

Numeričko modeliranje hidrodinamike mikroplastike u laboratorijskom eksperimentu

Kopajtić, Filip

Master's thesis / Diplomski rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Rijeka, Faculty of Engineering / Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:190:849042>

Rights / Prava: [Attribution 4.0 International](#)/[Imenovanje 4.0 međunarodna](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2025-03-23**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the University of Rijeka, Faculty of Engineering](#)



SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Diplomski sveučilišni studij strojarstva

Diplomski rad

**NUMERIČKO MODELIRANJE HIDRODINAMIKE
MIKROPLASTIKE U LABORATORIJSKOM
EKSPERIMENTU**

Rijeka, siječanj 2024.

Filip Kopajtić

0069080050

SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Diplomski sveučilišni studij strojarstva

Diplomski rad

**NUMERIČKO MODELIRANJE HIDRODINAMIKE
MIKROPLASTIKE U LABORATORIJSKOM
EKSPERIMENTU**

Mentor: prof.dr.sc. Lado Kranjčević

Rijeka, siječanj 2024.

Filip Kopajtić

0069080050

Rijeka, 19. ožujka 2023.

Zavod: **Zavod za mehaniku fluida i računarsko inženjerstvo**
Predmet: **Dinamika fluida**
Grana: **2.15.04 mehanika fluida**

ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Pristupnik: **Filip Kopajtić (0069080050)**
Studij: **Sveučilišni diplomski studij strojarstva**
Modul: **Računarska mehanika i inženjerstvo**

Zadatak: **Numeričko modeliranje hidrodinamike mikroplastike u laboratorijskom eksperimentu/Computational Analysis of Microplastics Hydrodynamics in Laboratory Experiment**

Opis zadatka:

Postaviti ili analizirati eksperiment strujanja vode u otvorenom laboratorijskom kanalu. Ponoviti eksperiment upotrebom numeričkih modela te usporediti rezultate različitih numeričkih modela i izabrati najpovoljniji turbulentni model strujanja. Upotrebom numeričkog simulacijskog softvera numerički izračunati polje brzina i tlaka i analizirati dinamiku gibanja čestica mikroplastike različitih veličina. Računalne analize provesti numeričkim modelom visoke rezolucije u supračunalnom okruženju.

Rad mora biti napisan prema Uputama za pisanje diplomskih / završnih radova koje su objavljene na mrežnim stranicama studija.

Kopajtić

Zadatak uručen pristupniku: 20. ožujka 2023.

Mentor:

Kranjčević

Prof. dr. sc. Lado Kranjčević

Predsjednik povjerenstva za
diplomski ispit:

Bonefačić

Izv. prof. dr. sc. Igor Bonefačić

IZJAVA

Izjavljujem da sam ovaj diplomski rad pod naslovom „Numeričko modeliranje hidrodinamike mikroplastike u laboratorijskom eksperimentu“ napravio samostalno, prema zadatku uručenom 20.3.2023.

Kopajtić

Filip Kopajtić

ZAHVALA

Zahvaljujem se mentoru prof.dr.sc Ladi Kranjčeviću i asistentici Marti Alvir na pruženim savjetima i pomoći tijekom izrade diplomskog rada, kao i na stečenom znanju tijekom studija. Također se zahvaljujem svojoj obitelji na podršci prilikom studiranja.

SADRŽAJ

1. UVOD	1
2. MIKROPLASTIKA	2
2.1 Karakteristike mikroplastike.....	2
2.2 Proces nastajanja mikroplastike.....	3
2.3 Utjecaj mikroplastike na okoliš i zdravlje	4
2.4 Nerazgradivost plastike	6
3. MODELIRANJE STRUJANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE	7
3.1 Matematički model strujanja čestica	7
3.2 Koeficijent otpora oblika	9
4. TURBULENTNO MODELIRANJE STRUJANJA	11
4.1 Podjela strujanja s obzirom na turbulentnost.....	11
4.2 Numerički modeli turbulentnog strujanja	13
4.2.1 DNS	13
4.2.2 LES	15
4.2.3 RANS.....	15
4.3 Turbulentni modeli strujanja.....	15
4.3.1 $k - \varepsilon$ modeli	16
4.3.2 $k - \omega$ modeli	18
4.3.3 $v^2 - f$ modeli	20
5. ANALIZA EKSPERIMENTA	23
5.1 Opis eksperimenta	23
5.2 Rezultati eksperimenta	25
6. IZRADA NUMERIČKOG MODELA I PRIPREMA SIMULACIJE	28
6.1 OpenFOAM.....	28
6.2 Izrada domene i numeričke mreže.....	29
7. SIMULACIJA STRUJANJA VODE	35
7.1 „simpleFoam“ numerički rješavač.....	35
7.2 Simulacija turbulentnog strujanja LES numeričkim modelom	37
7.3 Simulacija turbulentnog strujanja RANS numeričkim modelima.....	44
7.3.1 Simuliranje pomoću $k - \varepsilon$ modela	44
7.3.2 Simuliranje pomoću $k - \omega$ SST modela	51

8. SIMULACIJA HIDRODINAMIKE ČESTICA MIKROPLASTIKE	56
8.1 Superračunalo Bura	56
8.2 Priprema simulacije strujanja čestica mikroplastike	57
8.3 Validacija numeričke simulacije	61
8.4 Simulacija hidrodinamike nesferičnih čestica	70
9. ZAKLJUČAK	75
10. LITERATURA	76
11. SAŽETAK	80
12. SUMMARY	81
13. POPIS SLIKA	82
14. POPIS TABLICA	85

1. UVOD

Plastika se, zbog svoje raznovrsnosti i lake obrade, ubraja među najrašireniji materijal na svijetu. Zbog visoke razine korištenja te sve veće proizvodnje, plastika također postaje najrasprostranjenija vrsta otpada, koji velikom većinom završava u vodenim ekosustavima, a pogotovo moru.

Plastika se kao otpad u moru i ostalim većim vodenim površinama nalazi u različitim veličinama, ali se u posljednjim godinama istraživanje utjecaja plastike na ekosustave fokusiralo na mikroplastiku, koja se ispostavila kao zagađivač od iznimnog značaja. Pod mikroplastiku se ubrajaju sitni komadi plastike manji od 5 mm, i veći od 0,1 mm. S obzirom na malene dimenzije mikroplastika se veoma brzo širi pomoću morskih struja, te morski organizmi koji unesu čestice u sebe pate od trovanja, neuhranjenosti, i povećane smrtnosti. Mikroplastika predstavlja i problem za čovjekovo zdravlje, jer se na nju može naići u prehrambenim i kozmetičkim proizvodima [1].

Kako je nakupljanje mikroplastike u moru postao globalni problem, na temu ekološkog i zdravstvenog utjecaja mikroplastike su pisani brojni radovi. Zbog kontrole i smanjenja širenja čestica u okoliš, potrebno je poznavati ponašanje čestica prilikom kretanja u vodi, tj. njihovu dinamiku. Većina radova na temu mikroplastike se bavi prikupljanjem čestica i analiziranjem fizikalnih i kemijskih svojstava, dok oni koji se bave kretanjem čestica se pretežito fokusiraju na ponašanje čestica u statičkim uvjetima, pa su stoga pojave pri dinamičkom gibanju čestica mikroplastike slabije proučavane [1].

U ovom radu bit će analizirane pojave koje se javljaju prilikom dinamičkog gibanja čestica mikroplastike, preciznije prilikom strujanja vode u kanalu. U početnom dijelu diplomskog rada su opisani procesi nastajanja mikroplastike, njene karakteristike te utjecaj na okoliš. U narednim poglavljima je opisano matematičko modeliranje strujanja čestica, karakteristike turbulentnog strujanja te numeričko modeliranje istog, kao i opis eksperimenta na kojem se temelje provedene simulacije. Završna poglavlja obuhvaćaju izradu domene i pripremu simulacija te prikaz simulacija strujanja vode u otvorenom kanalu i simulacija strujanja čestica mikroplastike, nakon čega je dana usporedba dobivenih rezultata sa eksperimentom.

2. MIKROPLASTIKA

2.1 Karakteristike mikroplastike

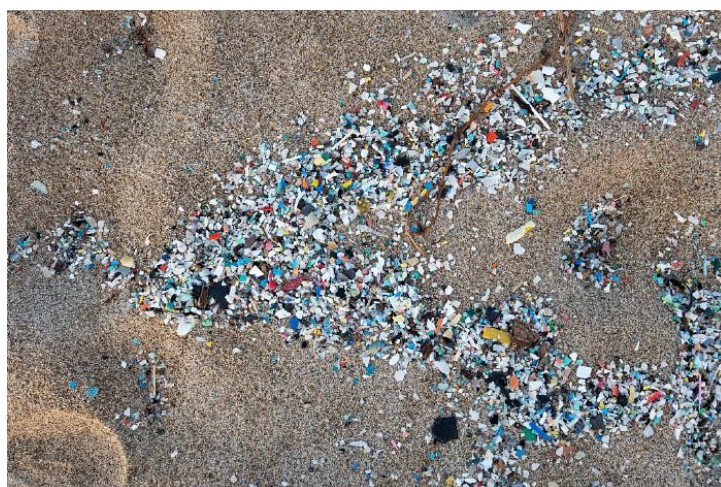
Mikroplastika je, kako se može zaključiti iz imena, naziv za sitne komadiće plastike. Općenito, plastiku s obzirom na veličinu plastičnih dijelova (čestica) možemo podijeliti na:

- Makroplastiku (čestice i komadi plastike promjera većeg od 2,5 cm)
- Mezoplastiku (čestice i komadi plastike u rasponu promjera od 2,5 cm do 5 mm)
- Mikroplastiku (čestice i komadi plastike u rasponu promjera od 5 mm do 0,1 mm)
- Nanoplastiku (čestice plastike promjera manjeg od 0,1 μm) [1]

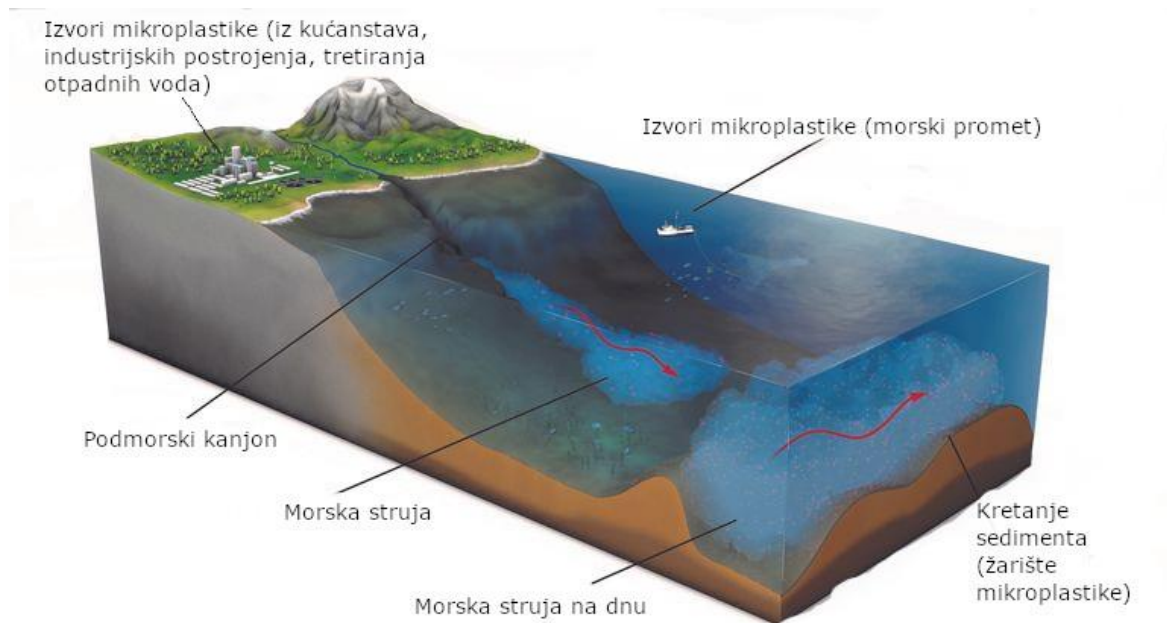


Slika 2.1 Veličina čestica mikroplastike [2]

Zbog svojih malih dimenzija mikroplastika se vrlo brzo rasprostranjuje pomoću zračnih i morskih struja te ju je moguće pronaći u gotovo svim okruženjima u svijetu, poput atmosfere, mora, oceana i slatke vode. Zbog dugotrajnosti i slabe razgradivosti mikroplastika se taloži i zadržava na površinama poput tla i morskog dna [3].



Slika 2.2 Nakupljanje mikroplastike na plaži [4]



Slika 2.3 Kretanje čestica mikroplastike kroz okoliš [5]

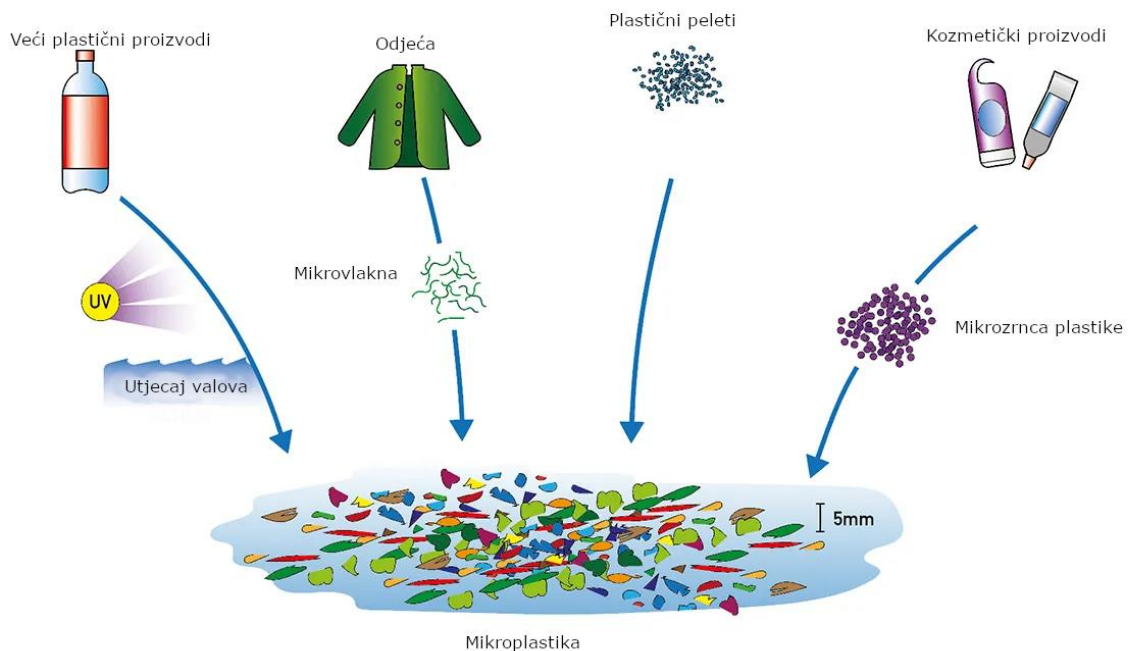
Dodatan problem predstavlja to što se čestice mikroplastike dugo zadržavaju u organizmima, te time imaju mogućnost penjanja po hranidbenom lancu, čime vrlo lako mogu narušiti zdravlje životinja i ljudi. Posebno velik rizik od ingestiranja imaju morski organizmi, koji mogu biti u stalnom kontaktu s česticama mikroplastike koje zamjenjuju za hranu. Zbog svoje široke rasprostranjenosti, čestice mikroplastike je moguće naći u prehrambenim proizvodima, poput mlijeka, vode za piće, medu, alkoholnim pićima i sl., te u kozmetičkim proizvodima poput šampona, gela za tuširanje, različitim kremama, proizvodima za šminkanje, pastama za zube itd [1].

2.2 Proces nastajanja mikroplastike

S obzirom na način kako mikroplastika nastaje, možemo napraviti podjelu na primarnu i sekundarnu mikroplastiku.

Primarna mikroplastika uključuje plastične čestice ili predmete koji imaju promjer odgovarajuće veličine prije nego što uđu u okoliš koji kontaminiraju. U najveće izvore primarne mikroplastike ubrajaju se automobilske gume (10-20% ukupne primarne mikroplastike), gradsko onečišćenje (10-20%), oznake na cestama (3-5%), te prevlaka brodovima i ostalim plovilima (3,7%). Osim navedenih, ostali česti izvori primarne mikroplastike su mikrovlakna iz odjeće i ostalih tekstilnih proizvoda (poput mreža za ribolov), plastični peleti te kozmetički proizvodi [6].

Sekundarna mikroplastika podrazumijeva čestice koje su nastale nakon kontaminiranja okoliša plastičnim otpadom. Otpad većih dimenzija, poput plastičnih boca, se pod utjecajem različitih faktora, kao što su vrijeme, zračenje Sunca, utjecaj valova, slanosti mora i sličnog, fragmentira na manje dijelove [1].



Slika 2.4 Nastajanje mikroplastike [7]

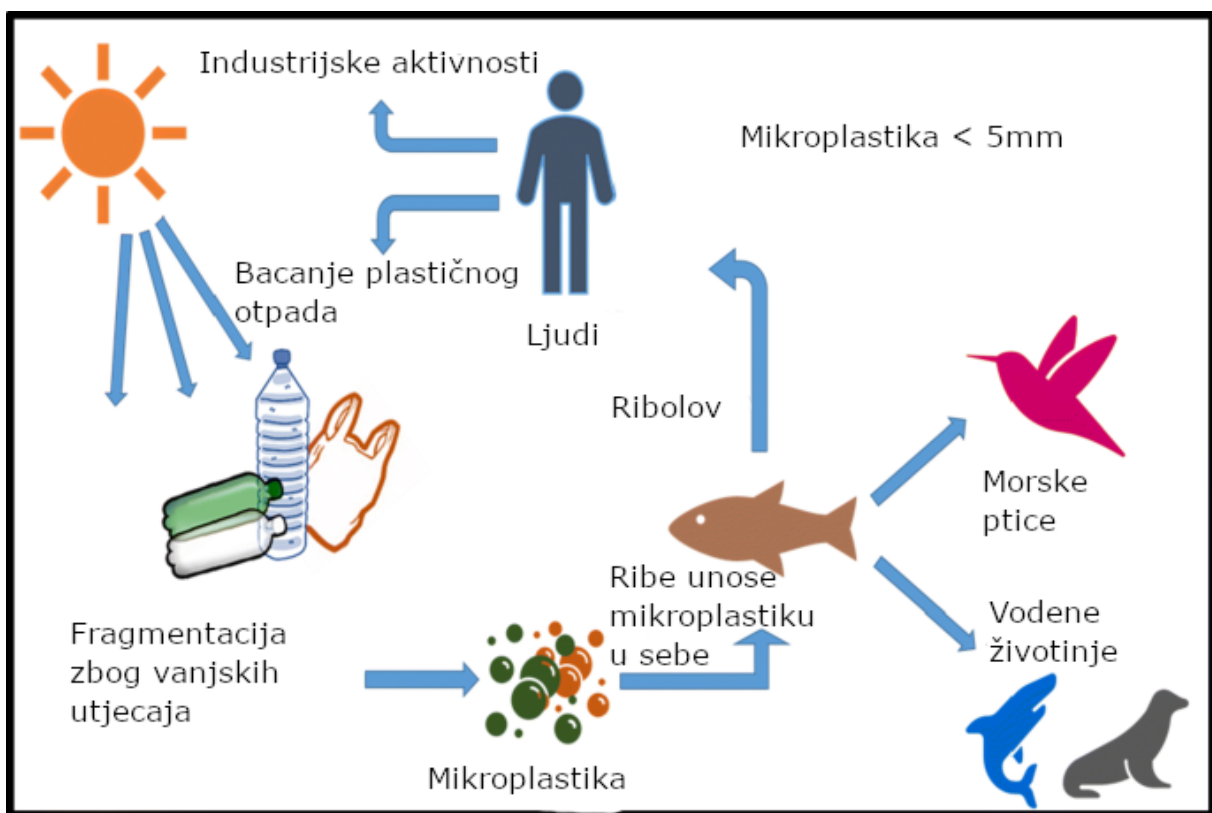
Polimerni materijali koji se najčešće javljaju u morskom okruženju u obliku mikroplastičnih čestica su polietilen (PE), polipropilen (PP), polistiren (PS), poliamid (PA), poliester (PES), i akril (AC). Od nabrojanih, najveći udio zastupljenosti imaju PE (54,5%), PP (16,5%) i PS (9,7%) [8].

2.3 Utjecaj mikroplastike na okoliš i zdravlje

Mikroplastika se pojavljuje u svim ekosustavima, uključujući zrak, tlo, mora i oceane, slatku vodu, a moguće ju je pronaći čak i u morskom ledu na Antarktici.[9] Prevelika rasprostranjenost mikroplastike narušava ravnotežu ekosustava, kako vodenih, tako i kopnenih. U morskom okruženju prisutnost mikroplastike mijenja sastav sedimenta na morskom dnu, te time ulazi u organizme koji se hrane hranjivim tvarima u sedimentu. Nakupljanje mikroplastike na tlu može negativno utjecati na plodnost i strukturu tla, te smanjiti kapacitet tla za vodu, što uzrokuje slabiji rast biljaka, a time i smanjenu poljoprivrednu aktivnost i proizvodnju hrane.

Mikroplastika ima štetne posljedice za organizme, pa tako i čovjeka. Iako sami polimeri nisu nužno otrovni, oni najčešće sadrže aditive te mogu na sebe vezivati vanjske toksine, poput polikloriranih bifenila, pesticida, ili teških metala, koji štete organizmima [10].

Mnogi organizmi (pogotovo morski) zamjenjuju čestice mikroplastike za hranu, čime dolazi do blokade probavnog sustava, što uzrokuje osjećaj lažne zasićenosti, pothranjenost, hormonsku neravnotežu, oštećenje organa, smanjenu reproduktivnost te povećanu smrtnost. Zbog dugotrajnog nakupljanja u organizmima i svojstva penjanja po hranidbenom lancu, mikroplastika ima negativne zdravstvene posljedice i za ljude. Dokazano je da mikroplastika u ljudima uzrokuje alergijske reakcije i staničnu smrt [11].



Slika 2.5 Kretanje mikroplastike po hranidbenom lancu [12]

2.4 Nerazgradivost plastike

Glavni razlog zbog kojeg plastični proizvodi čine štetu okolišu jest nerazgradivost plastike. Od raznih plastičnih materijala, najčešće se mogu reciklirati samo 4 vrste:

- PET (Polietilen tereftalat)
- PE-HD (Polietilen visoke gustoće)
- PE-LD (Polietilen niske gustoće)
- PP (Polipropilen)

Kod navedenih vrsta materijala postoje i iznimke, pa se tako npr. plastični omoti ne mogu reciklirati, iako su proizvedeni od PE-LD, jer su gotovo uvijek kontaminirani s ostalim tvarima, te ih je stoga teško razvrstati [13].

Plastični proizvodi, ovisno o materijalu i vanjskim utjecajima, mogu se zadržati u prirodi dugi niz godina prije nego što se potpuno razgrade. Tako se npr. neke plastične vrećice mogu razgraditi za 20 godina, dok se plastične boce u prosjeku zadržavaju oko 450 godina u okolišu dok se ne razgrade u potpunosti. Najveći problem u razgradnji plastike je velika količina uvjeta koje je potrebno zadovoljiti prije nego što nastupi razgradnja, što vrijedi čak i za materijale koje je moguće reciklirati. Kako bi se plastični materijali u prirodi razgradili, potrebni su utjecaji mikroorganizama, bakterija, visokih temperatura, UV zračenja te vode. Svi ti čimbenici rijetko djeluju simultano na plastični otpad, pa se on ni ne razgrađuje. Najčešće umjesto pravog razgrađivanja dolazi samo do erozije plastičnog otpada, što uzrokuje pojavu mikroplastike [14].

Nerazgradivost plastike uzrokuje nagomilavanje plastičnog otpada, što osim eventualne pojave mikroplastike i štetnog utjecaja na okoliš i zdravlje organizama, ima i nepovoljan utjecaj na klimatske promjene. Degradacija plastike uzrokuje kidanje polimernih lanaca od kojih se sastoji, zbog čega se emitiraju plinovi poput ugljikovog dioksida i metana, koji uzrokuju efekt staklenika. Kako proizvodnja plastike neprekidno i ubrzano raste od sredine 20. stoljeća pa sve do danas, moguće je očekivati sve veće gomilanje otpada te sve veća žarišta iz kojih se emitiraju staklenički plinovi, poput plastikom zagađenih plaža, gdje je degradacija plastike velika zbog utjecaja vode [15].

3. MODELIRANJE STRUJANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE

Relativno je malo znanstvenih radova napravljeno na temu simuliranja kretanja čestica mikroplastike. Većina radova se temelji na prikupljanju i analiziranju čestica, gdje se proučavaju fizikalna i kemijska svojstva čestica pronađenih u okolišu [1]. Simuliranje kretanja čestica otežava činjenica da su u stvarnosti čestice mikroplastike redovito različitih dimenzija i nepravilnih oblika, dok numeričko modeliranje ipak zahtijeva određena pojednostavljenja. Kretanje čestica se odvija u horizontalnom i vertikalnom smjeru, prvo zbog strujanja fluida, a drugo zbog tonjenja čestica. Kretanje ovisi o obliku, gustoći i veličini čestica te o gustoći i brzini strujanja fluida.

3.1 Matematički model strujanja čestica

Strujanje čestica moguće je opisati Basset-Boussinesq-Oseenovom jednačbom, koja opisuje gibanje čestice i sile koje djeluju na nju u nestacionarnom toku pri malim Reynoldsovim brojevima. Basset-Boussinesq-Oseen-ova jednačba za malu sferičnu česticu glasi:

$$m_p * \frac{dv_p}{dt} = m_f \left(\frac{Dv_f}{Dt} - \nu \nabla^2 v_f \right) - m_f * \frac{1}{2} * \frac{dv_{rel}}{dt} - 6 * \pi * r_p * \mu * v_{rel} + 6 * r_p^2 * \sqrt{\pi \rho_f \mu} \int_{t_0}^t \frac{1}{\sqrt{t - \tau}} \frac{dv_{rel}}{d\tau} d\tau + \sum_k F_k, \quad (3.1)$$

gdje vrijedi da je m_p masa materijalne čestice, v_p vektor brzine materijalne čestice, r_p polumjer materijalne čestice, m_f masa fluida koja odgovara volumenu materijalne čestice, v_f vektor brzine lokalnog volumena tekućine, v_{rel} vektor relativne brzine između materijalne čestice i lokalnog volumena fluida, ν kinematička viskoznost fluida, μ dinamička viskoznost fluida, τ varijabla pseudovremena, a F_k k-ta vanjska sila koja djeluje na materijalnu česticu [16].

Pritom je bitno napomenuti da ∇ označava diferencijalni operator nabla, $\frac{dv_p}{dt}$ i $\frac{dv_{rel}}{dt}$ označavaju vremenske derivacije vektora brzine materijalne čestice i relativne brzine, a $\frac{Dv_f}{Dt}$ označava materijalnu derivaciju vektora brzine lokalnog volumena fluida.

Materijalna derivacija, za koju se još može upotrijebiti i naziv derivacija koja prati gibanje [17], je diferencijalni operator čiji je izraz:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} * \nabla. \quad (3.2)$$

Primjenom operatora materijalne derivacije na skalarnu veličinu, poput tlaka p , dobivamo izraz:

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{v} * \nabla p = \frac{\partial p}{\partial t} + v_x * \frac{\partial p}{\partial x} + v_y * \frac{\partial p}{\partial y} + v_z * \frac{\partial p}{\partial z}, \quad (3.3)$$

U kojem se izraz $\frac{\partial p}{\partial t}$ naziva lokalna derivacija te predstavlja vremensku promjenu skalarne veličine (u ovom slučaju tlaka) u zadanoj prostornoj točki, a izraz $\mathbf{v} * \nabla p$ se naziva konvektivna derivacija te predstavlja promjenu skalarne veličine zbog promjene položaja čestice u prostoru. U slučaju primjene materijalne derivacije na vektorsku veličinu, kao što je učinjeno u Basset-Boussinesq-Oseenovoj jednadžbi primjenom na vektorsko polje brzina, dobivamo vektorsko polje ubrzanja:

$$\mathbf{a} = \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} * \nabla \mathbf{v}, \quad (3.4)$$

gdje je izraz $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ lokalno ubrzanje, a $\mathbf{v} * \nabla \mathbf{v}$ konvektivno ubrzanje.

S desne strane Basset-Boussinesq-Oseenove jednadžbe su, redoslijedom, izrazi koji predstavljaju:

1. Froude-Krylovu silu zbog gradijenta tlaka
2. Silu nastalu zbog dodane mase, koja uzima u obzir činjenicu da i fluid oko čestice ubrzava
3. Stokesovu silu, koja uzima u obzir sile otpora oblika za male Reynolds-ove brojeve
4. Basetovu silu, koja uzima u obzir vremensko kašnjenje razvijanja graničnog sloja tijela koja se kreću kroz tekućinu, nastalo zbog promjene relativne brzine.
5. Ostale vanjske sile koje djeluju na tijelo (gravitacija, uzgon) [16].

Uzevši u obzir da se modeliraju čestice mikroplastike koje su malih dimenzija, moguće je svesti jednadžbu na oblik:

$$m_p * \frac{dv_p}{dt} = m_f \left(\frac{Dv_f}{Dt} - \nu \nabla^2 v_f \right) \quad (3.5)$$

Za strujanje čestica u smjeru osi x dobiva se jednadžba gibanja:

$$m_p * \frac{dv_{p,x}}{dt} = \frac{1}{2} * c_d(v_p, v_f) * \rho_f(z_p) * A_p(d_p) * (v_{f,x} - v_{p,x}) |v_{f,x} - v_{p,x}|, \quad (3.6)$$

gdje je c_d koeficijent otpora oblika, $v_{p,x}$ i $v_{f,x}$ komponente vektora brzine čestice i fluida u smjeru osi x , $\rho_f(z_p)$ gustoća fluida na koordinati osi z čestice, a $A_p(d_p)$ projicirana površina čestice na ravninu okomitu na vektor brzine čestica v_p [16].

3.2 Koeficijent otpora oblika

Koeficijent otpora oblika je bezdimenzijska veličina koja kvantificira otpor predmeta prema strujanju nekog fluida. Koeficijent otpora oblika se može definirati izrazom:

$$c_d = \frac{2F_d}{\rho_f u^2 A}, \quad (3.7)$$

gdje je F_d sila otpora, ρ gustoća fluida, u brzina strujanja fluida, i A karakteristična površina tijela koje fluid opstrujava (uglavnom se uzima projekcija površine na ravninu okomitoj na vektor strujanja fluida). Koeficijent otpora općenito ovisi o obliku tijela, kutu nastrujavanja i bezdimenzijskim veličinama poput Reynoldsovog broja, pa se može definirati kao funkcija koja ovisi o tim veličinama $c_d = f(\text{oblik tijela}, \varphi, Re)$, gdje su pritom φ kut nastrujavanja i Re Reynoldsov broj. Oblik tijela se najčešće definira kroz neku karakterističnu površinu. Reynoldsov broj (bezdimenzijska značajka pomoću koje se može ustvrditi nastupanje laminarnog ili turbulentnog strujanja) je općenito definiran kao:

$$Re = \frac{\rho_f v l}{\mu} = \frac{v l}{\nu}, \quad (3.8)$$

gdje je ρ_f gustoća fluida, v brzina strujanja fluida, μ dinamička viskoznost fluida, ν kinematička viskoznost fluida, i l karakteristična duljina. Za potrebe modeliranja koeficijenta otpora čestica, moguće je kao karakterističnu duljinu upotrijebiti promjer čestica d_p . Moguće je tako definirati Reynoldsov broj kao:

$$Re = \frac{\rho_f(z_p) * \left(\sqrt{(v_{f,x} - v_{p,x})^2 - (v_{f,z} - v_{p,z})^2} \right) d_p}{\mu}, \quad (3.9)$$

gdje je $\rho_f(z_p)$ gustoća fluida na koordinati čestice z_p , dok razlike komponenti brzina fluida i čestice predstavljaju relativnu brzinu čestice u odnosu na brzinu fluida. [17]

Najkorišteniji model otpora oblika je Clift-Gauvinov model za sferična tijela, koji glasi:

$$c_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} * (1 + 0,15 * Re_p^{0,687}) + \frac{0,42}{1 + \frac{42500}{Re_p^{1,16}}}. \quad (3.10)$$

S obzirom da je velika većina čestica mikroplastike nepravilnog oblika, koji odstupa od idealne sfere, potrebno je uvesti parametrizaciju oblika kako bi smo mogli modelirati nepravilne oblike čestica mikroplastike. To je moguće učiniti pomoću indeksa sferičnosti ψ (koji za sferične predmete iznosi 1), koji se definira kao omjer oplošja sfere koja ima jednak volumen kao i promatrana čestica A_s i oplošja čestice A_p :

$$\psi = \frac{A_s}{A_p} = \frac{\pi^{\frac{1}{3}}(6V_p)^{\frac{2}{3}}}{A_p}. \quad (3.11)$$

Osim ove definicije, moguće je koristiti i modificiranu verziju indeksa sferičnosti:

$$\psi = \left(\frac{bc}{a^2}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (3.12)$$

gdje su pritom a , b , i c karakteristične dimenzije čestice mikroplastike mjerene u ortogonalnim pravcima. Prema ovom modelu, ovisno o tome koje su dimenzije dominantne, moguće je razvrstati čestice prema jednodimenzionalnim, dvodimenzionalnim i trodimenzionalnim česticama. Nedostatak ovog pristupa je taj da se gube podaci o obliku čestice, već je prema dimenzijama moguće samo prepoznati kojoj kategoriji čestica pripada [16].

Korištenjem indeksa sferičnosti moguće je definirati koeficijent otpora za proizvoljne oblike čestica:

$$c_d = \frac{24}{Re_p} (1 + ARe_p^B) + \frac{CRe_p}{D + Re_p} \quad (3.13)$$

$$A = \exp(2,3288 - 6,4581\psi + 2,4486\psi) \quad (3.14)$$

$$B = 0,0964 + 0,5565 * \psi \quad (3.15)$$

$$C = \exp(4,905 - 13,8944\psi + 18,4222\psi^2 - 10,2599\psi^3) \quad (3.16)$$

$$D = \exp(1,4691 + 12,2584\psi - 20,7322\psi^2 + 15,8855\psi^3). \quad (3.17)$$

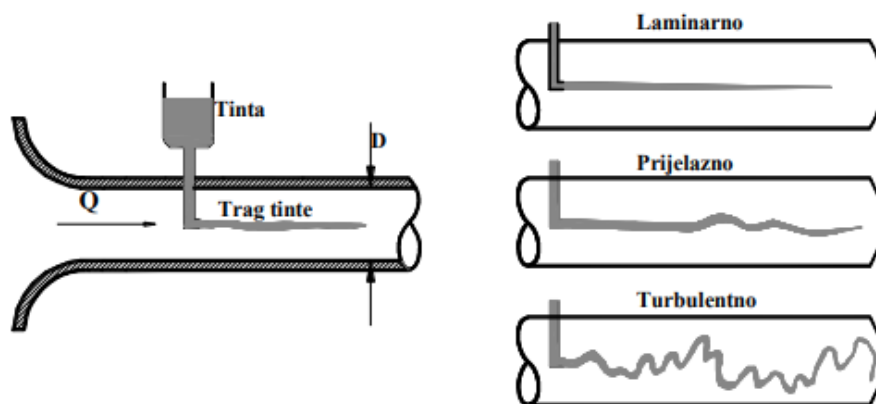
Parametri A , B , C , i D su dobiveni regresijskom analizom i ovise o indeksu sferičnosti ψ [16].

4. TURBULENTNO MODELIRANJE STRUJANJA

Turbulencija je pojava koju karakterizira nepredvidljivo i kaotično ponašanje fluida, koje se najčešće očitava kao vrtloženje. Turbulentno strujanje je osjetljivo na rubne i početne uvjete, koje nije moguće uvijek detaljno znati, a i kako su interakcije prilikom miješanja slojeva u fluidu nelinearne, time je dodatno otežano matematičko modeliranje turbulentnog sustava. S obzirom da je turbulencija jedna od važnijih pojava koje proučava računarska dinamika fluida, kako bi se prebrodile navedene teškoće radi modeliranja turbulencije razvijeni su mnogi numerički modeli.

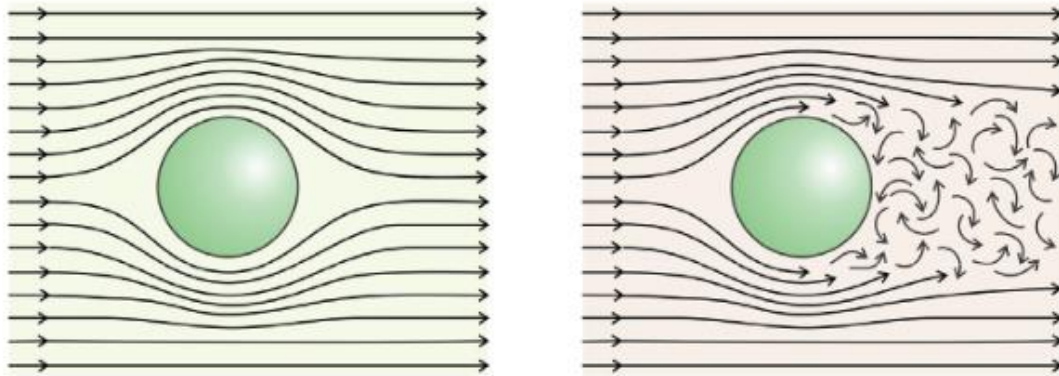
4.1 Podjela strujanja s obzirom na turbulentnost

Strujanje je naziv za gibanje fluida. Prema putanjama strujanja moguće je klasificirati strujanje kao laminarno, prijelazno i turbulentno. Kod laminarnog strujanja čestice fluida se gibaju po glatkim putanjama unutar infinitezimalno tankih slojeva (lamina). Svi slojevi se gibaju paralelno u odnosu na druge slojeve, te sve čestice fluida unutar istog sloja imaju jednaku brzinu. U slučaju povećanja brzine ili opstrujavanja čvrstih tijela, dolazi do miješanja slojeva te se javlja nepravilno vrtložno gibanje, koje se naziva turbulentno strujanje [17].



Slika 4.1 Eksperiment injektiranja tinte [17]

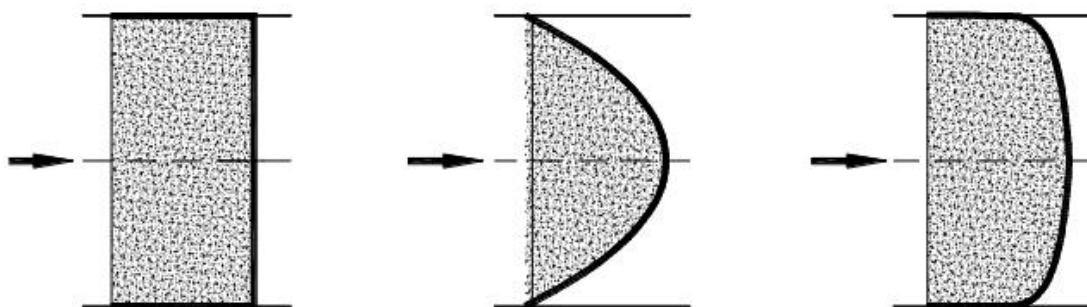
Na slici 4.1 je prikazan eksperiment injektiranja tinte. Tinta se injektira u cijev u kojoj struji voda te je s obzirom na kretanje tinte moguće saznati o kakvom se strujanju radi.



Slika 4.2 Razlika između laminarnog i turbulentnog strujanja [17]

Na slici 4.2 je prikazana razlika između laminarnog i turbulentnog strujanja pri opstrujavanju čvrstog tijela. Moguće je vidjeti da u slučaju laminarnog strujanja ne dolazi do promjene smjera polja brzina, dok se u slučaju turbulentnog strujanja nakon opstrujavanja mijenja smjer brzina iza čvrstog tijela, te se javlja vrtloženje.

Laminarno i turbulentno strujanje možemo razlikovati i prema profilu brzina, pa je tako laminaran profil brzina paraboloidan, dok je turbulentan profil spljoštenijeg izgleda. Prema slici 4.3 se vidi da je turbulentan profil sličan idealnom profilu brzina. Idealan profil brzina ima beskonačan Reynoldsov broj, pa se tako može zaključiti da će pri turbulentnom strujanju povećanjem Reynoldsovog broja turbulentni profil postajati sve spljošteniji, odnosno težiti će idealnom profilu brzina [17].



Slika 4.3 Profili brzina (idealni, laminarni i turbulentni oblici) [17]

Glavna veličina za utvrđivanje nastupanja turbulencije je, kao što je navedeno u prethodnom poglavlju, Reynoldsov broj. U tablici 4.1 je prikazana klasifikacija strujanja prema veličini Reynoldsovog broja.

Tablica 4.1 Vrsta strujanja s obzirom na Reynoldsov broj [17]

Reynoldsov broj	Vrsta strujanja
$Re \ll 1$	Puzajuće strujanje
$Re \leq 2300$	Laminarno strujanje
$2300 < Re \leq 4000$	Prijelazno strujanje
$Re > 4000$	Turbulentno strujanje

Vrijednosti iz tablice vrijede za manje brzine te se mogu upotrijebiti u većini slučajeva u kojima se promatra realno strujanje fluida. Iako važeće za većinu slučajeva, granice između laminarnog i turbulentnog strujanja definirane preko Reynoldsovog broja su relativne, pa je moguće u laboratorijskim uvjetima postići laminarno strujanje pri znatno većim Reynoldsovim brojevima ($Re > 20000$) [17].

4.2 Numerički modeli turbulentnog strujanja

Numerički modeli namijenjeni rješavanju turbulencije se mogu podijeliti u tri skupine: DNS, LES i RANS. Baziraju se na rješavanju Navier-Stokesovih jednadžbi, koje su zapravo jednadžbe očuvanja količine gibanja realnih fluida:

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \mu \Delta \mathbf{v} - \mathbf{grad} p + \rho \mathbf{f} \quad (4.1)$$

Član na lijevoj strani predstavlja silu inercije, prva dva člana na desnoj strani predstavljaju smičnu i normalnu silu, dok treći član predstavlja masenu silu [17].

4.2.1 DNS

DNS („Direct Numerical Simulation“) je pristup koji direktno rješava Navier-Stokesove jednadžbe i jednažbe očuvanja i ravnoteže za trodimenzionalne i vremenski ovisne probleme. Glavna karakteristika DNS pristupa je ta da ne koristi nikakve turbulentne modele za aproksimaciju turbulencije, te zato rješava sve instance turbulencije (vrtloga) koje se javljaju unutar definiranog problema. Kako se taj postupak obavlja za sve vrtloge neovisno o prostornoj i vremenskoj skali vrtloga (veličini i trajanju), koje mogu biti jako malene ili jako velike, numerička mreža mora biti trodimenzionalna i vrlo fina kako bi obuhvatila sve vrtloge, što čini ovakav pristup izrazito proračunski zahtjevnim [17].

Moguće je prikazati da zahtjevnost proračuna raste s povećanjem Reynoldsovog broja. Najmanja skala u dinamici fluida koja se koristi za mjerenje turbulentnog strujanja se naziva Kolmogorova skala. Tako je Kolmogorova skala za duljinu turbulentnog strujanja određena pomoću izraza:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (4.2)$$

gdje je ν kinematička viskoznost i ε je prosječna disipacija turbulentne energije. DNS pristup mora obuhvatiti turbulentne vrtloge na svim skalama, od Kolmogorove skale do integralne skale L . Kako bi se zadovoljio ovaj uvjet, mora vrijediti:

$$Nh > L, \quad (4.3)$$

$$h \leq \eta, \quad (4.4)$$

gdje je N broj točaka numeričke mreže u jednom smjeru, a h prostorna diskretizacija. Prethodni uvjeti moraju biti ispunjeni kako bi proračun obuhvatio obje skale. Disipaciju turbulentne energije možemo aproksimirati kao:

$$\varepsilon \approx \frac{u'^3}{L}, \quad (4.5)$$

gdje je u' korijen srednje vrijednosti kvadrata brzine strujanja fluida. Uz pretpostavku da je $h = \eta$ moguće je tada izvesti:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3 L}{u'^3} \right)^{\frac{1}{4}} \quad (4.6)$$

$$N \left(\frac{\nu^3 L}{u'^3} \right)^{\frac{1}{4}} > L \quad (4.7)$$

$$N \left(\frac{\nu^3}{u'^3} \right)^{\frac{1}{4}} > \frac{L}{L^{\frac{3}{4}}} = L^{\frac{1}{4}} \quad (4.8)$$

$$N > \left(\frac{Lu'}{\nu} \right)^{\frac{3}{4}} = Re^{\frac{3}{4}}. \quad (4.9)$$

Za trodimenzionalni problem ukupan broj točaka bi morao zadovoljiti uvjet:

$$N^3 \geq Re^{\frac{9}{4}}. \quad (4.10)$$

Vidljivo je da broj točaka izrazito raste s povećanjem Reynoldsovog broja, što kod velikih Reynoldsovih brojeva dovodi do neostvarivih zahtjeva za računalnim resursima. Slično vrijedi i za vremensku domenu, gdje broj vremenskih koraka raste s Reynoldsovim brojem. Zato se

DNS pristup najčešće koristi samo u jednostavnim slučajevima s malim Reynoldsovim brojevima [18].

4.2.2 LES

LES („Large Eddy Simulation“) je pristup simuliranju turbulencije u kojem se veći vrtlozi računaju numerički, dok se mali vrtlozi ispod granica numeričke mreže modeliraju matematički. Prilikom ovakvog modeliranja pretpostavlja se da su veliki vrtlozi odgovorni za većinu Reynoldsovih napreznja, te da su direktno povezani s rubnim uvjetima. Mali vrtlozi nemaju mnogo značaja na ukupna Reynoldsova napreznja, izotropni su te se, za razliku od većih kaotičnih vrtloga, ponašaju predvidljivo. Zbog matematičkog modeliranja manjih vrtloga, zadovoljavajuća je grublja numerička mreža, te je ovaj pristup naspram DNS-a znatno manje zahtjevniji što se tiče računalnih resursa. Usprkos tome, ovaj model je također računalno zahtjevan kada se koristi za rješavanje inženjerskih problema [17].

4.2.3 RANS

RANS („Reynolds Averaged Navier Stokes“) modeli su, zbog zahtjevnosti DNS i LES modela, danas najkorišteniji modeli pri rješavanju inženjerskih problema vezanih uz turbulentno strujanje. Zasnovani su na Reynoldsovim usrednjenjima, koja sadrže usrednjene veličine brzine i tlaka te produkte fluktuacija, poput Reynoldsovih napreznja. RANS modeli pojednostavljaju Navier-Stokesove jednadžbe, čime dolazi do gubitka podataka i manje točnosti rješenja. Najkorišteniji RANS modeli su dvojednadžbeni modeli, poput $k - \varepsilon$ i $k - \omega$ modela (model koji rješava jednadžbe turbulentne kinetičke energije k i disipacije turbulentne kinetičke energije ε , te model koji umjesto jednadžbe disipacije energije rješava jednadžbu specifične brzine disipacije ω) [17].

4.3 Turbulentni modeli strujanja

Pri modeliranju turbulencije najviše se koriste dvojednadžbeni modeli strujanja, poput prethodno navedenih $k - \varepsilon$ i $k - \omega$ modela. Iako su obje varijante adekvatne za modeliranje turbulencije, $k - \varepsilon$ točnije modelira područja turbulencije dalje od stijenke, dok $k - \omega$ točnije modelira područja bliže stijenci. Nadalje, $k - \varepsilon$ je prikladniji za strujanja s većim Reynoldsovim brojem, dok je $k - \omega$ prikladniji za niže Reynoldsove brojeve. Osim navedenih, postoji i $k - \omega$ SST model, koji je kombinacija prethodnih modela, te $v^2 - f$ model, koji je generalni model za turbulentno strujanje pri nižim Reynoldsovim brojevima.

4.3.1 $k - \varepsilon$ modeli

$k - \varepsilon$ modeli se temelje na rješavanju Navier-Stokesovih jednadžbi za strujanje nestlačivog fluida. Kako bi se Navier-Stokesove jednadžbe mogle riješiti, potrebno je uvesti dvije transportne jednadžbe za k i ε :

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P_k + P_b - \rho \varepsilon - Y_M * S_k \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (P_k + C_{3\varepsilon} P_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} S_\varepsilon, \quad (4.12)$$

gdje za obje jednadžbe vrijedi da prvi član s lijeve strane predstavlja vremensku komponentu, drugi član konvekciju, a prvi član s desne strane predstavlja difuziju. μ_t predstavlja turbulentnu dinamičku viskoznost, koja se definira na način:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad (4.13)$$

gdje je C_μ empirijska konstanta. P_k je produkt nastao zbog srednjeg smicanja brzine, P_b produkt zbog uzgona, dok su S_k i S_ε proizvoljno definirani izvori. Produkti zbog srednjeg smicanja brzine i uzgone mogu se definirati na sljedeći način:

$$P_k = -\rho \overline{(u'_i u'_j)} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, \quad (4.14)$$

$$P_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{PR_t} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad (4.15)$$

gdje je β koeficijent toplinske ekspanzije, g_i komponenta gravitacijskog vektora u i -tom smjeru, i PR_t turbulentni Prandtlov broj za energiju. Prandtlov broj se za standardni i „realizable“ $k - \varepsilon$ modele najčešće uzima kao 0,85. Član $-\rho \varepsilon$ u prvoj jednadžbi predstavlja disipaciju kinetičke energije, dok su $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ i $C_{3\varepsilon}$ empirijski koeficijenti. Vrijednosti empirijskih koeficijenata, kao i σ_k i σ_ε , dobivene su regresijskom analizom te su prikazane na tablici 4.2.

Tablica 4.2 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za standardni $k - \varepsilon$ model [19]

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{1\varepsilon}$	$C_{3\varepsilon}$
0,09	1,00	7,00	1,44	1,92

Koeficijent $C_{3\varepsilon}$ je moguće uzeti kao -0,33 [19].

$k - \varepsilon$ modeli se mogu podijeliti na standardni, „realizable“ i RNG model. Svi modeli imaju istu transportnu jednadžbu za turbulentnu kinetičku energiju, dok im se razlikuje transportna jednadžba za disipaciju turbulentne kinetičke energije. Tako druga transportna jednadžba za „realizable“ model glasi:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} P_b + S_\varepsilon, \quad (4.16)$$

gdje je:

$$C_1 = \max \left[0,43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad (4.17)$$

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon}, \quad (4.18)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}. \quad (4.19)$$

Ostale vrijednosti empirijskih koeficijenata za „realizable“ model su prikazane na tablici 4.3.

Tablica 4.3 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za "realizable" $k - \varepsilon$ model [20]

$C_{1\varepsilon}$	C_2	σ_k	σ_ε
1,44	1,9	1,0	1,2

RNG („Re-Normalisation Group“) model normalizira Navier-Stokesove jednadžbe, čime uzima u obzir utjecaje gibanja fluida na turbulenciju pri manjim skalama. Druga transportna jednadžba za RNG model glasi:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\varepsilon u_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{2\varepsilon}^* \rho \frac{\varepsilon^2}{k}, \quad (4.20)$$

gdje je $C_{2\varepsilon}^*$:

$$C_{2\varepsilon}^* = C_{2\varepsilon} + \frac{C_\mu \eta^3 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0} \right)}{1 + \beta \eta^3}. \quad (4.21)$$

Vrijednosti empirijskih koeficijenata za RNG model dane su na tablici 4.4.

Tablica 4.4 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za RNG $k - \varepsilon$ model [21]

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	η_0	β
0,0845	0,7194	0,7194	1,42	1,68	4,38	0,012

Osim ovih, postoje i modeli poput Lienovog kubičnog i Shihovog kvadratičnog modela, koji su slični prethodnim modelima, te se stoga neće u ovom radu pretjerano razmatrati.

4.3.2 $k - \omega$ modeli

$k - \omega$ modeli se mogu podijeliti na standardni (Wilcoxov), modificirani i SST model. Ako definiramo kinematičku viskoznost vrtloga kao:

$$\nu_T = \frac{k}{\omega}, \quad (4.22)$$

onda transportne jednadžbe za turbulentnu kinetičku energiju k i specifičnu brzinu disipacije ω glase:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \sigma^* \nu_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha \frac{\omega}{k} \tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\nu + \sigma^* \nu_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right]. \quad (4.24)$$

Iznosi koeficijenata su prikazani na tablici 4.5.

Tablica 4.5 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za standardni $k - \omega$ model [22]

α	β	β^*	σ	σ^*
5/9	3/40	9/100	1/2	1/2

Veza između turbulentnih veličina se izražava kao:

$$\varepsilon = \beta^* \omega k. \quad (4.25)$$

Modificirani $k - \omega$ model ima identične transportne jednadžbe kao i standardni, te je jedina razlika u načinu na koji su definirani koeficijenti (prikazanih na tablici 4.6) i veze između turbulentnih veličina.

Tablica 4.6 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za modificirani $k - \omega$ model [23]

α	β	β^*	β_0	β_0^*	σ	σ^*
13/25	$\beta_0 f_\beta$	$\beta_0^* f_{\beta^*}$	9/125	9/100	1/2	1/2

Pomoćne relacije za izračun koeficijenata su dane u nastavku:

$$f_\beta = \frac{1 + 70\chi_\omega}{1 + 80\chi_\omega}, \quad (4.26)$$

$$\chi_\omega = \left| \frac{\Omega_{ij}\Omega_{jk}S_{ki}}{(\beta_0^*\omega)^3} \right|, \quad (4.27)$$

$$f_{\beta^*} = \begin{cases} 1, & \chi_k \leq 0 \\ \frac{1 + 680\chi_k^2}{1 + 80\chi_k^2}, & \chi_k > 0 \end{cases}, \quad (4.28)$$

$$\chi_k = \frac{1}{\omega^3} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}. \quad (4.29)$$

Veze između turbulentnih veličina dane su izrazima:

$$\varepsilon = \beta^* \omega k, \quad (4.30)$$

$$l = \frac{k^2}{\omega}. \quad (4.31)$$

$k - \omega$ SST („Shear Stress Transport“) model je kombinacija standardnih $k - \varepsilon$ i $k - \omega$ modela. SST model se dobro ponaša pri nepovoljnim gradijentima tlaka i separacijskom protoku, dok mu je mana što ponekad proizvodi prevelike razine turbulencije u područjima s velikim normalnim naprezanjima ili ubrzanjima. Česti problem $k - \omega$ modela je taj da su jako osjetljivi na rubne uvjete (pogotovo za turbulentne veličine, tj. k i ω) na ulazu u domenu pri slobodnom strujanju fluida, što SST model uspješno izbjegava prebacivanjem na $k - \varepsilon$ model u područjima slobodnog strujanja [24]. Transportne jednadžbe za SST model glase:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = P_k - \beta^* k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma^* v_T) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right], \quad (4.32)$$

gdje je:

$$P_k = \min \left(\tau_{ij} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, 10\beta^* k \omega \right), \quad (4.33)$$

i:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + U_j \frac{\partial \omega}{\partial x_j} = \alpha S^2 - \beta \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(v + \sigma^* v_T) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2(1 - F_1) \sigma_{\omega^2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}. \quad (4.34)$$

Pomoću člana F_1 moguće je regulirati koji će se model upotrebljavati. U slučaju modeliranja bliže zidu, F_1 će biti jednak 1, pa će se koristiti $k - \omega$ model, dok dalje od zida F_1 će biti jednak 0, pa će se koristiti $k - \varepsilon$ model. Član F_1 zapravo predstavlja funkciju miješanja čiji je izraz:

$$F_1 = \tanh \left\{ \left\{ \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500v}{y^2 \omega} \right), \frac{4\sigma_{\omega 2} k}{CD_{k\omega} y^2} \right] \right\}^4 \right\}, \quad (4.35)$$

$$CD_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i}, 10^{-10} \right). \quad (4.36)$$

SST model drugačije definira kinematičku viskoznost vrtloga od standardnog modela, pa se tako u ovom slučaju ona definira izrazom:

$$v_T = \frac{a_1 k}{\max(a_1 \omega, SF_2)}. \quad (4.37)$$

U slučaju da su faktor S ili funkcija miješanja F_2 preveliki, viskoznost se reducira, što uzrokuje bolje modeliranje smičnog naprezanja prema zidu i smanjenje pretjerane turbulencije. F_2 je moguće izraziti kao [25]:

$$F_2 = \tanh \left[\left[\max \left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500v}{y^2 \omega} \right) \right]^2 \right]. \quad (4.38)$$

4.3.3 $v^2 - f$ modeli

$v^2 - f$ model [26], iako sličan standardnom $k - \varepsilon$ modelu, uključuje modeliranje anizotropne turbulencije blizu zida. Ovaj model ne koristi funkcije zida pri modeliranju, jer vrijedi sve do čvrste stijenke. Umjesto turbulentne kinetičke energije koristi se skala brzine $\overline{v^2}$ za modeliranje vrtložne viskoznosti. Skala brzine $\overline{v^2}$ može se smatrati fluktuacijom brzine normalnom na strujnice. Anizotropni utjecaji na zidu se modeliraju pomoću eliptične relaksacijske funkcije f .

Kako bi se povećale računalne performanse ovog modela, moguće je normalizirati skalu brzine:

$$\zeta = \frac{v^2}{k}, \quad (4.39)$$

koju možemo tretirati kao omjer između izotropne i anizotropne vremenske skale $\frac{k}{\varepsilon}$ i $\frac{\overline{v^2}}{\varepsilon}$.

Transportna jednadžba za $\overline{v^2}$ glasi:

$$\frac{\partial \overline{v^2}}{\partial t} + U_j \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial x_j} = kf - \frac{\overline{v^2}}{k} \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{v_T}{\sigma_{\overline{v^2}}} \right) \frac{\partial \overline{v^2}}{\partial x_j} \right], \quad (4.40)$$

gdje je kinematička viskoznost jednaka:

$$v_T = C_\mu \overline{v^2} T. \quad (4.41)$$

Eliptična jednačba za relaksacijsku funkciju f glasi:

$$L^2 \nabla^2 f - f = \frac{C_1 - 1}{T} \left(\frac{\overline{v^2}}{k} - \frac{2}{3} \right) - C_2 \frac{P_k}{\varepsilon}, \quad (4.42)$$

gdje su turbulentna duljinska skala L i turbulentna vremenska skala T jednake:

$$L = C_L \max \left[\frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}, C_\eta \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \right], \quad (4.43)$$

$$T = \max \left[\frac{k}{\varepsilon}, C_T \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (4.44)$$

Korišteni koeficijenti su prikazani na tablici 4.7.

Tablica 4.7 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za $v^2 - f$ model [26]

C_μ	$\sigma_{\overline{v^2}}$	C_1	C_2	C_T	C_L	C_η
0,22	1	1,4	0,45	6	0,25	85

Za model s normaliziranom skalom brzine ($\zeta - f$ model) transportna i eliptična jednačba glase:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + U_j \frac{\partial \zeta}{\partial x_j} = f - \frac{\zeta}{k} P_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\zeta} \right) \frac{\partial \zeta}{\partial x_j} \right], \quad (4.45)$$

$$L^2 \nabla^2 f - f = \frac{1}{T} \left(C_1 - 1 + C_2' \frac{P_k}{\varepsilon} \right) - C_2 \frac{P_k}{\varepsilon}. \quad (4.46)$$

Kinematička viskoznost i skale su jednake:

$$\nu_T = C_\mu \zeta k T, \quad (4.47)$$

$$T = \max \left[\min \left(\frac{k}{\varepsilon}, \frac{0.6}{\sqrt{6} C_\mu |S| \zeta} \right), C_T \left(\frac{v}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2}} \right], \quad (4.48)$$

$$L = C_L \max \left[\min \left(\frac{k^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon}, \frac{k^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{6} C_\mu |S| \zeta} \right), C_\eta \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{4}} \right]. \quad (4.49)$$

Korišteni koeficijenti su prikazani na tablici 4.8.

Tablica 4.8 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za $\zeta - f$ model [26]

C_μ	σ_{v^2}	C_1	C'_2	C_T	C_L	C_η
0,22	1,2	1,4	0,65	6	0,36	85

5. ANALIZA EKSPERIMENTA

U ovom poglavlju bit će opisan eksperiment strujanja vode u otvorenom laboratorijskom kanalu, koji je odrađen u svrhe promatranja hidrodinamičkog ponašanja čestica mikroplastike. Bitno je napomenuti da eksperiment nisam radio osobno, već su se podaci o eksperimentu i rezultatima u svrhu izrade diplomskog rada uzeli iz znanstvenog rada (Holjević i dr., 2023 [27]).

5.1 Opis eksperimenta

Eksperiment strujanja vode je proveden na Građevinskom fakultetu Sveučilišta u Rijeci, u hidrotehničkom laboratoriju. Hidrotehnički laboratorij sadrži eksperimentalni kanal koji se koristio za potrebe istraživanja hidrodinamičkog ponašanja čestica mikroplastike, točnije tonjenja, pod uvjetima koji se javljaju pri strujanju vode. Poprečni presjek kanala je 309x450 mm, dok je ukupna duljina kanala 12,5 m. Nagib kanala je postavljen na 0° (kanal je prikazan na slici 5.1) [27].

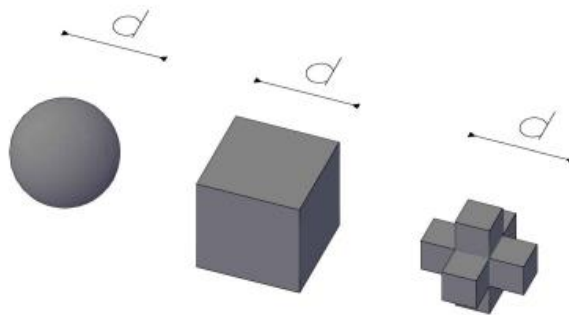


Slika 5.1 Eksperimentalni kanal u hidrotehničkom laboratoriju Građevinskog fakulteta u Rijeci [27]

Čestice mikroplastike su proizvedene pomoću 3d printera visoke preciznosti (slika 5.2). Čestice su isprintane u tri različita oblika: sferne, kockaste i križne. Karakteristične duljine čestica također variraju, pa su tako čestice isprintane u varijantama od 1,5 mm, 2 mm, 2,5 mm, i 3 mm. 3d modeli čestica i primjeri isprintanih čestica su prikazani na slikama 5.3 i 5.4 [27].



Slika 5.2 3d printer [27]



Slika 5.3 3d modeli čestica mikroplastike [27]

Parametar d predstavlja karakterističnu duljinu. U slučaju sfere radi se o promjeru, u slučaju kocke radi se o duljini ruba kocke, dok se kod križnog oblika radi o duljini jedne strane križa.



Slika 5.4 Isprintane čestice mikroplastike [27]

Čestice mikroplastike se nalaze u podupirućem materijalu koji 3d printer koristi prilikom izrade geometrije i koji se prije odvijanja eksperimenta uklanja ispiranjem pomoću otopine acetona u vodi.

Za praćenje pozicija čestica prilikom tonjenja koristila se video oprema visoke rezolucije te su se snimke analizirale pomoću OpenCV modula za Python. Pomoću OpenCV-a dobivene su putanje i trajanje tonjenja čestica mikroplastike. Profili brzina su dobiveni pomoću Nortek Vectrino brzinomjera. Izmjeren volumni protok je iznosio $72 \text{ m}^3/\text{h}$ [27].

5.2 Rezultati eksperimenta

Na temelju dobivenih mjerenja izračunat je koeficijent otpora c_d i uspoređen s rezultatima iz literature, te je grafički prikazana ovisnost između koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja za sve tri skupine čestica. Izračun koeficijenta otpora se vršio prema formuli:

$$c_d = 2g \frac{(\rho_{\text{MP}} - \rho)V}{\rho A v_z^2}, \quad (5.1)$$

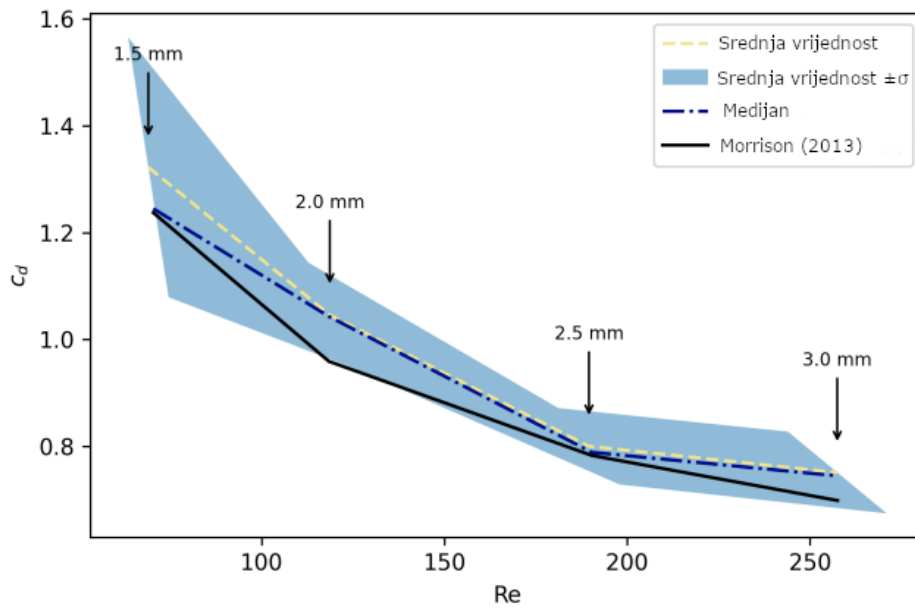
gdje je V volumen čestice, ρ gustoća vode koja je uzeta kao $\rho = 999 \text{ m}^3/\text{kg}$, i ρ_{MP} gustoća čestica mikroplastike koja je uzeta kao $\rho_{\text{MP}} = 1185 \text{ kg}/\text{m}^3$. Prosječna vertikalna brzina pada pojedine čestice je uzeta kao:

$$\bar{v}_z = \frac{z_{\text{start}} - z_{\text{stop}}}{t_{\text{stop}} - t_{\text{start}}}, \quad (5.2)$$

gdje su z_{start} i z_{stop} vertikalne pozicije čestica na početku i na kraju mjerenja, a t_{stop} i t_{start} pripadajuća vremena. Radi smanjenja utjecaja graničnog sloja na mjerenja, uzeta je pozicija čestice na kraju mjerenja $z_{\text{stop}} = 0.1 \text{ m}$, dok je za početak mjerenja uzeta pozicija $z_{\text{start}} = 0.3 \text{ m}$ radi izbjegavanja površinskih utjecaja i utjecaja postupka unošenja čestica na mjerenje. Eksperimentalni koeficijenti otpora su, radi potvrde rezultata, uspoređeni s koeficijentima otpora izračunatim preko izraza navedenim u 3. poglavlju (3.7) [27].

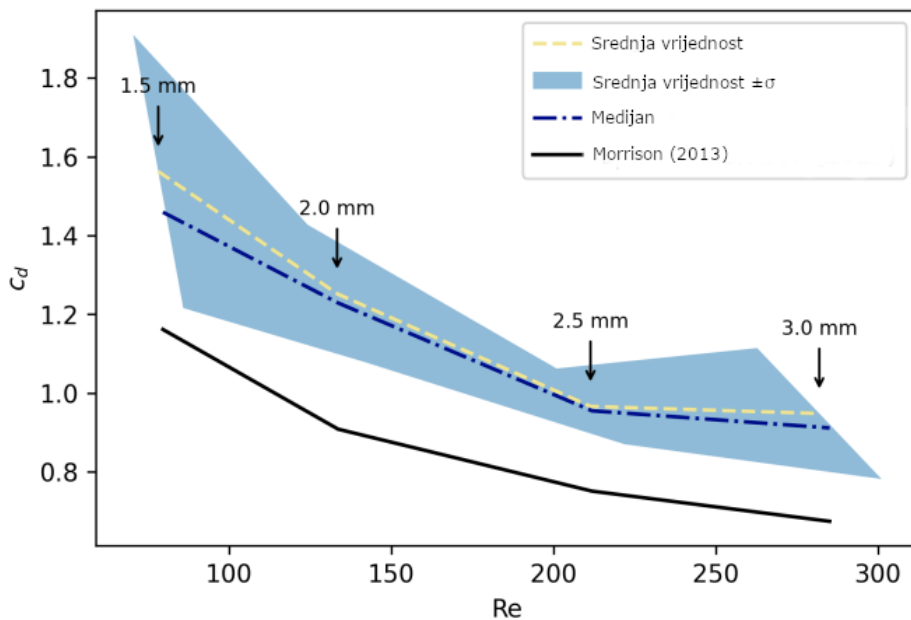
Kako bi se mogle pratiti promjene koeficijenta otpora ovisno o uvjetima strujanja, tj. ovisno o turbulenciji, potrebno je bilo izračunati i vrijednosti Reynoldsovog broja za svaku verziju eksperimenta.

Na grafovima su prikazane vrijednosti koeficijenata otpora iz literature, srednje vrijednosti eksperimentalnih koeficijenata otpora zajedno s standardnom devijacijom te medijan.



Slika 5.5 Korelacija između koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja za sfernu skupinu čestica [27]

Iz grafa se može očitati da su vrijednosti koeficijenta otpora dobivene preko Morrisonovog izraza unutar standardne devijacije te da se izmjereni rezultati dobro slažu s teorijskim rezultatima. Moguće je također primijetiti trend u kojem Reynoldsov broj raste s povećanjem veličine čestica, dok je koeficijent otpora veći za manje čestice.



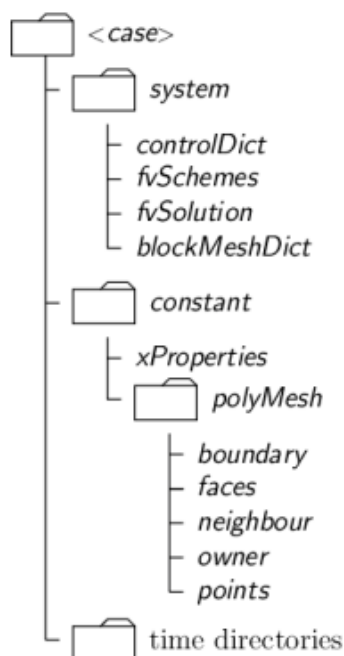
Slika 5.6 Korelacija između koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja za kockastu skupinu čestica [27]

U slučaju sa slike 5.6 promatrano je ponašanje kockastih čestica. Moguće je vidjeti da su koeficijenti otpora znatno veći u odnosu na teoretske rezultate. Kockasti oblik nije hidrodinamičan, pa se zato javljaju puno veće sile otpora, te se ranije odvaja granični sloj nego u slučaju sfernih čestica, što uzrokuje povećanje koeficijenata otpora. Kao i u prethodnom slučaju, za manje čestice je veći koeficijent.

6. IZRADA NUMERIČKOG MODELA I PRIPREMA SIMULACIJE

6.1 OpenFOAM

OpenFOAM je programski paket otvorenog koda napisan u C++ programskom jeziku, čija je namjena rješavanje problema iz mehanike kontinuuma, pogotovo problema iz računalne dinamike fluida. OpenFOAM, koji je prvenstveno pisan za operativne sustave bazirane na „Linux“-u, nema grafičko sučelje, već se njime upravlja unutar terminala, koristeći se pritom „Linux“-ovim naredbama. Slučajeve koje simuliramo moramo definirati na način koji je čitljiv programu, kako je prikazano na slici 6.1.



Slika 6.1 Struktura mape koja sadrži OpenFOAM slučaj [28]

Mapa „system“ sadrži datoteke vezane za postavke numeričke mreže i simulacije. „blockMeshDict“ datoteka je zadužena za definiranje domene i numeričke mreže, „controlDict“ za kontrolne parametre poput početnog i završnog vremena simulacije i vremenskog koraka, dok su „fvSolution“ i „fvSchemes“ datoteke zadužene za izbor rješavača i pripadajućih postavki te za izbor diskretizacijskih shema [28].

Osim ovih osnovnih datoteka, moguće je kreirati i „decomposeParDict“ datoteku, koja je zadužena za podjeljivanje domene u slučaju da provodimo paralelno računanje.

Mapa „constant“ sadrži opis numeričke mreže u poddirektoriju „polyMesh“ te može sadržavati datoteke koje opisuju fizikalna svojstva vezana za pojedini slučaj, poput „kinematicCloudProperties“, koja definira svojstva oblaka čestica u fluidu [28].

Mape „timeDirectories“ se odnose na mape koje sadrže izračunate fizikalne veličine (poput tlaka i brzine), za određene vremenske korake (vremenski korak zapisivanja rješenja definiramo u „controlDict“). Također se odnose i na mapu „0“, koja sadrži početne vremenske uvjete koje moramo sami definirati [28].

6.2 Izrada domene i numeričke mreže

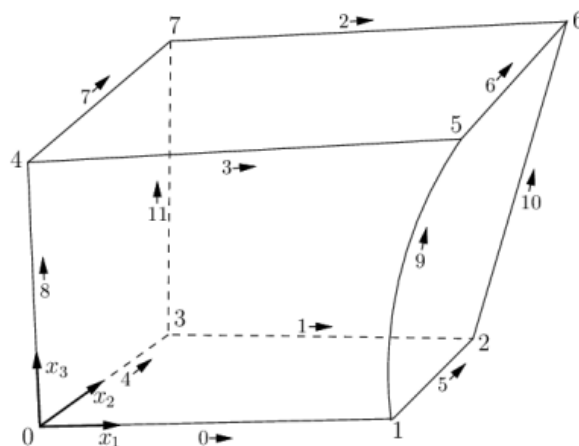
Domenu izrađujemo po uzoru na eksperimentalni kanal iz prethodnog poglavlja. Potrebno je prvo definirati vrhove („vertices“) domene unutar datoteke „blockMeshDict“. S obzirom da je kanal pravokutnog poprečnog presjeka, definiramo 8 vrhova, kao što je prikazano na slici 6.2.

```
convertToMeters 1;

vertices
(
    (0 0 0) //0
    (0 0.309 0) //1
    (0 0.309 0.450)//2
    (0 0 0.450)//3
    (12.5 0 0)//4
    (12.5 0.309 0)//5
    (12.5 0.309 0.450)//6
    (12.5 0 0.450)//7
);
```

Slika 6.2 Koordinate vrhova domene

Opcija „convertToMeters“ skalira definirane vrhove (u ovom slučaju ne dolazi do skaliranja jer se vrijednosti koordinata množe s 1).

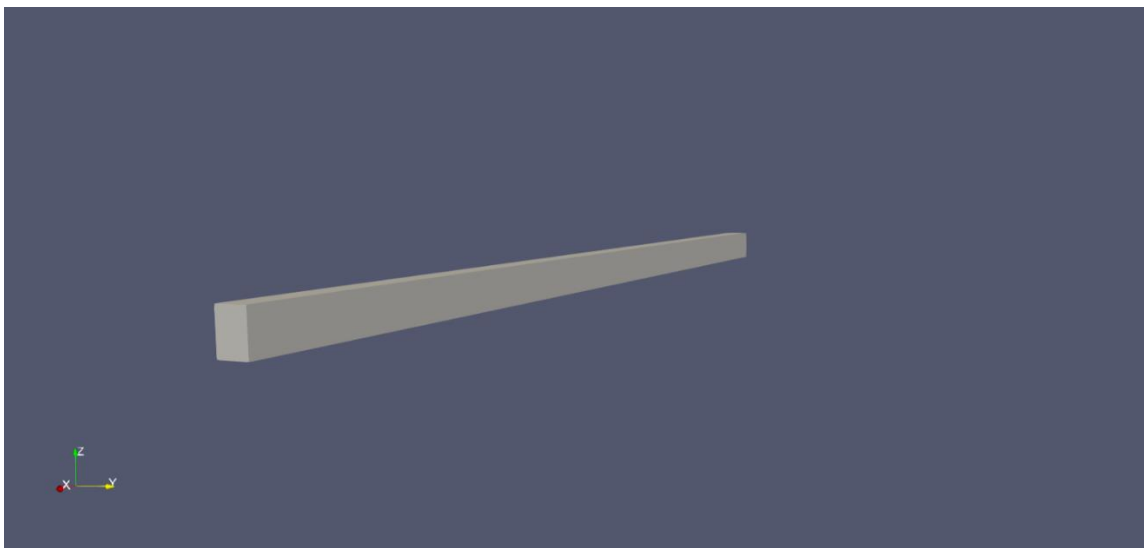


Slika 6.3 Blok numeričke mreže [29]

Na slici 6.3 je prikazan blok numeričke mreže definiran po OpenFOAM-ovoj konvenciji. Pravila po kojima OpenFOAM generira blokove su sljedeća:

- Vrh 0 predstavlja ishodište
- x_1 os se definira kretanjem od vrha 0 do vrha 1
- x_2 os se definira kretanjem od vrha 1 do vrha 2
- Vrhovi 0,1,2,3 definiraju ravninu $x_3 = 0$
- Vrh 4 se dobiva pomicanjem vrha 0 po x_3 osi
- Vrhovi 5,6 i 7 se također dobivaju pomicanjem vrhova 1,2 i 3 po x_3 osi [29]

Domenu možemo generirati naredbom „blockMesh“ unutar naredbenog prozora. Za vizualizaciju domene (i rješenja) moguće je koristiti program „ParaView“. Potrebno je kreirati praznu datoteku naredbom „touch“ na koju se „ParaView“ referira, a s obzirom da je ona prazna učitavaju se podaci direktno iz datoteka dobivenih simulacijom. Vizualizacija pomoću „ParaView“-a je prikazana na slici 6.4.



Slika 6.4 Domena eksperimentalnog kanala

Numeričku mrežu izrađujemo tako da ima 20 elemenata po x_1 i x_2 osi, te 100 elemenata po x_3 osi. Razlog tomu je što su vrhovi definirani na način da prvo definiraju poprečni presjek kanala (y i z os), te onda x os koja definira duljinu kanala, te stoga x_3 os predstavlja x os, dok x_1 i x_2 predstavljaju y i z osi, tj. širinu i visinu kanala (slika 6.5). Kako je domena jednostavnog oblika (kvadar), moguće je definirati numeričku mrežu samo s jednim blokom. Opcija „hex“ definira heksahedralni oblik blokova, te je u nastavku potrebno upisati vrhove koji definiraju blok. Opcija „simpleGrading“ definira uniformu ekspanziju niz x_1 , x_2 , i x_3 osi.

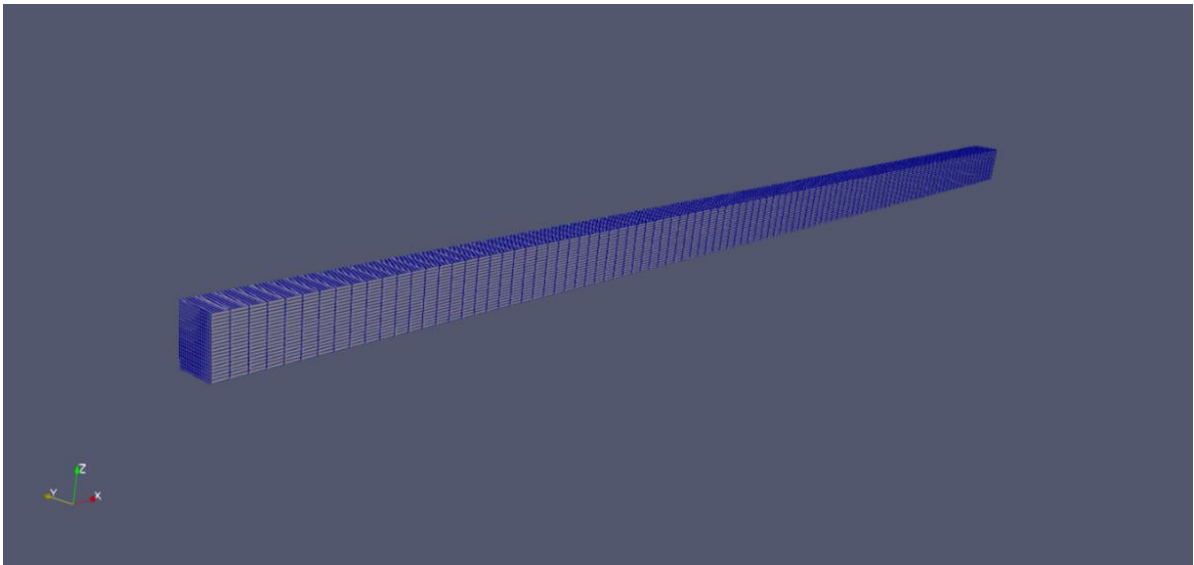
```

blocks
(
  hex (0 1 2 3 4 5 6 7)
  (30 30 100)
  simpleGrading (
    (
      (20 30 4)
      (60 40 1)
      (20 30 0.25)
    )
    (
      (20 30 4)
      (60 40 1)
      (20 30 0.25)
    )
  )
  1
)
);

```

Slika 6.5 Postavke numeričke mreže

Po rubovima domene je potrebno napraviti dodatna ugušćenja, kako bi rezultati bili što tačniji.



Slika 6.6 Domena s izrađenom numeričkom mrežom

Nakon definiranja numeričke mreže potrebno je definirati i granice domene, kao što je prikazano na idućim slikama.

```

boundary
(
  inlet
  {
    type patch;
    faces
    (
      (0 1 2 3)
    );
  }
  outlet
  {
    type patch;
    faces
    (
      (4 5 6 7)
    );
  }
}

```

Slika 6.7 Granice ulaza i izlaza iz domene

```

wall1
{
  type wall;
  faces
  (
    (5 1 2 6)
  );
}
wall2
{
  type wall;
  faces
  (
    (6 2 3 7)
  );
}
wall3
{
  type wall;
  faces
  (
    (5 1 0 4)
  );
}
wall4
{
  type wall;
  faces
  (
    (4 0 3 7)
  );
}
};

```

Slika 6.8 Granice zidova domene

Ulaz i izlaz iz domene („inlet“ i „outlet“) definiramo kao „patch“, dok zidove definiramo kao „wall“, kako bi se na tim plohama primijenile zidne funkcije. Plohe definiramo tako da upisujemo njihove vrhove u smjeru suprotnom od kazaljke na satu. Svaki zid je definiran zasebno radi preglednosti domene prilikom simulacije kretanja čestica.

Rubnu brzinu i tlakove definiramo ovisno o kojoj granici se radi. Kako nemamo zadanu brzinu, ali znamo da je volumni protok u kanalu jednak $72 \text{ m}^3/\text{h}$, tj. $0,02 \text{ m}^3/\text{s}$, možemo definirati volumni protok na ulazu pomoću opcije „flowRateInletVelocity“. Na izlazu iz domene postavljamo gradijent na 0 pomoću opcije „zeroGradient“. Kanal je otvorenog tipa, što znači da moramo definirati protok vode na gornjem zidu domene (jer gornji zid domene zapravo predstavlja površinu vode). To činimo postavljanjem „slip“ rubnog uvjeta, čime zadajemo da fluid ne prolazi kroz gornju plohu, ali ima brzinu zadanu usporedno s plohom. Na ostalim zidovima domene moramo postaviti „no-slip“ uvjet kako bi se osiguralo da nema prolaženja fluida ni ostvarivanja brzine, s obzirom da se tu radi o fizičkim zidovima kanala.

Za rubne uvjete tlakova na svim granicama definiramo „zeroGradient“, osim na izlazu iz domene gdje postavljamo fiksnu vrijednost 0. Ostali rubni uvjeti, poput turbulentne kinetičke energije i disipacije će biti detaljnije razrađeni u narednom poglavlju, prilikom simuliranja strujanja vode u otvorenom kanalu. Postavke rubnih uvjeta brzine i tlaka je moguće vidjeti na sljedećim slikama.

```

dimensions      [0 1 -1 0 0 0];
internalField   uniform (0 0 0);
boundaryField
{
    inlet
    {
        type          flowRateInletVelocity;
        volumetricFlowRate constant 0.02;
        value          uniform (0 0 0);
    }

    outlet
    {
        type          zeroGradient;
    }

    wall1
    {
        type          noSlip;
    }

    wall2
    {
        type          slip;
    }

    wall3
    {
        type          noSlip;
    }
    wall4
    {
        type          noSlip;
    }
}

```

Slika 6.9 Rubni uvjeti brzine

```

dimensions      [0 2 -2 0 0 0];
internalField   uniform 0;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type          zeroGradient;
    }

    outlet
    {
        type          fixedValue;
        value          uniform 0;
    }

    wall1
    {
        type          zeroGradient;
    }

    wall2
    {
        type          zeroGradient;
    }

    wall3
    {
        type          zeroGradient;
    }

    wall4
    {
        type          zeroGradient;
    }
}

```

Slika 6.10 Rubni uvjeti tlakova

7. SIMULACIJA STRUJANJA VODE

U ovom poglavlju razmatrati će se rezultati simuliranja strujanja vode u otvorenom kanalu. Za potrebe simuliranja turbulentnosti strujanja koristit će se RANS numerički modeli, ali usporedbe radi će biti prikazano i simuliranje turbulencije pomoću LES numeričkog modela.

7.1 „simpleFoam“ numerički rješavač

Numerički rješavač koji ćemo koristiti za provedbu simulacija se zove „simpleFoam“. „simpleFoam“ je rješavač koji rješava stacionarna stanja za turbulentno strujanje nestlačivog fluida. Rješavač koristi SIMPLE („Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations“) algoritam kako bi riješio jednadžbu očuvanja mase [30]:

$$\nabla \mathbf{v} = 0, \quad (7.1)$$

i jednadžbu ravnoteže količine gibanja:

$$\nabla(\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) - \nabla \mathbf{R} = -\nabla p + \mathbf{S}_u, \quad (7.2)$$

gdje je \mathbf{v} brzina fluida, \mathbf{R} tenzor naprezanja, p tlak i \mathbf{S}_u izvor količine gibanja.

Diskretizacijom jednadžbe ravnoteže količine gibanja dobivamo sustav algebarskih jednadžbi oblika:

$$M[\mathbf{v}] = -\nabla p, \quad (7.3)$$

gdje se matrica $M[\mathbf{v}]$ sastoji od dijagonalnih i nedijagonalnih dijelova nastalih korištenjem dekompozicije:

$$M[\mathbf{v}] = A\mathbf{v} - \mathbf{H}. \quad (7.4)$$

Diskretizirana jednadžba ravnoteže količine gibanja tada glasi:

$$A\mathbf{v} - \mathbf{H} = -\nabla p, \quad (7.5)$$

te sređivanjem dobivamo korekcijsku jednadžbu za brzinu:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{H}}{A} - \frac{1}{A} \nabla p. \quad (7.6)$$

Interpolacijom \mathbf{v} na lica numeričke mreže i vektorskim množenjem s vektorom površine lica \mathbf{S}_f dobivamo korekcijsku jednadžbu za volumetrijski fluks (brzinu volumnog protoka po jedinici površine) :

$$\phi = \mathbf{v} \times \mathbf{S}_f = \left(\frac{\mathbf{H}}{A}\right) \mathbf{S}_f - \left(\frac{1}{A}\right)_f \mathbf{S}_f \nabla_f^\perp p. \quad (7.7)$$

Iz jednadžbe očuvanja mase dobivamo uvjet:

$$\nabla \phi = 0, \quad (7.8)$$

te supstitucijom korekcijske jednadžbe za volumetrijski fluks konačno dobivamo jednadžbu tlaka:

$$\nabla \left[\left(\frac{1}{A}\right)_f \nabla p \right] = \nabla \left(\frac{\mathbf{H}}{A}\right)_f. \quad (7.9)$$

Algoritam za svaku iteraciju je sljedeći:

1. Prijelaz na iduću iteraciju $t = t^{n+1}$
2. Inicijalizacija \mathbf{v}^{n+1} i p^{n+1} koristeći najnovije dostupne vrijednosti za \mathbf{v} i p
3. Konstrukcija algebarskih jednadžbi očuvanja količine gibanja
4. Podrelaksacija matrice $M[\mathbf{v}]$
5. Rješavanje jednadžbi očuvanja količine gibanja i dobivanje predikcije za \mathbf{v}^{n+1}
6. Konstrukcija jednadžbe tlaka
7. Rješavanje jednadžbe tlaka za p^{n+1}
8. Korigiranje fluksa za ϕ^{n+1}
9. Podrelaksacija p^{n+1}
10. Korigiranje brzine za \mathbf{v}^{n+1}
11. Ponavljanje postupka od 2. točke u slučaju da nije nastupila konvergencija rješenja [31]

Iako su zbog niske računalne zahtjevnosti i jednostavnog programiranja SIMPLE algoritmi našli široku primjenu kod rješavanja RANS numeričkih modela, mana im je neefikasnost pri masivnijim numeričkim problemima, zbog slabe sprege tlaka i brzine. Konvergencija rješenja ne raste linearno s povećanjem problema, pa kvaliteta algoritma pada [17].

S obzirom da je cilj simulacije dobiti stacionaran tok vode u kanalu, prikladno je izabrati „simpleFoam“ rješavač, koji nudi opciju simuliranja laminarnog toka, te simuliranje turbulentnog toka pomoću LES i RANS numeričkih modela.

Kako bi odredili vrstu strujanja, a time i koju vrstu simulacije ćemo koristiti, moramo izračunati Reynoldsov broj. Karakteristična dužina koju ćemo koristiti za izračun Reynoldsovog broja je hidraulički promjer d_h , koji je jednak:

$$d_h = 4 * \frac{A}{P} = 4 * \frac{by}{b + 2y} = 4 * \frac{0,309 * 0,45}{0,309 + 2 * 0,45} = 0,46 \text{ m}, \quad (7.10)$$

gdje je A površina poprečnog presjeka, a P omočeni opseg. Korištena formula vrijedi za otvoreni pravokutni kanal.

Ulaznu brzinu strujanja vode možemo dobiti preko formule za volumni protok:

$$Q = A * v \quad (7.11)$$

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{Q}{ab} = \frac{0,02}{0,309 * 0,450} = 0,1438 \text{ m/s}. \quad (7.12)$$

Sada možemo izračunati Reynoldsov broj:

$$Re = \frac{vd_h}{\nu} = \frac{0,1438 * 0,46}{1 * 10^{-6}} = 66148. \quad (7.13)$$

Dobiveni Reynoldsov broj koji je znatno veći od 2300 pokazuje da je strujanje turbulentno, te sukladno tome simuliranje laminarnog strujanja nije zadovoljavajuće, već se moramo koristiti turbulentnim modelima.

7.2 Simulacija turbulentnog strujanja LES numeričkim modelom

Kako bismo pokrenuli simulaciju koristeći se LES numeričkim modelom, potrebno je definirati odgovarajuće postavke unutar „turbulenceProperties“ datoteke. S obzirom da se u ovom slučaju radi o turbulentnom strujanju, potrebno je definirati i turbulentni model, te je izabran „dynamic k equation“ model (slika 7.1).

```
simulationType LES;

LES
{
    model          dynamicKEqn;
    turbulence     on;
    printCoeffs   on;
    delta          cubeRootVol;

    dynamicKEqnCoeffs
    {
        filter     simple;
    }
    cubeRootVolCoeffs
    {
        deltaCoeff 1;
    }
}
```

Slika 7.1 Postavke LES numeričkog modela

Unutar „transportProperties“ datoteke je potrebno definirati kinematičku viskoznost koja za vodu iznosi $1 * 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ (slika 7.2). Uzeti su rubni uvjeti iz 6. poglavlja.

```
transportModel  Newtonian;  
nu              [0 2 -1 0 0 0] 1e-06;
```

Slika 7.2 Postavke svojstva fluida (vode)

Simulaciju pokrećemo naredbom „simpleFoam“. Simulacija se odvija za 2000 iteracija. Dobivamo konvergirano rješenje nakon 137 iteracija.

LES numerički modeli su prikladniji za rješavanje tranzijentnih problema, što ih čini nepovoljnim za ovaj slučaj, s obzirom da koristimo stacionarni rješavač, te se stacionarno stanje i traži. Za „dynamic k equation“ model potrebno je zadati kao rubni uvjet turbulentnu kinetičku energiju. Turbulentnu kinetičku energiju je moguće dobiti koristeći se „online“ kalkulatorom za turbulenciju prikazanim na slici 7.3. (<https://www.cfd-online.com/Tools/turbulence.php>), u koji je potrebno unijeti brzinu strujanja vode, intenzitet turbulencije i turbulentnu duljinsku skalu.

Intenzitet turbulencije možemo aproksimirati izrazom:

$$I = 0,16Re^{-\frac{1}{8}} = 0,16 * (66148)^{-\frac{1}{8}} = 0.0399. \quad (7.14)$$

Intenzitet turbulencije uzimamo kao 4%, dok turbulentnu duljinsku skalu računamo prema izrazu:

$$T_{uL} = 0,038 * d_h = 0,038 * 0,46 = 0,01748 \text{ m}, \quad (7.15)$$

gdje d_h predstavlja širinu kanala. Unosom ovih veličina dobivamo da je kinetička turbulentna energija jednaka:

$$k = 0,0000496 \text{ J/kg} = 4,96 * 10^{-5} \text{ J/kg}. \quad (7.16)$$

Dobivenu kinetičku energiju je potrebno unijeti u datoteku „k“ kako bi definirali rubni uvjet (slika 7.4).

Turbulence Properties, Conversions & Boundary Estimations

Properties

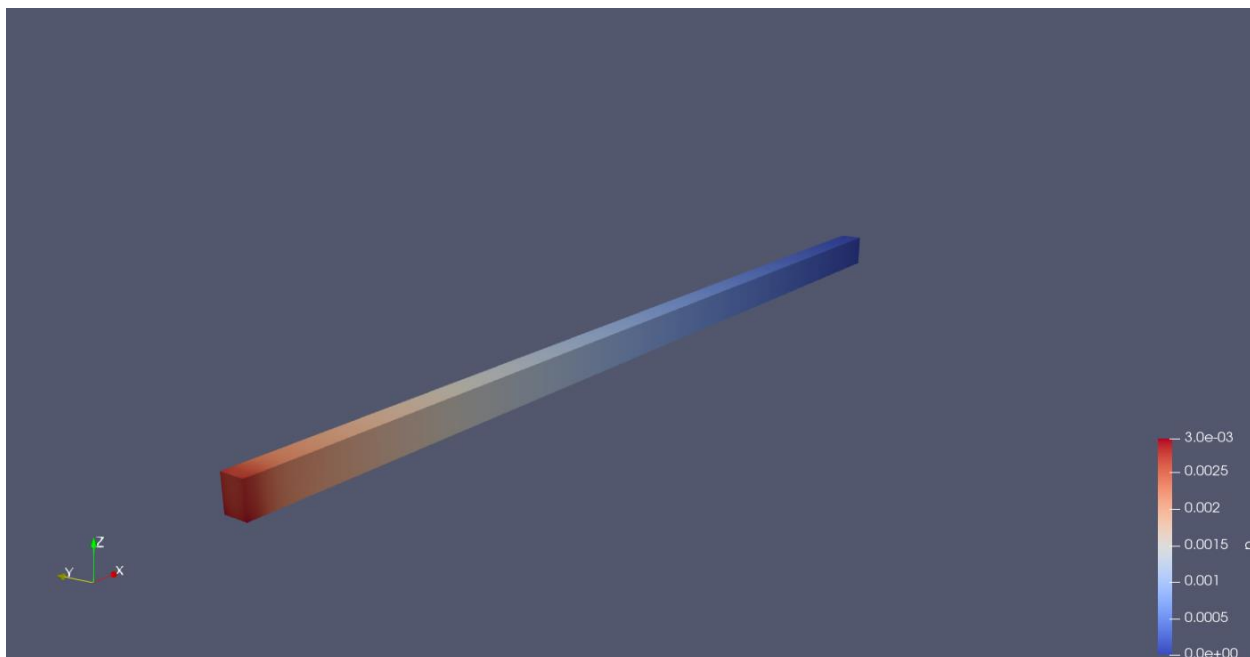
Freestream velocity	U_∞	0.1438	[m/s]	
Turbulence kinetic energy	k	0.0000496282560000	[J/kg] = [m ² / s ²]	
Turbulence dissipation	ϵ	0.00000180009158567	[J/kgs] = [m ² / s ³]	
Specific turbulence dissipation	ω	0.4030167334235939	[1/s]	
Turbulence intensity/level	Tu	4	[%]	
Turbulence length scale	Tu_L	0.01748	[m]	
Kinematic viscosity	ν	1e-6	[m ² /s] (Air: 1.5e-05, Water: 1E-06 at room temp & pressure)	
Eddy viscosity ratio	μ_t / μ		[]	
Color codings:		Source	Target	Error

Slika 7.3 Kalkulator turbulencije [32]

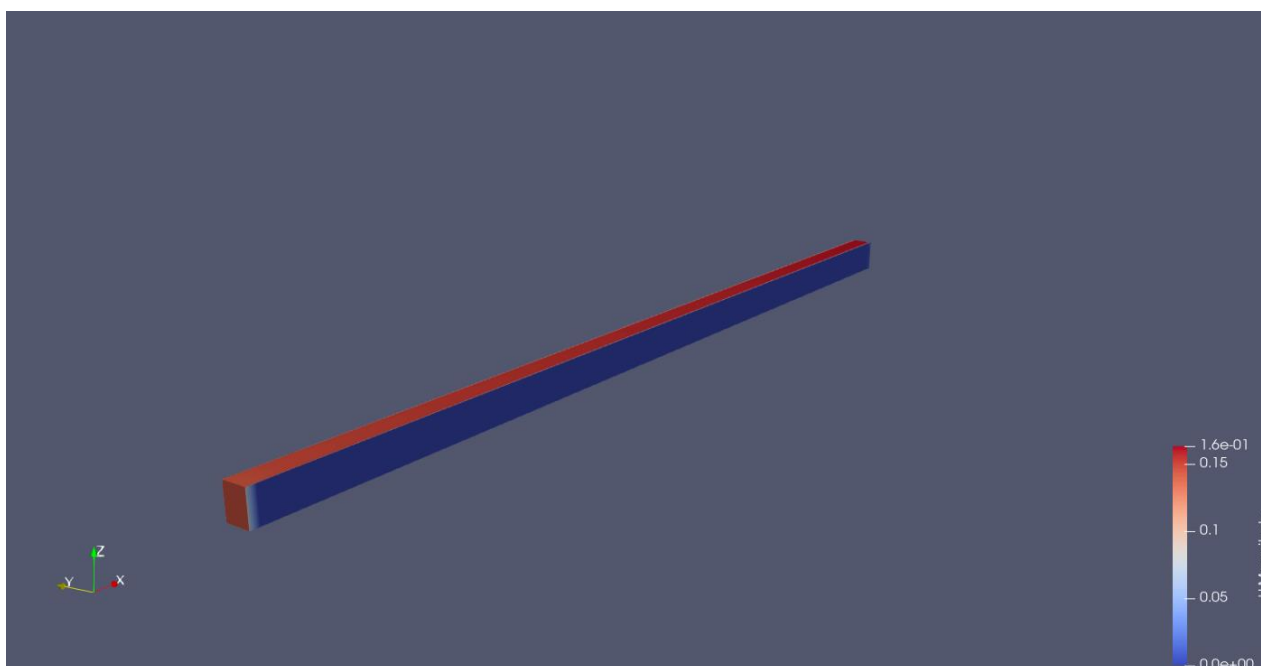
```

dimensions      [0 2 -2 0 0 0];
internalField   uniform 0.0000496;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 0.0000496;
    }
    outlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    wall1
    {
        type      kqRWallFunction;
        value     uniform 0.0000496;
    }
    wall2
    {
        type      kqRWallFunction;
        value     uniform 0.0000496;
    }
    wall3
    {
        type      kqRWallFunction;
        value     uniform 0.0000496;
    }
    wall4
    {
        type      kqRWallFunction;
        value     uniform 0.0000496;
    }
}
    
```

Slika 7.4 Rubni uvjeti za turbulentnu kinetičku energiju

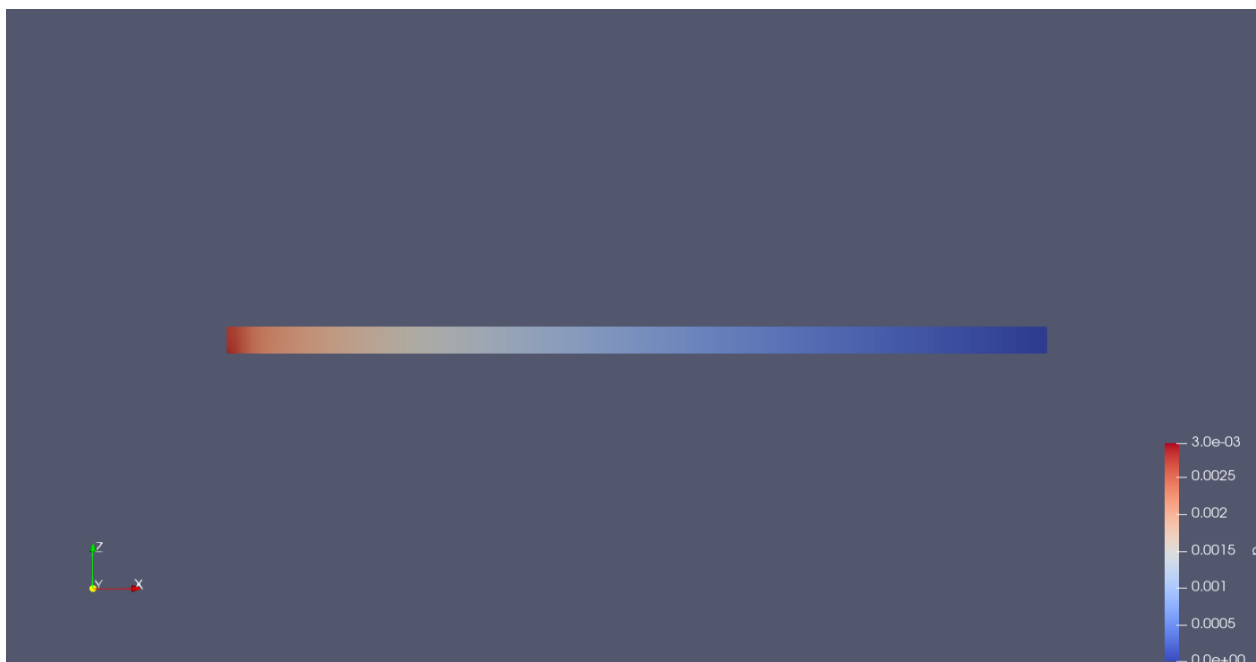


Slika 7.5 Kontura tlaka za turbulentno strujanje (LES)



Slika 7.6 Kontura brzina za turbulentno strujanje (LES)

Kontura tlaka (slika 7.5) prikazuje najveći tlak pri ulazu u domenu, koji postepeno pada prema izlazu iz domene, što je i očekivano s obzirom da se energija vode smanjuje kako voda struji kroz kanal, što uzrokuje pad tlaka. Iz konture brzina (slika 7.6) je moguće vidjeti da je na zidovima domene brzina 0 m/s, osim na gornjem zidu koji predstavlja otvoreni dio kanala, što odgovara prethodno postavljenim rubnim uvjetima. Radi detaljnijeg pregleda, moguće je prikazati presjeke kontura, kao na slikama 7.7 i 7.8. Presjeke možemo napraviti pomoću naredbe „Slice“, te je ravnina presjeka normalna s obzirom na y os.

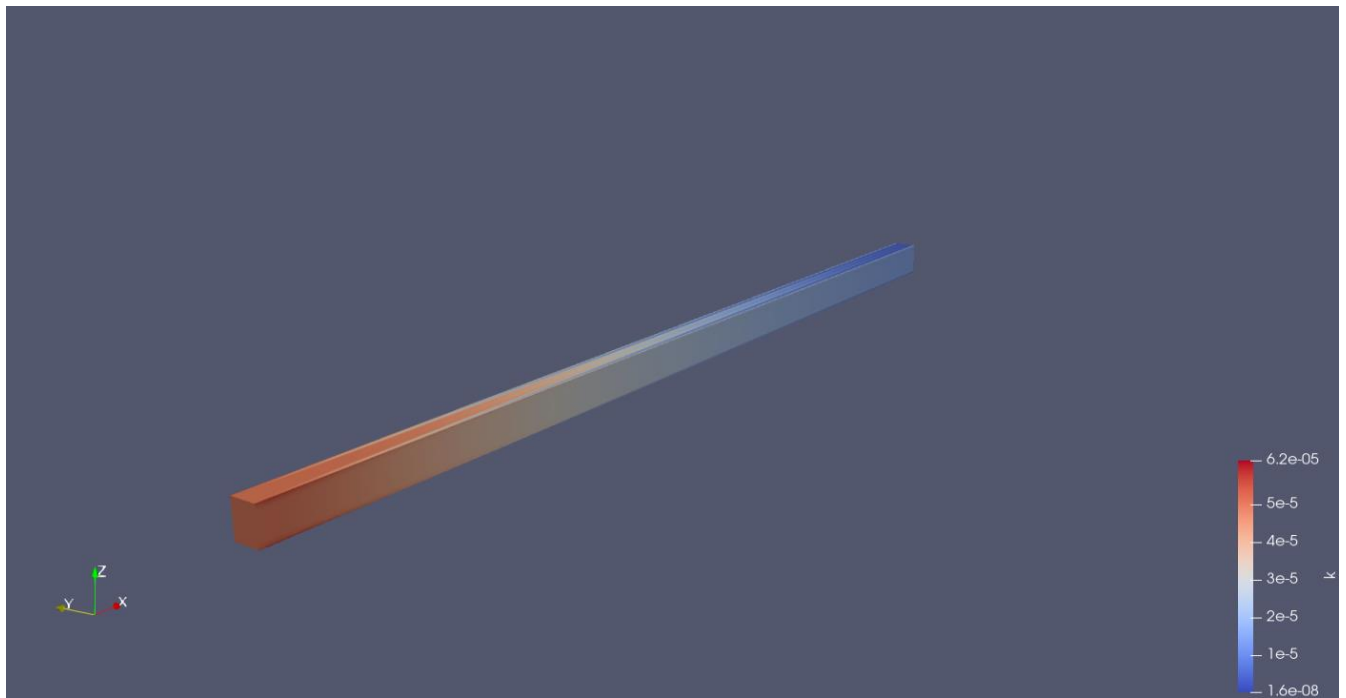


Slika 7.7 Presjek konture tlaka (LES)

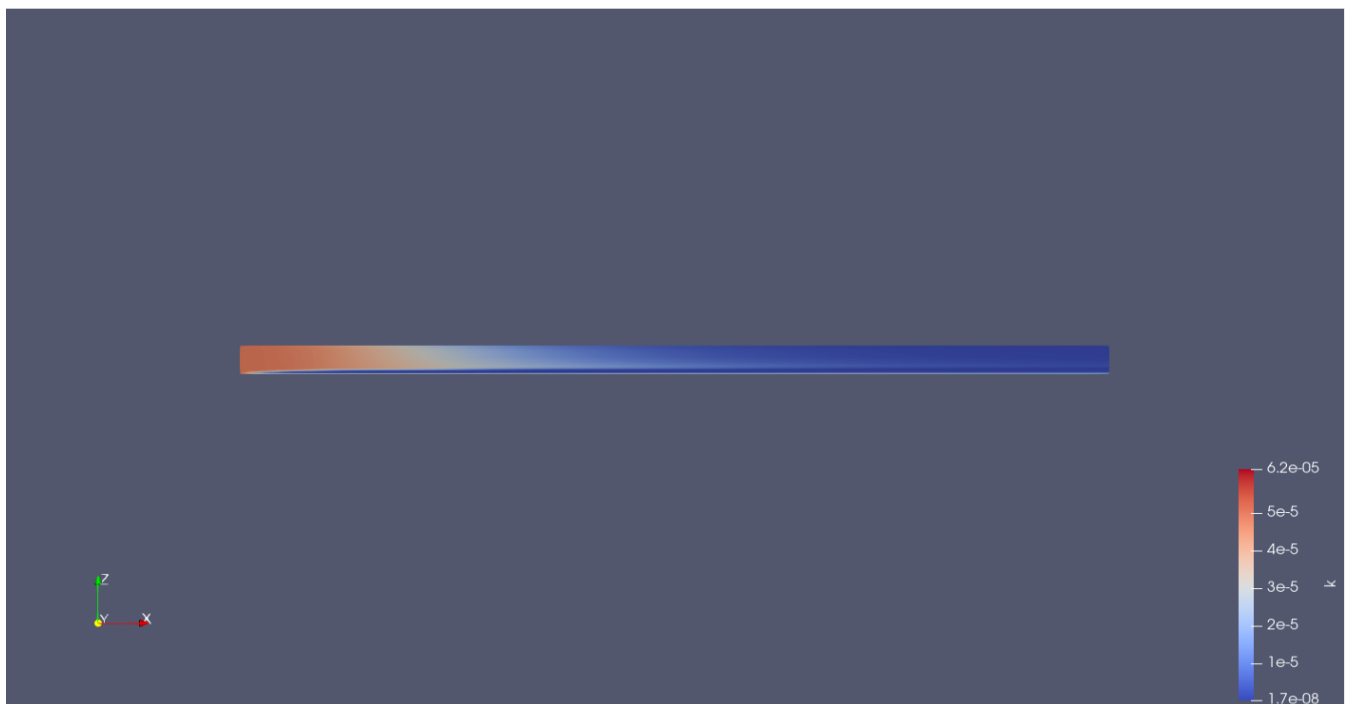


Slika 7.8 Presjek konture brzina (LES)

Iz slike 7.8 se može vidjeti da u slojevima blizu stijenke dolazi do smanjenja brzine. Zbog „slip“ uvjeta ta pojava se ne javlja na gornjoj plohi.



Slika 7.9 Kontura turbulentne kinetičke energije (LES)



Slika 7.10 Presjek konture turbulentne kinetičke energije (LES)

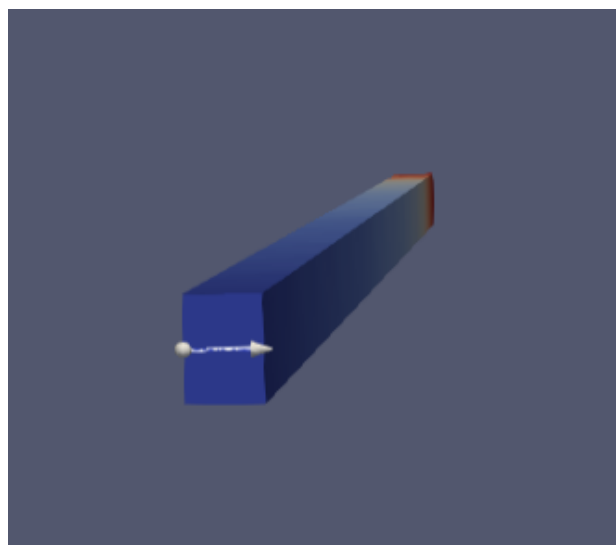
Kao što je vidljivo iz kontura, turbulentna kinetička energija je najveća na početku domene te se gradualno smanjuje prema izlazu. Iz presjeka se također vidi da je se turbulencija javlja po cijeloj domeni, a ne samo po zidovima, što je suprotno rezultatima dobivenim RANS modeliranjem, koje će biti prikazani kasnije. Razlog tomu je što je LES modeliranjem dobiveno polje turbulentne kinetičke vrijednosti čije su vrijednosti izrazito malene, neovisno gdje se u domeni nalazili.



Slika 7.11 Profil brzina (LES)

Iz slike 7.11 vidljiv je dobiveni profil spljoštenog oblika, što odgovara turbulentnom strujanju, ali dobiveni profil je toliko spljošten da praktički teži prema idealnom profilu brzina, što nije realna situacija. Ovakav pristup nije prikladan stacionarnim problemima, pa se stoga može zaključiti da dobivena rješenja nisu zadovoljavajuća, te se stoga LES numerički modeli neće dalje razmatrati, već će se fokusirati na numeričke modele temeljene na RANS pristupu, tj. na dvojednadžbene modele.

Profil brzina se pratio na izlazu iz domene (slika 7.12), te su koordinate ishodišne i završne točke pravca kojim se definirala ravnina profila brzina $T_1(12,5, 0, 0,225)$ i $T_2(12,5, 0,309, 0,225)$.



Slika 7.12 Pravac za definiranje ravnine profila brzina

7.3 Simulacija turbulentnog strujanja RANS numeričkim modelima

OpenFOAM nudi razne RANS turbulentne modele na korištenje, poput često korištenih $k - \varepsilon$, $k - \omega$ i $k - \omega SST$ modela. Osim njih, moguće je upotrijebiti i varijante $k - \varepsilon$ modela, poput Lienovog kubičnog, Shihovog kvadratičnog i „realizable“ modela, te je alternativno moguće upotrijebiti i $v^2 - f$ model. Koristit će se prethodno dobivene turbulentne vrijednosti iz kalkulatora:

$$k = 4,96 * 10^{-5} \text{ J/kg} \quad (7.14)$$

$$\varepsilon = 1,8 * 10^{-6} \text{ J/kgs} \quad (7.15)$$

$$\omega = 0,403 \text{ s}^{-1}. \quad (7.16)$$

Osim preko kalkulatora, vrijednosti je moguće dobiti proračunom, pa tako kinetičku energiju možemo izračunati izrazom:

$$k = \frac{3}{2} (v * l)^2 = \frac{3}{2} (0,1438 * 0,04)^2 = 4,96 * 10^{-5} \text{ J/kg}, \quad (7.17)$$

dok se disipacija kinetičke energije dobiva izrazom:

$$\varepsilon = C_\mu \frac{k^{\frac{3}{2}}}{T_{uL}} = 0,09 \frac{(4,96 * 10^{-5})^{\frac{3}{2}}}{0,01748} = 1,8 * 10^{-6} \text{ J/kgs}. \quad (7.18)$$

Brzinu disipacije možemo izračunati preko prethodno dobivenih vrijednosti:

$$\omega = \frac{\varepsilon}{k\beta^*} = \frac{1,8 * 10^{-6}}{4,96 * 10^{-5} * 0,09} = 0,4032 \text{ s}^{-1}. \quad (7.19)$$

Konstanta β^* se najčešće uzima kao $\beta^* = C_\mu = 0,09$ [33].

7.3.1 Simuliranje pomoću $k - \varepsilon$ modela

Postupak pokretanja simulacije je identičan kao i kod LES numeričkog modeliranja, tj. potrebno je sve potrebne podatke o simulaciji i rubnim uvjetima unijeti u odgovarajuće datoteke, kao što je prikazano na idućim slikama. Uvjeti za brzinu, tlak i kinetičku energiju ostaju nepromijenjeni. Kako simulacija sa standardnim $k - \varepsilon$ modelom nije konvergirala ni nakon 2000 iteracija, prikazati će se rezultati „realizable“ $k - \varepsilon$ modela koji je konvergirao nakon 163 iteracije.

```

simulationType RAS;

RAS
{
    RASModel      realizableKE;

    turbulence    on;

    printCoeffs   on;
}

```

Slika 7.13 Postavke za „realizable“ $k - \varepsilon$ model

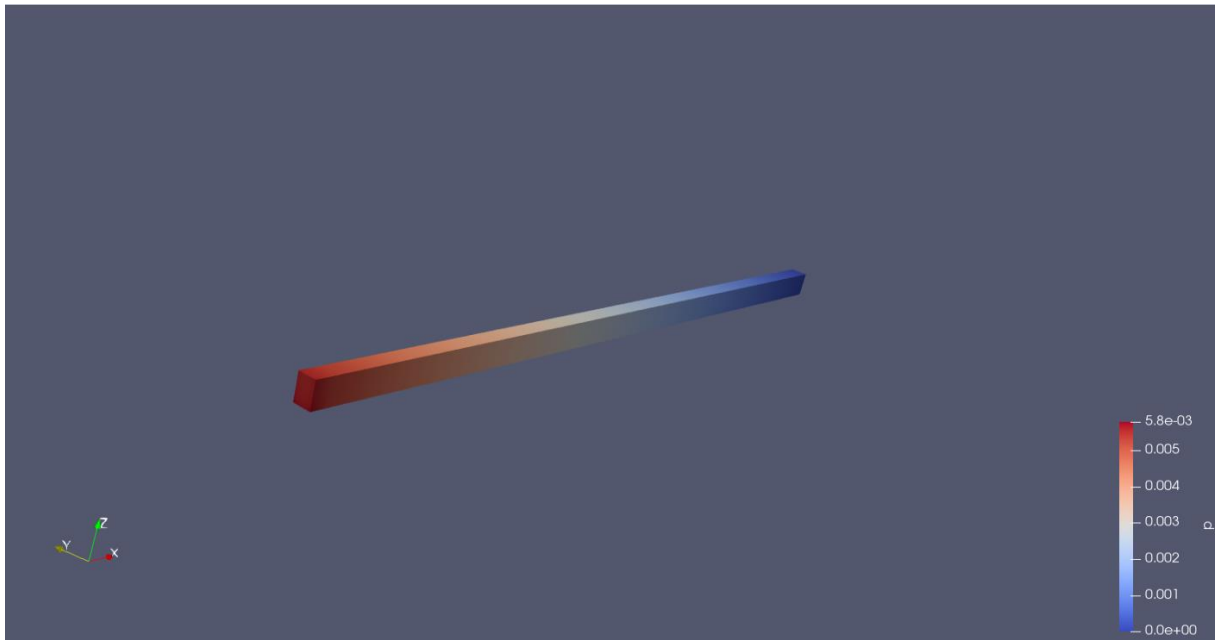
Pod opcijom „RASModel“ upisujemo željeni turbulentni model.

```

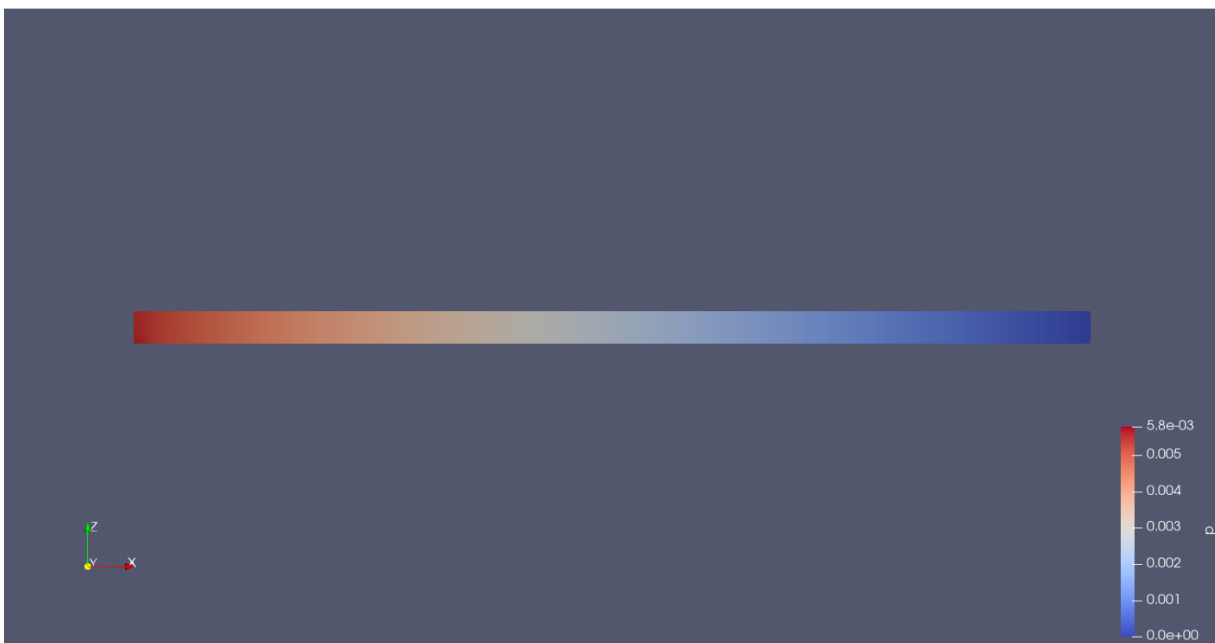
dimensions      [0 2 -3 0 0 0 0];
internalField   uniform 0.0000018;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 0.0000018;
    }
    outlet
    {
        type      zeroGradient;
    }
    wall1
    {
        type      epsilonWallFunction;
        value     uniform 0.0000018;
    }
    wall2
    {
        type      epsilonWallFunction;
        value     uniform 0.0000018;
    }
    wall3
    {
        type      epsilonWallFunction;
        value     uniform 0.0000018;
    }
    wall4
    {
        type      epsilonWallFunction;
        value     uniform 0.0000018;
    }
}

```

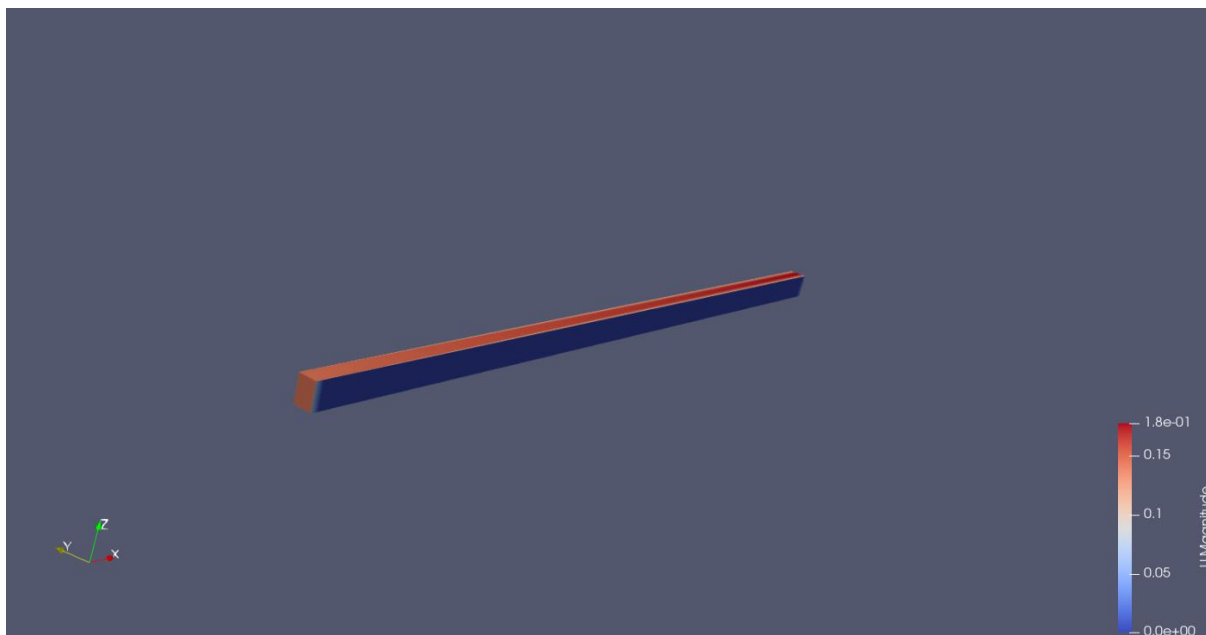
Slika 7.14 Rubni uvjeti za disipaciju turbulentne kinetičke energije



Slika 7.15 Kontura tlaka („realizable“ $k - \varepsilon$ model)



Slika 7.16 Presjek konture tlaka („realizable“ $k - \varepsilon$ model)

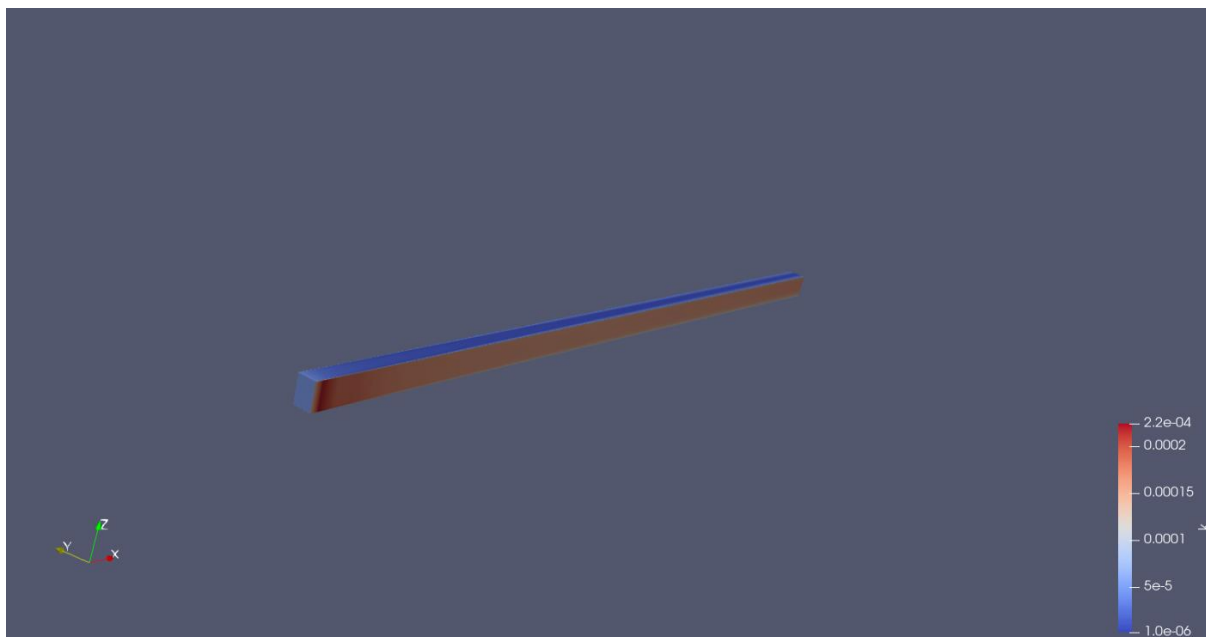


Slika 7.17 Kontura brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model)



Slika 7.18 Presjek konture brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model)

Iz kontura tlaka i brzina je moguće vidjeti da se izgledom dobiva veoma slično rješenje kao i kod LES modeliranja, ali su maksimalne vrijednosti polja tlakova i brzina veće u ovom slučaju. Odstupanja između vrijednosti brzina su manja (11,11%), dok su kod tlakova ipak znatno veća (48,27%).



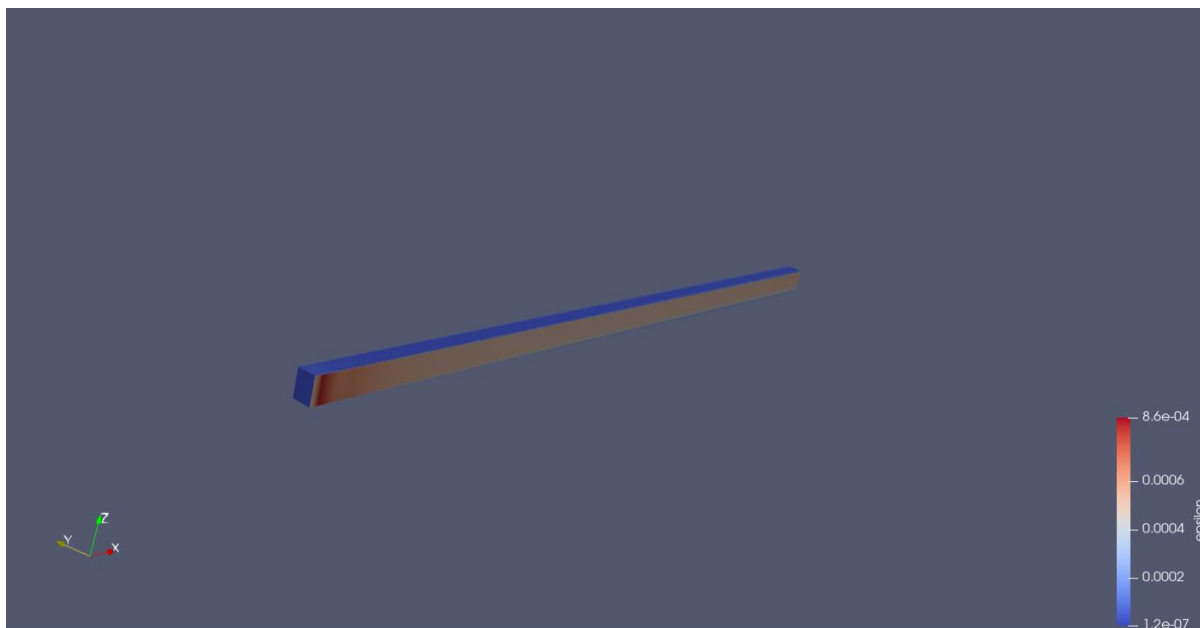
Slika 7.19 Kontura turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model)

Iz dobivene konture kinetičke energije je moguće vidjeti da se najveća kinetička energija, a time i turbulencija, javlja na zidovima sa „no slip“ uvjetima.



Slika 7.20 Presjek konture turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model)

Na ulazu i izlazu domene se dobiva turbulentna kinetička energija malene vrijednosti, dok je po sredini kanala turbulencije gotovo ni nema. Na gornjem zidu također nema turbulencije.



Slika 7.21 Kontura disipacije turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model)



Slika 7.22 Presjek konture disipacije turbulentne kinetičke energije

Očekivano, kontura disipacije prati trend konture kinetičke energije, te su stoga konture sličnog izgleda.



Slika 7.23 Profil brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model)

Iz slike 7.23 moguće je vidjeti da se ostvaruje turbulentan profil brzina. Najveća brzina se ostvaruje pri sredini kanala, oko 0,172 m/s.

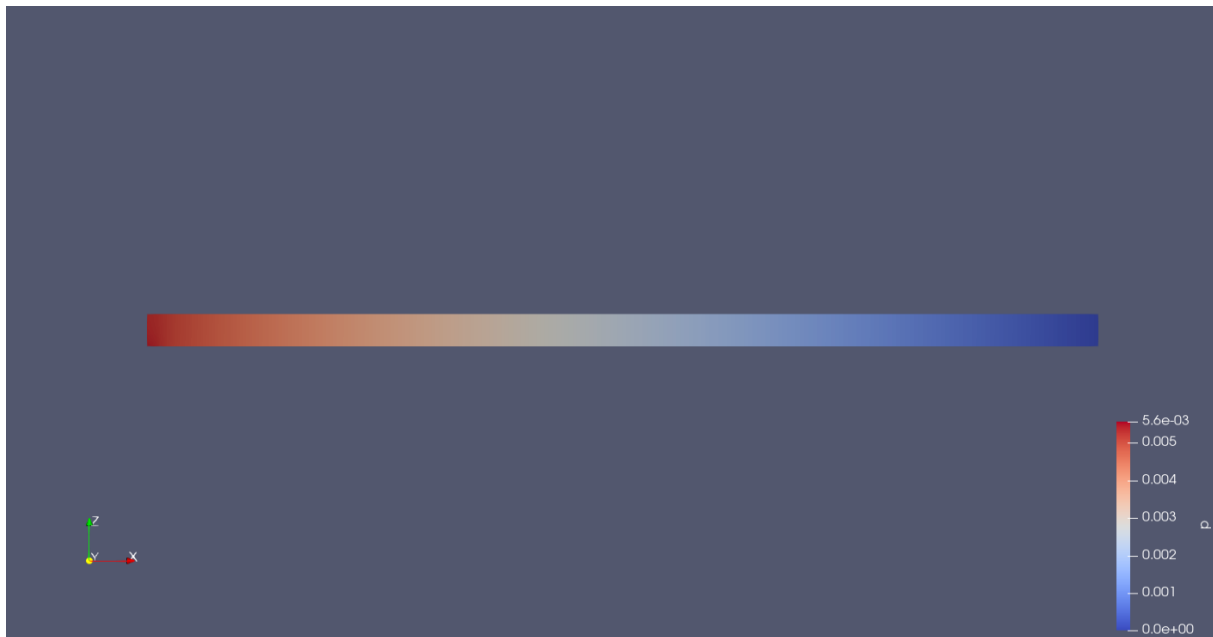
7.3.2 Simuliranje pomoću $k - \omega$ SST modela

Kako bi mogli pokrenuti simuliranje pomoću $k - \omega$ SST modela, unutar „turbulenceProperties“ datoteke je pod „RASModel“ potrebno upisati „kOmegaSST“. Rubni uvjeti ostaju isti kao i u prethodnom primjeru, ali umjesto rubnih uvjeta za disipaciju turbulentne kinetičke energije koristimo rubne uvjete za specifičnu brzinu disipacije (slika 7.32). Razlog zašto se nije koristio standardni $k - \omega$ model je sporija konvergencija rješenja ($k - \omega$ konvergira nakon 129 iteracija, a $k - \omega$ SST nakon 110).

```
dimensions      [0 0 -1 0 0 0];
internalField   uniform 0.403;
boundaryField
{
  inlet
  {
    type          fixedValue;
    value         $internalField;
  }
  outlet
  {
    type          zeroGradient;
  }
  wall1
  {
    type          omegaWallFunction;
    value         $internalField;
  }
  wall2
  {
    type          omegaWallFunction;
    value         $internalField;
  }
  wall3
  {
    type          omegaWallFunction;
    value         $internalField;
  }
  wall4
  {
    type          omegaWallFunction;
    value         $internalField;
  }
}
```

Slika 7.24 Rubni uvjeti za specifičnu brzinu disipacije

Na idućim slikama su prikazani dobiveni rezultati. Kako su rezultati vizualno gotovo identični onima dobivenim pomoću „realizable“ $k - \varepsilon$ modela, radi preglednosti za brzinu, tlak i turbulentnu kinetičku energiju su prikazani samo presjeci kontura.

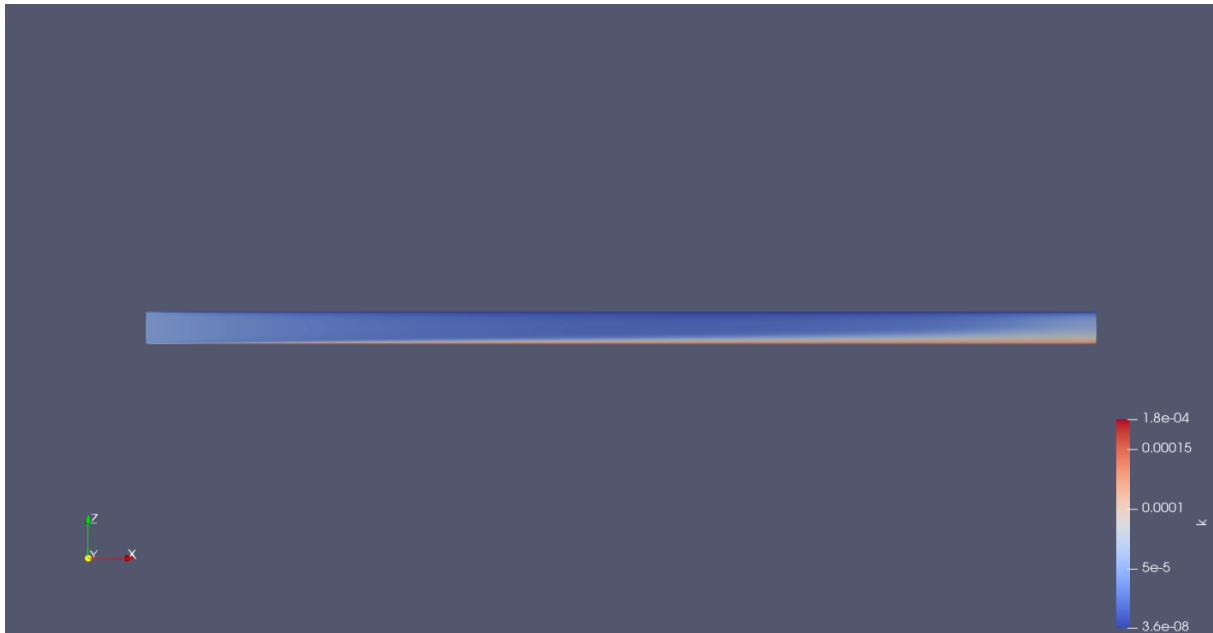


Slika 7.25 Presjek konture tlaka ($k - \omega$ SST model)



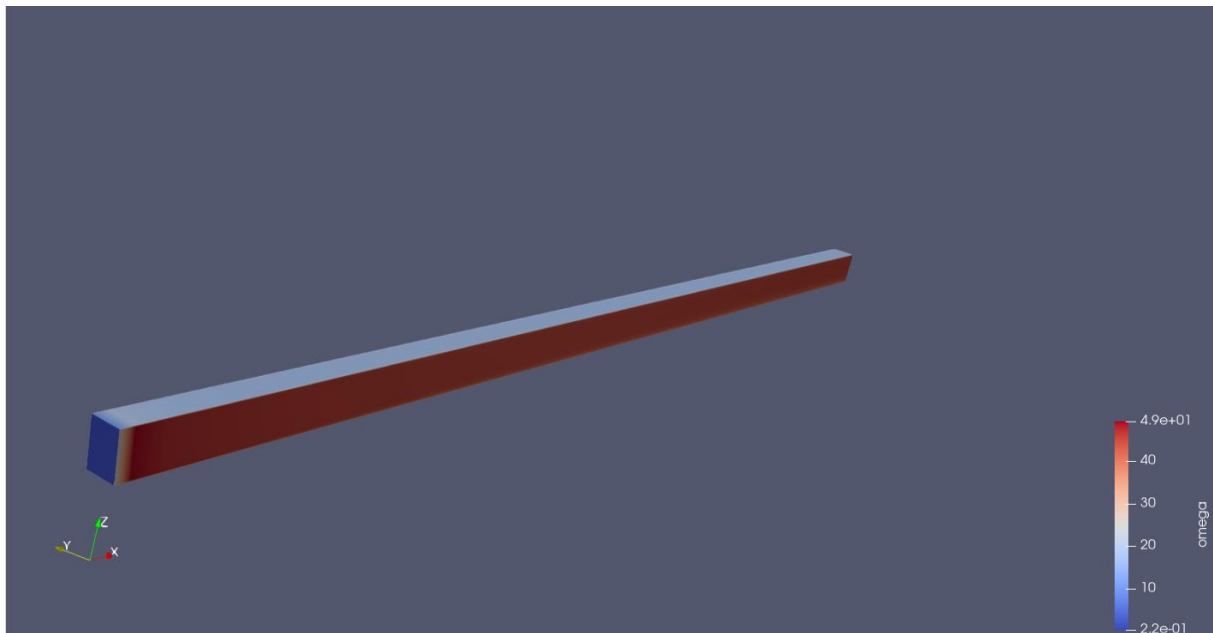
Slika 7.26 Presjek konture brzina ($k - \omega$ SST model)

Vidljivo je da su dobivene konture iste kao i one dobivene $k - \varepsilon$ modelom. Brzine su identične, dok je odstupanje između tlakova maleno (3,45%).



Slika 7.27 Presjek konture turbulentne kinetičke energije ($k - \omega$ SST model)

Maksimalne vrijednosti turbulentne kinetičke energije odstupaju od onih dobivenih $k - \varepsilon$ modelom za 18,18%.

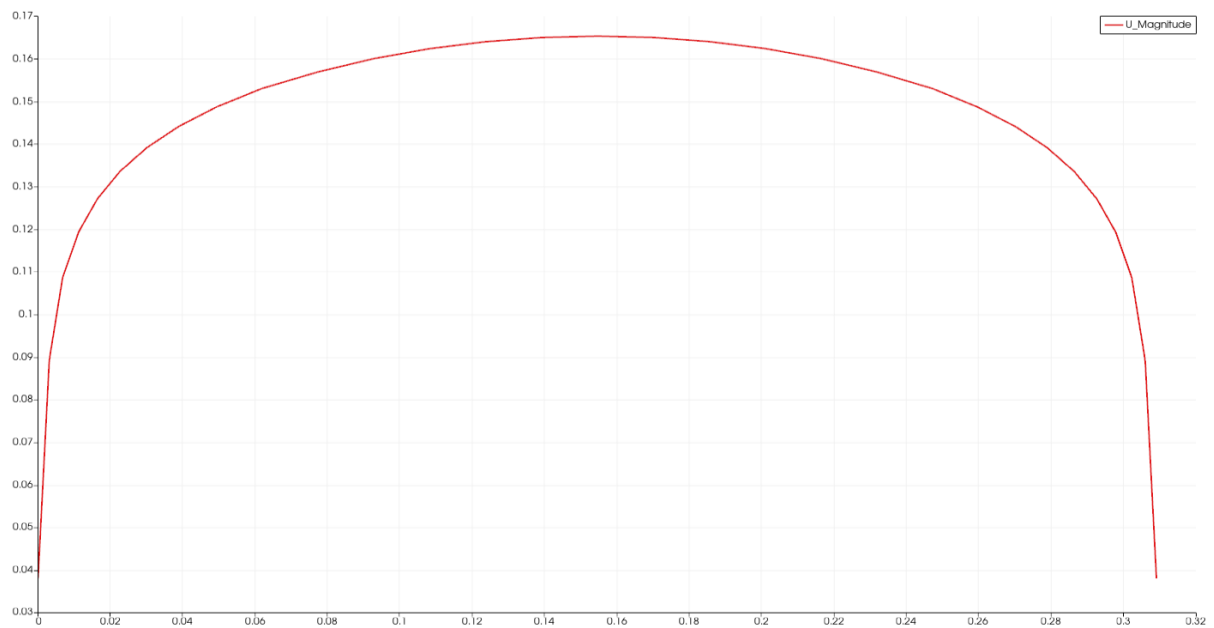


Slika 7.28 Kontura specifične brzine disipacije ($k - \omega$ SST model)



Slika 7.29 Presjek konture specifične brzine disipacije ($k - \omega$ SST model)

Kontura specifične brzine disipacije prati trend kao i ostale konture turbulentnih vrijednosti, pa se tako najveća specifična brzina nalazi na zidovima domene.



Slika 7.30 Profil brzina ($k - \omega$ SST model)

Iz slike 7.30 je moguće vidjeti da se ostvaruje turbulentan profil brzina, spljoštenijeg oblika i s nižim vrijednostima od profila brzina dobivenog s „realizable“ $k - \varepsilon$ modelom. Najveća brzina iznosi 0,166 m/s, što je neznajno manje naspram najveće brzine dobivene „realizable“ $k - \varepsilon$ modelom.

Kako su za oba turbulentna modela rezultati ili isti ili zanemarivo različiti, te su slični rezultati bili dobiveni i za varijacije ovih modela (poput Lienovog kubičnog i Shihovog kvadratičnog $k - \varepsilon$ modela), kao glavni kriterij za izbor turbulentnog modela je bila brzina konvergencija rješenja. Pokazalo se da $k - \omega$ SST model najbrže konvergira, dok standardni $k - \omega$ konvergira sporije, ali i dalje brže od $k - \varepsilon$ modela. Varijacije $k - \varepsilon$ modela imaju najsporiju konvergenciju, dok neki uopće ne konvergiraju.

Tablica 7.1 Broj iteracija simulacije ovisno o izabranom turbulentnom modelu

Turbulentni model	Broj iteracija do konvergencije rješenja
$k - \varepsilon$	Ne konvergira
$k - \omega$	129
$k - \omega$ SST	110
„realizable“ $k - \varepsilon$	163
Lienov kubični $k - \varepsilon$	Ne konvergira
Shihov kvadratični $k - \varepsilon$	188

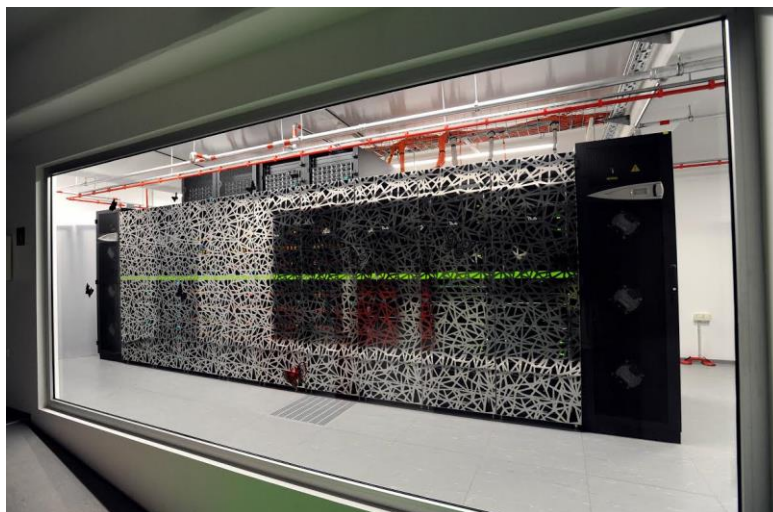
S obzirom da je domena jednostavnog oblika, broj iteracija do konvergencije je malen, ali kako je numerička mreža složenija (ugušćenja na rubovima), simulacija se relativno dugo odvija, pa je prikladno izabrati model koji ima najbržu konvergenciju, u ovom slučaju $k - \omega$ SST.

8. SIMULACIJA HIDRODINAMIKE ČESTICA MIKROPLASTIKE

Simuliranje hidrodinamike čestica je puno zahtjevniji problem od strujanja vode, koje smo radili u prethodnom poglavlju. Povećanjem broja čestica vrijeme računanja naglo raste, s obzirom da je tada potrebno modelirati kretanje svake čestice i interakcije između čestica, zbog čega je ovaj problem prezahtjevan za rješavanje na osobnom računalu. Zato se za rješavanje zadatka koristilo superračunalo Bura te će rad na superračunalu biti detaljnije objašnjen u ovom poglavlju. Kako simuliramo kretanje čestica, tj. vremensku promjenu njihovog položaja, potrebno je koristiti tranzijentni rješavač koji je specijaliziran za simuliranje kretanja čestica, te je iz tog razloga odabran „icoUncoupledKinematicParcelFoam“ rješavač.

8.1 Superračunalo Bura

Bura je hrvatsko superračunalo koje se nalazi na Sveučilištu u Rijeci. Temelji se na hibridnoj računalnoj arhitekturi koja se sastoji od višeračunalnih, heterogenih i višeprosorskih sustava. Sastoji se od tri dijela: „Cluster“, GPGPU i SMP. „Cluster“ je višeračunalni sustav koji se sastoji od grozda računala, kojeg čine 288 računalnih čvorova s dva procesora Xeon E5 po čvoru. Svaki čvor ima 64 GB memorije i 320 GB diskovnog prostora te je ukupno dostupno 6912 procesorskih jezgri, 24 po čvoru. GPGPU dio se sastoji od 4 heterogena čvora uz dva procesora Xeon E5 i dva grafička procesora opće namjene NVIDIA Tesla K40. SMP je višeprosorski sustav s velikom količinom dijeljene memorije. Sastoji se od 16 procesora Xeon E7 s 256 fizičkih jezgri, 6 TB memorije i 245 TB lokalnog prostora za pohranu (dva čvora na raspolaganju). Operacijski sustav koji pogoni superračunalo Bura je „Red Hat Enterprise Linux 7“ [34].



Slika 8.1 Superračunalo Bura [35]

Superračunalo Bura nema grafičko sučelje, već ga se koristi isključivo preko „Linux“ naredbenog prozora. Na superračunalo je instaliran SLURM („Simple Linux Utility for Resource Management“) upravitelj, pomoću kojega definirani zadatak šaljemo na superračunalo i definiramo različite postavke, poput broja procesa na koji će se zadatak podijeliti ili broja čvorova na kojem će se zadatak obavljati.

8.2 Priprema simulacije strujanja čestica mikroplastike

Simuliranje gibanja čestica mikroplastike u OpenFOAM-u vršimo pomoću tranzijentnog rješavača „icoUncoupledKinematicParcelFoam“, koji rješava pasivni transport oblaka čestica. Koordinate čestica i njihova svojstva su definirana unutar datoteka „kinematicCloudPositions“ i „kinematicCloudProperties“. Moguće je koristiti više datoteka za koordinate, čime unutar simulacije uvodimo više oblaka čestica s različitim svojstvima. Za potrebe validacije eksperimenta, provest će se više simulacija strujanja jedne sferne čestice mikroplastike, pri čemu će se u svakoj simulaciji mijenjati promjer čestice, te će se provesti jedna simulacija svih vrsta čestica zajedno. Na temelju dobivenih rezultata, izračunati će se koeficijent otpora, te će se izračunati koeficijent usporediti s eksperimentalnim rezultatima (5. poglavlje). Početne koordinate čestice mikroplastike se nalaze na točki T(0,3, 0,1545, 0,4). Bitna svojstva koja je potrebno definirati su prikazana na idućim slikama.

```
constantProperties
{
    rho0          1185;
    youngsModulus 3e9;
    poissonsRatio 0.35;
}
```

Slika 8.2 Svojstva čestice mikroplastike

Glavno svojstvo čestice mikroplastike koje je potrebno precizno definirati jest gustoća čestice, koju prema eksperimentalnim vrijednostima uzimamo kao 1185 kg/m^3 , dok Youngov modul i Poissonov koeficijent uzimamo kao 3 GPa i 0,35.

```

subModels
{
  particleForces
  {
    sphereDrag;
    gravity;
    SaffmanMeiLiftForce
    {
    }
  }
}

injectionModels
{
  model1
  {
    type          manualInjection;
    massTotal     0;
    parcelBasisType fixed;
    nParticle     1;
    SOI           0;
    positionsFile "kinematicCloudPositions";
    U0            (0 0 0);
    sizeDistribution
    {
      type          fixedValue;
      fixedValueDistribution
      {
        value 0.0015;
      }
    }
  }
}

```

Slika 8.3 Postavke modela oblaka čestica

Na slici 8.3 je prikazan model oblaka čestica, gdje se mogu definirati parametri poput sila koja djeluje na čestice, broja čestica, početne brzine oblaka, te raspodjele veličine čestica. Kako se radi o strujanju samo jedne čestice, pod „nParticle“ upisujemo broj 1. S obzirom da se radi o sfernoj čestici, potrebno je odabrati odgovarajući model sile otpora, što činimo upisivanjem opcije „sphereDrag“ pod „particleForces“. Time zapravo biramo model koji glasi:

$$F_d = \frac{3}{4} \frac{\mu c_d \text{Re}_p}{\rho_p d_p^2} \quad (8.1)$$

$$c_d = \frac{24}{\text{Re}_p} \left(1 + \frac{1}{6} \text{Re}_p^{\frac{2}{3}} \right), \quad \text{Re}_p \leq 1000 \quad (8.2)$$

$$c_d = 0,424 \text{Re}_p, \quad \text{Re}_p > 1000 \quad (8.3)$$

Osim navedenog, unutar modela oblaka potrebno je definirati i silu gravitacije te lokaciju datoteke u kojoj se nalaze koordinate čestice. Na čestice u vodi osim sile otpora i gravitacije djeluje i sila uzgona, te OpenFOAM nudi izbor između Tomiyama i Saffman-Mei modela sile uzgona. Tomiyama model pretpostavlja da je čestica zapravo mjehur, te kao parametar zahtijeva površinsku napetost, zbog čega ovaj model nije primjenjiv. Zato je moguće izabrati Saffman-Mei model, koji je namijenjen za modeliranje sile uzgona sfernih čestica. Međutim, primjećeno

je da dodavanje ovog modela sile uzgona ne utječe na izračun koeficijenta otpora, jer brzina tonjenja čestica ostaje ista. Mogući razlog tomu je što Saffman-Mei model ovisi o smičnom naprezanju u fluidu, koje je zanemarivo s obzirom na to da se čestice nalaze na središnjoj osi domene, gdje je smično naprezanje jednako 0. Osim navedenog, činjenica da niti jedan primjer simuliranja kretanja čestica unutar OpenFOAM-a ne koristi modele za sile uzgona, već samo gravitaciju i silu otpora, također govori u prilog tome da korištenje ovih modela sile uzgona za potrebe simuliranja kretanja čestica mikroplastike nije potrebno.

Pretpostavka ovakvih tranzijentnih rješavača je da rješavaju transport (ili gibanje) oblaka s mnogo čestica, zbog čega je veličina čestica definirana kroz raspodjelu veličine i kroz maksimalan moguć promjer čestice. U slučaju promatranja jedne čestice kojoj želimo dodijeliti specifičan promjer, dovoljno je taj promjer definirati pod maksimalan moguć promjer, što je prikazano na slici 8.4. Zato što se radi samo o jednoj čestici, njoj se automatski dodjeljuje maksimalan moguć promjer, što će biti dokazano kasnije u poglavlju.

```
pairCollisionCoeffs
{
    // Maximum possible particle diameter expected at any time
    maxInteractionDistance 0.0015;
```

Slika 8.4 Definiranje maksimalnog mogućeg promjera čestice

Za simuliranje strujanja čestica potrebno je i nadopuniti datoteku „transportProperties“, gdje je potrebno dodati još i gustoću fluida, tj. vode u slobodnom toku (u prethodno obrađenim simulacijama strujanja vode u otvorenom kanalu je bilo dovoljno samo definirati kinematičku viskoznost vode).

```
transportModel Newtonian;

rhoInf          [1 -3 0 0 0 0] 999;

nu              [0 2 -1 0 0 0] 1e-06;
```

Slika 8.5 Nadopunjena datoteka "transportProperties"

Ono što je bitno napomenuti prije pokretanja simulacije jest koju verziju OpenFOAM-a koristiti. Verzije OpenFOAM-a skinute s stranice <https://openfoam.org> ne koriste Kartezijev koordinatni sustav (x,y,z), već prelaze na baricentrične koordinate radi bržeg rješavanja. No, Paraview nema podršku za takve koordinate, te se zbog toga čestice neće prikazivati. Verzije OpenFOAM-a skinute s stranice <https://www.openfoam.com> (poput OpenFOAMv2206 koji se

koristio) rješavaju taj problem tako da kreiraju dvije datoteke, jednu s Kartezijevim koordinatama za vizualizaciju, i drugu s baricentričnim koordinatama za računanje.

Prije pokretanja simulacije na superračunalo potrebno je pripremiti slučaj koji promatramo. Čestice se unose u već razvijeno turbulentno strujanje, pa za početni uvjet koristimo rezultate dobivene simulacijom turbulentnog strujanja (iz poglavlja 7), tako da kopiramo mapu s konvergiranim rezultatima u direktorij sa slučajem i preimenujemo ju u „0“. Na superračunalo simulaciju ćemo paralelizirati, što moramo učiniti kreiranjem datoteke „decomposeParDict“, prikazanoj na slici 8.6. Također je potrebno kreirati i SLURM skriptu pomoću koje šaljemo naredbe na superračunalo (slika 8.7).

```
numberOfSubdomains 4;  
  
method          scotch;
```

Slika 8.6 Postavke dekompozicije domene

Domena je podijeljena na 4 dijela, i metoda po kojoj se dekompozicija vrši se naziva „Scotch“ metoda. „Scotch“ metoda pokušava minimizirati broj granica između poddomena, čime smanjuje potrebnu komunikaciju između procesora zaduženih za pojedine poddomene, te time smanjuje vrijeme trajanja simulacije [36].

```
#!/bin/bash  
#SBATCH --job-name=mp_strujanje  
#SBATCH --ntasks=4  
#SBATCH --mem-per-cpu=2048MB  
#SBATCH -o output-%j.out  
#SBATCH --partition=computes_thin  
  
solver=icoUncoupledKinematicParcelFoam  
cores=$SLURM_NTASKS  
  
blockMesh  
decomposePar  
mpirun -np $cores $solver -parallel > log.txt 2>&1  
reconstructPar
```

Slika 8.7 SLURM skripta

Pod naredbama koje započinju s „#SBATCH“ su definirane stavke poput imena zadatka, podjele zadatka na više procesa, memorija po procesoru, itd. Unutar skripte je također potrebno navesti „bash“ naredbe vezane za OpenFOAM, poput „blockMesh“. Naredba „decomposePar“ dijeli domenu na poddomene, dok ju naredba „reconstructPar“ rekonstruira nakon obavljene

simulacije, kako bi mogli prikazati rezultate. S obzirom da rješavač pokrećemo naredbom „mpirun“, moramo prije učitati odgovarajući MPI modul. To činimo naredbom „module load mpi/openmpi-x86/64“. OpenFOAMv2206 također učitavamo na isti način („module load OpenFOAM/v2206“). Zadatak šaljem superračunalu na obavljanje naredbom „sbatch ime_skripte.sh“. Pokraj naredbe „mpirun“ definiramo podjelu domene, rješavač koji koristimo i tekstualnu datoteku u kojoj će se zapisivati podaci o rješavanju.

8.3 Validacija numeričke simulacije

Ključan aspekt provođenja numeričkih simulacija jest uspoređivanje izračunatih rezultata s eksperimentalnim rezultatima. Postavljanjem istih uvjeta kao u eksperimentu te dobivanjem istih ili približnih rezultata potvrđujemo točnost simulacije. Tada opravdavamo njeno korištenje pri izmijenjenim uvjetima (npr. pri većoj brzini, različitim promjerima i oblicima čestice). Valjanost simulacije gibanja sfernih čestica mikroplastike u vodi će se temeljiti na izračunu koeficijenata otpora prema vrijednostima dobivenim iz numeričkih simulacija, koji će se uspoređivati sa eksperimentalnim koeficijentima prikazanim u 5. poglavlju.

Radi sigurnosti da će čestice u potpunosti potonuti, vrijeme trajanja simulacije se prvotno odabralo prema dužini domene i početnoj brzini strujanja:

$$t = \frac{s}{v} = \frac{12.5}{0.1438} = 86.9 \text{ s}, \quad (8.4)$$

pa je stoga izabrano vrijeme simulacije od 90 sekundi. Kasnije se ispostavilo da čestice uglavnom potonu unutar prvih 10 sekundi, te se nakon toga gibaju po dnu domene u smjeru x osi bez daljnjih promjena, tako da je za potrebe prikazivanja potonuća čestica, a i izračuna koeficijenata otpora dovoljno simulirati prvih 10 sekundi.

```

Time = 0.005

Evolving kinematicCloud

Solving3-D cloud kinematicCloud

Cloud: kinematicCloud injector: modell1
  Added 1 new parcels

  4864 move-collide subCycles
Cloud: kinematicCloud
  Current number of parcels      = 1
  Current mass in system        = 2.09407e-06
  Linear momentum               = (1.03945e-07 1.96506e-15 -2.61433e-08)
  |Linear momentum|            = 1.07182e-07
  Linear kinetic energy         = 2.743e-09
  Average particle per parcel   = 1
  Injector modell1:
    - parcels added             = 1
    - mass introduced           = 2.09407e-06
  Parcel fate: system (number, mass)
    - escape                   = 0, 0
  Rotational kinetic energy     = 0

ExecutionTime = 2.5 s  ClockTime = 2 s

```

Slika 8.8 Ciklus „icoUncoupledKinematicParcelFoam“ rješavača

Na slici je prikazan jedan ciklus u kojem se rješava kinematički oblak čestica. Iz njega je moguće vidjeti da se u sustav unosi jedna čestica mase $2,094 * 10^{-6}$ kg. Promjer sferne čestice čije gibanje rješavamo je jednak 1,5 mm. Moguće je izračunati volumen te čestice:

$$V = \frac{4}{3}r^3\pi = \frac{4}{3} * \left(\frac{1.5 * 10^{-3}}{2}\right)^3 \pi = 1.767 * 10^{-9} \text{ m}^3. \quad (8.5)$$

S obzirom da nam je poznata gustoća čestice mikroplastike moguće je dobiti masu čestice:

$$m = \rho_{MP} * V = 1185 * 1.767 * 10^{-9} = 2,094 * 10^{-6} \text{ kg}. \quad (8.6)$$

Vidljivo je da se izračunata masa podudara s masom unesenom u sustav, što znači da se radi o sfernoj čestici promjera 1,5 mm. Ovaj kratki proračun može poslužiti kako bismo se uvjerali da smo dobro postavili veličinu čestice, jer je način definiranja čestica apstraktnije naravi, a

Paraview čestice prikazuje kao reprezentativne točke, zbog čega se ne vizualiziraju razlike u promjerima.



Slika 8.9 Početna pozicija čestice

Čestica veoma brzo dostiže svoju maksimalnu brzinu te unutar par sekundi potone na dno. Očekivano, veće čestice zbog veće mase brže potonu na dno, te time imaju veću brzinu pada, što će se pokazati kasnije u proračunu. Zbog hidrodinamičnosti sfernih čestica, moguće je očekivati relativno niske koeficijente otpora.



Slika 8.10 Pozicija čestice nakon potonuća



Slika 8.11 Pozicije čestica u 3. sekundi simulacije

Slika 8.11 potvrđuje prethodne navode o brzini tonjenja čestica. Čestice su obojane s obzirom na njihov promjer, te se vidi da najmanja čestica ima najmanju vertikalnu brzinu i najduže vrijeme padanja, zbog čega se nalazi na najvišoj poziciji naspram ostalih čestica. Zbog sporog padanja, na najmanju česticu duže utječe strujanje vode, te ona prelazi najveći put u smjeru x osi, što je vidljivo na slici 8.12. Moguće je stoga zaključiti da su za vodeni okoliš opasnije čestice manjeg promjera, jer one duže ostaju u toku vode, čime se lakše šire kroz okoliš. Čestice

mikroplastike većeg promjera jako brzo tonu na dno, što otežava njihovo daljnje kretanje, ali bi u prirodnim uvjetima taloženjem zagađivale dno vodenih površina.



Slika 8.12 Pozicije čestica na dnu domene

Koeficijent otpora računamo prema izrazu iz 5. poglavlja (5.1). Kako se zbog malih brzina taloženja može zanemariti sekundarni protok, čestica zadržava konstantnu orijentaciju duž putanje, pa je tako dovoljno odrediti samo početnu orijentaciju čestice za izračun projicirane površine. Temeljem navedenog, karakteristična površina sferne čestice iznosi:

$$A = \frac{d^2}{4} * \pi = \frac{(1,5 * 10^{-3})^2}{4} * \pi = 1,767 * 10^{-6} \text{ m}^2. \quad (8.7)$$

Za izračun vertikalne brzine pada čestice potrebno je odrediti vertikalne pozicije na početku i na kraju mjerenja. U 5. poglavlju je navedeno da su, radi smanjenja raznih utjecaja, odabrane pozicije od 0,3 i 0,1 m. Vertikalnu brzinu pada čestice je moguće izračunati tako da prvo pronađemo u kojim vremenskim trenucima se približno ostvaruju ove pozicije. Trenutci u kojima se ostvaruju približne pozicije su:

$$t_{start} = 1,8 \text{ s} \quad (8.8)$$

$$t_{stop} = 5,5 \text{ s}, \quad (8.9)$$

dok same pozicije iznose:

$$z_{start} = 0,303 \text{ m} \quad (8.10)$$

$$z_{stop} = 0,1 \text{ m} \quad (8.11)$$

Vertikalna brzina pada čestice iznosi:

$$v_z = \frac{z_{start} - z_{stop}}{t_{stop} - t_{start}} = \frac{0,303 - 0,1}{5,5 - 1,8} = 0,0547 \text{ m/s} \quad (8.12)$$

Sada možemo dobiti koeficijent otpora:

$$c_d = 2g \frac{(\rho_{MP} - \rho)V}{\rho A v_z^2} = 2 * 9,81 * \frac{(1185 - 999) * 1,767 * 10^{-9}}{999 * 1,767 * 10^{-6} * 0,0547^2} = 1,22 \quad (8.13)$$

Dok je Reynoldsov broj jednak:

$$Re_p = \frac{v_z d}{\nu} = \frac{0,0547 * 1,5 * 10^{-3}}{1 * 10^{-6}} = 82,05 \quad (8.14)$$

Proračuni koeficijenta otpora i Reynoldsovih brojeva za čestice većih dimenzija su dani u nastavku:

a) $d = 2 \text{ mm}$

$$V = \frac{4}{3} r^3 \pi = \frac{4}{3} * \left(\frac{2 * 10^{-3}}{2} \right)^3 \pi = 4,189 * 10^{-9} \text{ m}^3 \quad (8.15)$$

$$A = \frac{d^2}{4} * \pi = \frac{(2 * 10^{-3})^2}{4} * \pi = 3,141 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.16)$$

$$z_{start} = 0,301 \text{ m} \quad (8.17)$$

$$z_{stop} = 0,099 \text{ m} \quad (8.18)$$

$$t_{start} = 1,4 \text{ s} \quad (8.19)$$

$$t_{stop} = 4,2 \text{ s}, \quad (8.20)$$

$$v_z = \frac{z_{start} - z_{stop}}{t_{stop} - t_{start}} = \frac{0,301 - 0,099}{4,2 - 1,4} = 0,072 \text{ m/s} \quad (8.21)$$

$$c_d = 2g \frac{(\rho_{MP} - \rho)V}{\rho A v_z^2} = 2 * 9,81 * \frac{(1185 - 999) * 4,189 * 10^{-9}}{999 * 3,141 * 10^{-6} * 0,072^2} = 0,94 \quad (8.22)$$

$$Re_p = \frac{v_z d}{\nu} = \frac{0,072 * 2 * 10^{-3}}{1 * 10^{-6}} = 144 \quad (8.23)$$

b) $d = 2,5 \text{ mm}$

$$V = \frac{4}{3}r^3\pi = \frac{4}{3} * \left(\frac{2,5 * 10^{-3}}{2}\right)^3 \pi = 8,18 * 10^{-9} \text{ m}^3 \quad (8.24)$$

$$A = \frac{d^2}{4} * \pi = \frac{(2,5 * 10^{-3})^2}{4} * \pi = 4,908 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.25)$$

$$z_{start} = 0,297 \text{ m} \quad (8.26)$$

$$z_{stop} = 0,102 \text{ m} \quad (8.27)$$

$$t_{start} = 1,2 \text{ s} \quad (8.28)$$

$$t_{stop} = 3,4 \text{ s}, \quad (8.29)$$

$$v_z = \frac{z_{start} - z_{stop}}{t_{stop} - t_{start}} = \frac{0,297 - 0,102}{3,4 - 1,2} = 0,0886 \text{ m/s} \quad (8.30)$$

$$c_d = 2g \frac{(\rho_{MP} - \rho)V}{\rho A v_z^2} = 2 * 9,81 * \frac{(1185 - 999) * 8,18 * 10^{-9}}{999 * 4,908 * 10^{-6} * 0,0886^2} = 0,775 \quad (8.31)$$

$$Re_p = \frac{v_z d}{\nu} = \frac{0,0886 * 2,5 * 10^{-3}}{1 * 10^{-6}} = 221,5 \quad (8.32)$$

c) $d = 3 \text{ mm}$

$$V = \frac{4}{3}r^3\pi = \frac{4}{3} * \left(\frac{3 * 10^{-3}}{2}\right)^3 \pi = 1,41 * 10^{-8} \text{ m}^3 \quad (8.33)$$

$$A = \frac{d^2}{4} * \pi = \frac{(3 * 10^{-3})^2}{4} * \pi = 7,07 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.34)$$

$$z_{start} = 0,301 \text{ m} \quad (8.33)$$

$$z_{stop} = 0,102 \text{ m} \quad (8.34)$$

$$t_{start} = 2,9 \text{ s} \quad (8.35)$$

$$t_{stop} = 1 \text{ s}, \quad (8.36)$$

$$v_z = \frac{z_{start} - z_{stop}}{t_{stop} - t_{start}} = \frac{0,301 - 0,102}{2,9 - 1} = 0,105 \text{ m/s} \quad (8.37)$$

$$c_d = 2g \frac{(\rho_{MP} - \rho)V}{\rho A v_z^2} = 2 * 9,81 * \frac{(1185 - 999) * 1,41 * 10^{-8}}{999 * 7,07 * 10^{-6} * 0,105^2} = 0,66 \quad (8.38)$$

$$Re_p = \frac{v_z d}{\nu} = \frac{0,105 * 3 * 10^{-3}}{1 * 10^{-6}} = 315 \quad (8.39)$$

Proračun je moguće dodatno skratiti, jer unutar mapa s vremenskim koracima se, osim koordinata čestice, sadrže i podaci o brzini i volumenu čestice, pa je moguće direktno izvući te vrijednosti, bez potrebe za njihovim proračunavanjem, kao što je prikazano na slijedećim slikama.

```
4((0.147159 -9.7144e-09 -0.0547331)
(0.147234 2.93316e-05 -0.0722375)
(0.147339 5.9046e-05 -0.0887548)
(0.147464 -2.9729e-05 -0.104527))
```

Slika 8.13 Brzine čestica različitih promjera

Brzine se redom odnose na čestice promjera 1,5 mm, 2 mm, 2,5 mm i 3 mm. Vidljivo je da se brzine u smjeru osi z podudaraju s prethodno izračunatim brzinama. Naravno, potrebno je izabrati mapu vremenskog koraka u kojem čestice tonu, kako bi dobili vertikalnu brzinu potrebnu za izračun koeficijenta otpora (npr. nema smisla birati vremenski korak nakon što čestica potone na dno, jer je tada vertikalna brzina jednaka nuli).

```
injectionModel
{
  model1
  {
    volumeTotal      1.76715e-09;
    massInjected     2.09407e-06;
    nInjections      600;
    parcelsAddedTotal 1;
    timeStep0        3;
  }
  model2
  {
    volumeTotal      4.18879e-09;
    massInjected     4.96372e-06;
    nInjections      600;
    parcelsAddedTotal 1;
    timeStep0        3;
  }
  model3
  {
    volumeTotal      8.18123e-09;
    massInjected     9.69476e-06;
    nInjections      600;
    parcelsAddedTotal 1;
    timeStep0        3;
  }
  model4
  {
    volumeTotal      1.41372e-08;
    massInjected     1.67525e-05;
    nInjections      600;
    parcelsAddedTotal 1;
    timeStep0        3;
  }
}
```

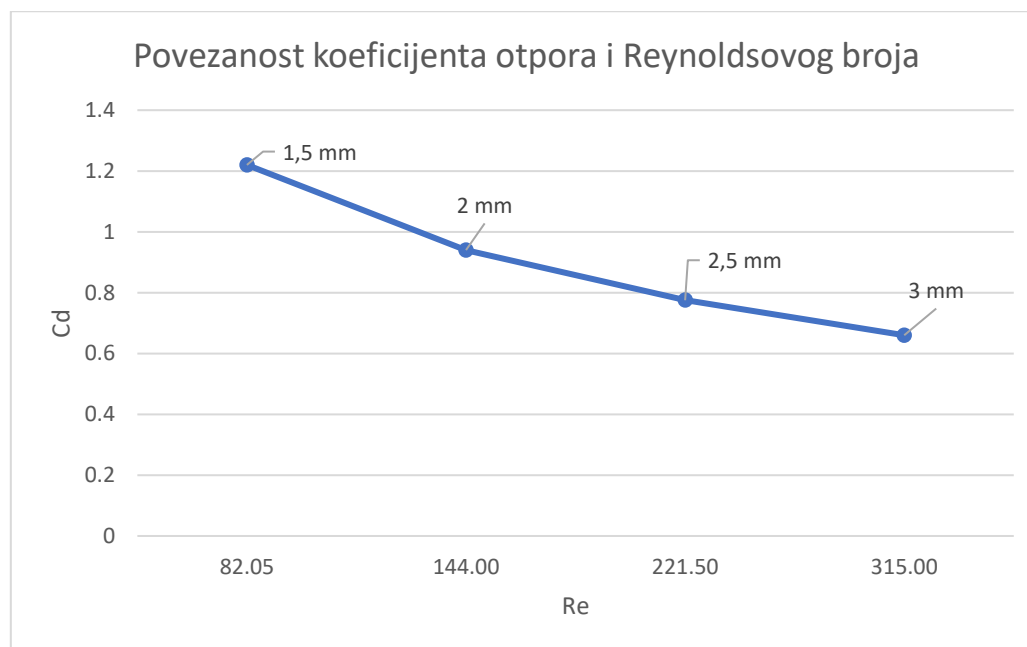
Slika 8.14 Podaci o česticama različitih promjera

Iz slike 8.14 je moguće vidjeti da su i volumeni točno izračunati.

Tablica 8.1 Usporedba koeficijenata otpora za sferične čestice

Promjer [mm]	c_d	Clift-Gauvin c_d	Srednja vrijednost $c_d \pm \sigma$ [27]
1,5	1,22	1,2	$1,32 \pm 0,24$
2	0,94	0,93	$1,05 \pm 0,10$
2,5	0,775	0,777	$0,80 \pm 0,07$
3	0,66	0,68	$0,75 \pm 0,08$

U tablici 8.1 je prikazana usporedba dobivenih koeficijenata otpora sa eksperimentalnim vrijednostima. Osim prethodno prikazanog pristupa, koeficijenti su izračunati i prema Clift-Gauvinovom modelu otpora za sferična tijela (3.10). Simulirani koeficijenti otpora se nalaze na nižoj strani standardne devijacije, te se čestice promjera 1,5 i 2,5 mm nalaze unutar standardne devijacije, dok za čestice promjera 2 i 3 mm postoji minimalno, praktički zanemarivo odstupanje od niže granice standardne devijacije (za oba primjera odstupanje je jednako 0,01). Koeficijenti otpora su praktički jednakih iznosa, neovisno o modelu prema kojem ih računamo. Simulirani koeficijenti otpora se također smanjuju s povećanjem veličine čestice, što je ponašanje koje je primijećeno u eksperimentu. Također se primjećuje i obrnuto proporcionalna veza između Reynoldsovog broja i koeficijenta otpora, što je prikazano na slici 8.16. Može se zaključiti da simulacija jako dobro potvrđuje eksperimentalne rezultate.



Slika 8.15 Graf povezanosti koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja

Krivulja grafa prati ponašanje eksperimentalnih rezultata, tj. veći c_d i manji Re za manje promjere, te obrnuto za veće promjere.

8.4 Simulacija hidrodinamike nesferičnih čestica

Simulaciju kretanja nesferičnih čestica moguće je izvršiti postavljanjem nesferičnog modela sile otpora (slika 8.17).

```
subModels
{
    particleForces
    {
        nonSphereDrag
        {
            phi 0.806;
        }
    }
}
```

Slika 8.16 Postavke nesferičnog modela otpora

Time zapravo odabiremo Clift-Gauvinov model otpora, koji je opisan u 3. poglavlju, te je za uspješno pokretanje simulacije s ovim modelom otpora potrebno definirati indeks sferičnosti. Čestice koje promatramo su kockastog oblika, pa tako njihov indeks sferičnosti iznosi:

$$\psi = \frac{\pi^{\frac{1}{3}}(6V_p)^{\frac{2}{3}}}{A_p} = \frac{\pi^{\frac{1}{3}}(6d^3)^{\frac{2}{3}}}{6d^2} = 0,806 \quad (8.40)$$

Karakteristične veličine (u slučaju sferičnih čestica su to bili promjeri, a u slučaju kockastih čestica to je dužina jedne stranice) ostaju iste. Do poteškoća se nailazi pri određivanju karakteristične površine za nesferične čestice, tj. projekcije površine okomite na strujanje fluida, koju je teško odrediti za nepravilne predmete. OpenFOAM ne nudi mogućnost defniranja početne orijentacije čestice, te iako računa vrijednosti poput volumena, zapravo ih ne tretira kao trodimenzionalne predmete, već kao jednodimenzionalne točke, pa ne možemo ni vizualno odrediti početnu orijentaciju čestice kako bi izračunali projekciju površine, što ograničava izbor na jednostavnije oblike. Zato je i izabran oblik kocke (izabran je i radi usporedbe s eksperimentalnim rezultatima), čija se projicirana površina zbog male brzine tonjenja može svesti na:

$$A = d^2 \quad (8.41)$$

Projicirane površine za čestice iznose:

$$A_1 = d_1^2 = (1,5 * 10^{-3})^2 = 2,25 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.42)$$

$$A_2 = d_2^2 = (2 * 10^{-3})^2 = 4 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.43)$$

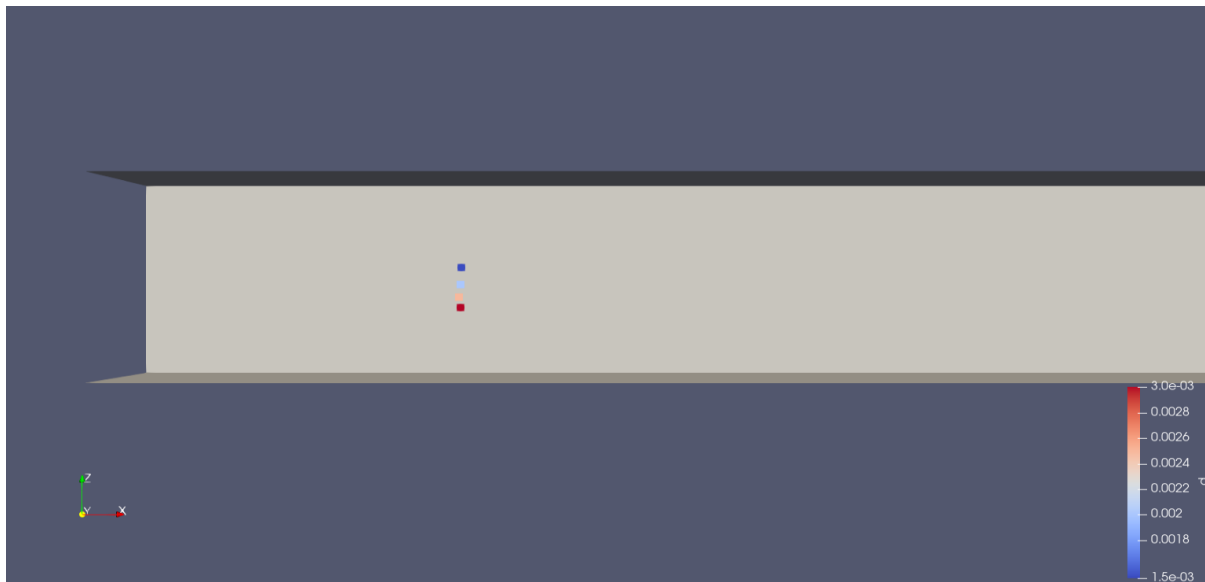
$$A_3 = d_3^2 = (2,5 * 10^{-3})^2 = 6,25 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.44)$$

$$A_3 = d_3^2 = (3 * 10^{-3})^2 = 9 * 10^{-6} \text{ m}^2 \quad (8.45)$$

Zbog nesferičnosti čestica očekuju se veći koeficijente otpora, jer kockasti oblik nije hidrodinamičan koliko i sferni, te manje brzine pada. Na slici 8.17 su prikazane dobivene brzine pada.

```
4((0.147147 -9.42048e-09 -0.0505123) (0.147197 2.92919e-05 -0.0635596)
(0.14725 5.88089e-05 -0.0735917) (0.147288 -2.9374e-05 -0.0815828))
```

Slika 8.17 Brzine kockastih čestica



Slika 8.18 Pozicije kockastih čestice na 3. sekundi simulacije

```

model1
{
  volumeTotal      1.76715e-09;
  massInjected     2.09407e-06;
  nInjections      600;
  parcelsAddedTotal 1;
  timeStep0        3;
}
model2
{
  volumeTotal      4.18879e-09;
  massInjected     4.96372e-06;
  nInjections      600;
  parcelsAddedTotal 1;
  timeStep0        3;
}
model3
{
  volumeTotal      8.18123e-09;
  massInjected     9.69476e-06;
  nInjections      600;
  parcelsAddedTotal 1;
  timeStep0        3;
}
model4
{
  volumeTotal      1.41372e-08;
  massInjected     1.67525e-05;
  nInjections      600;
  parcelsAddedTotal 1;
  timeStep0        3;
}

```

Slika 8.19 Podaci o kockastim česticama

Na slici 8.19 su prikazana dobivena fizikalna svojstva čestica, te je moguće uočiti zanimljivost koju OpenFOAM čini. Volumeni čestica su jednaki kao i u prethodnom slučaju sa sfernim česticama, što implicira da rješavač prvo modelira čestice kao sferne, te na takve čestice primjenjuje nesferični model otpora i vrši simulaciju. Prema formuli za volumen kocke pravi volumeni bi trebali iznositi

$$V = d^3 \quad (8.46)$$

$$V_1 = d_1^3 = (1,5 * 10^{-3})^3 = 3,375 * 10^{-9} \text{ m}^3 \quad (8.47)$$

$$V_2 = d_2^3 = (2 * 10^{-3})^3 = 8 * 10^{-9} \text{ m}^3 \quad (8.48)$$

$$V_3 = d_3^3 = (2,5 * 10^{-3})^3 = 1,5625 * 10^{-8} \text{ m}^3 \quad (8.49)$$

$$V_4 = d_4^3 = (3 * 10^{-3})^3 = 2,7 * 10^{-8} \text{ m}^3 \quad (8.50)$$

Tablica 8.2 Usporedba koeficijenata otpora za kockaste čestice

d [mm]	c_d (OpenFOAM volumen)	Srednja vrijednost $c_d \pm \sigma$ [27]
1,5	1,15	$1,56 \pm 0,35$
2	0,95	$1,25 \pm 0,17$
2,5	0,88	$0,97 \pm 0,10$
3	0,87	$0,95 \pm 0,17$

U tablici 8.2 su izračunati koeficijenti otpora uspoređeni s eksperimentalnim rezultatima. Primjetljivo je da koeficijenti za prva dva promjera jako odstupaju od srednje vrijednosti eksperimentalnog koeficijenta, tj. nisu obuhvaćeni ni približno standardnom devijacijom, dok su koeficijenti za zadnja dva promjera relativno blizu aritmetičkoj sredini te su unutar standardne devijacije. Međutim ako usporedimo rezultate za kockastu i sfernu česticu karakterističnih dužina od 1,5 mm, vidimo da kockasta čestica ima manji koeficijent od sferne, što se svakako ne bi trebalo dogoditi. Također, čestice karakteristične dužine 2 mm imaju gotovo iste koeficijente, što nije realno. Zbog krivo izračunatog volumena ne dobivaju se adekvatni rezultati.

Tablica 8.3 Usporedba Reynoldsovih brojeva za kockaste čestice

Re	Medijan Re [27]
75	78
127	133
184	211
243	282

Uspoređivajući Reynoldsove brojeve, možemo zaključiti da se oni nalaze relativno blizu medijanu, te ako samo to uzimamo kao kriterij, njih se naizgled može prihvatiti kao točne, ali kako je stvaran volumen drugačiji, a time i masa čestice, sigurno postoji odstupanje od stvarne brzine pada, a time i od Reynoldsovog broja.

Ako izračunamo koeficijente otpora prema Clift-Gauvinovom modelu za nesferične čestice (3.13), dobivamo rezultate koji su točniji i time puno prihvatljiviji, ali s obzirom na krivo računanje volumena, validnost ove simulacije ostaje upitna.

Tablica 8.4 Usporedba koeficijenata otpora za kockaste čestice (Clift-Gauvin model)

Clift-Gauvin c_d	Srednja vrijednost $c_d \pm \sigma$ [27]
1,43	$1,56 \pm 0,35$
1,2	$1,25 \pm 0,17$
1,12	$0,97 \pm 0,10$
1,09	$0,95 \pm 0,17$

Konačno, ne smije se zanemariti ni činjenica da „icoUncoupledKinematicParcelFoam“ rješavač zanemaruje interakcije između fluida i čestica, što vrlo vjerojatno uzrokuje niže vrijednosti koeficijenta otpora kod sfernih i nerealne vrijednosti kod kockastih čestica. Također je zanemarena rotacija čestica, što u slučaju kockastih čestica zbog oblika ima značajan utjecaj na rezultate.

9. ZAKLJUČAK

U ovom radu je prikazano numeričko simuliranje strujanja čestica mikroplastike u otvorenom kanalu. Cilj rada je bio ustvrditi da li su programi za numeričko simuliranje, točnije OpenFOAM, adekvatni za provođenje ovakvih vrsta simulacije. Uobičajena praksa pri validaciji simulacije je modeliranje uvjeta simulacije i geometrije domene prema eksperimentu, a nakon izvršavanja simulacije uspoređivanje rezultata simulacije sa eksperimentalnim rezultatima, što se u ovom radu i učinilo.

Prije pokretanja simulacije gibanja čestice, potrebno je dobiti razvijeno polje brzine u domeni, koju tranzijentni rješavač koristi kao početni uvjet. Strujanje u kanalu je turbulentno, pa je bilo potrebno odabrati odgovarajući turbulentan model. Odabran je $k - \omega$ SST model, jer najbrže konvergira, i jer se radi o modelu koji kombinira standardne $k - \omega$ i $k - \varepsilon$ modele, što ga čini jako pouzdanim.

Mikroplastika u stvarnosti dolazi u različitim oblicima, pa su iz tog razloga provedene dvije vrste simulacije, sa sferičnim i nesferičnim, tj. kockastim česticama. Kockasti oblik je odabran kako bi se što jednostavnije mogle izračunati potrebne veličine, poput indeksa sferičnosti i projicirane površine. Osim sferičnosti čestica, bitan parametar koji utječe na hidrodinamičnost čestica je njihova veličina, pa su se tako za obje vrste promatrala čestice s 4 različite karakteristične veličine (promjer za sferne, i dužina stranice za kockaste čestice). Parametar koji je bio ključan za uspoređivanje rezultata jest koeficijent otpora, koji se morao izračunati ručno iz podataka koji su dobiveni simulacijama, poput brzine pada i volumena čestice, jer OpenFOAM ne daje direktno koeficijent otpora kao rezultat. Pokazalo se da se koeficijenti otpora dobiveni simuliranjem strujanja sfernih čestica jako dobro slažu s eksperimentalnim koeficijentima otpora, neovisno o modelu prema kojem računamo koeficijent. Međutim, volumen čestice se u OpenFOAM-u uvijek računa kao da je čestica sferna, te zbog toga simuliranje strujanja kockastih čestica ne daje rezultate koji odgovaraju eksperimentalnima.

Zaključak je da s obzirom na dobro poklapanje s eksperimentalnim rezultatima, izabrani tranzijentni rješavač dobro simulira strujanje sfernih čestica te se u te svrhe može koristiti za provođenje daljnjih simulacija. Međutim, ne daje adekvatne rezultate prilikom simuliranja strujanja nesferičnih čestica jer zakazuje zbog određenih nedostataka i pojednostavljenja u kodu, poput neispravnog izračuna volumena i zanemarivanja rotacije i interakcije čestica s fluidom, zbog čega je za kompleksnije oblike čestica potrebna ili izmjena koda ili alternativno softversko rješenje.

10. LITERATURA

- [1] Alvir, M.: „Mikroplastika u moru“, seminarski rad, Rijeka, Sveučilište u Rijeci, Tehnički Fakultet, 2021.
- [2] Allen, L.: „This Is Why Microplastics Are So Hard To Detect In The Ocean“, s interneta, <https://www.forbes.com/sites/allenelizabeth/2020/02/26/this-is-why-microplastics-are-so-hard-to-detect-in-the-ocean/?sh=6a2a3d903dff>, 10.rujna.2023.
- [3] Parker, L.: „Microplastics have moved into virtually every crevice on Earth“, s interneta, <https://www.nationalgeographic.com/science/article/microplastics-in-virtually-every-crevice-on-earth>, 10.rujna.2023.
- [4] Oregon State University: „Microplastics on the Beach“, s interneta, <https://seagrant.oregonstate.edu/visitor-center/found-beach/plastic-discs>, 11.rujna.2023.
- [5] Technology Networks: „Highest Ever Density of Microplastics Discovered on Seabed“ s interneta, <https://www.technologynetworks.com/applied-sciences/news/highest-ever-density-of-microplastics-discovered-on-seabed-334203>, 11.rujna.2023.
- [6] First Sentier MUFG: "What is micropollution and why is it a concern for the environment and human health?", s interneta, <https://www.firstsentier-mufg-sustainability.com/insight/sources-of-microplastics-and-their-distribution-in-the-environment.html>, 12.rujna.2023.
- [7] Encounter Edu: „Where do microplastics come from?“, s interneta, <https://encounteredu.com/multimedia/images/sources-of-microplastics>, 12.rujna.2023.
- [8] ScienceDaily: „Pe, PP and PS: The most abundant type of microplastics in Mediterranean coastal waters“, s interneta, <https://www.sciencedaily.com/releases/2019/02/190228134238.htm>, 12.rujna.2023.
- [9]: Aves R. A., Revell E. L., Gaw S., Ruffel H, Schuddeboom A., Wotherspoon E. N., LaRue M., McDonald J. A.: „First evidence of microplastics in Antarctic Snow“, s interneta, <https://tc.copernicus.org/articles/16/2127/2022/>, 12.rujna.2023.
- [10] Johnson-Arbor K.: „Are Microplastics Harmful?“, s interneta, <https://www.poison.org/articles/are-microplastics-harmful>, 12.rujna.2023.

- [11] Parker, L.: „Microplastics are in our bodies. How much do they harm us?“, s interneta, <https://www.nationalgeographic.com/environment/article/microplastics-are-in-our-bodies-how-much-do-they-harm-us>, 14.rujna.2023.
- [12] Agbekpohnu P., Kevudo I.: „The Risks of Microplastic Pollution in the Aquatic Ecosystem“, s interneta, https://www.researchgate.net/figure/The-effect-of-microplastic-pollution-on-marine-ecosystem-58_fig2_366897794, 14.rujna.2023.
- [13] Oxfordshire County Council: „Types of plastic and how to recycle them“, s interneta, <https://www.oxfordshire.gov.uk/residents/environment-and-planning/waste-and-recycling/oxfordshire-recycles/types-plastic>, 15.rujna.2023.
- [14] Hughes M.: „How long does it take for everyday items to decompose“, s interneta, <https://www.forgerecycling.co.uk/blog/how-long-it-takes-everyday-items-to-decompose/>, 15.rujna.2023.
- [15] Edmond, C.: „We know plastic pollution is bad – but how exactly is it linked to climate change?“, s interneta, <https://www.weforum.org/agenda/2022/01/plastic-pollution-climate-change-solution/>, 15.rujna.2023.
- [16] Travaš, V., et al. (2021). 'Model gibanja čestica mikroplastike u nehomogenom i laminarnom polju brzine', *Hrvatske vode*, 29(117), str. 201-213.
- [17] Kranjčević I.: „Mehanika fluida“, skripta, Tehnički fakultet Rijeka, 2020.
- [18] CFD online: „Direct numerical simulation (DNS)“, s interneta, [https://www.cfd-online.com/Wiki/Direct_numerical_simulation_\(DNS\)](https://www.cfd-online.com/Wiki/Direct_numerical_simulation_(DNS)), 4.listopada.2023.
- [19] CFD online: „Standard k-epsilon model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/Standard_k-epsilon_model, 5.listopada.2023.
- [20] CFD online: „Realisable k-epsilon model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/Realisable_k-epsilon_model, 5.listopada.2023.
- [21] CFD online: „RNG k-epsilon model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/RNG_k-epsilon_model, 5.listopada.2023.
- [22] CFD online: „Wilcox's k-omega model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/Wilcox%27s_k-omega_model, 8.listopada.2023.

- [23] CFD online: „Wilcox's modified k-omega model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/Wilcox%27s_modified_k-omega_model, 8.listopada.2023.
- [24] CFD online: „SST k-omega model“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/SST_k-omega_model, 8.listopada.2023.
- [25] Rak, A.: „Modeliranje strujanja zraka oko urbanih struktura“, diplomski rad, Rijeka, Sveučilište u Rijeci, Tehnički Fakultet, 2021.
- [26] CFD online: „V2-f models“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/V2-f_models, 9.listopada.2023.
- [27] Holjević, T., et al. (2023). 'Experimental Assessment of Drag Coefficient for Quasi-Radially-Symmetric Microplastic Particles Sinking in Water Stream', *Journal of Marine Science and Engineering*,
- [28] OpenFOAM: „2.1 File Structure of OpenFOAM cases“, s interneta, <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/2-openfoam-cases/2.1-file-structure-of-openfoam-cases>, 25.listopada.2023.
- [29] OpenFOAM: „4.3 Mesh generation with the blockMesh utility“, s interneta, <https://www.openfoam.com/documentation/user-guide/4-mesh-generation-and-conversion/4.3-mesh-generation-with-the-blockmesh-utility>, 25.listopada.2023.
- [30] OpenFOAM: „Pressure-velocity algorithms“, s interneta, <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-applications-solvers-pressure-velocity-intro.html#eqn-solver-momentum>, 27.listopada.2023.
- [31] OpenFOAM: „SIMPLE algorithm“, s interneta, <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-applications-solvers-simple.html>, 27.listopada.2023.
- [32] CFD online: „Turbulence Properties, Conversions & Boundary Estimations“, s interneta, <https://www.cfd-online.com/Tools/turbulence.php>, 5.studenog.2023.
- [33] CFD online: „Specific turbulence dissipation rate“, s interneta, https://www.cfd-online.com/Wiki/V2-f_models, 8.studenog.2023.
- [34] Centar za napredno računanje i modeliranje: „Računalni resursi“, s interneta, <https://cnrm.uniri.hr/hr/bura/>, 12.studenog.2023.

[35] UNIRI: „Superračunalo Bura i način uporabe“, s interneta, <https://uniri.hr/vijesti/superracunalo-bura-i-nacin-uporabe/>, 12.studenog.2023.

[36] SIMSCALE: „Simulation Control for Fluid Analysis“, s interneta, <https://www.simscale.com/docs/simulation-setup/simulation-control-fluid/>, 13.studenog.2023.

11. SAŽETAK

U ovom diplomskom radu je obrađena tema simuliranja hidrodinamike čestica mikroplastike. U uvodnom dijelu su opisana opća svojstva mikroplastike, te je prikazano matematičko modeliranje čestica. Također je ukratko razmatrana teorija turbulentnog strujanja, te različiti načini numeričkog modeliranja istog, s obzirom da nam je za potrebe provođenja simulacije potrebno prvo odrediti adekvatan turbulentni model. Dan je i opis eksperimenta prema čijim rezultatima kasnije potvrđujemo validnost te preciznost simulacije. Iduća poglavlja opisuju izradu domene i numeričke mreže, te provedbu simulacije stujanja vode u otvorenom kanalu, koju smo vršili radi odabira adekvatnog turbulentnog modela, te je izabran $k - \omega$ SST turbulentni model. Simuliranje strujanja vode je također bilo potrebno izvršiti radi dobivanja stacionarnog toka kojeg koristimo pri simuliranju strujanja čestica mikroplastike. Izrada domene i simuliranje su obavljani u OpenFOAM-u, zbog čega su dane upute za navedeni program. Simuliranje čestica mikroplastike je bilo potrebno obaviti u superračunalnom okruženju, pa se za rješavanje zadatka koristilo superračunalo Bura, čije su tehničke specifikacije i način rada iz tog razloga dani u ovom diplomskom radu. Simulirale su se dvije vrste čestica različitih dimenzija, sferne i nesferne, tj. u ovom slučaju radi uspoređivanja rezultata nesferne čestice su bile kockastog oblika. Ključne veličine koje su se uspoređivale su koeficijenti otpora, te Reynoldsovi brojevi. Pokazalo se da se rezultati simulacije strujanja sfernih čestica izrazito dobro poklapaju s eksperimentalnim rezultatima za iste, dok se za kockaste, tj. nesferne čestice dobivaju znatno lošiji rezultati zbog nedostataka u kodu OpenFOAM-ovog rješavača.

Ključne riječi: *mikroplastika, čestice, numeričko modeliranje, turbulentan model, OpenFOAM, simulacija, koeficijent otpora, Reynoldsov broj*

12.SUMMARY

This thesis deals with the topic of simulating the hydrodynamics of microplastic particles. In the introductory part, the general properties of microplastics are described, and the mathematical modeling of the particles is presented. The theory of turbulent flow and different ways of its numerical modeling are also briefly discussed, considering that for the purposes of conducting the simulation, we first need to determine an adequate turbulent model. A description of the experiment is given, according to the results of which we later confirm the validity and precision of the simulation. The following chapters describe the creation of the domain and the numerical network, and the implementation of the simulation of water flow in an open channel, which we performed to select an adequate turbulent model, and the $k - \omega$ SST turbulent model was chosen. It was also necessary to simulate the flow of water in order to obtain the stationary flow that we use when simulating the flow of microplastic particles. The creation of the domain and the simulation were done in OpenFOAM, which is why the instructions for the above-mentioned software are given. The simulation of microplastic particles had to be done in a supercomputer environment, so the Bura supercomputer was used to solve the task, whose technical specifications and mode of operation are given in this thesis for that reason. Two types of particles of different dimensions were simulated, spherical and non-spherical, i.e. in this case, in order to compare the results, the non-spherical particles were cubical. The key quantities that were compared were drag coefficients and Reynolds numbers. It was shown that the results of the simulation of the flow of spherical particles match extremely well with the experimental results for the same, while for cubic, i.e. non-spherical particles, significantly worse results are obtained due to deficiencies in the code of the OpenFOAM solver.

Key words: *microplastics, particles, numerical modelling, turbulence model, OpenFOAM, simulation, drag coefficient, Reynolds number*

13. POPIS SLIKA

Slika 2.1 Veličina čestica mikroplastike [2].....	2
Slika 2.2 Nakupljanje mikroplastike na plaži [4].....	2
Slika 2.3 Kretanje čestica mikroplastike kroz okoliš [5].....	3
Slika 2.4 Nastajanje mikroplastike [7].....	4
Slika 2.5 Kretanje mikroplastike po hranidbenom lancu [12].....	5
Slika 4.1 Eksperiment injektiranja tinte [17].....	11
Slika 4.2 Razlika između laminarnog i turbulentnog strujanja [17].....	12
Slika 4.3 Profili brzina (idealna, laminarna i turbulentna oblika) [17].....	12
Slika 5.1 Eksperimentalni kanal u hidrotehničkom laboratoriju Građevinskog fakulteta u Rijeci [27].....	23
Slika 5.2 3d printer [27].....	24
Slika 5.3 3d modeli čestica mikroplastike [27].....	24
Slika 5.4 Isprintane čestice mikroplastike [27].....	24
Slika 5.5 Korelacija između koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja za sfernu skupinu čestica [27].....	26
Slika 5.6 Korelacija između koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja za kockastu skupinu čestica [27].....	26
Slika 6.1 Struktura mape koja sadrži OpenFOAM slučaj [28].....	28
Slika 6.2 Koordinate vrhova domene.....	29
Slika 6.3 Blok numeričke mreže [29].....	29
Slika 6.4 Domena eksperimentalnog kanala.....	30
Slika 6.5 Postavke numeričke mreže.....	31
Slika 6.6 Domena s izrađenom numeričkom mrežom.....	31
Slika 6.7 Granice ulaza i izlaza iz domene.....	32
Slika 6.8 Granice zidova domene.....	32
Slika 6.9 Rubni uvjeti brzine.....	34
Slika 6.10 Rubni uvjeti tlakova.....	34

Slika 7.1 Postavke LES numeričkog modela.....	37
Slika 7.2 Postavke svojstva fluida (vode).....	38
Slika 7.3 Kalkulator turbulencije [32].....	39
Slika 7.4 Rubni uvjeti za turbulentnu kinetičku energiju.....	39
Slika 7.5 Kontura tlaka za turbulentno strujanje (LES).....	40
Slika 7.6 Kontura brzina za turbulentno strujanje (LES).....	40
Slika 7.7 Presjek konture tlaka (LES).....	41
Slika 7.8 Presjek konture brzina (LES)	41
Slika 7.9 Kontura turbulentne kinetičke energije (LES).....	42
Slika 7.10 Presjek konture turbulentne kinetičke energije (LES).....	42
Slika 7.11 Profil brzina (LES).....	43
Slika 7.12 Pravac za definiranje ravnine profila brzina.....	43
Slika 7.13 Postavke za „realizable“ $k - \varepsilon$ model.....	45
Slika 7.14 Rubni uvjeti za disipaciju turbulentne kinetičke energije.....	45
Slika 7.15 Kontura tlaka („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	46
Slika 7.16 Presjek konture tlaka („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	46
Slika 7.17 Kontura brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	47
Slika 7.18 Presjek konture brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	47
Slika 7.19 Kontura turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	48
Slika 7.20 Presjek konture turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	48
Slika 7.21 Kontura disipacije turbulentne kinetičke energije („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	49
Slika 7.22 Presjek konture disipacije turbulentne kinetičke energije.....	49
Slika 7.23 Profil brzina („realizable“ $k - \varepsilon$ model).....	50
Slika 7.24 Rubni uvjeti za specifičnu brzinu disipacije.....	51
Slika 7.25 Presjek konture tlaka ($k - \omega$ SST model).....	52
Slika 7.26 Presjek konture brzina ($k - \omega$ SST model).....	52
Slika 7.27 Presjek konture turbulentne kinetičke energije ($k - \omega$ SST model)	53
Slika 7.28 Kontura specifične brzine disipacije ($k - \omega$ SST model).....	53

Slika 7.29 Presjek konture specifične brzine disipacije ($k - \omega$ SST model).....	54
Slika 7.30 Profil brzina ($k - \omega$ SST model).....	54
Slika 8.1 Superračunalo Bura [35].....	56
Slika 8.2 Svojstva čestice mikroplastike.....	57
Slika 8.3 Postavke modela oblaka čestica.....	58
Slika 8.4 Definiranje maksimalnog mogućeg promjera čestice.....	59
Slika 8.5 Nadopunjena datoteka "transportProperties"	59
Slika 8.6 Postavke dekompozicije domene.....	60
Slika 8.7 SLURM skripta.....	60
Slika 8.8 Ciklus „icoUncoupledKinematicParcelFoam“ rješavača.....	62
Slika 8.9 Početna pozicija čestice.....	63
Slika 8.10 Pozicija čestice nakon potonuća.....	64
Slika 8.11 Pozicije čestica u 3. sekundi simulacije.....	64
Slika 8.12 Pozicije čestica na dnu domene.....	65
Slika 8.13 Brzine čestica različitih promjera	68
Slika 8.14 Podaci o česticama različitih promjera.....	68
Slika 8.15 Graf povezanosti koeficijenta otpora i Reynoldsovog broja.....	69
Slika 8.16 Postavke nesferičnog modela otpora.....	70
Slika 8.17 Brzine kockastih čestica.....	71
Slika 8.18 Pozicije kockastih čestice na 3. sekundi simulacije.....	71
Slika 8.19 Podaci o kockastim česticama.....	72

14. POPIS TABLICA

Tablica 4.1 Vrsta strujanja s obzirom na Reynoldsov broj [17].....	13
Tablica 4.2 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za standardni $k - \varepsilon$ model [19].....	16
Tablica 4.3 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za "realizable" $k - \varepsilon$ model [20].....	17
Tablica 4.4 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za RNG $k - \varepsilon$ model [21].....	17
Tablica 4.5 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za standardni $k - \omega$ model [22].....	18
Tablica 4.6 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za modificirani $k - \omega$ model [23].....	18
Tablica 4.7 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za $v^2 - f$ model [26].....	21
Tablica 4.8 Vrijednosti empirijskih koeficijenata za $\zeta - f$ model [26].....	22
Tablica 7.1 Broj iteracija simulacije ovisno o izabranom turbulentnom modelu.....	55
Tablica 8.1 Usporedba koeficijenata otpora za sferične čestice.....	69
Tablica 8.2 Usporedba koeficijenata otpora za kockaste čestice.....	73
Tablica 8.3 Usporedba Reynoldsovih brojeva za kockaste čestice.....	73
Tablica 8.4 Usporedba koeficijenata otpora za kockaste čestice (Clift-Gauvin model).....	74