

Računalna analiza hidrodinamike mikroplastike

Rogović, Lovro

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:190:428057>

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

Download date / Datum preuzimanja: **2024-12-25**



Repository / Repozitorij:

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



SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Sveučilišni diplomski studij strojarstva

Diplomski rad

RAČUNALNA ANALIZA HIDRODINAMIKE MIKROPLASTIKE

Rijeka, siječanj 2024.

Lovro Rogović

0069082029

SVEUČILIŠTE U RIJECI

TEHNIČKI FAKULTET

Sveučilišni diplomski studij strojarstva

Diplomski rad

RAČUNALNA ANALIZA HIDRODINAMIKE MIKROPLASTIKE

Mentor: prof. dr. sc. Lado Kranjčević

Komentor: prof. dr. sc. Siniša Družeta

Rijeka, siječanj 2024.

Lovro Rogović

0069082029

Rijeka, 16. ožujka 2022.

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

ZADATAK ZA DIPLOMSKI RAD

Pristupnik: **Lovro Rogović (0069082029)**
Studij: **Diplomski sveučilišni studij strojarstva**
Modul: **Računarska mehanika i inženjerstvo**

Zadatak: **Računalna analiza hidrodinamike mikroplastike / Computational Analysis of Microplastics Hydrodynamics**

Opis zadatka:

Potrebno je 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.


Zadatak uručen pristupniku: 21. ožujka 2022.

Mentor:

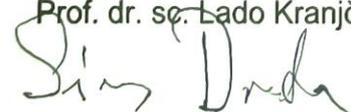
Predsjednik povjerenstva za
diplomski ispit:



Prof. dr. sc. Lado Kranjčević



Prof. dr. sc. Kristian Lenić



Prof. dr. sc. Siniša Družeta (komentor)

IZJAVA

Ovom izjavom potvrđujem da sam samostalno izvršio diplomski rad.

Rijeka, siječanj 2024.



Lovro Rogović

ZAHVALA

Ovim putem želim se zahvaliti mentoru prof.dr.sc. Ladi Kranjčeviću i asistentima univ. mag. ing. mech. Ante Sikirici i univ. mag. ing. mech. Marti Alvir na danim kritikama i pruženoj pomoći tokom izrade diplomskog rada.

SADRŽAJ

1.	UVOD	1
2.	OPĆENITO O MIKROPLASTICI	2
2.1	Mikroplastika i njezini izvori	2
2.2	Reciklaža i razgradnja mikroplastike	3
2.3	Utjecaj mikroplastike na okoliš	4
2.4	Transportna dinamika mikroplastike	4
2.5	Pristupi računalnog modeliranja ponašanja mikroplastike	6
3.	MATEMATIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE	8
3.1	Jednadžbe gibanja	8
3.2	Faktor otpora oblika c_d	11
4.	NUMERIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE	15
4.1	Python numerički model	15
4.2	OpenFOAM numerički model	21
4.2.1	OpenFOAM	21
4.2.2	InterFoam rješavač	23
4.2.3	MPPICFoam rješavač	24
4.2.4	MPPICInterFoam rješavač	26
5.	NUMERIČKA ANALIZA	27
5.1	Parametri analize	27
5.2	Izrada domene	28
5.3	Rubni uvjeti	31
5.4	Turbulentni model	37
5.4.1	Reynolds Averaged Simulaton (RAS)	37
5.5	Modeliranje veličine čestica i injekcija	39
5.6	Postavke rješavača	44
6.	REZULTATI	46
6.1	Pokretanje simulacije	46

6.2	Rezultati polja tlaka	47
6.3	Rezultati polja brzina.....	48
6.4	Rezultati taloženja čestica	49
7.	ZAKLJUČAK	53
8.	LITERATURA.....	54
9.	SAŽETAK.....	56

1. UVOD

U ovom radu fokus će biti usmjeren na proučavanje dinamike mikroplastike u vodi. Nadahnuće za ovaj rad proizašlo je iz svakodnevnog porasta broja čestica mikroplastike koje nalazimo u našem okruženju. Mikroplastika se zbog svojih opsežnih izvora i distribucije može pronaći u širokom rasponu poput: oceana, rijeka, tla, atmosfere, divljih životinja, ljudskih tkiva, urbanih područja, postrojenja za pročišćavanje otpadnih voda i odlagališta otpada. Problem s mikroplastikom u izvorima slatke vode i oceanima je njezina raširena prisutnost, koja predstavlja ekološku prijetnju vodenom životu, zabrinutost za ljudsko zdravlje kroz prehrambeni lanac i dugoročne posljedice za okoliš zbog njihove postojanosti i potencijalne toksičnosti.

Cilj pristupa računalnog modeliranja dinamike mikroplastike u različitim okolinama je unaprijediti razumijevanje kretanja i sudbine mikroplastike te pružiti temelj za razvoj učinkovitih mjera zaštite okoliša. Kroz ovakvo modeliranje, istraživači žele analizirati utjecaj gustoće, veličine i oblika mikroplastike na njihovu dinamiku i distribuciju, što može pomoći očuvanju ekosustava i boljem upravljanju ovim onečišćivačem.

Rad je strukturiran u devet poglavlja. U prvom je poglavlju uvodni dio rada gdje je ukratko opisan cilj i nadahnuće za rad, drugo poglavlje daje pregled trenutnih teorijska saznanja o mikroplastici poput: izvora, reciklaže i razgradnje, utjecaja na okoliš, transportne dinamike i računalnih pristupa modeliranja mikroplastike. Matematički model gibanja čestica mikroplastike poglavlje je koje u nastavku prikazuje jednadžbe gibanja i opis faktora otpora oblika, te odmah iza njega numerički model gibanja i implementaciju istog unutar Pythona i OpenFOAMa. Sljedeće poglavlje detaljno opisuje numeričku analizu uz pregled parametara analize, izrade domene, postavljanje rubnih uvjeta, pregled različitih numeričkih modela koji će biti podvrgnuti analizi i modeliranje injekcije čestica. Pred kraj se nalazi poglavlje rezultati iz kojeg se može isčitati polje tlaka, brzina i usporedba između rezultata taloženja dobivenih implementacijom numeričkih modela unutar OpenFOAMa i Pythona. Za kraj, u osmom poglavlju nalazi se zaključak, u devetom poglavlju pregled je korištene literature tijekom pisanja rada i u desetom poglavlju sažetak rada.

2. OPĆENITO O MIKROPLASTICI

2.1 Mikroplastika i njezini izvori

Mikroplastika je klasificirana kao čestica plastike manja od 5mm. Može se kategorizirati u primarnu i sekundarnu mikroplastiku:

- Primarna mikroplastika - namjerno se proizvodi u malim veličinama i pronalazi se u proizvodima kao što su predmeti za osobnu njegu (sredstva za čišćenje lica, pasta za zube i kreme za piling) i unutar industrijskih procesa (sirovine koje se koriste u proizvodnji plastičnih predmeta).
- Sekundarna mikroplastika - nastaje kao rezultat raspadanja većih plastičnih predmeta (vrećice, boce, ribarska oprema) pod utjecajem čimbenika iz okoliša (fizikalni, kemijski i biološki procesi mogu dovesti do smanjenja strukturnog integriteta te plastike, što dovodi do njezine fragmentacije). Također, do ovog raspada može doći i prije nego što ti materijali uđu u okoliš, kao što je slučaj sa sintetičkim vlaknima iz odjeće koja se oslobađaju tijekom ciklusa pranja ili habanja automobilskih guma, što stvara sitne polimerne fragmente.

U tablici 2.1 pregled je kategorizacije i povezani primjeri nastajanja mikroplastike.

Tablica 2.1. Kategorizacija i primjeri mikroplastike [1]

Primarna mikroplastika	Industrijski abrazivi
	Specifični medicinski proizvodi (npr. pribor za poliranje zuba)
	Proizvodi za osobnu njegu/proizvodi za čišćenje
	Tekućine za bušenje
	Sirovine/podproizvodi procesa
	Neppravilno rukovanje/odlaganje
Sekundarna mikroplastika	Opće bacanje smeća/neppravilno odlaganje plastičnog otpada
	Odbačeni ribolovni pribor
	Abrazija na odlagalištima i mjestima za recikliranje
	Vlakna oslobođena iz sintetičkih tekstila
	Otpad koji stvara brod
	Vlakna iz higijenskih proizvoda
	Plastični materijal iz organskog otpada
	Abrazija tijekom uklanjanja boje/korištenje boje s sintetikom
Polimeri koji se nalaze u aditivima za kompost	

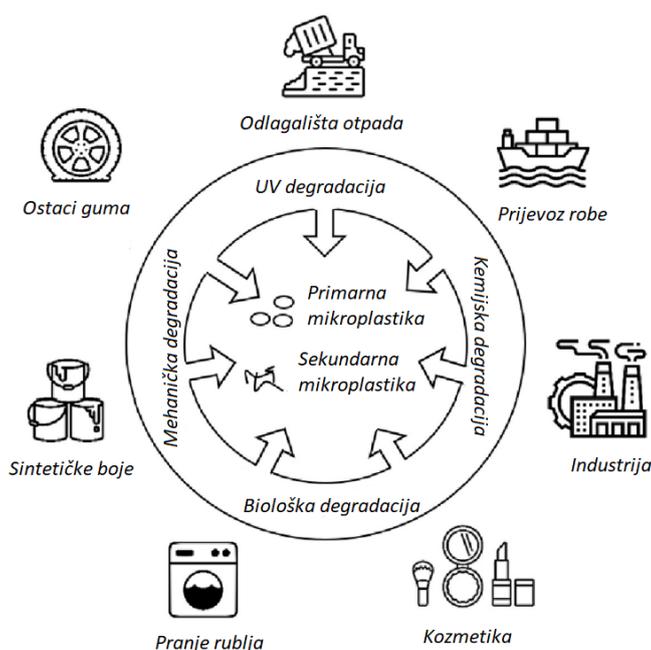
2.2 Reciklaža i razgradnja mikroplastike

Samo se dio plastičnog otpada reciklira i to je većinom „neisplativo“ zbog inherentnog procesa odvojenog prikupljanja, transporta, obrade i ponovne proizvodnje. Ovi znatni troškovi u kombinaciji s niskom komercijalnom vrijednošću reciklirane plastike s jedne strane i niskom cijenom čistih polimera s druge strane rijetko čine proces recikliranja isplativim i često zahtijevaju velike državne subvencije.

Plastika u okolišu razgrađuje se različitim procesima:

- C–C spojna plastika (npr. PP, PS, PVC, PE): Ova plastika se raspada kada je izložena svjetlu, što uzrokuje cijepanje veza između atoma ugljika i vodika (C–H veze). Zbog toga su plastične strukture slabije i podložnije daljnjoj degradaciji.
- Heteroatomska plastika (npr. PET, PU): plastika koja sadrži atome osim ugljika i vodika (heteroatomi) uglavnom se razgrađuje hidrolizom, pri čemu molekule vode prekidaju njihove kemijske veze.

Osim navedenih, razlikujemo i druge procese prikazane na slici 2.1. u nastavku. No, plastika u stvarnom svijetu često sadrži razne aditive što može utjecati na procese degradacije plastike, čineći taj proces složenom i promjenjivom situacijom [1].



Slika 2.1. Izvori, degradacija i podjela mikroplastike [2]

2.3 Utjecaj mikroplastike na okoliš

Mikroplastika, sitne plastične čestice koje se nalaze u raznim ekosustavima, izazivaju nekoliko ekoloških problema. U nastavku su dani primjeri toksičnosti mikroplastike na organizme:

- Gutanje od strane organizama: mikroplastiku može progutati širok raspon organizama, uključujući planktonske vrste, sisavce, ptice i ribe. Gutanje mikroplastike može rezultirati raznim negativnim učincima.
- Kemijski utjecaj: kemikalije, uključujući aditive i zagađivače, mogu se zalijepiti za mikroplastiku. Ove kemikalije mogu se osloboditi nakon gutanja, ostavljajući negativne posljedice na organizam.
- Izloženost zagađivačima: mikroplastika može apsorbirati i otpustiti postojeće organske zagađivače (POPs), koji mogu naškoditi organizmima.

Ukratko, mikroplastika predstavlja rizik za okoliš jer je gutaju različiti organizmi i potencijalno uzrokuje fizičke blokade, izloženost kemikalijama i druge štetne učinke. Razumijevanje punog opsega njihovog utjecaja na ekosustave ostaje aktivno područje istraživanja [1].

2.4 Transportna dinamika mikroplastike

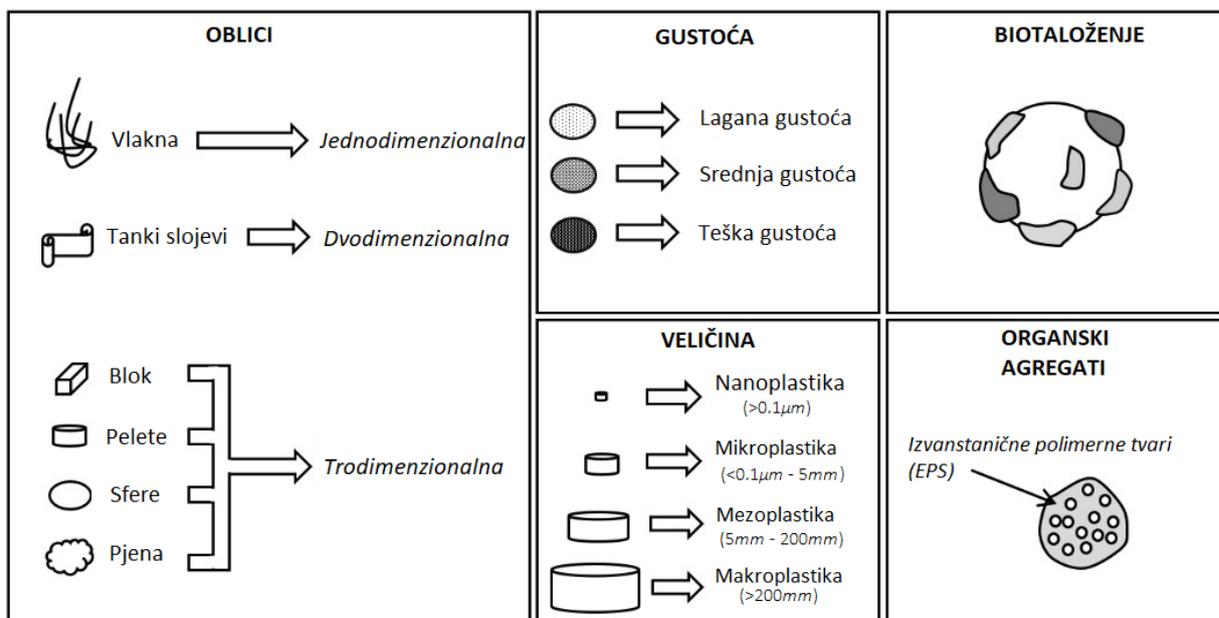
Ovaj odjeljak bavi se složenim karakteristikama mikroplastike koje imaju velik utjecaj na dinamiku njezinog transporta unutar vodenog okoliša. Čestice mikroplastike, koje potječu iz različitih izvora, pokazuju izuzetnu varijabilnost u sastavu i fizičkom obliku, što se uglavnom pripisuje njihovim izvorima i procesima trošenja kroz koje prolaze tijekom svog postojanja. Razumijevanje ovih karakteristika ključno je za razumijevanje njihove disperzije i obrazaca taloženja unutar vodenih sustava. Tako, možemo razlikovati:

- Varijacije gustoće: čestice mikroplastike pokazuju značajne razlike u gustoći, u rasponu od $<0,05 \text{ g/cm}^3$ za lagane materijale poput polistirenske pjene do $2,1\text{--}2,3 \text{ g/cm}^3$ za gušće tvari poput politetrafluoretilena. Ova varijacija značajno upravlja distribucijom mikroplastike unutar vodenih ekosustava. Čestice gustoće niže od tipičnih vrijednosti morske vode imaju tendenciju pokazivati uzgon, plutajući unutar vodenog stupca. Naime, polietilen (PE), polipropilen (PP) i polistiren (PS) često su uočeni u površinskim vodama

zbog svog neutralnog uzgona. Suprotno tome, mikroplastika veće gustoće nastoji se taložiti u sedimentima, utječući na njihovu distribuciju u sličnim uvjetima okoliša.

- Utjecaj oblika: geometrijska konfiguracija mikroplastičnih čestica također igra ključnu ulogu u njihovoj dinamici. Istraživači su kategorizirali mikroplastiku u tri skupine na temelju oblika: jednodimenzionalna (npr. vlakna, linije), dvodimenzionalna (npr. filmovi, ljustice) i trodimenzionalna (npr. nepravilni fragmenti, kuglice, jajoliki, cilindri, sferule). Jednodimenzionalne i dvodimenzionalne čestice često se opiru taloženju kroz vodeni stupac, ostajući bioraspoložive u podpovršinskim slojevima. Nasuprot tome, trodimenzionalni oblici pokazuju poboljšanu sposobnost slijeganja. Nedavne ekotoksikološke studije pokazale su da je vjerojatnije da će čestice koje nisu trodimenzionalne biti asimilirane, što utječe na obilje mikroplastike u obalnim vodama u usporedbi s otvorenim oceanskim okolišima.
- Veličina je bitna: čestice mikroplastike pokazuju širok raspon veličina u vodenim ekosustavima, u rasponu od 10 μ m do 5mm. Ovaj raspon veličina je sličan prirodnim mineralnim česticama. Međutim, na hidrodinamičko ponašanje mikroplastike utječu njezini različiti sastavi i teksture, zbog čega je granulometrija nedovoljno korišten kriterij procjene u nekim studijama. Veličina čestica utječe na njihove sklonosti kretanja, pri čemu mikroorganizmi potencijalno mogu progutati manje čestice i potom ih proslijediti u veće organizme duž hranidbenog lanca.
- Biotaloženje i agregacija: mikroplastika može biti podvrgnuta biotaloženju, gdje mikroorganizmi koloniziraju površine razvojem biofilma. Ovaj proces može povećati gustoću čestica, uzrokujući njihovo potonuće u uvjetima morske vode. Agregacija s drugim česticama, plastičnim i organskim, može modificirati omjer gustoće/volumena mikroplastike, utječući na njen uzgon i ponašanje pri taloženju. Osim toga, organski agregati mogu značajno poboljšati taloženje lakše mikroplastike.

Razumijevanje ovih karakteristika mikroplastike (slika 2.2.) ključno je za modeliranje njezina ponašanja i predviđanje uzoraka distribucije unutar vodenog okoliša. Istraživači neprestano nastoje razotkriti složenost ovih čimbenika, nastojeći poboljšati naše razumijevanje dinamike mikroplastike i njezinih potencijalnih ekoloških posljedica [2].



Slika 2.2. Značajke koje utječu na transportnu dinamiku mikroplastike [2]

2.5 pristupi računalnog modeliranja ponašanja mikroplastike

Računalni pristupi igraju ključnu ulogu u proučavanju ponašanja mikroplastike u različitim okruženjima. Evo nekih ključnih računalnih metoda i tehnika koje se koriste u istraživanju mikroplastike:

- Simulacije molekularne dinamike (*engl. Molecular Dynamics*), koriste se za proučavanje interakcija između mikroplastike i okolnih molekula na atomskoj ili molekularnoj razini. Ove simulacije mogu pružiti uvid u fizikalne i kemijske procese uključene u razgradnju, adsorpciju i transport mikroplastike.
- Analiza konačnih elemenata (*engl. Finite Element Analysis*), FEA se koristi za modeliranje mehaničkog ponašanja mikroplastike u različitim uvjetima okoline. Pomaže u razumijevanju načina na koji mikroplastika reagira na sile poput vodenih struja i mehaničkih napreznja, što može utjecati na njihovo kretanje i fragmentaciju.
- Računalna dinamika fluida (*engl. Computational Fluid Dynamics*), CFD simulacije koriste se za analizu toka vode i drugih tekućina u interakciji sa mikroplastikom. To pomaže u predviđanju transporta i raspršivanja mikroplastike u vodenom okolišu, uključujući oceane, rijeke i jezera.
- Strojno učenje i rudarenje podataka (*engl. Machine Learning and Data Mining*), algoritmi strojnog učenja primjenjuju se za analizu velikih skupova podataka o distribuciji i karakteristikama mikroplastike. Ovi algoritmi mogu pomoći u prepoznavanju obrazaca,

trendova i korelacija u ponašanju i izvorima mikroplastike. Također se mogu koristiti za predviđanje koncentracija mikroplastike na različitim mjestima.

- Modeliranje temeljeno na „agentima“ (*engl. Agent-Based Modeling*), ABM se koristi za simulaciju ponašanja pojedinačne mikroplastike i njihove interakcije unutar većeg ekosustava. Može pomoći istraživačima da razumiju kako se mikroplastika kreće, komunicira s organizmima i utječe na dinamiku ekosustava.
- Modeli sudbine u okolišu (*engl. Environmental Fate Models*), ovi modeli simuliraju sudbinu i transport mikroplastike u okolišu, uzimajući u obzir čimbenike poput vodenih struja, sedimentacije i razgradnje. Oni mogu predvidjeti distribuciju mikroplastike u različitim odjeljcima okoliša tijekom vremena.
- Daljinska detekcija i GIS (*engl. Remote Sensing and GIS*), geografski informacijski sustavi (GIS) i tehnike daljinske detekcije koriste se za mapiranje i praćenje onečišćenja mikroplastikom u većem mjerilu. Ovi alati kombiniraju prostorne podatke s računskom analizom kako bi vizualizirali i analizirali distribuciju mikroplastike u oceanima, obalama i drugim ekosustavima.
- Modeliranje kvantitativnog odnosa strukture i aktivnosti (*engl. Quantitative Structure-Activity Relationship Modeling*), QSAR modeli predviđaju toksičnost kemikalija, uključujući aditive i zagađivače povezane s mikroplastikom. Analizirajući kemijska svojstva ovih tvari, istraživači mogu procijeniti njihovu potencijalnu štetu za organizme.
- Monte Carlo simulacije, koriste se za procjenu vjerojatnosti različitih događaja povezanih s mikroplastikom, kao što su njezine interakcije s organizmima ili njihova distribucija u sedimentima. Ove simulacije daju probabilistički uvid u ponašanje mikroplastike.
- Spojeni modeli (*engl. Coupled Models*), mnoge studije koriste spojene modele koji integriraju višestruke računalne pristupe za simulaciju složenih interakcija i ponašanja mikroplastike u različitim dijelovima okoliša, uključujući zrak, vodu, sediment i biotu.

3. MATEMATIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE

U nastavku će biti prikazan model gibanja čestica mikroplastike za slučaj stacionarnog toka tekućine s nehomogenim poljem brzine u ravninskom laminarnom toku. Proširenje modela, u smislu trodimenzionalnog toka sa utjecajem turbulencije kompleksan je zadatak budući da temeljni odnosi potrebni za modeliranje ovog učinka nisu u potpunosti razriješeni za slučaj mikroplastike [4].

3.1 Jednadžbe gibanja

Jednadžba gibanja koristi se za opisivanje kako se čestica kreće unutar tekućine koja je također u gibanju. Ova jednadžba uzima u obzir različite sile koje djeluju na česticu.

Analiza počinje razmatranjem gibanja čestice u fluidu koji u početku miruje. Čestica se kreće brzinom v_p u odnosu na fluid, a brzina čestice je označena kao $v_{rel} = v_p - v_f$, gdje v_f predstavlja brzinu fluida. Zatim se uvodi linearna brzina v_f u sustav, koji se sastoji od fluida i čestice. Brzina $v_f(t)$ je funkcija vremena, što znači da je podložna promjeni kroz vrijeme. Kao rezultat, tekućina doživljava ubrzanje, što dovodi do stvaranja gradijenta tlaka u cijelom polju tekućine. Prisutnost ovog gradijenta tlaka unutar tekućine prenosi silu na sferičnu česticu. Ova sila proizlazi iz varijacija tlaka uzrokovanih ubrzanjem tekućine zbog uvođenja brzine v_f . Basset–Boussinesq–Oseenovom jednadžbom (3.1) (*engl. BBO equation*) određuju se sile koje djeluju na kuglastu česticu za slučaj gibanja čestice u nestacionarnom toku tekućine okarakteriziranog malim Reynoldsovim brojem [3].

$$m_p \cdot \frac{dv_p}{dt} = 2\pi r_p^3 \rho_f \cdot \frac{dv_f}{dt} - \frac{2\pi r_p^3 \rho_f}{3} \cdot \frac{dv_p}{dt} - 6 \cdot \pi \cdot r_p \cdot \mu \left(v_{rel} + \frac{r_p}{\sqrt{\pi \cdot \nu}} \int_{-\infty}^t dt_1 \frac{v_{rel}(t_1)}{\sqrt{t-t_1}} \right) - \frac{4\pi r_p^3}{3} g \cdot \rho_{rel} \quad (3.1)$$

gdje je:

v_p - vektor brzine materijalne čestice [m/s]

m_p - masa materijalne čestice [kg]

r_p - radijus materijalne čestice [m]

v_f - vektor brzine lokalnog volumena tekućine [m/s]

m_f - masa tekućine koja odgovara volumenu čestice [kg]

v_{rel} - vektor relativne brzine između materijalne čestice i lokalnog volumena tekućine [m/s]

g - vektor ubrzanja sile teže [m/s²]

μ - dinamička viskoznost tekućine [kg/m·s]

g - vektor ubrzanja sile teže [m/s²]

ν - kinematička viskoznost tekućine [m²/s]

ρ_{rel} - relativna gustoća između materijalne čestice i lokalnog volumena tekućine [kg/m³]

U nastavku biti će objašnjene sve sile koje se pojavljuju u BBO jednadžbi (3.1).

Prikaz rezultanta tlakova koji se pojavljuju kao posljedica ubrzanja \dot{v}_f tekućine:

$$F_p = 2\pi r_p^3 \rho_f \cdot \frac{dv_f}{dt} \quad (3.2)$$

Dok jednadžba u nastavku predstavlja višak inercije uzrokovan pritiscima koji su rezultat ubrzanja \dot{v}_p čestice:

$$F_i = \frac{2\pi r_p^3 \rho_f}{3} \cdot \frac{dv_p}{dt} \quad (3.3)$$

Sila dodane mase (*engl. Added mass force*). Predstavlja silu koja se pojavljuje na čvrstom objektu, obično čestici ili tijelu, kada se kreće kroz fluid. Ta sila nastaje zbog pomicanja okolnog fluida dok se čestica kreće, a povezana je s promjenom inercije čestice zbog interakcije s fluidom. Sila dodane mase računa se kao:

$$F_v = -m_f \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{dv_{rel}}{dt} \quad (3.4)$$

Stokesova sila, predstavlja linearni otpor zbog relativne brzine $v_{rel} = (v_p - v_f)$. Ima presudnu ulogu u određivanju brzine čestica i njihovog ponašanja u viskoznim tekućinama. Stokesova sila računa se izrazom:

$$F_d = -6 \cdot \pi \cdot r_p \cdot \mu \cdot v_{rel} \quad (3.5)$$

Bassetova sila, predstavlja kako prethodna ubrzanja čestice utječu na njezino sadašnje gibanje u tekućini. Ta je sila vitalna za točno modeliranje dinamike čestica u nestabilnim ili promjenjivim tokovima tekućine i jednaka je:

$$F_B = -6 \cdot \pi \cdot r_p \cdot \mu \cdot \frac{r_p}{\sqrt{\pi \cdot v}} \int_{-\infty}^t dt_1 \frac{v_{rel}^{\cdot}(t_1)}{\sqrt{t - t_1}} \quad (3.6)$$

Gravitacijska sila koja djeluje na kuglastu česticu predstavlja silu koja uzima u obzir volumen čestice, gravitacijsko ubrzanje i razliku gustoće između čestice i okolne tekućine ρ_{rel} :

$$F_g = -\frac{4\pi r_p^3}{3} g \cdot \rho_{rel} \quad (3.7)$$

Uvažavajući dimenzije čestica mikroplastike, valja primijetiti kako je većinu od navedenih članova opravdano zanemariti te matematički model gibanja svesti na utjecaj sile otpora oblika i gravitacijske sile odnosno uzgonske sile. Za ravninski tok tekućine, u kojem je polje brzine definirano komponentama $v_{f,x}$ i $v_{f,z}$ u ravnini paralelnoj s vektorom ubrzanja sile teže g , primjena principa očuvanja mase za x smjer koordinatne osi definira jednadžbu gibanja:

$$m_p \cdot \frac{dv_{p,x}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p, v_f) \cdot \rho_f(z_p) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| \quad (3.8)$$

te se analogno definira i jednadžba gibanja za z koordinatnu os:

$$m_p \cdot \frac{dv_{p,z}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p, v_f) \cdot \rho_f(z_p) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot |v_{f,z} - v_{p,z}| + f_g \quad (3.9)$$

gdje je:

m_p - masa materijalne čestice [kg]

$v_{p,x}$ i $v_{p,z}$ - komponente brzine čestice mikroplastike [m/s]

$v_{f,x}$ i $v_{f,z}$ - komponente brzine tekućine [m/s]

c_d - funkcija faktora otpora oblika [1]

$\rho_f(z_p)$ - gustoća tekućine na visinskoj koordinati z_p čestice mikroplastike [kg/m³]

$A_p(d_p)$ - projekcija površine čestice na ravninu okomitu na rezultirajući vektor brzine v_p [m²]

Rezultirajuća uzgonska sila:

$$f_g = (\rho_f(z_p) - \rho_p) \cdot V_p(d_p) \cdot g \quad (3.10)$$

gdje je:

f_g – uzgonska sila [kg·m/s²]

ρ_p - gustoća čestice mikroplastike [kg/m³]

z_p - visinska koordinata čestice mikroplastike [m]

$V_p(d_p)$ - volumen čestice mikroplastike [m³]

Jednadžbe (3.1) i (3.8) definiraju sustav običnih nelinearnih diferencijalnih jednadžbi s varijabilnim koeficijentima. Jednadžbe gibanja nije moguće riješavati odvojeno zbog toga što rješenja zavise o funkciji otpora oblika c_d čiji su argumenti nepoznata brzina čestice mikroplastike v_p i brzina tekućine v_f . U pojednostavljenom slučaju, gdje je faktor otpora oblika unaprijed poznat i konstantan, predmetni sustav može se dekomponirati na dvije obične diferencijalne jednadžbe [4].

3.2 Faktor otpora oblika c_d

Brzina taloženja čestica mikroplastike temeljni je parametar potreban za napredne transportne modele i predviđanja. Provedeno je nekoliko eksperimentalnih studija o brzini taloženja mikroplastičnih čestica, razmatrajući različite oblike i uvjete. Studije su otkrile da čimbenici poput oblika i okolišnih uvjeta značajno utječu na brzine taloženja. Koeficijent otpora, označen kao c_d ,

je bezdimenzijski broj koji se koristi za kvantificiranje koliko se učinkovito objekt kreće kroz fluid karakterizirajući otpor ovisan o obliku. No, osim oblika čestice, na koeficijent otpora utječe i lokalni Reynoldsov broj Re_p koji se za slučaj čestica mikroplastike može definirati jednadžbom:

$$Re_p = \frac{\rho_f(z_p) \cdot (\sqrt{(v_{f,x} - v_{p,x})^2 + (v_{f,z} - v_{p,z})^2}) \cdot d_p}{\mu} \quad (3.11)$$

gdje je:

Re_p – lokalni Reynoldsov broj [1]

$\rho_f(z_p)$ - gustoća tekućine na koordinati čestice z_p [kg/m³]

$v_{p,x}$ i $v_{p,z}$ - komponente brzine čestice mikroplastike [m/s]

$v_{f,x}$ i $v_{f,z}$ - komponente brzine tekućine [m/s]

d_p - karakteristična dimenzija čestice z_p [m]

μ - dinamička viskoznost tekućine [kg/m·s]

Za sferne čestice, određivanje odnosa Reynoldsovog broja (Re) i njegovog odgovarajućeg koeficijenta otpora (c_d) može se kategorizirati u različite regije ili područja. Specifična područja za određivanje $Re(c_d)$ za sferne čestice su sljedeća:

- Stokesovo područje ($0 \leq Re_p \leq 1$) - U Stokesovom režimu, koji odgovara vrlo niskim Reynoldsovim brojevima, koeficijent otpora c_d prvenstveno se određuje formulom [6]:

$$c_d = \frac{24}{Re} \quad (3.12)$$

Ovaj režim karakterizira visoko viskozno, puzajuće strujanje oko kuglaste čestice. Predstavlja ponašanje vrlo malih, sporih čestica gdje dominiraju viskozne sile.

- Prijelazno područje ($1 < Re_p < 1000$) - U prijelaznom režimu, c_d se često opisuje pomoću složenijih jednadžbi, kao što je Schiller-Naumannova jednadžba ili druge empirijske korelacije. Turbulencija se počinje razvijati u граниčnom sloju, a uzorak strujanja postaje složeniji.

- Newtonovo područje ($Re_p > 1000$) - Pri Reynoldsovima brojevima većim od 1000 strujanje oko kuglastih čestica ulazi u Newtonov režim. U ovom režimu, ponašanje c_d zna varirati, ali je često pod manjim utjecajem viskoznih sila i više ovisi o turbulentnom strujanju i drugim čimbenicima. Empirijske formule ili eksperimentalni podaci obično se koriste za određivanje c_d u ovom režimu.

Clift-Gauvinov model, dan jednadžbom (3.13) daje sveobuhvatan koeficijent otpora u širokom rasponu Reynoldsovih brojeva ($Re_p < 300\,000$). Osmišljen je da bude primjenjiv kroz sva tri specifična područja navedena iznad, što ga čini svestranim izborom za simulacije i numeričke modele koji uključuju sferne mikroplastične čestice [5].

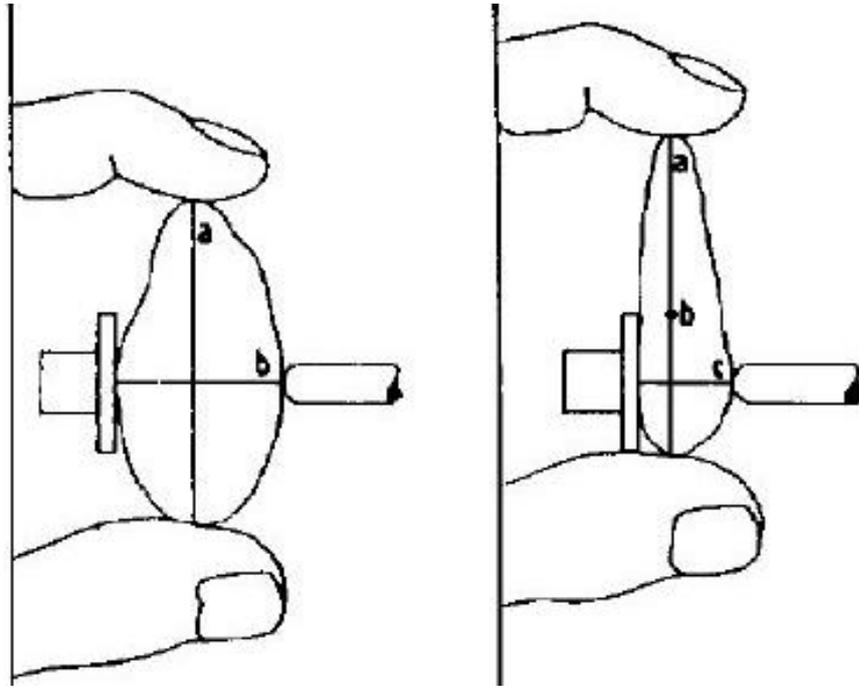
$$c_d = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + 0,15 \cdot Re_p^{0,687}) + \frac{0,42}{1 + 4,25 \cdot 10^4 \cdot Re_p^{-1,16}} \quad (3.13)$$

Sferičnost čestice odnosi se na mjeru u kojoj se oblik čestice približava obliku savršene sfere. Drugim riječima, mjeri koliko objekt nalikuje kugli. Sferičnost čestica važan je koncept u raznim područjima, uključujući geologiju, fiziku i inženjerstvo.

Sferičnost se obično kvantificira pomoću numeričke vrijednosti. Savršeno sferična čestica imala bi vrijednost sferičnosti $\psi = 1$, dok bi izrazito nepravilne ili nesferične čestice imale vrijednosti $\psi < 1$. Indeks sferičnosti definiran je jednadžbom:

$$\psi = \sqrt[3]{\frac{b \cdot c}{a^2}} \quad (3.14)$$

gdje su a, b i c okarakterizirani kao duga, srednja i kratka os čestice. Na slici 3.1. može se vidjeti primjer mjerenja osi [7].



Slika 3.1. Uzorak i primjer mjerenja osi a, b i c [7]

Radi pojednostavljenja numeričkog modela, indeks sferičnosti za svaki je od tri primarna oblika mikroplastike (slika 2.2, oblici) sveden na jedan broj. Pa je tako za jednodimenzionalne čestice ($a \gg b, c$) određen indeks sferičnosti $\psi = 0,05$, za dvodimenzionalne čestice ($a, b \gg c$) iznosi $\psi = 0,5$ i za trodimenzionalne tj. prostorne čestice ($a = b = c$) jednak je $\psi = 1$.

Odnos između sferičnosti čestica i otpora oblika određen je eksperimentalno. Podaci pokazuju da smanjenjem sferičnosti čestice (ψ) otpor (c_d) koji čestica doživljava raste. Drugim riječima, manje sferne čestice imaju veći otpor. U radu se koristi četvero-parametarska (A, B, C, D) jednadžba kako bi se prilagodili eksperimentalnim podacima za koeficijente otpora. Ti parametri, određuju se temeljem sferičnosti čestica i modificirane jednadžbe otpora oblika i dani su jednadžbom [8]:

$$c_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + A \cdot Re_p^B) + \frac{C}{1 + \frac{D}{Re_p}} \quad (3.15)$$

Parametri A, B, C i D prikazani su unutar jednadžbe (3.16):

$$\left. \begin{aligned} A &= \exp(2,3288 - 6,4581 \cdot \psi + 2,4486 \cdot \psi^2) \\ B &= 0,0964 + 0,5565 \cdot \psi \\ C &= \exp(4,905 - 13,8944 \cdot \psi + 18,4222 \cdot \psi^2 - 10,2599 \cdot \psi^3) \\ D &= \exp(1,4681 + 12,2584 \cdot \psi - 20,7322 \cdot \psi^2 + 15,8855 \cdot \psi^3) \end{aligned} \right\} \quad (3.16)$$

4. NUMERIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE

4.1 Python numerički model

Prethodno definirani matematički model primijenit će se u nastavku za izradu numeričkog modela, koji predstavlja računski algoritam za simulaciju ponašanja mikroplastične čestice označene kao p . Ovu specifičnu česticu mikroplastike karakteriziraju unaprijed određeni parametri: početni položaj (x_p, z_p) , početna brzina $(v_{p,x}, v_{p,z})$, gustoća (ρ_p) , karakteristična veličina (d_p) i koeficijent sferičnosti (ψ_p) . Da bi se to postiglo, prvi korak uključuje rastavljanje vremenske derivacije jednadžbe gibanja, što znači dijeljenje vremenskog raspona u diskretne segmente. Predloženi algoritam koristi metodu u kojoj su vremenski intervali ravnomjerno raspoređeni.

Na početku svakog vremenskog koraka, označenog kao n , sva bitna mehanička svojstva već su unaprijed poznata, bilo iz početnih uvjeta ili iz prethodnog vremenskog koraka. Na kraju vremenskog koraka, označenog kao $n + 1$, ta se svojstva određuju kroz proces aproksimacije koji pronalazi rješenja jednadžbi gibanja (3.8) i (3.9). Aproksimacija vremenskih derivacija izvodi se izravnom uporabom Eulerove diferencijalne metode prikazane u jednadžbi (4.1).

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{v^{(n+1)} - v^{(n)}}{\Delta t} \quad (4.1)$$

Budući da se analize o kojima se raspravlja odnose na relativno velika prostorna područja protoka, obuhvaćajući scenarije u kojima je prijenos čestica mikroplastike bitan (rijeke, morski zaljevi itd.), a s obzirom da je brzina čestica (v_p) znatno manja od brzine tekućine (v_f) odgovorne za prijenos tih čestica, nužno je konfigurirati numerički algoritam na način koji osigurava njegovu stabilnost kada se radi s prilično velikim vremenskim intervalima (Δt) .

Za rješavanje ovih zahtjeva koristit će se implicitni numerički pristup. U ovom pristupu, veličine na desnoj strani jednadžbi procjenjuju se na kraju vremenskog intervala $(n+1)$. To rezultira sustavom algebarskih jednadžbi. Izravnom zamjenom vremenskih derivacija u njihove odgovarajuće aproksimacije iz jednadžbe (4.1), jednadžba (3.8) u x i jednadžba (3.9) u z smjeru koordinatnog sustava poprimaju aproksimativni oblik prikazan u jednadžbama (4.2) i (4.3).

$$m_p \cdot \frac{v_{p,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}| \quad (4.2)$$

$$m_p \cdot \frac{v_{p,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}| \quad (4.3)$$

Kako bi se uključio utjecaj piknokline (promjena gustoće vode s dubinom) na putanju čestica mikroplastike, gustoća tekućine ρ_f na desnoj strani jednadžbi (4.2) i (4.3), posebno unutar modela sile otpora oblika, definirana je kao funkcija vezana uz vertikalni položaj čestice (z_p). Vrijedno je napomenuti da smjer djelovanja sile otpora oblika ovisi o razlici između komponente brzine fluida i komponente brzine čestice. Na primjer, kada je $v_{p,x} > v_{f,x}$, orijentacija sile otpora oblika suprotna je smjeru gibanja, i obrnuto.

Diskretiziranim oblikom jednadžbi (4.2) i (4.3) uspostavlja se par nelinearnih algebarskih jednadžbi. Kada su dati početni uvjeti ove jednadžbe treba riješiti kroz iterativni proces. Za to se koristi Newtonova metoda koja u svakoj iteraciji precizira pretpostavljeno rješenje na temelju izračunate pogreške ili reziduala. Rezidual za jednadžbu gibanja u x smjeru koordinatnog sustava prema jednadžbi (4.2) daje odgovarajuću jednadžbu:

$$f_x(v_{p,x}, v_{p,z}) = v_{p,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n)} + \frac{\Delta t}{m_p} \left[\frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}| \right] \quad (4.4)$$

Dok je za z smjer prema jednadžbi (4.3) rezidual jednak jednadžbi:

$$f_z(v_{p,x}, v_{p,z}) = v_{p,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n)} + \frac{\Delta t}{m_p} \left[\frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}| \right] \quad (4.5)$$

Kako bismo razlikovali rješenje kroz iteracijske cikluse, uvodimo brojač iteracijskih ciklusa označen slovom k . Ovaj nam pristup omogućuje preciziranje početne pretpostavke rješenja unutar svakog iteracijskog ciklusa. Početna pretpostavka može se izvesti iz rješenja na kraju prethodnog vremenskog koraka, koje se može izraziti kao $(v_p^{(k=0),(n+1)} = v_p^{(n)})$.

Inkrementi korekcije za početnu pretpostavku definirani su tijekom rješavanja prve iteracije kao $\delta v_{p,x}$ i $\delta v_{p,z}$. Ove korekcije se određuju pomoću matrične jednadžbe (5.6) u kojoj matrica koeficijenata J predstavlja Jakobijanu sustava, δ je vektor korekcije za pretpostavljeno rješenje, a vektor desne strane r predstavlja rezidual sustava.

$$\begin{aligned} & \overbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,x}} & \frac{\partial f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,z}} \\ \frac{\partial f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,x}} & \frac{\partial f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,z}} \end{bmatrix}}^J \\ & \underbrace{\begin{Bmatrix} \delta v_{p,x} \\ \delta v_{p,x} \end{Bmatrix}}^{\ddot{a}} = - \underbrace{\begin{Bmatrix} f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)}) \\ f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)}) \end{Bmatrix}}^r \end{aligned} \quad (4.6)$$

Ovaj matrični sustav treba riješiti tijekom svakog iteracijskog ciklusa, a rezultirajući vektor δ prilagođava se na temelju sljedećeg uzorka:

$$\begin{aligned} v_{p,x}^{(n+1),(k+1)} &= v_{p,x}^{(n+1),(k)} + \delta v_{p,x} \\ v_{p,z}^{(n+1),(k+1)} &= v_{p,z}^{(n+1),(k)} + \delta v_{p,z} \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nakon svakog iteracijskog ciklusa, korak se ažurira s k na $k + 1$, a postupak naveden u jednadžbama (4.6) i (4.7) se ponavlja. Ovo se ponavljanje nastavlja sve dok razlika u normama vektora $r^{(k+1)}$ i $r^{(k)}$ unutar iteracijskog ciklusa ne postane manja od unaprijed definirane vrijednosti tolerancije označene kao ε , koja služi kao kriterij konvergencije.

Algoritam računalne implementacije uključuje izračunavanje elemenata Jakobijane J . Ovo izračunavanje zahtijeva simbolički izračun parcijalnih derivacija rezidualnih funkcija iz jednadžbi (4.4) i (4.5) u odnosu na komponente rješenja sustava, $v_{p,x}$ i $v_{p,z}$. Ovaj proces nam omogućuje da definiramo član $J_{1,1}$ prikazan jednadžbom u nastavku:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,x}} &= \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot c_d(v_p, v_f)}{2 \cdot m_p} \cdot (|v_{f,x} - v_{p,x}| + \text{sign}(v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot (v_{f,x} - \\ & v_{p,x})) + \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,x}}}{2 \cdot m_p} \cdot (v_{p,x} - v_{f,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| + 1 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Član $J_{1,2}$ prikazan jednadžbom:

$$\frac{\partial f_x(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,z}} = - \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot (v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,z}}}{2 \cdot m_p} \quad (4.9)$$

Član $J_{2,1}$ prikazan jednadžbom:

$$\frac{\partial f_z(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,x}} = - \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot (v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot |v_{f,z} - v_{p,z}| \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,x}}}{2 \cdot m_p} \quad (4.10)$$

Član $J_{2,2}$ prikazan jednadžbom:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_x(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,z}} = & \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot c_d(v_p, v_f)}{2 \cdot m_p} \cdot (|v_{f,z} - v_{p,z}| + \text{sign}(v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot (v_{f,z} - \\ & v_{p,z})) + \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,z}}}{2 \cdot m_p} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Ovdje se funkcija „*sign*“ koristi za određivanje predznaka argumenta koji predstavlja razliku između brzina lokalnog volumena tekućine i brzine čestice. Budući da je funkcija faktora otpora oblika c_d integralna komponenta sustava prikazano u jednadžbama (4.2) i (4.3), te se oslanja na rješenje sustava, to zahtijeva uvođenje skupa diferencijalnih jednadžbi. Osim ostalih poznatih numeričkih vrijednosti na desnoj strani, elementi Jakobijane J također obuhvaćaju parcijalne derivacije funkcije c_d s obzirom na rješenja sustava, odnosno $v_{p,x}$ i $v_{p,z}$. Generaliziranoj jednadžbi (3.15) funkcije faktora otpora oblika, parcijalna derivacija u vezi s komponentom brzine $v_{p,x}$ prikazana je u jednadžbi (4.12) [4].

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,x}} = & \frac{12 \cdot \mu \cdot v_{d,x} \left(A \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^B + 1 \right)}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot v_r^{3/2}} - \frac{12 \cdot A \cdot B \cdot v_{d,x} \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{B-1}}{v_r} - \\ & \frac{C \cdot D \cdot \mu \cdot v_{d,x}}{2 \cdot d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \left(\frac{D \cdot \mu}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}} + 1 \right)^2 \cdot v_r^{3/2}} \end{aligned} \quad (4.12)$$

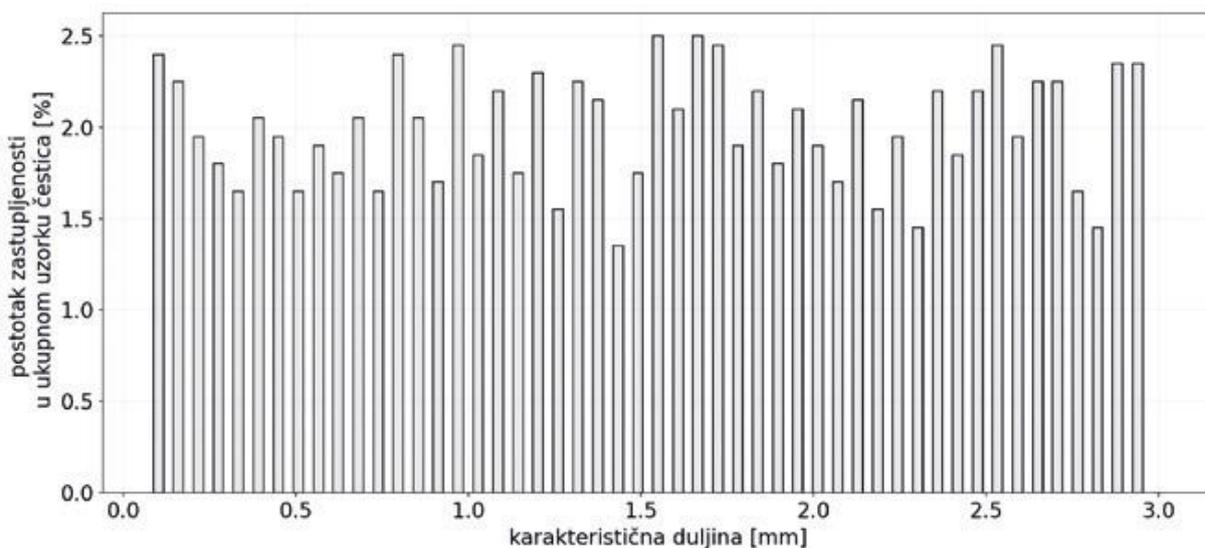
Te, veza s komponentom $v_{p,z}$ dana je u jednadžbi:

$$\frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,z}} = \frac{12 \cdot \mu \cdot v_{d,x} \left(A \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^B + 1 \right)}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot v_r^{3/2}} - \frac{12 \cdot A \cdot B \cdot v_{d,z} \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{B-1}}{v_r} - \frac{C \cdot D \cdot \mu \cdot v_{d,z}}{2 \cdot d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \left(\frac{D \cdot \mu}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}} + 1 \right)^2 \cdot v_r^{3/2}} \quad (4.13)$$

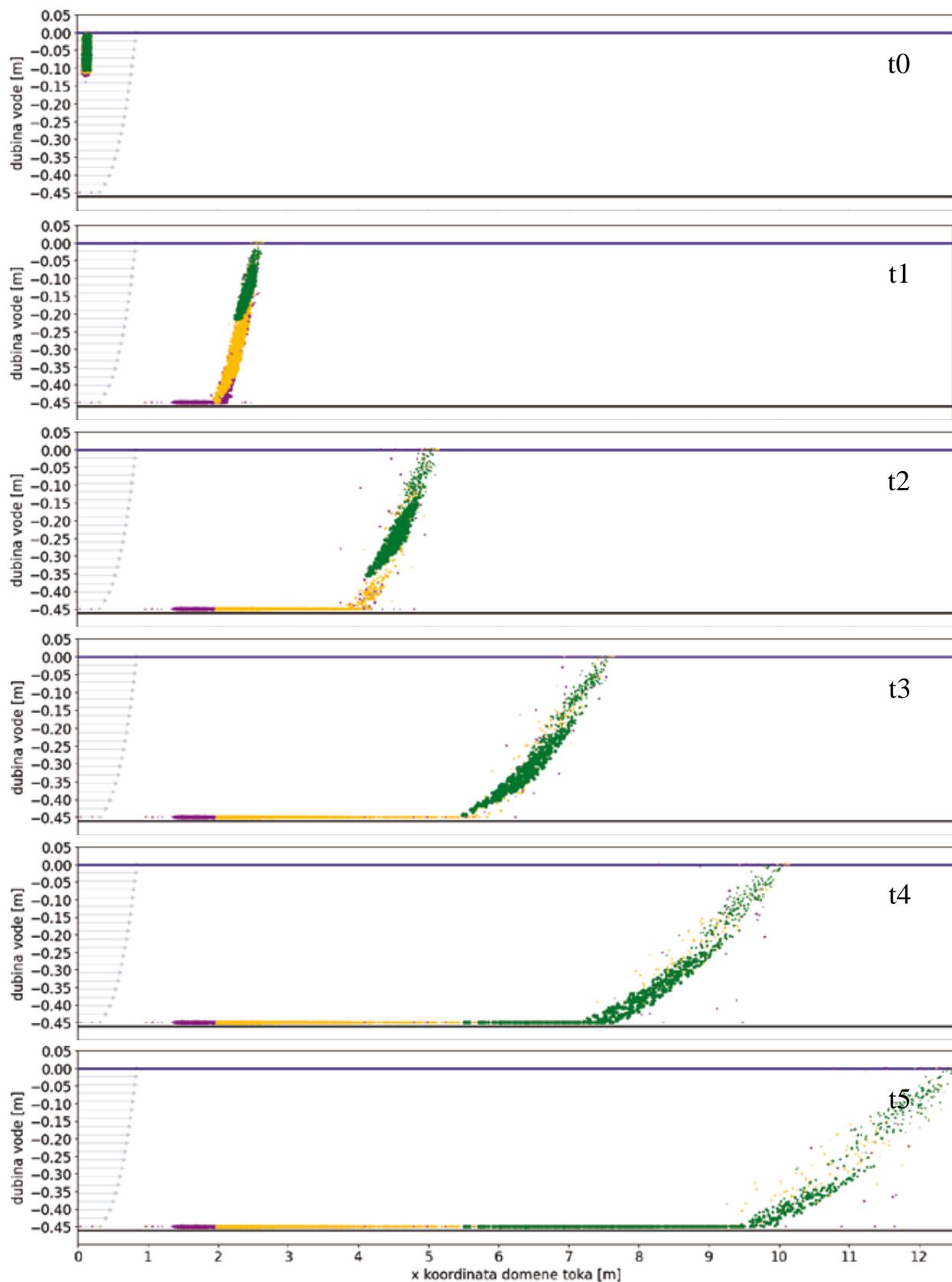
gdje je:

$$v_r = (v_{f,x} - v_{p,x})^2 + (v_{f,z} - v_{p,z})^2$$

Prikazani numerički model bio je baza za uspostavu koda unutar Pythona. Model je definiran za vremensku domenu od 180 sekundi i polje brzine zadano je kao nehomogeno u laminarnom toku tekućine. Numerički primjer uključuje 2000 čestica mikroplastike koje su klasificirane u tri kategorije na temelju njihovog indeksa sferičnosti: 3D (ljubičasta boja), 2D (žuta boja) i 1D uzorci (zeleno boja). Gustoća čestica mikroplastike zadana je srednjom vrijednošću od 1035,0kg/m³, a gustoća vode iznosi 1000kg/m³. Veličina čestica bila je u rasponu od 0,1 do 3mm prema ujednačenoj statističkoj distribuciji (slika 4.1.). Rezultati modela daju niz slika koji prikazuje položaje tih čestica u intervalima od 25 sekundi (slika 4.2.). Iako je model razmatrao različite oblike čestica, na slikama su sve čestice prikazane kao krugovi kako bi se održao odnos relativne veličine, ne predstavljajući njihovu apsolutnu veličinu unutar domene protoka.



Slika 4.1. Distribucija čestica mikroplastike korištena u Python numeričkom modelu [4]



Slika 4.2. Rezultati dobiveni Python numeričkim modelom, vremenski razmaci $t=25s$ [4]

Rezultati ovog modela biti će uspoređen sa numeričim modelom unutar OpenFOAM programa.

4.2 OpenFOAM numerički model

4.2.1 OpenFOAM

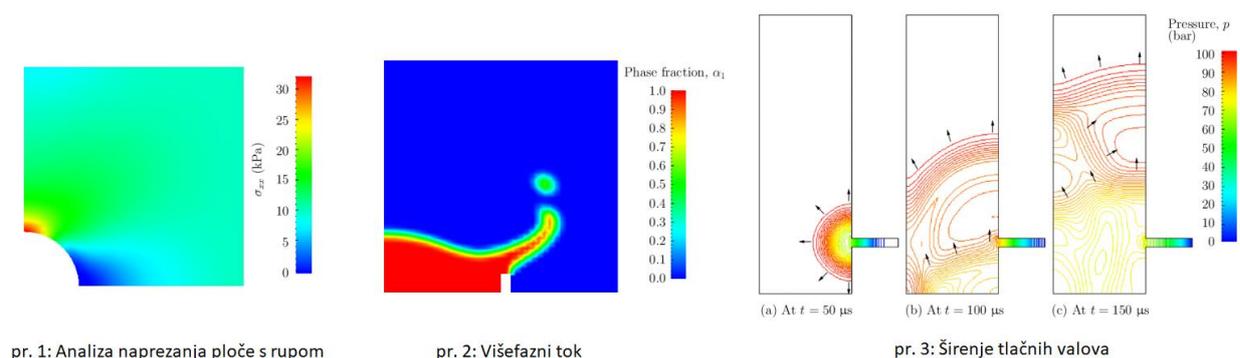
OpenFOAM, što je kratica za Open Field Operation and Manipulation, softverski je paket otvorenog koda za računsku dinamiku fluida (CFD). To je široko korišten alat za simulaciju i rješavanje složenih problema poput protoka fluida, prijenosom topline i analize naprežanja (slika 4.3.). OpenFOAM je razvio OpenCFD i pruža opsežan okvir za modeliranje i simulaciju širokog spektra problema dinamike fluida.

Jedno od značajnih svojstava OpenFOAMa je njegova opsežna biblioteka integriranih rješavača. Ovi alati za rješavanje su unaprijed izgrađeni numerički algoritmi i alati za simulaciju koji se mogu koristiti za rješavanje različitih problema protoka fluida i prijenosa topline. Evo nekih ključnih integriranih rješavača unutar OpenFOAMa:

- Rješavači za nestlačivo strujanje (*engl. Incompressible Flow Solvers*): OpenFOAM uključuje nekoliko alata za rješavanje nestišljivih strujanja, kao što je popularni *icoFoam* za laminarni protok i *pisoFoam* za tranzijentne, turbulentne simulacije protoka. Ovi se rješavači koriste za modeliranje tokova gdje se gustoća fluida značajno ne mijenja.
- Rješivači kompresibilnog protoka (*engl. Compressible Flow Solvers*): za probleme kompresibilnog protoka, OpenFOAM nudi rješenja kao što su *rhoCentralFoam* i *rhoSimpleFoam*. Ovi rješavači su prikladni za modeliranje tokova gdje se gustoća značajno mijenja.
- Rješavači prijenosa topline (*engl. Heat Transfer Solvers*): OpenFOAM omogućuje simulaciju problema s prijenosom topline pomoću rješavača kao što su *buoyantPimpleFoam* za prirodnu konvekciju i *chtMultiRegionFoam* za simulacije prijenosa topline u više regija.
- Rješavači za višefazni tok (*engl. Multiphase Flow Solvers*): OpenFOAM ima alate za modeliranje višefaznih tokova kao što je *interFoam* za tokove na međufazi i *multiphaseInterFoam* za tokove s više faza.
- Akustični alati za rješavanje (*engl. Acoustic Solvers*): akustičke simulacije mogu se provesti korištenjem alata za rješavanje problema kao što su *sonicFoam* i *rhoPimpleFoam* za modeliranje širenja kompresibilne buke.
- Rješavači kemijskih reakcija (*engl. Chemical Reaction Solver*): za reakcijske tokove i simulacije izgaranja, OpenFOAM nudi rješavače kao što su *reactingFoam* i *reactingMultiphaseEulerFoam*.

- Rješavači za praćenje čestica (*engl. Particle Tracking Solvers*): za modeliranje tokova i sedimentacije opterećenih česticama, OpenFOAM uključuje rješavače kao što su *solidParticleFoam* i *lagrangian*. Lagrangian rješavač u OpenFOAMu dizajniran je za simulaciju kretanja i praćenja diskretnih čestica unutar protoka tekućine. Koristi se za širok raspon primjena uključujući simulaciju ponašanja čestica, kapljica ili mjehurića u različitim fluidnim sustavima. Rješavač izračunava putanje pojedinačnih čestica dok ih prenosi okolni tok uzimajući u obzir sile kao što su otpor, gravitacija i interakcije među česticama. Lagrangian može biti osobito koristan za proučavanje fenomena kao što su sedimentacija, raspršivanje aerosola i protok čestica u okolišu i industriji na što je ovaj rad i fokusiran.
- Mreža i predobrada (*engl. Meshing and Preprocessing*): OpenFOAM je također opremljen raznim pomoćnim programima za generiranje mreže i pretprocesiranje radi pripreme geometrije za simulaciju.

Priroda otvorenog koda i modularnost OpenFOAMa čine ga vrlo fleksibilnim i prilagodljivim. Korisnici mogu proširiti i modificirati softver kako bi odgovarao njihovim specifičnim potrebama i integrirati vlastite rješavače ili prilagoditi postojeće. Tako će se za ovaj rad, koristiti rješavač *MPPICInterFoam* koji je kombinacija *InterFoam* i *MPPIC* rješavač. Dodatno, velika i aktivna zajednica korisnika doprinosi razvoju i poboljšanju OpenFOAMa, čineći ga moćnim alatom za širok raspon simulacija dinamike fluida i prijenosa topline. [9]



Slika 4.3. Primjeri uporabe OpenFOAMa [9]

4.2.2 InterFoam rješavač

Rješavač *interFoam* u OpenFOAMu dizajniran je za simulaciju ponašanja dviju nestlačivih, izotermnih tekućina koje se ne miješaju. Koristi se pristupom volumena tekućine (VOF) za računanje interakcije između dvije tekućine. Ako se slijedi Eulerov pristup volumena tekućine, može se uzeti u obzir kontrolni volumen djelomično ispunjen s dvije tekućine gdje su volumenski udjeli tekućina koje zauzimaju ćeliju označeni kao α i dani jednadžbom (4.14). Nadalje, koristi se model homogenog protoka, koji pretpostavlja prosječnu brzinu i tlak ćelije i pretpostavlja se da se tekućine mogu tretirati kao nestlačive [10].

$$\alpha_i = \int_v \frac{dV_i}{V}, \quad i = 1, 2 \quad (4.14)$$

Jednadžba očuvanja mase dana je kao:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v_f) = 0 \quad (4.15)$$

gdje je gustoća fluida (koja je mješavina faza koje se međusobno ne miješaju) izračunava se kao:

$$\rho = \alpha_1 \rho_1 + \alpha_2 \rho_2 \quad (4.16)$$

Rezultat kombiniranja jednadžbi (4.14) i (4.15) daje jednadžbu udjela faze kao:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha v_f) = 0 \quad (4.17)$$

Gornje jednadžbe zajedno s momentnom jednadžbom mogu se koristiti za dobivanje udjela faze, polja brzine i tlaka. Momentna jednadžba dana je kao:

$$\frac{\partial(\rho v_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha v_f \times v_f) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla v_f + \nabla v_f^T)) + \rho g + f_\sigma \quad (4.18)$$

gdje je f_σ međufazna napetost koja se temelji na modelu kontinuirane površinske sile i računa se jednadžbom (4.19):

$$f_{\sigma} = \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (4.19)$$

gdje je:

σ - međufazna napetost [N/m]

$\kappa = \nabla \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right)$ - zakrivljenost međupovršine [1/m]

4.2.3 MPPICFoam rješavač

Višefazna metoda čestica u ćeliji (*engl. Multiphase particle-in-cell method*) MP-PIC je numerička metoda za modeliranje interakcija čestica-fluid i čestica-čestica u proračunima računalne dinamike fluida. Metoda MP-PIC postiže veću stabilnost od svog prethodnika čestica u ćeliji (*engl. particle-in-cell*) istovremeno tretirajući čvrste čestice kao računске čestice i kao kontinuum. U MP-PIC pristupu, svojstva čestica preslikavaju se iz Lagrangeovih koordinata u Eulerovu mrežu korištenjem funkcija interpolacije. Nakon procjene derivacije kontinuuma, svojstva čestica se mapiraju natrag na pojedinačne čestice. MP-PIC metoda opisana je jednadžbama, interpolacijskim operatorima i modelom naprezanja čestica danim u nastavku [11].

Nestlačiva Navier-Stokesova jednadžba za laminarni tok:

$$\frac{\partial \alpha v_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha v_f \times v_f) - \nabla \cdot \alpha \tau = -\frac{\nabla p}{\rho} + \alpha g - \frac{F}{\rho} \quad (4.20)$$

gdje je:

α - volumni udio tekućine [1]

v_f - brzina tekućine [m/s]

ρ - gustoća tekućine [kg/m³]

∇p - gradijent tlaka [N/m²]

g - specifična gravitacija [m²/s]

F - međufazni prijenos momenta [N/m³]

τ , tenzor naprezanja:

$$\tau = \frac{\mu}{\rho} (\nabla v_f + (\nabla v_f)^T) + \frac{2\mu}{3\rho} (\nabla \cdot v_f) \delta \quad (4.21)$$

gdje je:

τ – tenzor naprezanja [N/ m²]

μ - dinamička viskoznost tekućine [kg/m·s]

Jednadžba kontinuiteta:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha v_f) = 0 \quad (4.22)$$

Međufazni član prijenosa momenta F obično kombinacija uzgona i otpora čestice unutar računске ćelije definiran jednadžbom:

$$F = \sum_p f = \frac{1}{V} \sum_p (f_{drag} - V_p \nabla p_i) = F_{drag} - \frac{1}{V} \sum_p V_p \nabla p_i \quad (4.23)$$

gdje je:

V - volumen računске ćelije [m³]

V_p - volumen čestice [m³]

∇p_i - gradijent tlaka koji djeluje na česticu [Pa]

F - međufazni član prijenosa momenta čestica [N]

f_{drag} - sila otpora pojedine čestice [N]

Uzmemo li u obzir da je gravitacijsko polje uniformno i koristimo $\frac{1}{V} \sum_p \rho V_p g = (1 - \alpha) \rho g$, jednadžba (4.20) poprima sljedeći oblik:

$$\frac{\partial \alpha v_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha v_f \times v_f) - \nabla \cdot \alpha \tau = -\frac{\nabla p}{\rho} + g - \frac{F_{drag}}{\alpha \rho} - \frac{1}{V} \sum_p V_p \left[\frac{Dv_f}{Dt} \right]_p \quad (4.24)$$

$$F_{drag} = \frac{1}{(1 - \alpha)V} \sum_p V_p \beta (v_p - v_f|_p) \quad (4.25)$$

gdje je:

v_p - brzina čestice [m/s]

$v_f|_p$ - brzina tekućine interpolirana za poziciju čestice [m/s]

β je definirana prema Ergun-Wen-Yu modelu otpora, a c_D unutar navedenog modela ovisi o vrsti simulacije [12]. Za slučaj simulacije mikroplastičnih čestica koristi se model *nonSphereDrag*, preko kojeg se računa c_D , a dan je u prijašnjem poglavlju i koristi se jednačba (3.15).

4.2.4 MPPICInterFoam rješavač

MPPICInterFoam rješavač kombinacija je *InterFoam* i *MPPICFoam* rješavač, tj. predstavlja *interFoam* rješavač za dvije nestlačive, izotermne tekućine (koje se ne miješaju) koristeći VOF za praćenje granica između faza i *MPPICFoam* tranzijentni rješavač za spojeni transport kinematičkog oblaka čestica uključujući učinak volumnog udjela čestica na kontinuiranu fazu.

5. NUMERIČKA ANALIZA

5.1 Parametri analize

Analiza se fokusira na određenu prostornu domenu unutar laboratorijskog okruženja u svrhu promatranja kretanja i sedimentacije čestica mikroplastike. Parametri čestica i protoka tekućine pažljivo su odabrani kako bi se olakšala sedimentacija pojedinačnih uzoraka čestica. Izdvajanjem sedimentiranih čestica i ponavljanjem eksperimenta bez tih čestica možemo promatrati njihovu interakciju te istu kvantificirati. Kako bi se osigurali kontrolirani eksperimentalni uvjeti, svi karakteristični parametri čestica mikroplastike, uključujući veličinu (d_p) i oblik, precizno su definirani. U tu svrhu korišten je visokoprecizni 3D printer (slika 5.1.) koji je proizveo ispitne uzorke čestica različitih dominantnih dimenzija, kategoriziranih u 3D, 2D i 1D uzorke na temelju njihovog oblika. Te su kategorije usklađene s indeksom sferičnosti (ψ), što omogućuje usporednu analizu između rezultata modela i eksperimentalnih rezultata.



Slika 5.1. 3D printer kojim će se izvršiti priprema uzoraka čestica mikroplastike (1D, 2D i 3D čestice – desna slika, bijeli dio su čestice, plavi dio je baza koje se ispire) [4]

Izbor prostorne domene toka odgovara dimenzijama eksperimentalnog kanala, vidljivog na slici 5.2., koji ima radni dio duljine 12,5 m, širine 30,9 cm i visine 45,0 cm. Polje brzine protoka određeno je visinom poprečnog presjeka i temelji se na eksponencijalnom profilu brzine.



Slika 5.2. Eksperimentalni žlijeb sa hidrotehničkog laboratorija Građevinskog fakulteta u Rijeci unutar kojeg će eksperiment biti proveden (HM 162 Experimental flume) [4]

5.2 Izrada domene

Računalna domena strukturirana je u skladu s karakteristikama laboratorijskog kanala „HM 162 Experimental flume“, dimenzija 309x450x12500mm. Za točan prikaz scenarija otvorenog laboratorijskog kanala, računaska domena proteže se do visine od 800mm, gdje je visinski dio od 450mm do 800mm diskretiziran zbog pokrivenosti zraka osiguravajući kompatibilnost s atmosferskim uvjetima. Konstrukcija mreže implementirana je kroz kod sadržan u konfiguracijskoj datoteci *blockMeshDict*. Ovaj kod se izvodi pomoću programa *blockMesh* unutar okvira OpenFOAMa koji omogućava stvaranje strukturirane heksaedarske mreže (slika 5.3.). Ovaj princip generiranja mreže pridržava se načela metode konačnog volumena, numeričke metode koja se koristi u računskoj dinamici fluida za diskretizaciju računске domene. Rezultirajuća mreža služi kao temelj za naredne simulacije, pružajući rafinirani prikaz laboratorijskog kanala.

```

scale 1;

vertices
(
  (0 0 0)
  (12.5 0 0)
  (12.5 0 0.309)
  (0 0 0.309)
  (0 0.45 0)
  (12.5 0.45 0)
  (12.5 0.45 0.309)
  (0 0.45 0.309)
  (0 0.8 0)
  (12.5 0.8 0)
  (12.5 0.8 0.309)
  (0 0.8 0.309)
);
blocks
(
  hex (0 3 2 1 4 7 6 5) (16 600 36) simpleGrading (1 1 1) /// (z, x ,y)
  hex (4 7 6 5 8 11 10 9) (16 600 28) simpleGrading (1 1 1)
);
edges
(
);
boundary
(
  inlet
  {
    type patch;
    faces
    (
      (0 3 7 4)
    );
  }
  outlet
  {
    type patch;
    faces
    (
      (1 2 6 5)
      (5 6 10 9)
      (4 7 11 8)
    );
  }
  walls
  {
    type wall;
    faces
    (
      (3 2 6 7)
      (7 6 10 11)
      (0 1 5 4)
      (4 5 9 8)
      (0 3 2 1)
    );
  }
}

```

```

atmosphere
{
  type patch;
  faces
  (
    (8 11 10 9)
  );
}
);

mergePatchPairs
(
);

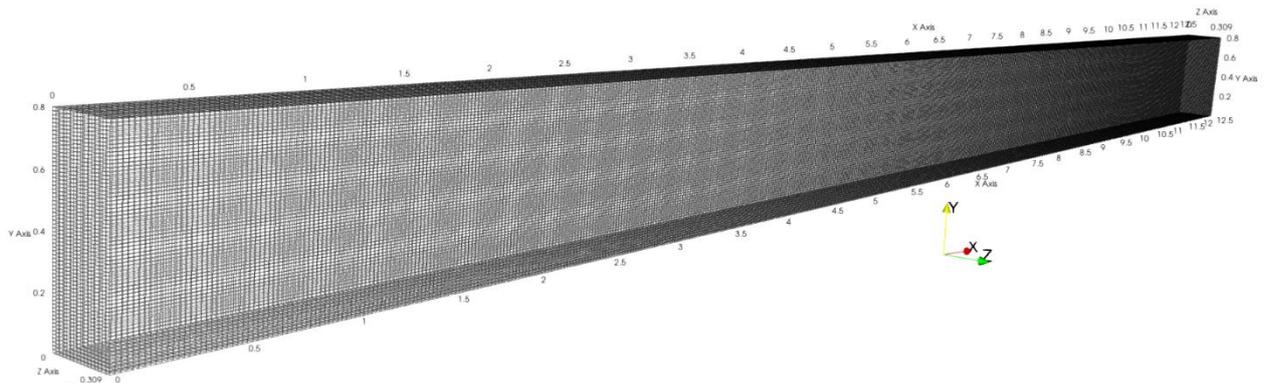
```

Mesh Information

boundingBox: (0 0 0) (12.5 0.8 0.309)
nPoints: 664105
nCells: 614400
nFaces: 1892224
nInternalFaces: 1794176

Patches

patch 0 (start: 1794176 size: 576) name: inlet
patch 1 (start: 1794752 size: 1472) name: outlet
patch 2 (start: 1796224 size: 86400) name: walls
patch 3 (start: 1882624 size: 9600) name: atmosphere

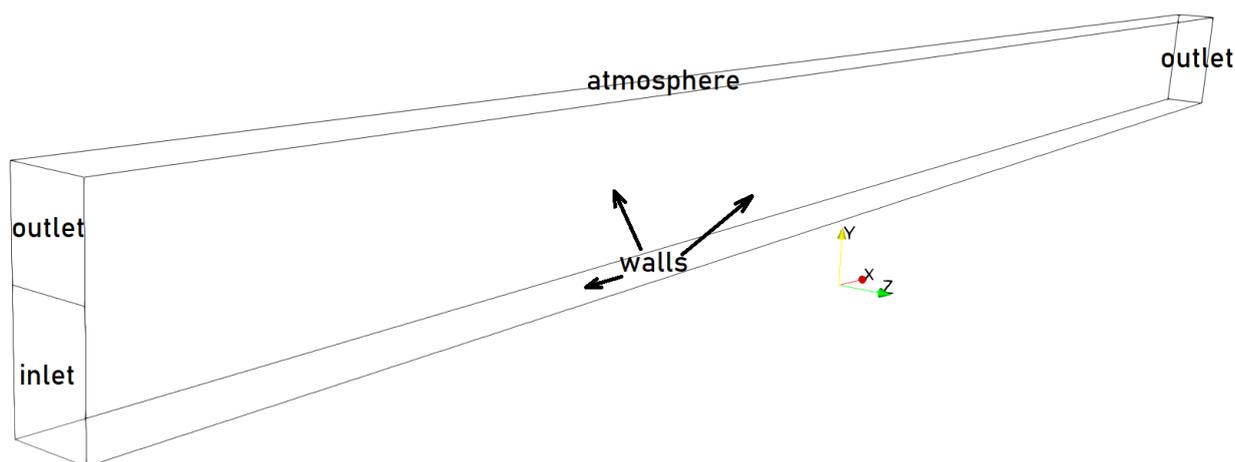


Slika 5.3. Domena toka

5.3 Rubni uvjeti

Kako bi mogli predočiti rubne uvjete, na slici 5.4. prikazana je domena uz označena područja gdje su rubni uvjeti zadani. OpenFOAM nudi širok raspon uvjeta, grupiranih prema [9]:

- Ograničenima: geometrijska ograničenja, npr. za 2-D, osnosimetrične itd. (procesorska, ravnina simetrije, klin)
- Općenito: dostupno za sve vrste lica i polja (Kodirana fiksna vrijednost, uniformna fiksna vrijednost, nulti gradijent)
- Ulazu, izlazu, zidu: uvjeti (Uvjeti brzine, tlaka, temperature, turbulencije)
- Povezanosti: povezani uvjeti (Sučelje cikličke proizvoljne mreže (AMI), ciklički, ventilator)



Slika 5.4. Imenovana lica za rubne uvjete

Prethodno provedenim mjerenjima utvrđeno je da se profil brzine unutar eksperimentalnog kanala može prikazati modelom:

$$v_{f,x} = v_{f,max} \cdot \left(\frac{z+h}{h}\right)^\alpha \quad (5.1)$$

gdje je:

$v_{f,x}$ - brzina toka na određenoj visini [m/s]

$v_{f,max}$ - brzina horizontalnog toka na površini vode [m/s]

z - visinska koordinata mjerena od dna žlijeba [m]

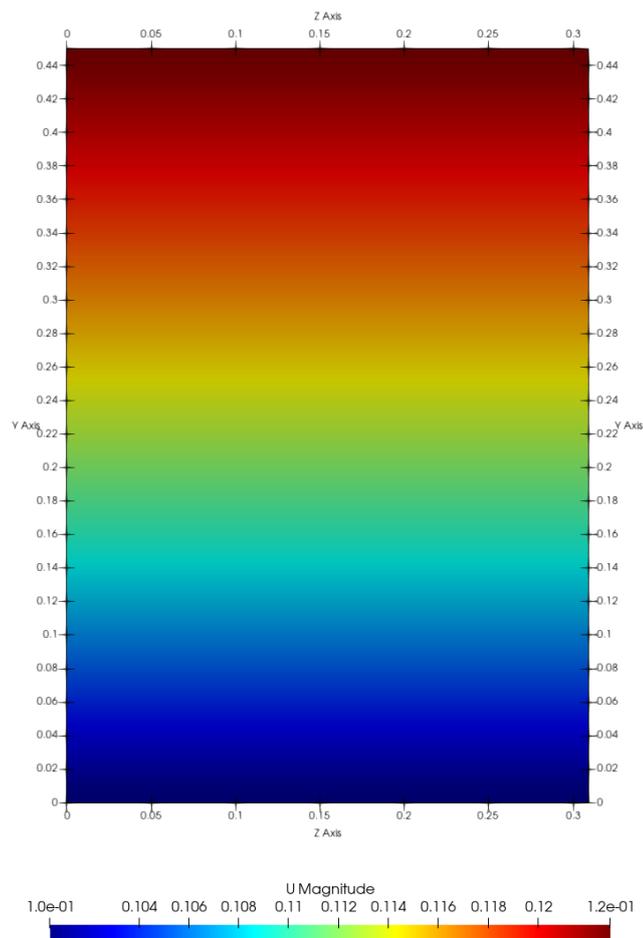
α - parametar za definiranje geometrije profila

Za eksperimentalni žlijeb ovih dimenzija, usvojeno je $\alpha = 0,3$. Brzina horizontalnog toka na površini vode iznosi $0,1 \text{ m/s}$. Uzevši sve to u obzir može se konstruirati profil brzine ovisan o visini koji je dan u excel tablici (*0/Uprofile.csv*) koju OpenFOAM čita i postavlja na ulazno lice.

U nastavku je vidljiva tablica 5.1. u kojoj je prikazana ovisnost visine profila i ulazne brzine prema modelu (5.1). Slika 5.5. prikazuje ulazno lice i profil brzine vode na ulazu.

Tablica 5.1. Odnos između visine profila i ulazne brzine

Visina [m]	Brzina [m/s]
0	0,1
0,05	0,103
0,1	0,106
0,15	0,109
0,2	0,112
0,25	0,114
0,3	0,117
0,35	0,119
0,4	0,121
0,45	0,123



Slika 5.5. Profil brzine na ulaznom licu

Rubni uvjet brzine prikazan je u nastavku:

```

dimensions      [0 1 -1 0 0 0 0];

internalField   uniform (0 0 0);

boundaryField
{
    walls
    {
        type      fixedValue;
        type      uniform (0 0 0);
    }

    inlet
    {
        type      fixedProfile;
        profile    csvFile;

        profileCoeffs
        {
            nHeaderLine      0;
            refColumn         0;
            componentColumns  (1 2 3);
        }
    }
}

```

```

        separator          ", ";
        mergeSeparators    no;
        file                "0/Uprofile.csv";
        outOfBounds        clamp;
        interpolationScheme  linear;
    }
    direction              (0 1 0); // smjer promjene brzine
    origin                  0;
}

outlet
{
    type                    zeroGradient;
    type                    uniform (0 0 0);
}

atmosphere
{
    type                    pressureInletOutletVelocity;
    value                    uniform (0 0 0);
}
}

```

Početni tlak modela zadan je sljedećim rubnim uvjetima:

```

dimensions                [ 1 -1 -2 0 0 0 0 ];
internalField              uniform 0;
boundaryField
{
    inlet
    {
        type                fixedFluxPressure;
        value                uniform 0;
    }

    outlet
    {
        type                fixedFluxPressure;
        value                uniform 0;
    }

    atmosphere
    {
        type                totalPressure;
        p0                  uniform 0;
    }

    walls
    {
        type                fixedFluxPressure;
        value                uniform 0;
    }
}
}

```

Unutar *constant/transportProperties* nalaze se vrijednosti *nu*, *rho*, *transportModel* i *sigma*. *Nu* [m^2/s] predstavlja kinematsku viskoznost fluida, *rho* [kg/m^3] gustoću fluida, *sigma* [N/m] je parametar kojim se definira površinska napetost između specifičnih faza. *TransportModel* postavljen je na *Newtonian*, gdje se *Newtonian* odnosi na pretpostavku da tekućina slijedi Newtonov zakon viskoznosti.

```
phases          (water air);

water
{
    transportModel  Newtonian;
    nu              1e-06;
    rho             1000;
}
air
{
    transportModel  Newtonian;
    nu              1.48e-05;
    rho             1;
}

sigma           0.07;
```

Unutar *0/alpha.water*, nalaze se rubni uvjeti koji su ključni za definiranje kako se volumni udio vode ponaša u različitim regijama računске domene, utječući na simulaciju dvofaznog toka. Na ulazu postavljen je rubni uvjet kojim se definira da je ondje vodena faza potpuno prisutna. *zeroGradient* rubnim uvjetom na izlazu impliciramo da se volumni udio može slobodno prilagoditi na temelju internih izračuna simulacije, dok na zidovima sugerira da volumni udio vode ne prodiere kroz zidove. Na granici atmosfere, volumni udio vode može ući ili izaći iz domene, dok se vrijednostima postavljenim na 0 ukazuje da volumni udio vode na toj granici nije prisutan.

```
dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];

internalField   uniform 1;

boundaryField
{
    inlet
    {
        type      fixedValue;
        value     uniform 1;
    }
}
```

```

outlet
{
    type            zeroGradient;
}
walls
{
    type            zeroGradient;
}
atmosphere
{
    type            inletOutlet;
    inletValue      uniform 0;
    value           uniform 0;
}
}

```

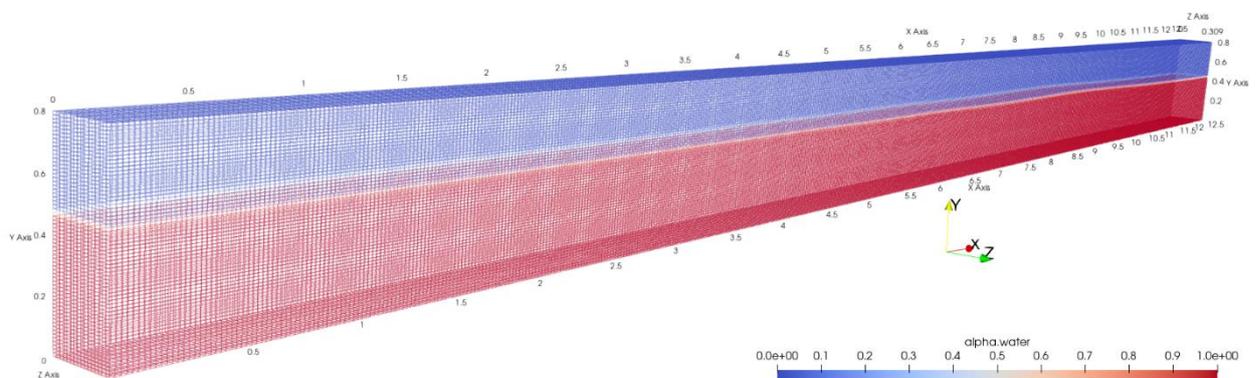
Posljednji rubni uvjet nalazi se u dokumentu *setFieldsDict* unutar *system* foldera, kojim se unutar domene postavlja početna visina vode (slika 5.6.) komandom *setFields*:

```

defaultFieldValues
(
    volScalarFieldValue alpha.water 0
);

regions
(
    boxToCell
    {
        box (0 0 0) (12.5 0.45 0.309);
        fieldValues
        (
            volScalarFieldValue alpha.water 1
        );
    }
);

```



Slika 5.6. Početna razina vode

5.4 Turbulentni model

Odabir odgovarajućeg turbulentnog modela simulacije zahtjeva razmatranje karakteristika toka, potrebne preciznosti i raspoložive računalne mogućnosti. Pouzdana i računalno ekonomična opcija za uobičajene industrijske primjene često je kEpsilon model. Reynolds-averaged Navier Stokes (RANS) modeli, kao što su kOmega i SST, također su prikladni za širok raspon protoka. Large Eddy Simulation (LES) ili Direct Numerical Simulation (DNS) računalno su zahtjevnije metode koje mogu biti korisne za složenije tokove sa značajnom nestabilnošću. No, osim navedenih razmatranja oko složenosti modela, točnosti simulacije i dostupnosti računanih resursa, validacija prema eksperimentalnim podacima i razumijevanje fizike protoka ključni su za odabir modela.

U radu će se napraviti usporedba tri modela: Reynolds Averaged Simulation (RAS) kOmega i kEpsilon, te laminarni model. Razlika ovih modela je u tome što laminarni model, ne uzima u obzir turbulencije, dok se kOmega i kEpsilon razlikuju po tome kako modeliraju turbulentnu viskoznost.

5.4.1 Reynolds Averaged Simulaton (RAS)

Model pogodan za 1D,2D i 3D simulacije stacionarnog ili tranzijentnog toka [13].

Reynoldsova dekompozicija brzine na njenu srednju vrijednost i fluktuirajuće utjecaje ima oblik:

$$v(x, t) = \bar{v}(x, t) + v'(x, t) \quad (5.2)$$

gdje je srednja vrijednost fluktuirajuće komponente definirana kao nula: $\bar{v}' = 0$

Primijenjeno na Navier-Stokesove jednadžbe, ovo dovodi do jednadžbi (5.3) i (5.4) za srednju brzinu i tlak:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \times \bar{v}) = g + \nabla \cdot (\overline{\tau}) - \nabla \cdot (\rho R) \quad (5.4)$$

Gdje je $\bar{\tau}$ prosječni tenzor naprezanja za Newtonske tekućine dan kao:

$$\bar{\tau} = -\left(p + \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \bar{v}\right)I + \mu(\nabla\bar{v} + (\nabla\bar{v})^T) \quad (5.5)$$

Korištenjem odnosa:

$$\nabla \cdot \bar{v} = tr(\nabla\bar{v}) = tr((\nabla\bar{v})^T) \quad (5.6)$$

Tenzor napona postaje:

$$\bar{\tau} = -pI + \mu\left[\nabla\bar{v} + (\nabla\bar{v})^T - \frac{2}{3}tr((\nabla\bar{v})^T)I\right] = -pI + \mu[\nabla\bar{v} + dev2((\nabla\bar{v})^T)] \quad (5.7)$$

gdje je $dev2$ operator definiran kao: $dev2(\phi) = \phi - \frac{2}{3}tr(\phi)I$

R , je Reynoldsov tenzor naprezanja:

$$R = \overline{v' \times v'} \quad (5.8)$$

Reynoldsov tenzor naprezanja dalje se dijeli na izotropne i devijatorne anizotropne utjecaje:

$$R = \overline{v' \times v'} = \underbrace{\frac{2}{3}kI}_{izotropni} + \underbrace{\overline{v' \times v'} - \frac{2}{3}kI}_{devijatorski} \quad (5.9)$$

Samo anizotropni utjecaj Reynoldsovog tenzora naprezanja prenosi moment, pri čemu se izotropni utjecaj može dodati srednjem tlaku, što dovodi do punog oblika (5.10):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{v}) + \nabla \cdot (\rho\bar{v} \times \bar{v}) = g - \nabla\bar{p}' + \nabla \cdot (\mu\overline{\nabla v}) + \nabla \cdot (\mu dev2((\nabla\bar{v})^T)) - \nabla \cdot (\rho R_{dev}) \quad (5.10)$$

gdje je:

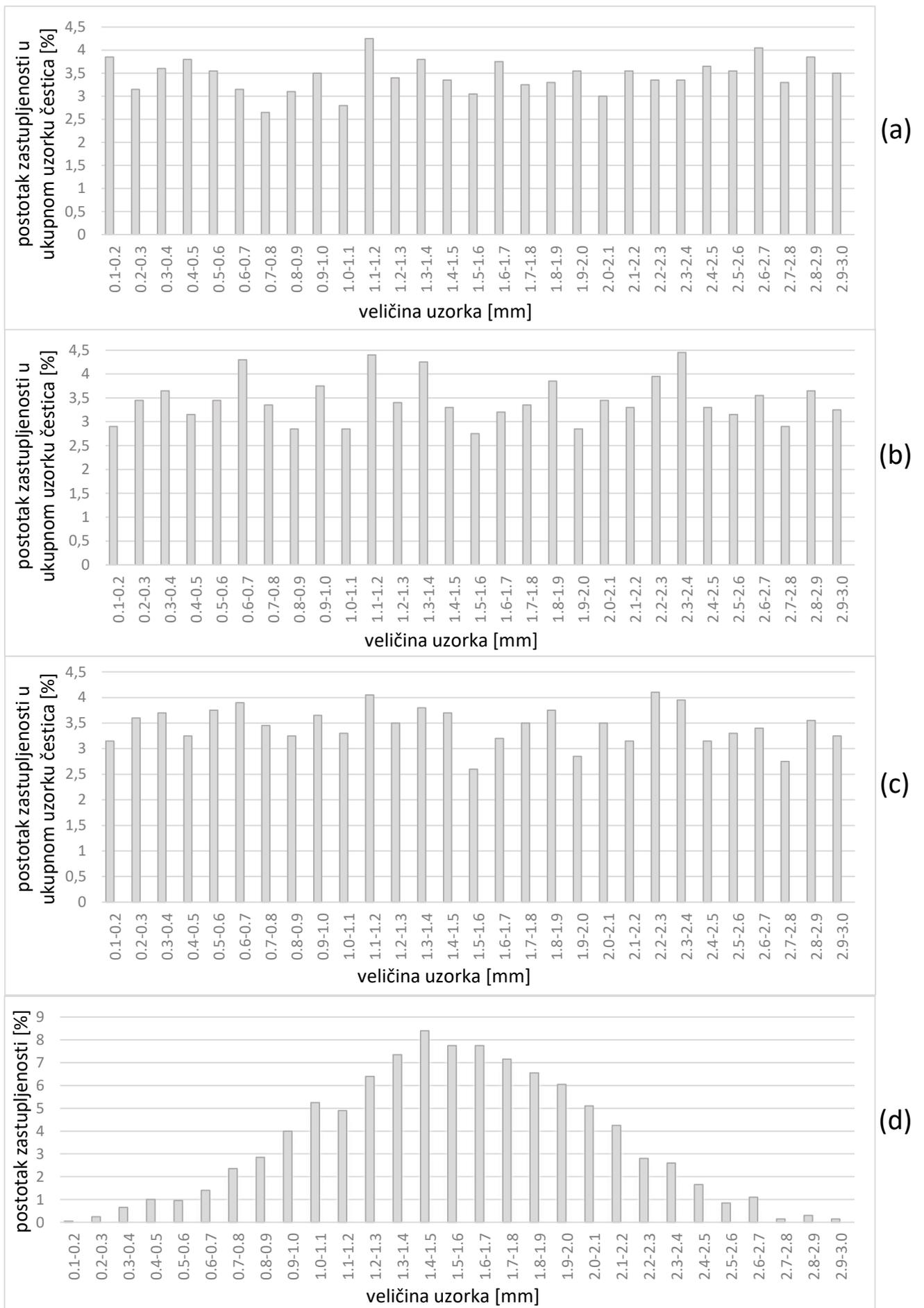
$$R_{dev} = \overline{v' \times v'} - \frac{2}{3}kI$$

$$\bar{p}' = \bar{p} + \frac{2}{3}\rho k$$

5.5 Modeliranje veličine čestica i injekcija

Potrebna je odgovarajuća definicija svih karakterističnih svojstava čestica mikroplastike kako bi se zadovoljio zahtjev eksperimentalnog postupka za kontroliranim uvjetima. Kao što je prije navedeno karakteristična veličina čestica zadana je donjom granicom od 0,1mm i gornjom granicom od 3mm. Također, možemo razlikovati tri kategorije ili tri indeksa sferičnosti čestica: čestice mikroplastike s jednom - 1D ($\psi = 0.05$), dvije - 2D ($\psi = 0.5$) ili tri dominantne dimenzije - 3D ($\psi = 1$). Kako bi definirali veličine čestica, testirano je više razdioba koje OpenFOAM pruža kojim bi adekvatno opisali model. Specifična gustoća čestica dana je srednjom vrijednošću od 1035 kg/m^3 i ukupno je zadano 2000 čestica mikroplastike za svaki indeks sferičnosti.

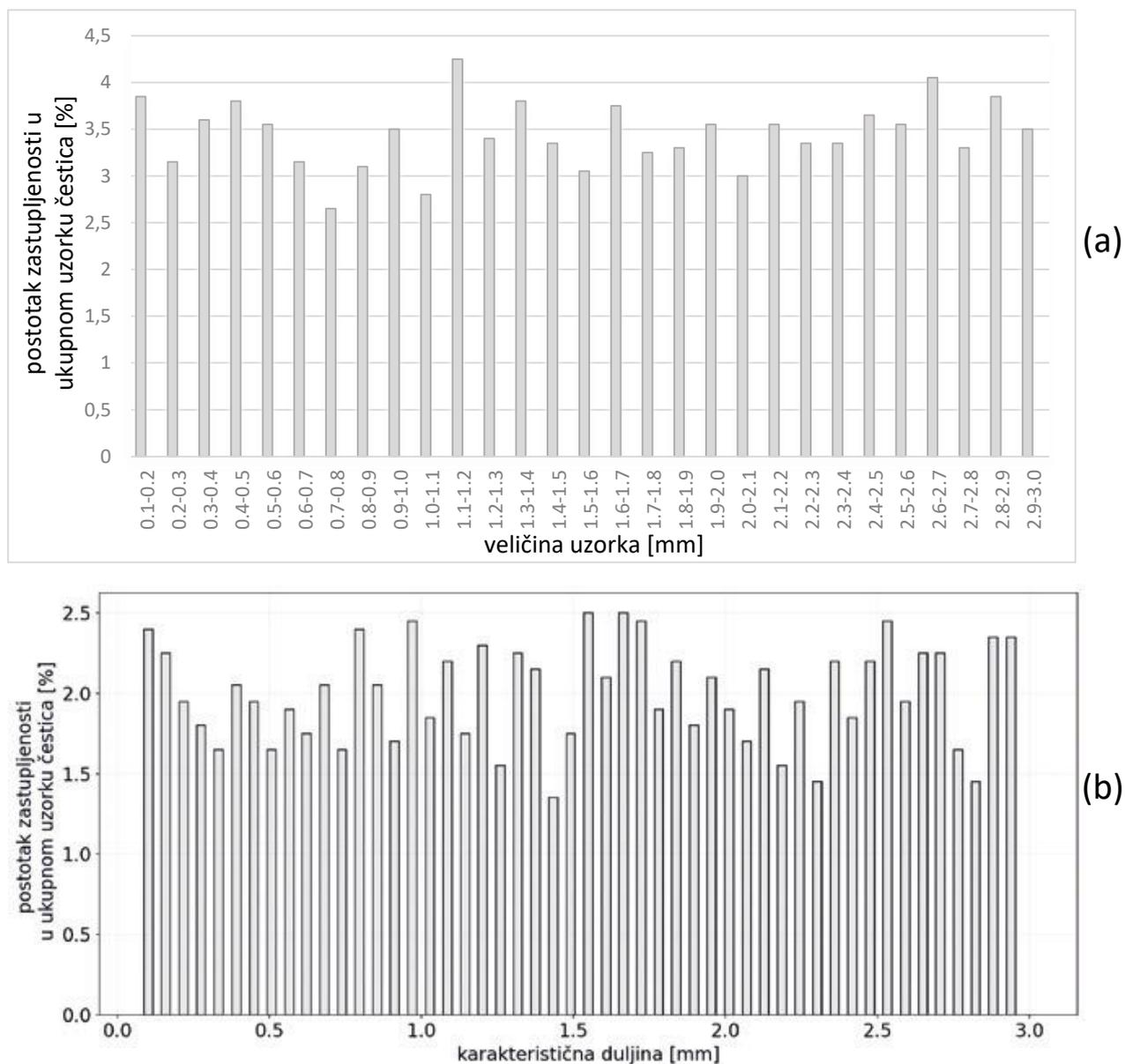
U nastavku na slici 5.7. možemo promatrati grafove razdiobe, gdje su uspoređene četiri vrste: uniformna, generalna, eksponencijalna i normalna razdioba. Sivim stupcima prikazan je postotak zastupljenosti čestica određene veličine unutar ukupnog skupa uzorka (primjer – čestice veličine između 0.1-0.2mm čine 3% ukupnog uzorka).



Slika 5.7. OpenFOAM tipovi razdiobe: a)Uniformna razdioba, b)Generalna razdioba, c)Eksponencijalna razdioba, d)Normalna razdioba

Možemo primjetiti da prve tri razdiobe daju slične rezultate, dok normalna razdioba očekivano izgleda drugačije. Kako bi bili dosljedni sa numeričkim modeliranjem, kao i kod Python numeričkog modela, ovdje će se isto koristiti uniformna razdioba čestica.

Na sljedećoj slici 5.8. prikazana je usporedba između razdiobe korištene unutar Python numeričkog modela i razdiobe korištene u OpenFOAM numeričkom modelu. U oba slučaja korištena je uniformna razdioba čestica.



Slika 5.8. a) Uniformna razdioba čestica korištena kod OpenFOAM numeričkog modela, b) Uniformna razdioba čestica korištena kod Python numeričkog modela

Unutar koda, definiranje razdioba nalazi se u *constant/KinematicCloudProperties* i izgleda ovako za svaki od prijašnjih primjera:

```
sizeDistribution
{
    type          normal;
    normalDistribution
    {
        mu          155e-5;
        sigma       493e-6;
        minValue    1e-4;
        maxValue    30e-4;
    }
}
```

```
sizeDistribution
{
    type          general;
    generalDistribution
    {
        cumulative  false;

        distribution
        (
            (0.0001 0.02)
            (0.000159184 0.02)
            ...
            (0.002940816 0.02)
            (3E-3 0.02)
        );
    }
}
```

```
sizeDistribution
{
    type          exponential;
    exponentialDistribution
    {
        lambda      27.5;
        minValue    1E-4;
        maxValue    3E-3;
    }
}
```

```
sizeDistribution
{
    type          normal;
    normalDistribution
    {
        mu          155e-5;
        sigma       493e-6;
        minValue    1e-4;
        maxValue    30e-4;
    }
}
```

Ubacivanje ili injekcija čestica unutar računalne domene, napravljena je preko tzv. manualne injekcije i `constant/KinematicCloudPositions` koda. Početne prostorne koordinate čestica stohastički su generirane korištenjem excel tablice uzevši u obzir geometrijska razmatranja kanala za lansiranje preko kojeg će čestice biti ubačene u eksperimentalni žlijeb. Unutarnja širina kanala je 50mm, početna visina čestica postavljena je kao i kod Python numeričkog primjera i varira između 330mm i 450mm, mjereno od dna žlijeba.

```

constantProperties
{
  rho0          1035; //Srednja vrijednosti specifične gustoće čestica
  alphaMax      0.9;
}
subModels
{
  particleForces
  {
    nonSphereDrag
    {
      alpha alpha.water;
      phi 0.05; // indeks sferičnosti(0.05, 0.5 ili 1)
    }
    gravity;
    interface
    {
      C          -10; //utječe na unutarnju silu čestica (default=-10)
      alpha      alpha.water;
    }
  }
  injectionModels
  {
    modell
    {
      type          manualInjection;
      massTotal     0; // vrijednost 0, u ovom slučaju označava da
      ukupna masa ubrizganih čestica nije eksplicitno specificirana i da će se
      odrediti nakon nasumičnog odabira čestica prema određenoj distribuciji
      parcelBasisType fixed;
      nParticle     1;
      SOI           49.9; // vremenski početak injekcije
      positionsFile "kinematicCloudPositions";
      U0            (0 0 0); // početna brzina čestica
      sizeDistribution // distribucija veličini čestica
      {
        type          uniform;
        uniformDistribution
        {
          minValue     0.1e-3;
          maxValue     3e-3;
        }
      }
    }
  }
  dispersionModel none;
  patchInteractionModel localInteraction;
}

```

```

localInteractionCoeffs
{
    patches
    (
        walls
        {
            type rebound;
            e    0.95; // elastičnost čestice pri sudaru s površinom
            mu   0.09; // količina trenja između čestice i površine
        }
        atmosphere
        {
            type escape;
        }
        inlet
        {
            type rebound;
            e    0.95;
            mu   0.09;
        }
        outlet
        {
            type escape;
        }
    );
}

```

5.6 Postavke rješavača

Preko *controlDict*-a definirano je trajanje simulacije kao i vremenski korak koji je u ovom slučaju podložan promjeni kako bi se osigurala numerička stabilnost. Unutar *KinematicCloudProperties* vidljivo je kako je početak injekcije na 50s (49.9 s), kako bi se osigurala stabilnost toka (zbog promjene iz stacionarnog u laminarni režim) i kako ta promjena nebi utjecala na dinamiku čestica.

```

application      MPPICInterFoam;

startFrom        startTime;

startTime        0;

stopAt           endTime;

endTime          230.0;

deltaT           0.5; // vremenski korak

writeControl     adjustable;

```

```
writeInterval    5;
purgeWrite       0;
writeFormat      ascii;
writePrecision   6;
writeCompression off;
timeFormat       general;
timePrecision    6;
runTimeModifiable yes;
adjustTimeStep  yes; // promjenjivi vremenski korak
maxCo            1.0;
maxAlphaCo       1.0;
maxDeltaT        0.05;
```

6. REZULTATI

6.1 Pokretanje simulacije

Zbog visoke rezolucije mreže, simulacija je provedena na superračunalu BURA korištenjem Bash skripte i tzv. MPI (engl. Message Passing Interface) zadatka unutar OpenFOAMa. Slijedi skripta koja se šalje u SLURM job scheduler koji će zatim dodijeliti resurse (čvorove, procesore, memoriju itd.) i upravljati izvršenjem skripte. Korištena verzija OpenFOAMa je V2206.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=particle_injection
#SBATCH --time=02:00:00
#SBATCH --nodes=10
#SBATCH --ntasks-per-node=12
#SBATCH --mem-per-cpu=1024MB
#SBATCH --output=logit-%j.out
#SBATCH --partition=computes_thin

# set solver
solver=MPPICInterFoam

# generate mesh
blockMesh > log.blockMesh
setFields

# modify decomposeParDict and decompose
decomposePar -fileHandler collated > log.decomposePar

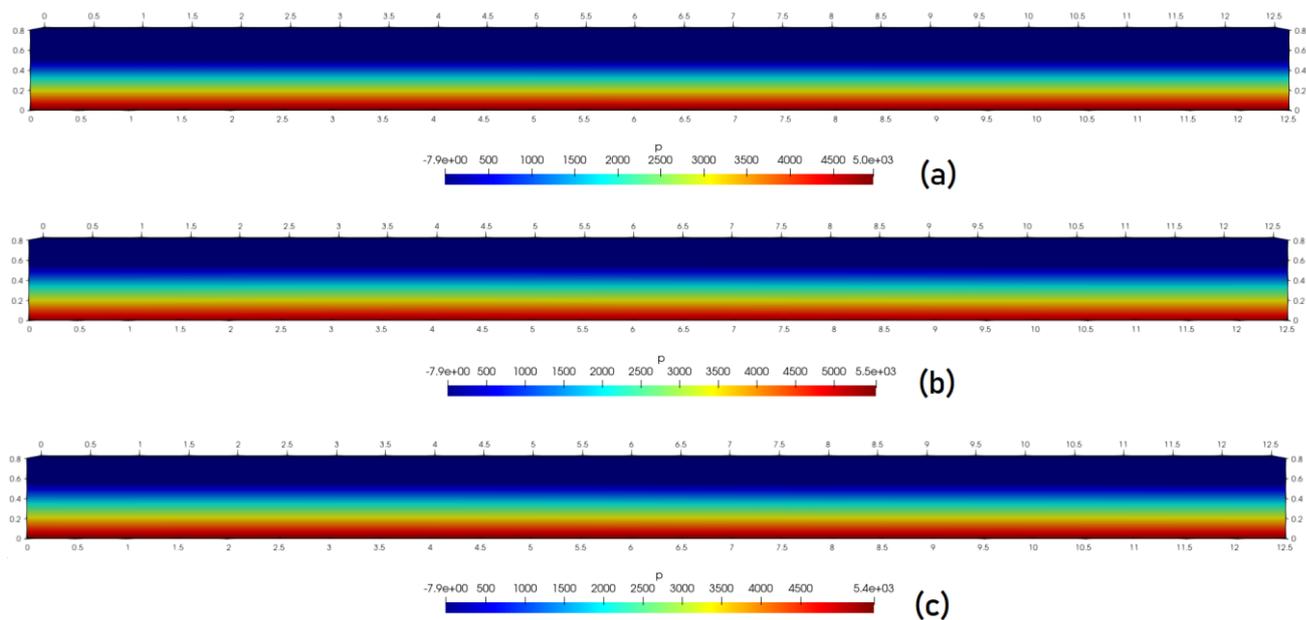
# run
mpirun -np $SLURM_NTASKS $solver -parallel -fileHandler collated >
log.LOGGIT 2>&1

# reconstruct cases
reconstructPar
```

Simulacije su provedene za tri indeksa sferičnosti i tri različita modela: kEpsilon i kOmega turbulentni modeli, te laminarni model. Rezultati polja tlaka i brzina biti će međusobno uspoređeni između ovih modela. Također, usporediti će se rezultati taloženja numeričkog modela dobivenog python programskim jezikom s numeričkim modelima OpenFOAMa.

6.2 Rezultati polja tlaka

Na slici 6.1. slijedi prikaz usporedbi polja tlaka između kOmega, kEpsilon i laminarnog modela.

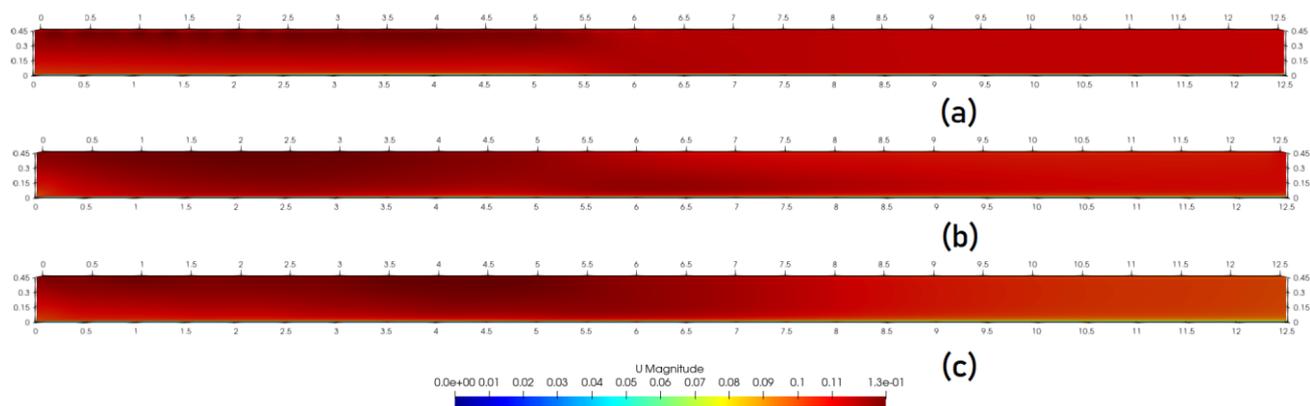


Slika 6.1. Usporedba polja tlaka između numeričkih modela: a) laminarni model, b) kOmega turbulentni model, c) kEpsilon turbulentni model

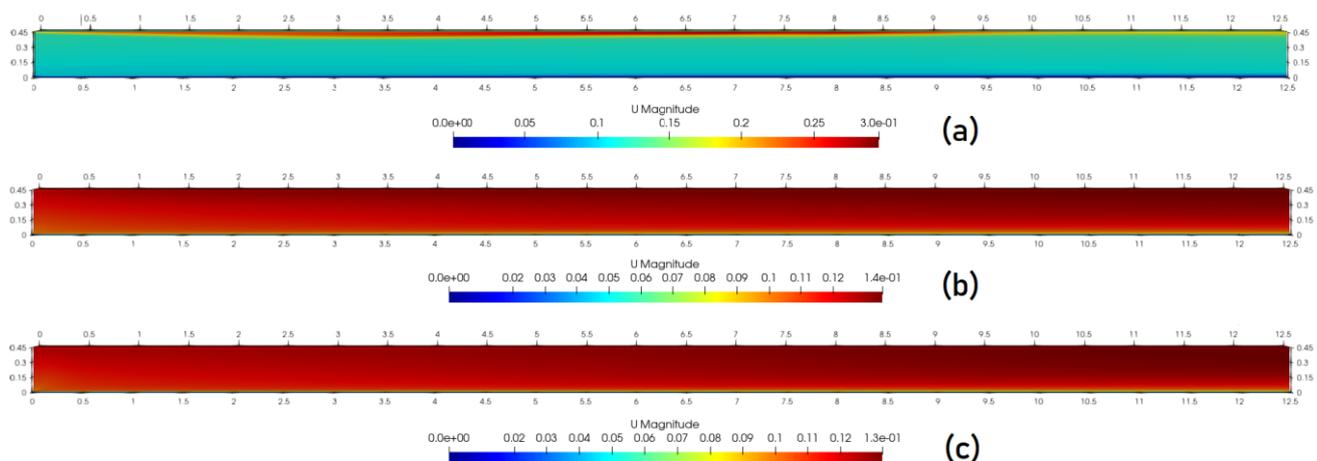
Primjećujemo da su modeli dali približno iste rezultate, što ukazuje na stabilnu konvergenciju rješenja. Također, može se primjetiti da odabir turbulentnog modela ne utječe previše na polje tlaka unutar ovog primjera simulacije.

6.3 Rezultati polja brzina

Na slikama u nastavku prikazana su polja brzine vodene faze za različite modele u trenutku ubacivanja čestica u domenu ($t=50s$) na slici 6.2. i pred kraj simulacije ($t=230s$) slikom 6.3.



Slika 6.2. Usporedba polja brzina u trenutku $t=50s$ između numeričkih modela: a) laminarni model, b) kOmega turbulentni model, c) kEpsilon turbulentni model



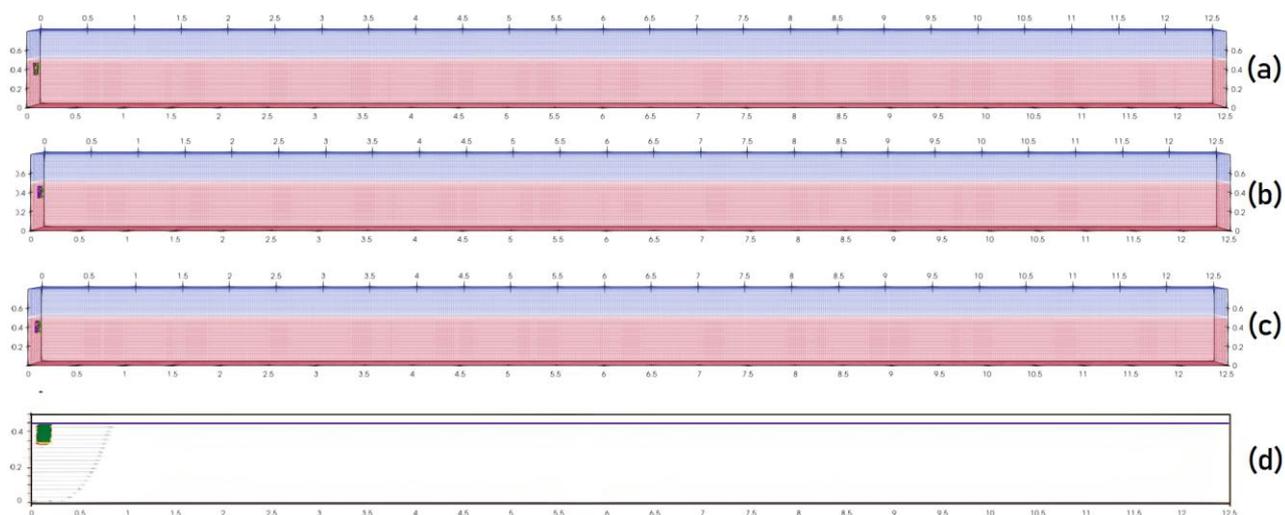
Slika 6.3. Usporedba polja brzina u trenutku $t=230s$ između numeričkih modela: a) laminarni model, b) kOmega turbulentni model, c) kEpsilon turbulentni model

Na slici 6.3. promatrajući laminarni model može se primjetiti veća brzina gornjeg sloja. To se dešava zbog povećanja polja brzine iznad vodene faze što zahvaća i utječe na brzinu same vodene faze. Razlog tome može biti način na koji je model postavljen i/ili nemogućnost prigušivanja turbulencija kod laminarnog modela.

kOmega i kEpsilon modeli koji se oslanjaju na dodatne transportne jednadžbe za specifičnu turbulentnu kinetičku energiju prikazuju stabilno polje brzina.

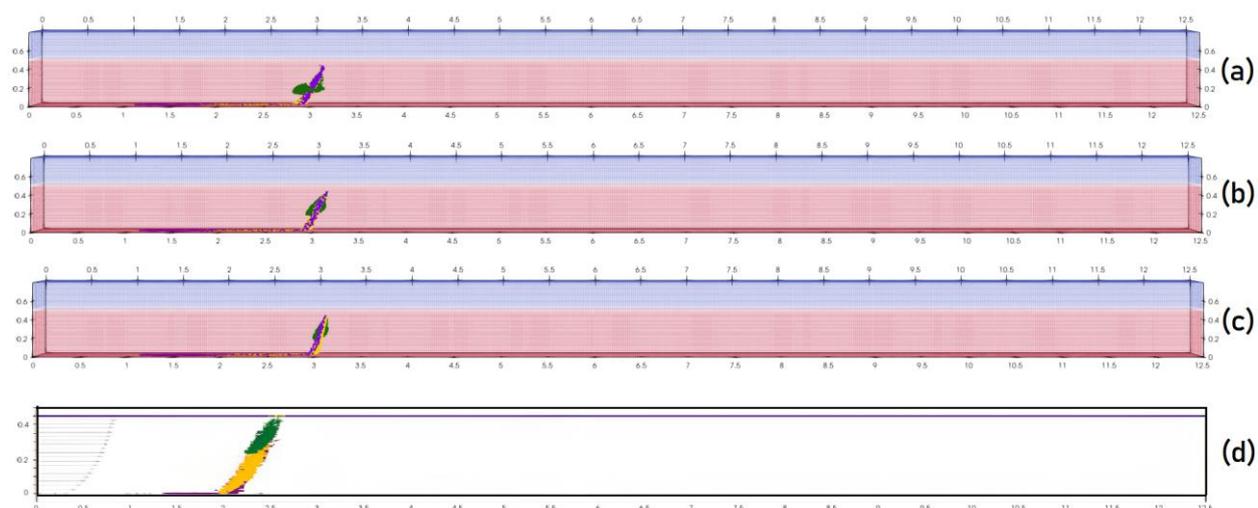
6.4 Rezultati taloženja čestica

Slijedi prikaz rezultata taloženja čestica za različite numeričke modele, gdje ljubičasta boja predstavlja 3D čestice ($\psi = 1$), žuta boja 2D čestice ($\psi = 0.5$) i zelena boja 1D čestice ($\psi = 0.05$). Rezultati su dani kroz šest vremenskih trenutaka. Slika 6.4. prikazuje početno vrijeme t_0 inekcije čestica unutar domene.



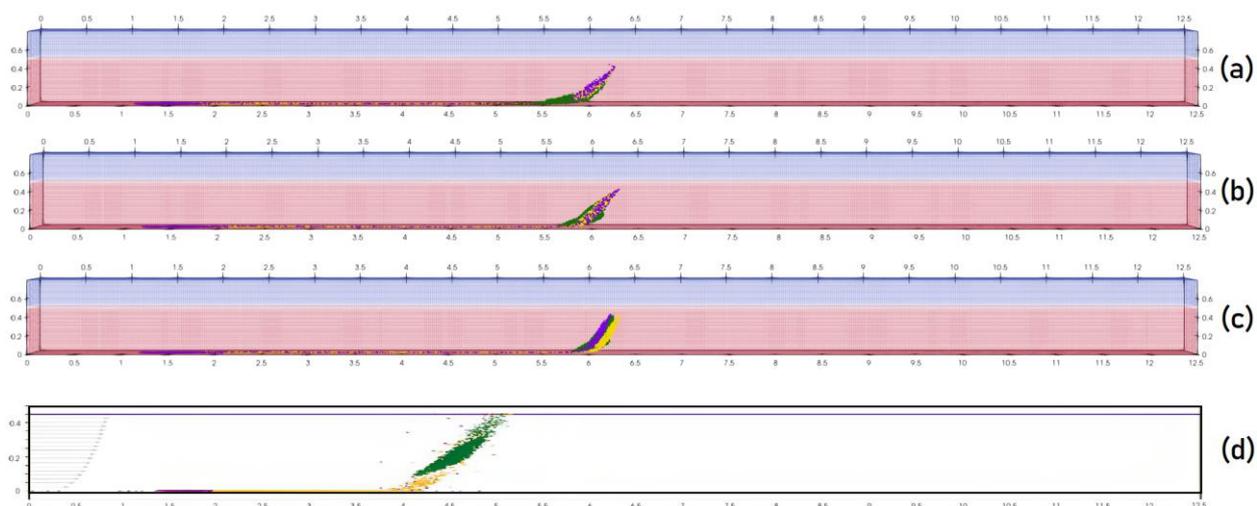
Slika 6.4. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_0 : a) laminarni model, b) $k\Omega$ turbulentni model, c) $k\epsilon$ turbulentni model, d) Python numerički model

Slika 6.5. prikazuje trenutak $t_1=25s$ nakon početne inekcije.



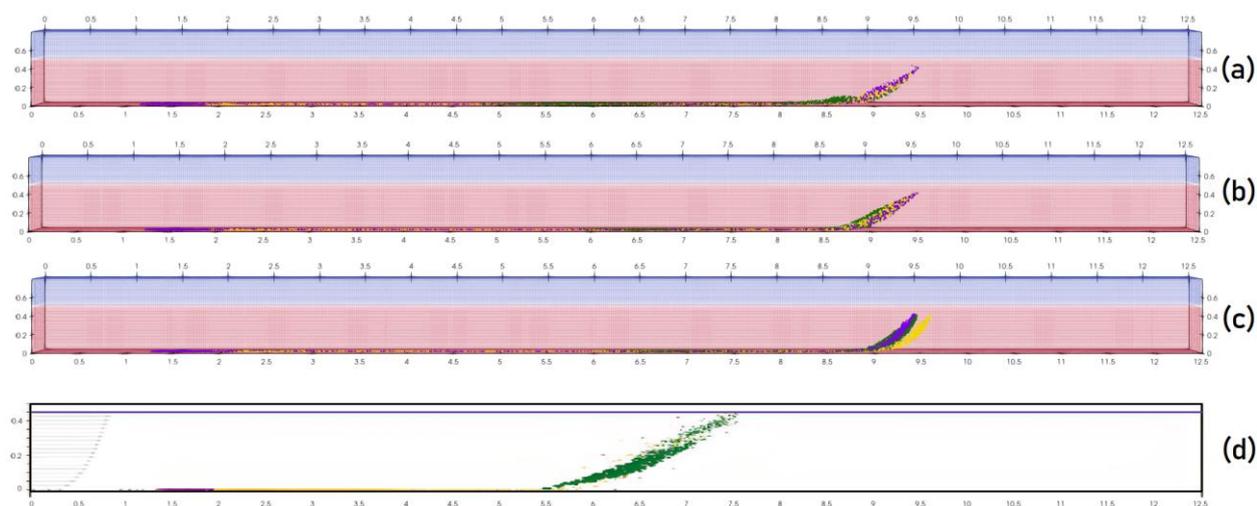
Slika 6.5. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_1 : a) laminarni model, b) $k\Omega$ turbulentni model, c) $k\epsilon$ turbulentni model, d) Python numerički model

Slijedi slika 6.6. koja prikazuje trenutak $t_2=50s$ nakon početne injekcije.



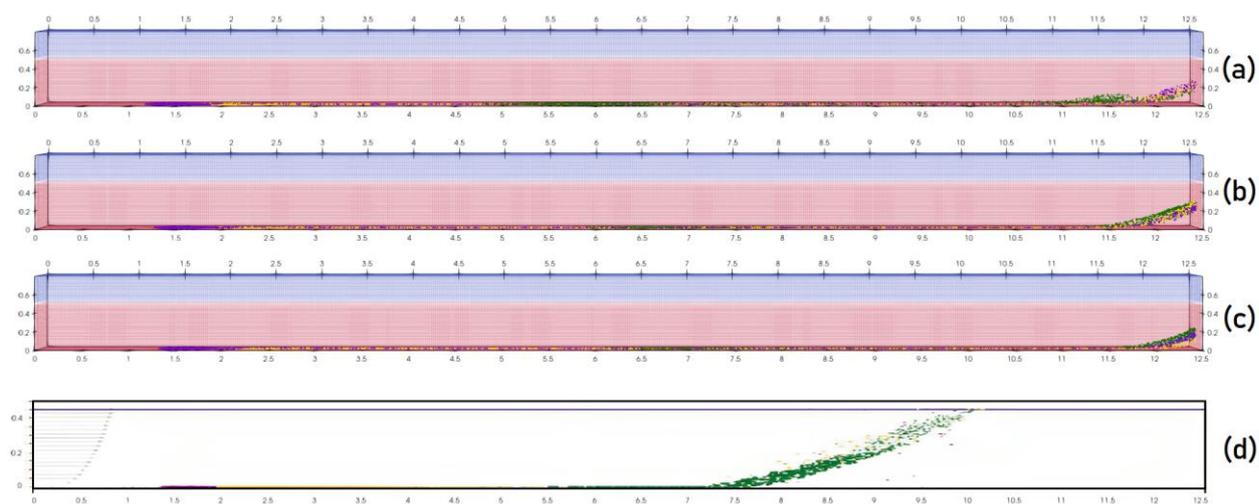
Slika 6.6. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_2 : a) laminarni model, b) $k\Omega$ turbulentni model, c) $k\epsilon$ turbulentni model, d) Python numerički model

Nakon toga, slika 6.7. prikazuje trenutak $t_3=75s$ nakon početne injekcije.



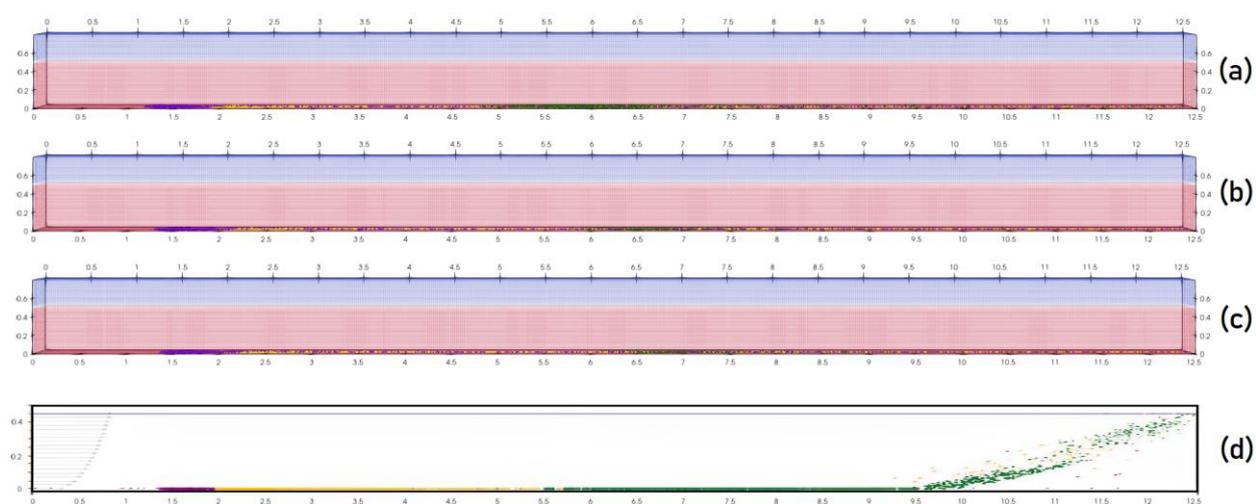
Slika 6.7. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_3 : a) laminarni model; b) $k\Omega$ turbulentni model; c) $k\epsilon$ turbulentni model; d) Python numerički model

Trenutak $t_4=100s$ nakon početne injekcije, prikazan slikom 6.8.



Slika 6.8. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_4 : a) laminarni model, b) $k\Omega$ turbulentni model, c) $k\epsilon$ turbulentni model, d) Python numerički model

Posljednji promatrani trenutak $t_5=125s$ nakon početne injekcije prikazan je na slici 6.9.



Slika 6.9. Usporedba numeričkih rezultata taloženja čestica mikroplastike u trenutku t_5 : a) laminarni model, b) $k\Omega$ turbulentni model, c) $k\epsilon$ turbulentni model, d) Python numerički model

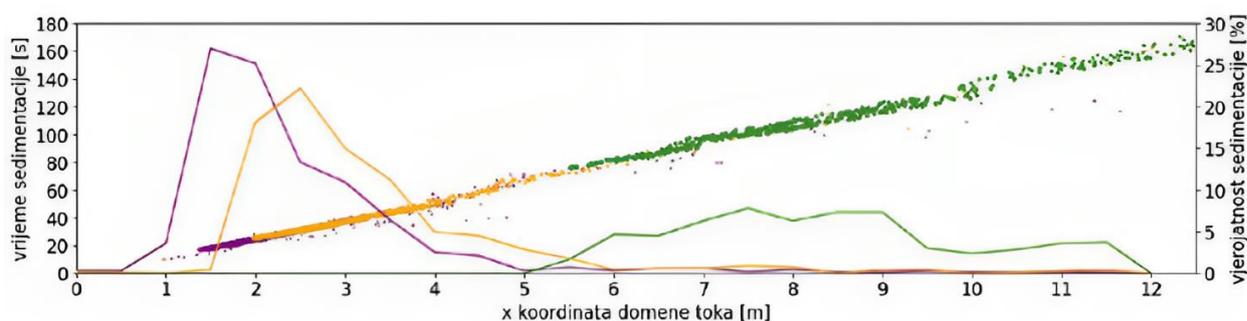
Uspoređujući numeričke modele jasno je vidljiva razlika između brzine čestica OpenFOAM i Python numeričkog modela. Unatoč tome, svi računalni modeli dali su slične rezultate u smislu prostornog opsega taloženja čestica za specifične indekse sferičnosti. Zbog limitiranosti vizualne reprezentacije u tablici 6.1. prikazani su rezultati kako bi mogli statistički usporediti rezultate.

Tablica 6.1. Rezultati OpenFOAM numeričkih modela

Korišteni Model	laminar			kOmega			kEpsilon		
Indeks sferičnosti ψ	1	0,5	0,05	1	0,5	0,05	1	0,5	0,05
Ukupna količina uzorka	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000	2000
Broj istaloženih čestica	1774	1765	1648	1712	1645	1311	1705	1636	1290
Vjerojatnost taloženja [%]	88,7	88,3	82,4	85,6	82,25	65,55	85,25	81,8	64,5
Dimenzija najmanje istaložene čestice [mm]	0,319	0,3	0,42	0,438	0,52	0,721	0,438	0,537	0,796
Čestice manje od 0,5 mm koje nisu istaložene [%]	75,59	75,9	96,66	95,32	100	100	96,66	100	100

Promatrajući rezultate laminarnog modela može se uočiti da je vjerojatnost taloženja svih čestica, obzirom na indeks sferičnosti, dosta blizu. Nasuprot tome, kOmega i kEpsilon modeli turbulencije pokazuju usporedive rezultate, s vidljivom ravnotežom između modela uspoređujući broj čestica zadržan unutar računске domene. Iz tablice je važno uočiti da je vjerojatnost taloženja mikroplastičnih čestica dimenzije manje od 0,5mm u oba turbulentna modela mala. Kao finalna misao, uspoređivanjem rezultata OpenFOAM numeričkih modela, između kOmega i kEpsilon turbulentni modela ne primjećuje se preveliko odstupanje i čine se kao pokazatelji dobrih numeričkih rezultata taloženja čestica. No, nakon provedene eksperimentalne analize moći će se potvrditi koji model je zapravo najbolji pokazatelj dinamike kretanja čestica mikroplastike.

Slika 6.10. prikazuje rezultate Python numeričkog modela, gdje je vrijednostima na lijevoj osi prikazano vrijeme proteklo do taloženja pojedinačne čestice mikroplastike (točkasti prikaz čestica). Desna os predstavlja vjerojatnost taloženja čestica mikroplastike, gdje je punom linijom prikazana funkcija gustoće vjerojatnosti za pojedinu grupaciju čestica mikroplastike [4].



Slika 6.10. Rezultati taloženja python numeričkog modela [4]

7. ZAKLJUČAK

U ovom radu provedena je numerička analiza dinamičkog ponašanja mikroplastičnih čestica koje su okarakterizirane različitim veličinama. Numerički modeli postavljeni su tako da je moguća eksperimentalna validacija istih korištenjem geometrije laboratorijskog kanala. Eksperimentalna analiza uključuje kontrolirano otpuštanje čestica koje je generirao 3D printer, s naglaskom na uočavanje razlika u dimenzionalnosti čestica (1D, 2D i 3D čestice).

Unutar rada pojašnjen je razvoj numeričkog modela implementiranog u Pythonu i uspostavljen je numerički model unutar OpenFOAMa. Proces modeliranja uključivao je specifikaciju rubnih uvjeta, diskretizaciju mreže korištenjem numeričke metode konačnih volumena i konfiguraciju parametara injekcije čestica. Provedeno je više simulacija i ispitan je utjecaj $k\epsilon$ i $k\omega$ turbulentnih modela u odnosu na laminarni model strujanja.

Rezultati numeričkih modela otkrili su odstupanje u vjerojatnosti taloženja mikroplastičnih čestica različitih dimenzionalnosti. Naime, 2D i 3D čestice pokazale su veću vjerojatnost taloženja, dok su 1D (linijske) čestice rezultirale manjom vjerojatnošću. Također, bitno je napomenuti da je OpenFOAM numerički model prezentirao malu vjerojatnost taloženja čestica manjih od 0,5mm, bez obzira na njihovu dimenzionalnost.

Kako bi se povećala vjerodostojnost modela, računске rezultate potrebno je podvrgnuti eksperimentalnoj analizi. No, za predviđanje kretanja mikroplastike na većoj razini, moramo uzeti u obzir da na točnost takvih predviđanja utječu različiti čimbenici poput: vrste strujanja, veličine domene promatranog kretanja i neki od mnogobrojnih potencijalnih nedostataka prilikom modeliranja (poput uključivanja nedovoljnog broja vanjskih varijabli koje utječu i mijenjaju rezultate sustava).

Promatranjem trenutne literature o računalnim pristupima za analizu ponašanja mikroplastike unutar vode mogu zaključiti da je većina postojećih modela previše pojednostavljena i zanemarene su složene interakcije između mikroplastike i njezinog okoliša. Za ublažavanje daljnjih onečišćenja mikroplastikom potrebne su mjere poput smanjenja plastike za jednokratnu upotrebu i provedba učinkovitih sustava gospodarenja otpadom.

8. LITERATURA

- [1] European Parliament: “The environmental impacts of plastics and micro-plastics use, waste and pollution: EU and national measures“, European Union, 2020., s Interneta, [https://www.europarl.europa.eu/thinktank/en/document/IPOL_STU\(2020\)658279](https://www.europarl.europa.eu/thinktank/en/document/IPOL_STU(2020)658279), 07.10.2023.
- [2] Almeida, M.P.d., Gaylarde, C., Pompermayer, F.C., Lima, L.d.S., Delgado, J.d.F., Scott, D., Neves, C.V., Vieira, K.S., Baptista Neto, J.A., Fonseca, E.M.: “The Complex Dynamics of Microplastic Migration through Different Aquatic Environments: Subsidies for a Better Understanding of Its Environmental Dispersion“ *Microplastics* 2023, 2, 62–77, s Interneta, <https://doi.org/10.3390/microplastics2010005>, 07.10.2023.
- [3] Tchen Chan-Mou: ”Mean Value and Correlation Problems connected with the Motion of Small Particles suspended in a turbulent fluid“, Martinus Nijhoff, The Hague 1947.
- [4] “Model gibanja čestica mikroplastike u nehomogenom i laminarnom polju brzine“, *Hrvatske vode*, Vol. 29 No. 117, 2021.
- [5] R. Clift: “Motion of entrained particles in gas streams“ 1971, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, s Interneta, <https://www.academia.edu/47006411>, 07.10.2023.
- [6] Goral, K. D., Guler, H. G., Larsen, B. E., Carstensen, S., Christensen, E. D., Kerpen, N. B., Schlurmann, T., & Fuhrman, D. R. (2023): “Settling velocity of microplastic particles having regular and irregular shapes“ *Environmental Research*, 228, s interneta <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.115783>, 08.10.2023.
- [7] W.C. Krumbein (1941): “Measurement and geological significance of shape and roundness of sedimentary particles“ *Journal of Sedimentary Petrology*, Vol.11, No.2, PP. 64-72, s Interneta, <https://pubs.geoscienceworld.org/sepm/jsedres/article-abstract/11/2/64/94958/>, 08.10.2023.
- [8] Haider, A.; Levenspiel, O. (1988): “Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Non-Spherical Particles“, *Powder Tehnology*, Vol. 58, PP. 67-70., s Interneta, <https://www.researchgate.net/publication/244155878>, 12.10.2023.
- [9] “OpenFOAM Documentation“, s Interneta, <https://www.openfoam.com/documentation>, 18.10.2023.
- [10] Johan A. Heyns and Oliver F. Oxtoby “Modelling surface tension dominated multiphase flows using the VoF approach“, s Interneta, <https://www.academia.edu/74851188>, 27.11.2023.

[11] Andrews, M.J. and O'Rourke, P.J. (1996): "The Multiphase Particle-in-Cell (MP-PIC) Method for Dense Particle Flows" International Journal of Multiphase Flow, Vol.22, No.2, PP. 379–402, s Interneta, <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0301932295000720>, 04.12.2023.

[12] Wachem, B. (2000): "Derivation, implementation, and validation of computer simulation models for gas-solid fluidized beds"

[13] "OpenFOAM Documentation: Reynolds Averaged Simulation (RAS)", s Interneta, <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-turbulence-ras>, 04.12.2023.

9. SAŽETAK

U ovom radu provedeno je istraživanje dinamike kretanja mikroplastike kroz laminarni tok vode u otvorenom kanalu. Početak rada utemeljen je na teorijskim saznanjima o mikroplastici. Nakon toga opisan je numerički model implementiran u Pythonu i uspostavio se numerički model unutar OpenFOAMa. OpenFOAM analize provedene su na superračunalu BURA i prikazana je usporedba Python i OpenFOAM numeričke analize. Rezultati modela potvrdili su odstupanja u vjerojatnosti taloženja čestica mikroplastike s obzirom na njihov indeks sferičnosti i naglašena je vjerojatnost da čestice manje od 0,5mm bez obzira na indeks sferičnosti, teško dostižu dno domene.

Ključne riječi: računalna dinamika fluida, mikroplastika, indeks sferičnosti, višefazni model, čestice, taloženje, ekološko onečišćenje, računalna analiza, superračunalo, OpenFOAM

ABSTRACT

In this paper, the dynamics of the movement of microplastics through the laminar flow of water in an open channel was investigated. The beginning of the work is based on theoretical knowledge about microplastics. After that, the numerical model implemented in Python was described and the numerical model within OpenFOAM was established. The OpenFOAM analyzes were performed on the BURA supercomputer and a comparison of the Python and OpenFOAM numerical analyzes is presented. The results of the model confirmed deviations in the probability of settling of microplastic particles with regard to their sphericity index, and the probability that particles smaller than 0.5mm, regardless of the sphericity index, hardly reach the bottom of the domain was emphasized.

Keywords: computational fluid dynamics, microplastics, sphericity index, multiphase model, particles, deposition, environmental pollution, computational analysis, supercomputer, OpenFOAM