.

Vanlige estimater ligger mellom 500 og 2500 gigatonn.
Høye estimater er $\sim 10\,000$ gigatonn.

Det 120 gigatonn karbon i kjente naturgassreservoarer.



Det ligger masse gasshydrater i havet, men sannsynligvis ikke så mye som man ofte blir fortalt..



Risiko

Operasjonell

- Tette rør

Geologisk

- Sedimentskred
- *the clathrate gun hypothesis*

Åpne spørsmål

Materialeegenskaper

- Bruddstyrke
- Spøtt eller duktilt?
- Hvordan ser sprekkeoverflaten ut?
- Hvor mye metan frigjøres ved oppsprekking?
- Hvor forutsigbar er bruddstyrken?
- Hvorfor viser eksperimenter deformasjonsharding til 20 % deformasjon?

Simuleringsteknisk

- Hvilke interaksjonspotensialer er best?
- Hvordan bør man utløse sprekker?

Oversikt

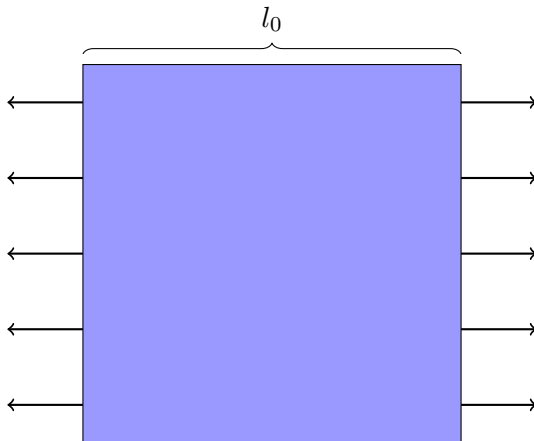
1 Introduksjon og Bakgrunn

2 Modellering og simulering

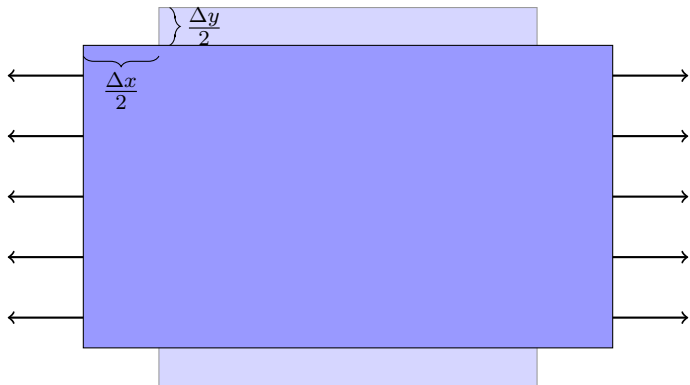
3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

Simulert system for mekaniske egenskaper



Simulert system for mekaniske egenskaper



Beregner Youngs modul og Poissonforholdet basert på de forrige figurene:

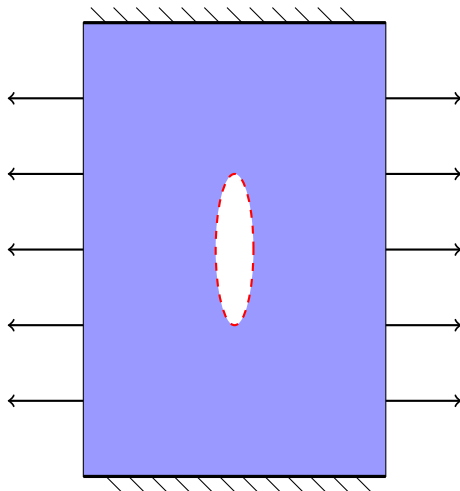
Youngs modul

$$E = \frac{\sigma_x l_0}{\Delta x} = \frac{\sigma_x}{\epsilon_x}$$

Poissonforholdet

$$\nu = -\frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Simulert system for sprekker



Oversikt

1 Introduksjon og Bakgrunn

2 Modellering og simulering

3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

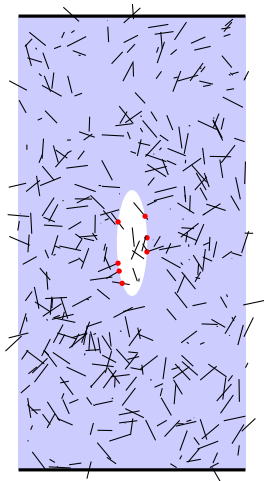
Mekaniske egenskaper

Måling av arealet til sprekkoverflaten

Jeg bruker en
Monte-Carlo-metode for å finne
tilgjengelig overflate:

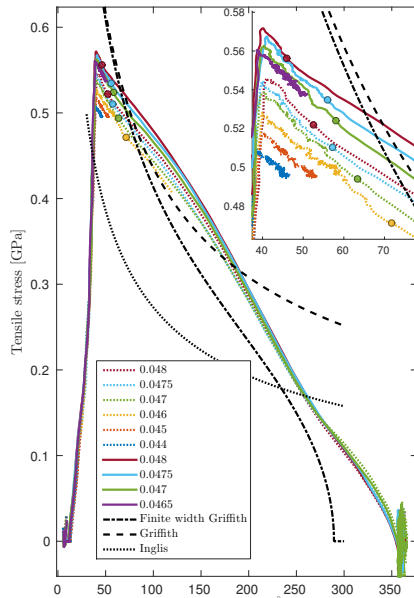
$$A_{ss} = 2V \frac{n_s}{L}$$

A_{ss}	overflatearealet
V	volum av prøven
n_s	antall kryssninger vegg-tomrom
L	total lengde av trukne linjestykker



Hovedresultat

- Hver fargede strek er en sprekksimulering.
- Oppsprekking skjer først sakte, ved smelting, deretter fort, ved brudd.



Oversikt

- 1 Introduksjon og Bakgrunn
- 2 Modellering og simulering
- 3 Resultater
- 4 Oppsummering og diskusjon**