

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

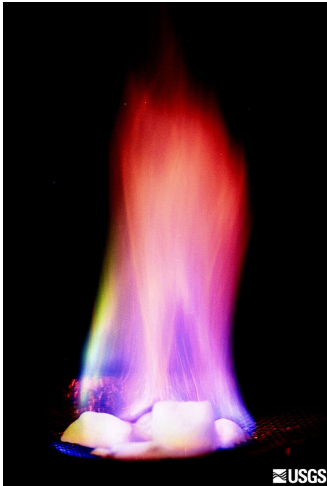
3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

Hva skjer i masteren min?

Jeg kombinerer 3 ting som ikke er så vanlig å kombinere:

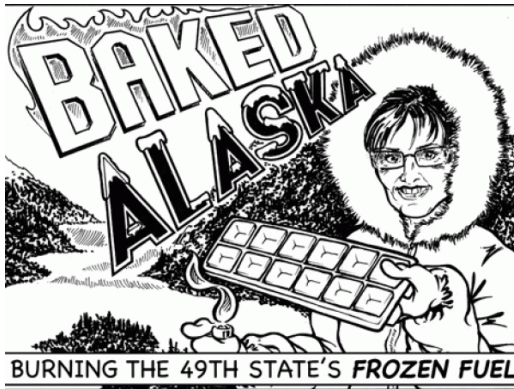
Hva er gasshydrater?



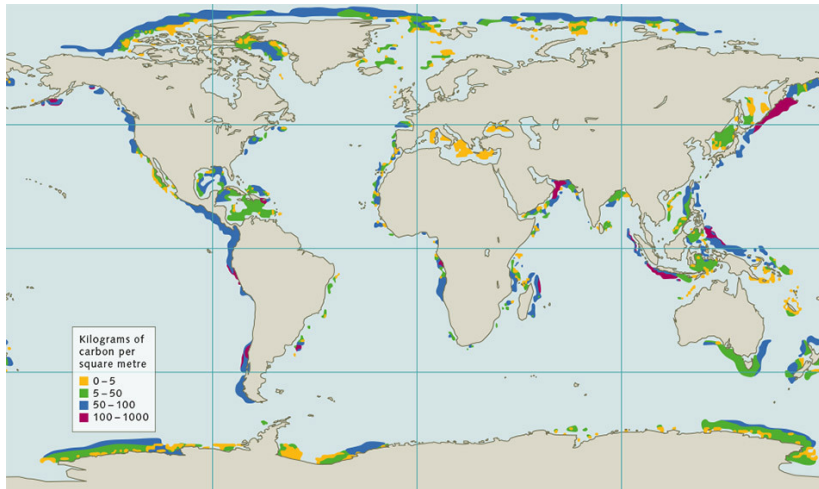
- Et isliknende stoff som inneholder molekyler av stoffer som opptre som gasser under vanlige forhold.
- Vanligvis mener man metanhydrater når man sier gasshydrater.

Bruksområder

- Energi (brenne metan)
- CO₂-lagring



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

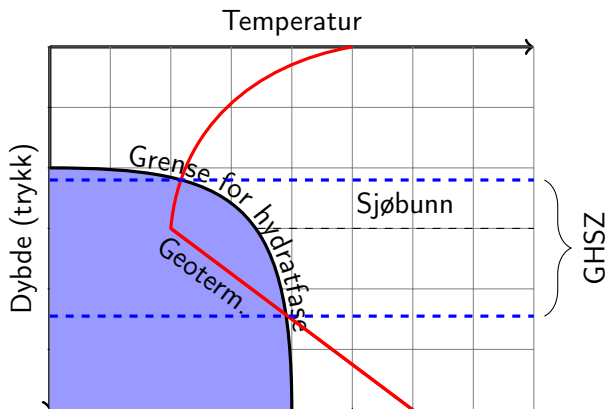


Figur: *The World Ocean Review, Marine Resources – Opportunities and Risks, 2014*

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..



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

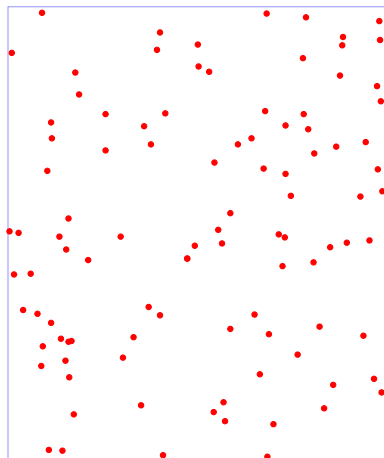
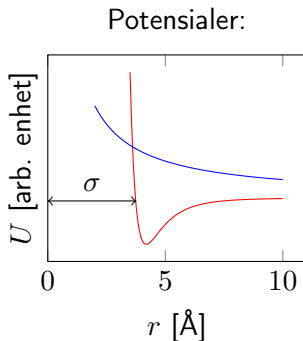
2 Modellering og simulering

3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

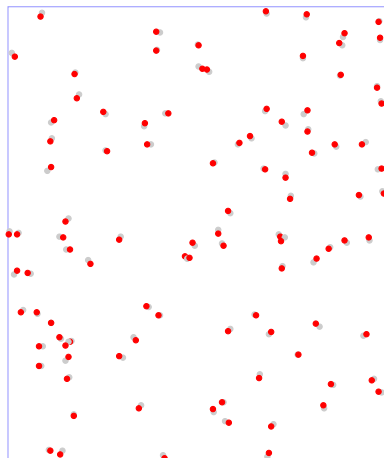
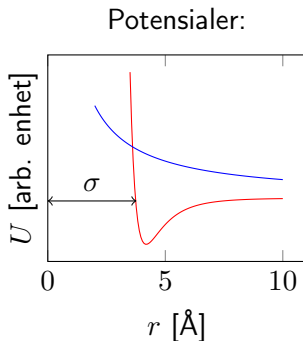
Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



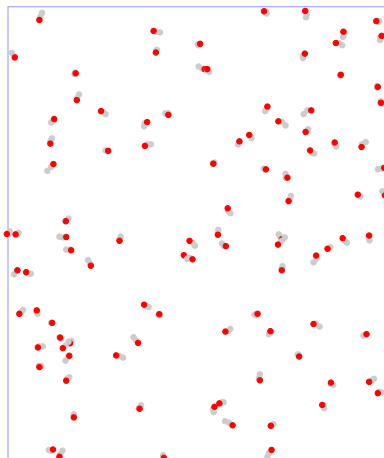
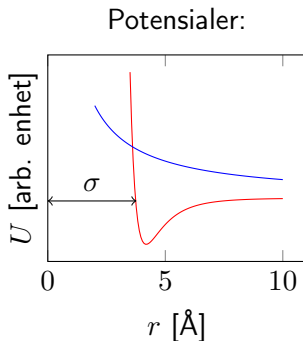
Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter



Molekylærdynamikk: Tidsutvikle et system av punktpartikler som styres av Newtons 2. lov, $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}$

Partikler med posisjoner og hastigheter

Lennard–Jones-
potensialet

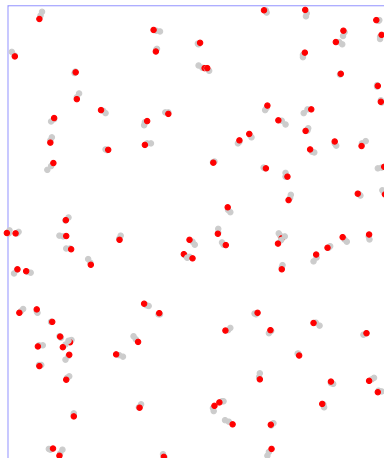
$$U = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Coulomb-potensialet

$$U = k \frac{q_a q_b}{r}$$

Kraftberegning

$$\mathbf{F} = -\nabla U$$

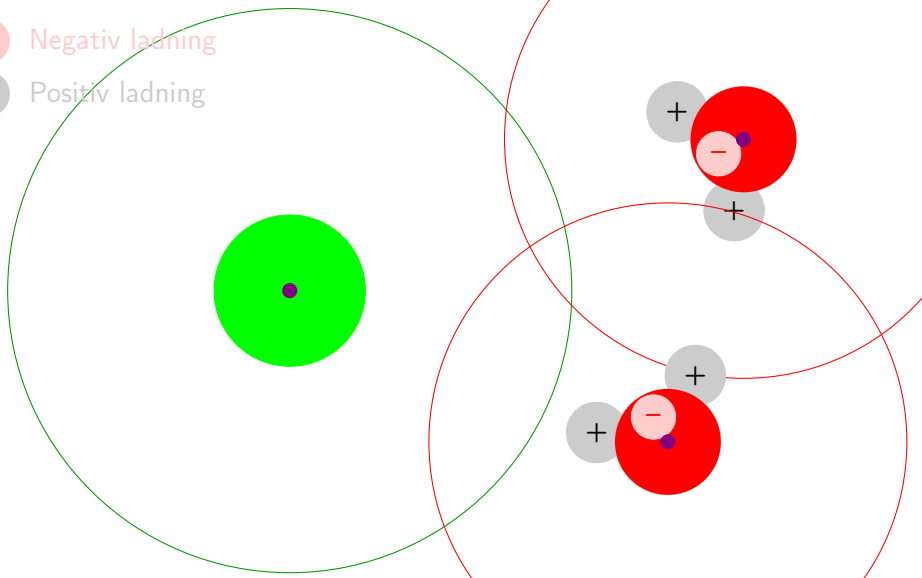


TIP4P/ICE + UAM (vann og metan)

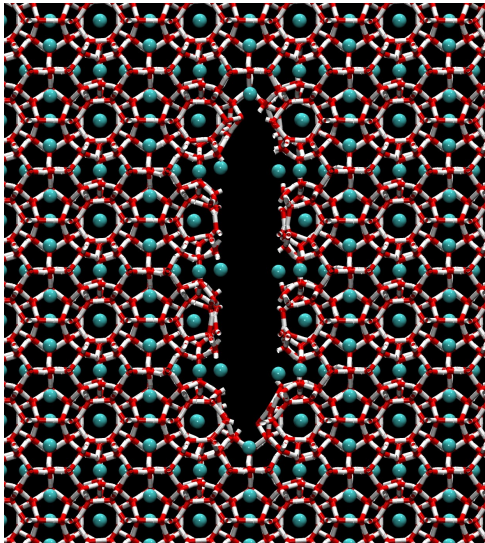
● Lennard-Jones-sentrum

— Negativ ladning

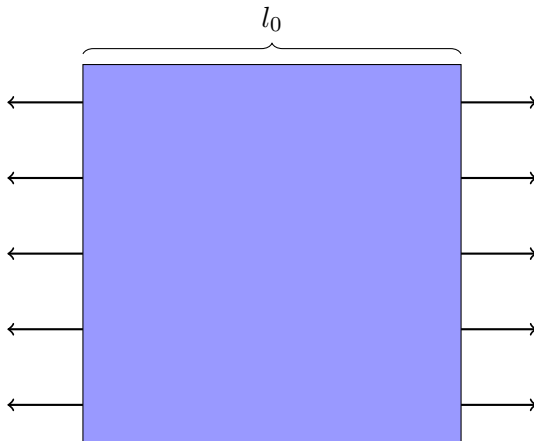
+ Positiv ladning



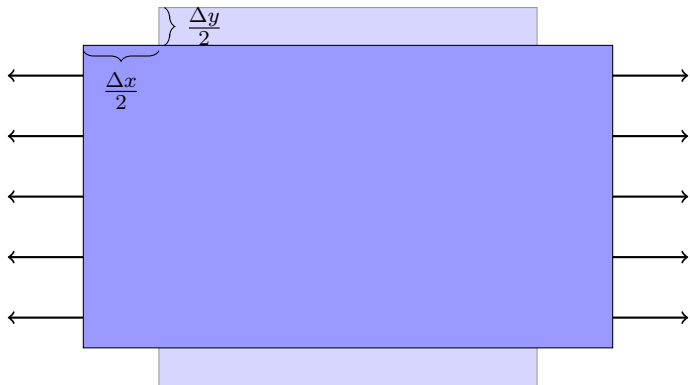
TIP4P/ICE + UAM (vann og metan)



Simulert system for mekaniske egenskaper



Simulert system for mekaniske egenskaper



Simulert system for mekaniske egenskaper

Beregner Youngs modul og Poissonforholdet basert på de forrige figurene:

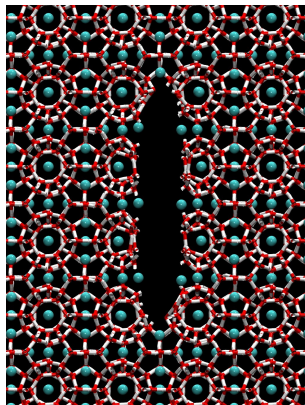
Youngs modul

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

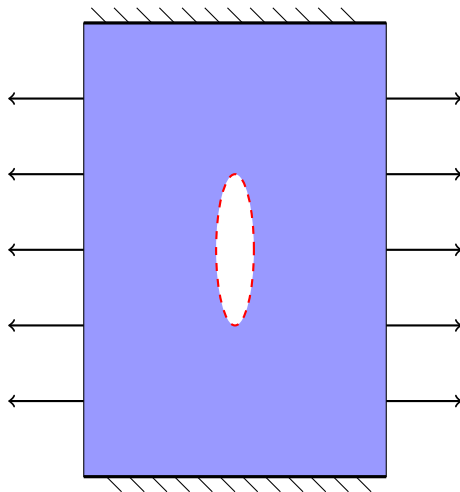
Poissonforholdet

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

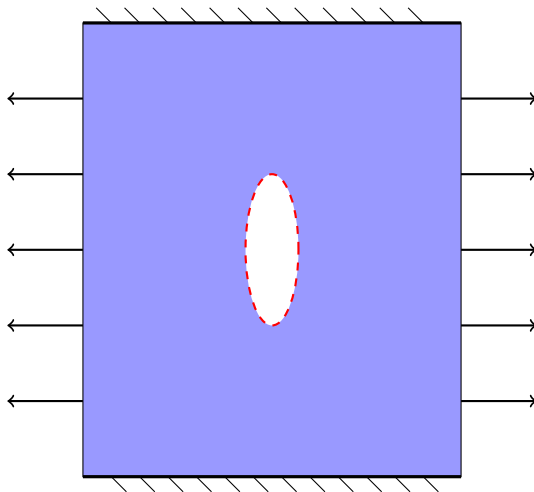
Simulert system for sprekker



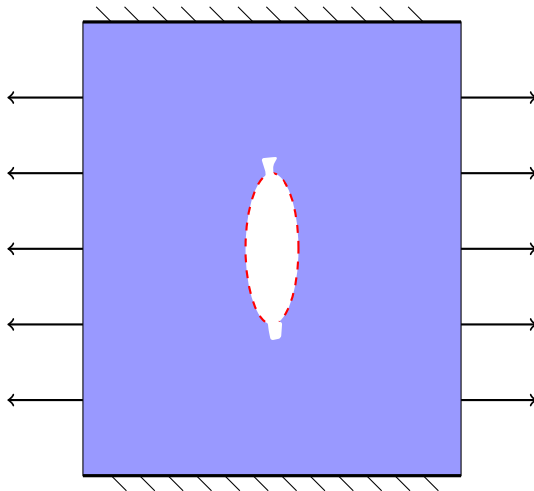
Simulert system for sprekker



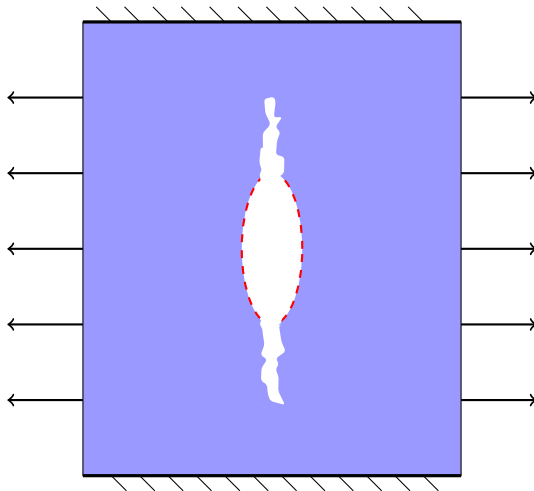
Simulert system for sprekker



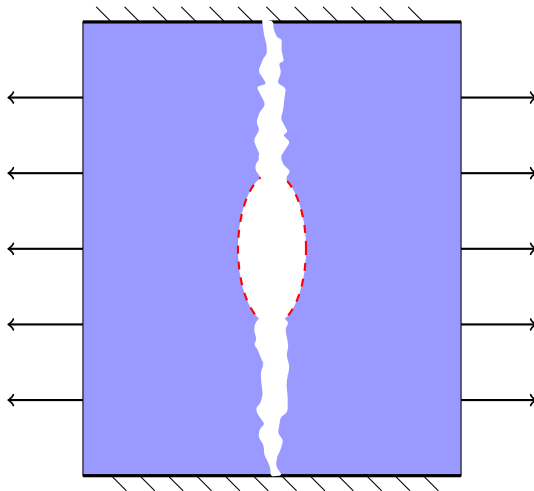
Simulert system for sprekker



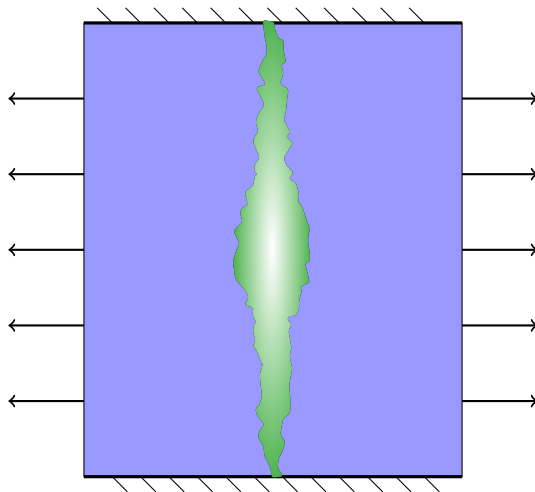
Simulert system for sprekker



Simulert system for sprekker



Simulert system for sprekker



Hva skal til for at det sprekker opp?

Griffith og Irwins energibalanse

$$\mathcal{G} > \mathcal{G}_c \stackrel{\text{sprøtt}}{=} 2\gamma_s$$

Dersom den *mekaniske* energien som frigjøres ved å åpne ny sprekkeflate er større enn energien som kreves for å åpne sprekken, vil sprekken vokse.

Hva var det jeg lurte på?

- Bruddstyrke
- Frigjort metan
- Bruddmekanisme

Oversikt

1 Introduksjon og Bakgrunn

2 Modellering og simulering

3 Resultater

4 Oppsummering og diskusjon

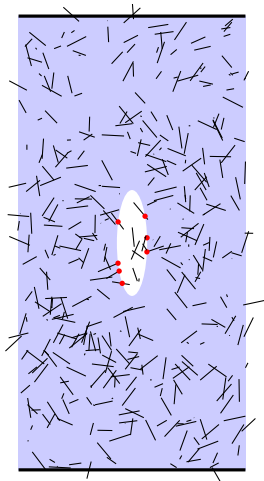
Mekaniske egenskaper

Måling av arealet til sprekkoverflaten

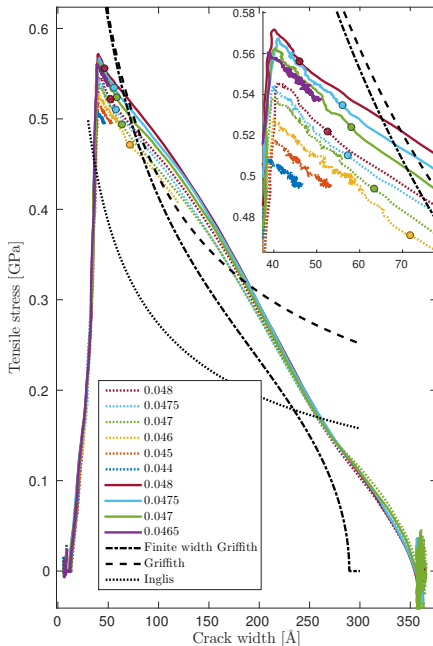
Jeg bruker en
Monte-Carlo-metode for å finne
tilgjengelig overflate:

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

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



- 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**