

Prethodno priopćenje | Preliminary report | UDK: 504.7
 Primljeno (Received): 18.06.2021.; ; Prihvaćeno (Accepted): 07.09.2021.

MODEL GIBANJA ČESTICA MIKROPLASTIKE U NEHOMOGENOM I LAMINARNOM POLJU BRZINE

Izv. prof. dr. sc. Vanja Travaš,
dipl. ing. građ.
 Sveučilište u Rijeci,
 Građevinski fakultet u Rijeci,
 Radmile Matejčić 3, Rijeka, Hrvatska
 e-pošta: vanja.travas@uniri.hr

Prof. dr. sc. Lado Kranjčević,
dipl. ing. stroj.
 Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet,
 Vukovarska 58, Rijeka, Hrvatska

Prof. dr. sc. Siniša Družeta, **dipl. ing. stroj.**
 Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet,
 Vukovarska 58, Rijeka, Hrvatska

Toni Holjević, **mag. ing. aedif.**
 Hidroprojekt-ing, d.o.o.,
 Draškovićeva 35/I, Zagreb, Hrvatska

Ivana Lučin, **dipl. ing. stroj.**
 Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet,
 Vukovarska 58, 51000 Rijeka, Hrvatska

Marta Alvir, **dipl. ing. stroj.**
 Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet,
 Vukovarska 58, Rijeka, Hrvatska

Luka Grbčić, **dipl. ing. stroj.**
 Sveučilište u Rijeci, Tehnički fakultet,
 Vukovarska 58, Rijeka, Hrvatska

Ante Sikirica, **dipl. ing. stroj.**
 Sveučilište u Rijeci, Centar za napredno
 računanje i modeliranje,
 Radmile Matejčić 2, Rijeka, Hrvatska

Iz perspektive održivog razvoja, nerazgradivost te konstantni porast broja čestica mikroplastike u akvatičnim recipijentima zahtijeva urgentan razvoj mjera zaštite od nepovoljnih ekoloških posljedica što između ostalog iziskuje razumijevanje geneze mikroplastike te mehanike gibanja ovakve vrste onečišćenja u biosferi. Iz navedenoga slijedi i motivacija za istraživačkim aktivnostima koje su u ovom radu dokumentirane, a odnose se na prikaz odabrane teorijske osnove za modeliranje gibanja čestica mikroplastike te na relativno jednostavni numerički algoritam razvijen u svrhe modeliranja pronosa čestica mikroplastike u nehomogenom polju brzine tekućine u ravninskom i laminarnom toku. Lagrangeov opis gibanja čestica mikroplastike je neophodan radi nemogućnosti definiranja predmetnog REV-a te kontinuiranog polja koncentracije. Kako analize od praktičnog značaja uvjetuju relativno veliki broj čestica mikroplastike, neophodno je numerički algoritam formirati kroz kompromisno rješenje u okviru kojeg se nastoji minimizirati proračunsko vrijeme te maksimizirati utjecaj svih dominantnih fizikalnih procesa. Predloženi model se tako temelji na sustavu od dvije obične i nelinearne diferencijalne jednadžbe. Kako bi se pritom uvela mogućnost modeliranja čestica različitih oblika, faktor otpora oblika c_d je modeliran poopćenim četvero-parametarskim Clift-Gauvinovim modelom u kojem su parametri definirani faktorom sferičnosti čestice mikroplastike odnosno mjerom odstupanja oblika čestice od kugle. Predloženi pristup modeliranja se može inkorporirati u neki od raspoloživih programskih rješenja (npr. OpenFOAM), a na kraju rada je prikazan numerički primjer dobiven implementacijom algoritma u programskom jeziku Python te je iznijet i osvrt na naredne eksperimentalne aktivnosti.

Ključne riječi: faktor otpora oblika, mikroplastika, obične diferencijalne jednadžbe, poopćeni Clift-Gauvinov model, pronos čestica mikroplastike

1. UVOD

Od početka 50-ih godina prošlog stoljeća, kada je industrija sintetičkih materijala zahvatila planetarne razmjere, pa sve do danas, procjenjuje se da je proizvedeno

više od 8 milijardi tona različite vrste plastike. Kako je osviještenost u pogledu recikliranja otpadnih materijala poprimila značaj tek recentno, pa tako i plastike, manje

od 20 % navedenog iznosa je uklonjeno iz biosfere (reciklirano ili spaljeno), dok je preostali dio još uvijek prisutan u obliku otpadnog materijala. Prisustvo plastike u obliku otpadnog materijala je pritom i dalje u porastu, ali se putem mjera obaveznog recikliranja otpada u posljednjih nekoliko dekada jasno ukazuje na porast u trendu recikliranih količina plastike te tako i pad u trendu unosa odbačene plastike u biosferu.

Odbačena ili neadekvatno deponirana plastika u biosferi se putem atmosferskih tekućina pronosi te najčešće završava u akvatičnim područjima odnosno morima i oceanima (Andrady, 2011; Sundt, Schulze i Syversen, 2014; Chubarenko et al., 2016, Zhang, 2017). Iako je intuitivno da njeno prisustvo ugrožava ustaljeni tijek mnogih bioloških i drugih procesa, u mnogo navrata je dokazano kako prisustvo plastike u akvatičnim recipijentima predstavlja izravnu ugrozu za održivi razvoj jer negativno utječe na biljni i životinjski svijet (Long et al., 2015), ali isto tako i na mnoge druge aspekte cjelovitog ekosustava (Hantoro et al., 2019). Na taj način je i problem prisustva plastike u obliku odbačenog otpada prepoznat i od strane UN-ovog programa za okoliš gdje je uz klimatske promjene navedeno identificirano kao problem prioritarnog značaja za osiguravanje biološke raznovrsnosti. Jedno od žarišta onečišćenja mikroplastikom je i Sredozemno more koje je pod konstantnim nadzorom istraživača i stručnjaka u svrhu evidentiranja dinamike izmjene mase i tranzicije sadržane mikroplastike (Llorcaa et al., 2020; Fuente et al., 2021; Fytianos et al., 2021). Naime, provedenim terenskim ispitivanjima i mjerenjima ustanovljeno je prisustvo mikroplastike u površinskom i dubinskom sloju, na samom morskom dnu, ali i u probavnim sustavima različitih vrsta životinjskog svijeta.

U skladu s prethodno navedenim, neophodno je osigurati uvjete pravovremene zaštite od svih potencijalnih negativnih učinaka na okoliš, te je zato potrebno urgentno reagirati provodeći istraživanja koja su usmjerena na genezu plastike u okolišu, putem kojih se onda mogu odrediti mjere sprječavanja njenog unosa, ali i istraživanja koja se okreću modeliranju gibanja plastike čime se ostvaruju preduvjeti za prognozu stanja i definiranja adekvatnih mjera zaštite (Petersen i Hubbart, 2021). Od navedenih smjernica istraživanja, u ovom radu se pažnja pridaje problemu modeliranja pronosa čestica mikroplastike. Naime, u svrhu redukcije kompleksnosti predmetne problematike, usvojen je konsenzus unutar kojeg se prisustvo plastike u akvatičnim recipijentima u prvom redu kategorizira prema veličini samog uzorka plastike. U tu svrhu se za mjeru veličine uzorka usvaja maksimalna razdaljina koja se može izmjeriti između udaljenih materijalnih točaka čestice čime se definira karakteristična dimenzija uzorka d_p L. Iako postoje različite kategorizacije plastike prema veličini, u novije vrijeme se najčešće susreće ona po kojoj se uzorci svrstavaju u 4 kategorije: (i) makroplastika za uzorke kod kojih je d_p veći od 200 mm, (ii) mezoplastika za uzorke kod kojih je d_p u rasponu od 5 do 200 mm, (iii)

mikroplastika (MP) za uzorke kod kojih je d_p u rasponu od 0,001 do 5 mm te (iv) nanoplastika za uzorke kod kojih je d_p u rasponu od 1 do 100 nm. Ovakva kategorizacija je prvenstveno uvedena iz razloga što se u navedenim prostornim dimenzijama različiti mehanički i biološki procesi ukazuju kao dominantni. Pritom, u nastavku se pažnja pridaje isključivo MP-u koja je ujedno i u fokusu mnogih istraživanja (Horton i ADixon, 2017) radi njenog značajnog prisustva i interakcije s ekosustavima akvatičnih sredina, ali i radi potencijala prelaska u nanoplastiku putem mehaničkih i degradacijskih procesa (područje interakcije s ekosustavom koje nije u potpunosti razjašnjeno). Modeliranje dinamike MP-a u moru stavlja pred istraživače vrlo kompleksan i izazovan problem. Naime, samo u specifičnim slučajevima se prisustvo MP-a može sagledati kroz prizmu hipoteze kontinuuma pa se karakteristični parametri ovakvog onečišćenja definiraju kontinuiranim funkcijama prostornih koordinata (Khatmullina i Chubarenko, 2019). S druge strane, za modeliranje gibanja čestica MP-a za koje se ne može unaprijed definirati reprezentativni elementarni volumen (REV), susreću se alternative od kojih se mogu izdvojiti metode temeljene na strojnom učenju ili pak metode čestičnog modeliranja MP-a koje se provode u okviru definiranja funkcija gibanja s argumentima Lagrangeovih odnosno materijalnih koordinata. Upravo ovaj drugi pristup je predmet daljnjih razmatranja. Kompleksnost ovakve zadaće se može prepoznati uvodeći relevantne parametre koji utječu na gibanje čestica MP-a. Tako se kao dominantni čimbenici izdvajaju: (i) gustoća MP-a, (ii) veličina MP-a i (iii) oblik MP-a.

Gustoća MP-a ρ_p u morima može značajno varirati te zavisi o vrsti polimera i industrijskom procesu obrade plastike. Najčešće se u akvatičnim recipijentima pronalaze: (i) PE ili polietilen plastike kojima gustoća varira u rasponu od 900 do 999 kg/m³, (ii) PP ili polipropilen plastike kojima gustoća varira u rasponu od 850 do 950 kg/m³, (iii) PS ili polistiren plastike kojima gustoća varira u rasponu od 950 do 1100 kg/m³ te (iv) PET ili polietilen-tereftalat plastika s gustoćom od 1380 kg/m³ (koja se najčešće koristi za ambalaže). U kontekstu vertikalnog gibanja čestica MP-a, valja prepoznati da se mogu razlikovati uvjeti tonjenja čestica (engl. *negatively buoyant plastic*) i uvjeti izranjanja čestica (engl. *positively buoyant plastic*) što osim parametra gustoće ρ_p ujedno zavisi i o vertikalnoj raspodjeli gustoće recipijenta ρ_f odnosno prisustva piknokline. Veličina i oblik čestica MP imaju dominantan utjecaj u pogledu magnitude sile otpora oblika koja se pojavljuje za slučaj relativnog gibanja između tekućine koji sadrži MP i same čestice MP-a. Modeliranje utjecaja veličine te naročito oblika MP-a na njenu trajektoriju u struji tekućine predstavlja izazovan problem. U prvom redu se navedeno odnosi na kompleksnost definiranja prikladnog faktora otpora oblika c_d za generički oblik čestice MP-a pa se dosad u tu svrhu primjenjivao redukcijski princip u kojem se oblik čestice MP kategorizira prema broju dominantnih dimenzija

čestice. Na taj način se mogu prepoznati čestice MP s (i) podjednako zastupljenim karakterističnim dimenzijama d_p u tri ortogonalna smjera (kategorizirano kao 3D objekt), (ii) podjednako zastupljenim dimenzijama d_p u dva ortogonalna smjera (kategorizirano kao 2D objekt) te (iii) s jednom karakternom dimenzijom d_p (kategorizirano kao 1D objekt). Koristeći ovakav redukcijski princip, u nastavku rada je prikazan matematički i potom numerički algoritam za integraciju jednadžbi gibanja čestica MP-a poopćenog oblika, uzimajući u obzir promjenu faktora otpora oblika čestica MP-a.

2. MATEMATIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MP-a

Modeliranje gibanja čestica mikroplastike će se u nastavku sagledati za slučaj stacionarnog toka tekućine s nehomogenim poljem brzine u ravninskom laminarnom toku. Ekstenzija modela na prostornu orijentaciju toka je trivijalna, dok je uvažavanje utjecaja turbulencije daleko od toga jer iziskuje definiranje konstitutivnih veza (Clift i Gauvin, 1970; Traugott i Liberzon, 2017) koje za slučaj mikroplastike nisu još u potpunosti razjašnjene.

2.1. Jednadžbe gibanja

U najopćenitijem slučaju gibanja materijalne čestice u nestacionarnom toku tekućine okarakteriziranog malim Reynoldsovom brojem definirano je Basset-Boussinesq-Oseenovom jednadžbom (engl. BBO equation). U uvjetima malih Reynoldsovih brojeva, koji se dostižu za slučaj relativno male brzine toka, ali ujedno i čestica malih karakterističnih dimenzija, otpor oblika se može definirati Stokesovim zakonom, pa tako za sferične čestice BBO jednadžba poprima oblik (Chan-Mou, 1947)

$$m_p \cdot \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = m_f \left(\underbrace{\frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} - \nu \nabla^2 \mathbf{v}_f}_I \right) - \underbrace{m_f \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{d\mathbf{v}_{rel}}{dt}}_{II} - \underbrace{6 \cdot \pi \cdot r_p \cdot \mu \cdot \mathbf{v}_{rel}}_{III} + \dots \quad (1)$$

$$m_p \cdot \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = m_f \left(\underbrace{\frac{D\mathbf{v}_f}{Dt} - \nu \nabla^2 \mathbf{v}_f}_I \right)$$

u kojem \mathbf{v}_p predstavlja vektor brzine materijalne čestice LT^{-1} , m_p masu materijalne čestice M , r_p radijus materijalne čestice L , \mathbf{v}_f vektor brzine lokalnog volumena tekućine LT^{-1} , m_f masa tekućine koja odgovara volumenu čestice M , \mathbf{v}_{rel} vektor relativne brzine između materijalne čestice i lokalnog volumena tekućine, \mathbf{g} vektor ubrzanja sile teže LT^{-2} , μ dinamičku viskoznost tekućine $ML^{-1}T^{-1}$, ν kinematičku viskoznost tekućine L^2T^{-1} , τ varijabla pseudo-vremena T , $D\mathbf{v}_f / Dt$ oznaka materijalne derivacije brzine \mathbf{v}_f te ∇ diferencijalni operator nabra. Članovi desne strane jed.

(1) se u fizikalnom smislu mogu tumačiti kao: (1.I) sila gradijenta tlaka, (1.II) sila dodane mase (engl. *added mass force*), (1.III) Stokesova sila, (1.IV) Bassetova sila te (1.V) sila uzgona. Sila gradijenta tlaka nastaje kao posljedica integracije normalnih i posmičnih naprezanja na površini čestice dok sila dodane mase nastaje kao posljedica inercijalne sile tekućine koje okružuje česticu. Stokesova sila uvodi kvantifikaciju sile otpora oblika za slučaj malih Reynoldsovih brojeva, a Bassetova sila kvantificira utjecaj viskoznosti vezan za razvoj graničnog sloja na površini čestice te uvažava vremensko kašnjenje u razvoju graničnog sloja u slučaju promjene relativne brzine materijalne čestice (iz tog razloga je ovaj član kvantificiran vremenskom integracijom pripadajućih doprinosa). Uvažavajući dimenzije čestica MP-a, 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_{fx} i v_{fz} u ravnini paralelnoj s vektorom ubrzanja sile teže \mathbf{g} , primjena principa očuvanja mase za x smjer koordinatne osi definira jednadžbu gibanja

$$m_p \cdot \frac{dv_{p,x}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot c_d(\mathbf{v}_p, \mathbf{v}_f) \cdot \rho_f(z_p) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| \quad (2)$$

te se analogno definira i jednadžba gibanja za z koordinatnu os

$$m_p \cdot \frac{dv_{p,z}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot c_d(\mathbf{v}_p, \mathbf{v}_f) \cdot \rho_f(z_p) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot |v_{f,z} - v_{p,z}| + f_g \quad (3)$$

gdje je m_p masa čestice MP-a M , $v_{p,x}$ i $v_{p,z}$ komponente brzine čestice MP LT^{-1} , c_d funkcija faktora otpora oblika 1 , $\rho_f(z_p)$ gustoća tekućine na visinskoj koordinati čestice MP-a z_p ML^{-3} , $A_p(d_p)$ projekcija površine čestice mikroplastike na ravninu okomitu na rezultirajući vektor brzine \mathbf{v}_p L^2 te f_g rezultirajuća uzgonska sila MLT^{-2} definirana s

$$f_g = (\rho_f(z_p) - \rho_p) \cdot V_p(d_p) \cdot \mathbf{g} \quad (4)$$

gdje je ρ_p gustoća čestice MP-a ML^{-3} te $V_p(d_p)$ volumen čestice MP-a L^3 doveden u vezu s karakterističnom dimenzijom čestice MP-a d_p . Valja primijetiti da jed. (1) i (2) definiraju sustav običnih nelinearnih diferencijalnih jednadžbi s varijabilnim koeficijentima. Naime, jednadžbe gibanja nije moguće odvojeno rješavati iz razloga što rješenja zavise o funkciji faktora otpora oblika c_d čiji su argumenti nepoznata brzina čestice MP-a \mathbf{v}_p i brzina

tekućine \mathbf{v}_f . U najjednostavnijem slučaju, unutar kojeg je faktor otpora oblika unaprijed zadan i konstantan, predmetni sustav se može dekomponirati na dvije obične diferencijalne jednadžbe. Pritom, kako će se u nastavku detaljnije obrazložiti, ovakva simplifikacija modela nije opravdana za slučaj gibanja čestica MP-a.

2.2. Faktor otpora oblika c_d

Faktor otpora oblika u najopćenitijem smislu iskazuje mjeru otpora pri gibanju uronjenog predmeta kroz prostor zauzet tekućinom. Ova bezdimenzionalna veličina je definirana fenomenološkim modelom sile otpora oblika, iskazanog na desnoj strani jed. (2) i (3), te objedinjava utjecaje trenja na površini uronjenog tijela i sile nastale integracijom rasporeda tlakova oko objekta na ukupno ustanovljeni otpor gibanja. Osim navedenoga, za faktor otpora oblika je ustanovljena eksperimentalna činjenica da isti zavisi i o lokalnom Reynoldsovom broju Re_p . Valja primijetiti da se navedeno odnosi na Reynoldsov broj definiran za karakterističnu dimenziju uronjenog objekta Re_p , pa se tako za slučaj čestica MP-a isti može definirati u obliku

$$Re_p = \frac{\rho_f(z_p) \cdot \left(\sqrt{(v_{f,x} - v_{p,x})^2 + (v_{f,z} - v_{p,z})^2} \right) \cdot d_p}{\mu} \quad (5)$$

u kojem $\rho_f(z_p)$ predstavlja gustoću tekućine ML^{-3} na koordinati čestice z_p , d_p karakterističnu dimenziju čestice MP-a L , μ dinamičku viskoznost tekućine $ML^{-1}T^{-1}$ te razlika komponenti brzine u brojniku definira relativnu brzinu čestice MP-a u odnosu na lokalnu brzinu tekućine. Za slučaj kuglastih čestica relativno glatke površine, eksperimentima su utvrđena 3 karakteristična područja funkcije $c_d(Re_p)$: (i) Stokesovo područje ($0 \leq Re_p \leq 0,2$) u kojem je c_d definiran omjerom $24/Re_p$, (ii) tranzicijsko područje ($0 \leq Re_p \leq 1000$) unutar kojeg se najčešće koristi Sciller-Neumannova jednadžba te (iii) Newtonovo područje ($Re_p > 1000$) unutar kojeg je c_d 0,44 (Khatmullina i Isachenko, 2017). U svrhu definiranja numeričkog modela gibanja čestica MP-a, prikladno je ova karakteristična područja objedini jednom funkcijom te se u tu svrhu najčešće koristi Clift-Gauvinov model napisan za slučaj kuglastih tijela (6).

$$c_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + 0,15 \cdot Re_p^{0,687}) + \frac{0,42}{1 + \frac{42500}{Re_p^{1,16}}} \quad \text{za: } Re_p < 3 \cdot 10^5 \quad (6)$$

Kako bi faktor otpora oblika c_d uvažio i oblik čestica MP-a, u nastavku se uvodi koncept sferičnosti (engl. *particle sphericity*) razvijen od strane geologa u svrhu kategorizacije oblika geoloških uzoraka. Ovakvom

parametrizacijom oblika se geometrija čestice MP-a okarakterizira indeksom sferičnosti ψ 1 definiran omjerom površine kugle jednakog volumena kao čestica MP i površine same čestice. Kako je indeks sferičnosti ψ problematičan za mjerenje, u nastavku će se koristiti modificirana interpretacija (Wadell, 1932)

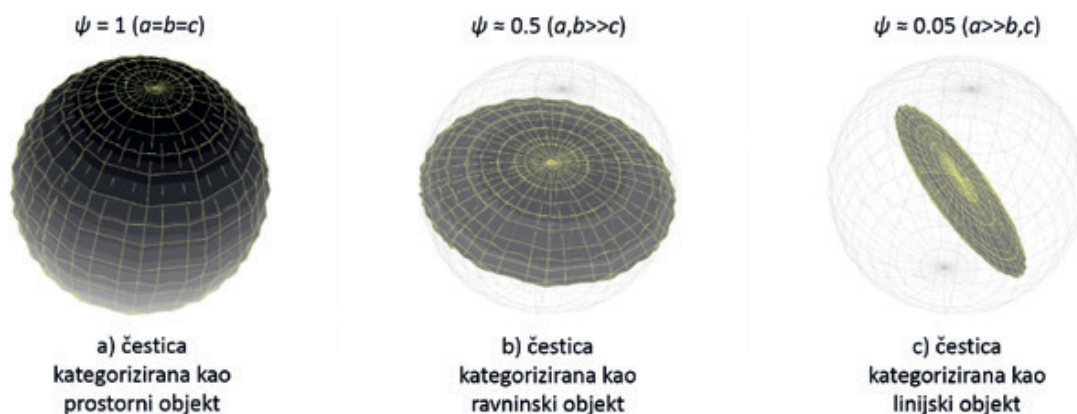
$$\psi = \left(\frac{b \cdot c}{a^2} \right)^{1/3} \quad (7)$$

gdje su a , b i c karakteristične dimenzije čestice mjerene u ortogonalnim pravcima. Kako je ovim informacija geometrijskih karakteristika reducirana na jedan broj ψ , istom nije moguće prepoznati sve raznolikosti koje se mogu pojaviti u oblicima čestica MP-a, ali je moguće prepoznati kategoriju unutar koje čestica MP pripada prema broju dominantnih dimenzija. Tako se mogu razlikovati čestice MP svrstane u kategoriju prostornih objekata, one s dvije dominantne dimenzije odnosno svrstane u kategoriju ravninskih objekata te one s jednom dominantnom dimenzijom odnosno svrstane u kategoriju linijskih objekata. Slika 1 prikazuje navedena 3 karakteristična slučaja te je za iste ilustrirano odstupanje od sferičnog tijela.

Kako bi se uvažio utjecaj promjene oblika čestica MP-a u predmetni model, potrebno je indeks sferičnosti ψ dovesti u vezu s modelom faktora otpora oblika (6) za očekivanu domenu Re . U tu svrhu se koriste rezultati istraživanja provedenog od strane Haidera i Levenspiela (1988) u okviru kojeg je provedena objedinjena analiza podataka objavljenih eksperimentalnih ispitivanja od različitih grupa istraživača i za različite oblike uronjenih čestica. Kako bi se pritom prikupljeni podaci provedenih analiza poopćili za proizvoljne oblike čestica, isti su prethodno normalizirani definirajući indeks sferičnosti ψ za sve ispitane oblike čestica. Na taj način je kvantificiran utjecaj redukcije indeksa sferičnosti ψ na porast faktora otpora oblika c_d . Drugim riječima, čestice s većim odstupanjem geometrije od idealne kugle trpe veću silu otpora oblika. Kako bi se model (6) poopćio za proizvoljne indekse sferičnosti ψ , i time omogućilo unificirano modeliranje faktora otpora oblika za proizvoljne oblike čestica, predložen je četvero-parametarski model (Haider i Levenspiel, 1988)

$$c_d(Re_p) = \frac{24}{Re_p} \cdot (1 + c_1 \cdot Re_p^{c_2}) + \frac{c_3}{1 + \frac{c_4}{Re_p}} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} c_1 &= \exp(2,3288 - 6,4581 \cdot \psi + 2,4486 \cdot \psi^2) \\ c_2 &= 0,0964 + 0,5565 \cdot \psi \\ c_3 &= \exp(4,905 - 13,8944 \cdot \psi + 18,4222 \cdot \psi^2 - 10,2599 \cdot \psi^3) \\ c_4 &= \exp(1,4681 + 12,2584 \cdot \psi - 20,7322 \cdot \psi^2 + 15,8855 \cdot \psi^3) \end{aligned} \quad (9)$$



Slika 1. Ilustracija utjecaja faktora sferičnosti ψ (7) na oblik čestica mikroplastike. Prema tekućoj praksi modeliranja čestica MP-a se na ovaj način mogu modelirati (i) prostorni objekti, (ii) dominantno ravninski objekti te (iii) dominantno linijski objekti.

koji vrijedi za istu domenu broja Re kao i model (6) te u kojem su parametri c_1 , c_2 , c_3 i c_4 dobiveni na temelju regresijske analize i definirani indeksom sferičnosti čestice ψ (8).

Prethodno navedenim su stvorene pretpostavke za definiranje generaliziranog matematičkog modela gibanja čestica MP-a različitih oblika, koji uključuje promjenjivost faktora otpora oblika $c_d(Re_p)$ zavisno o lokalnom broju Re_p i obliku same čestice.

3. NUMERIČKI MODEL GIBANJA ČESTICA MP-a

Prethodno definiran matematički model će se u nastavku koristiti za formiranje numeričkog modela odnosno proračunskog algoritma za proizvoljnu česticu mikroplastike p s unaprijed definiranim početnim položajem (x_p, z_p) , početnom brzinom $(v_{p,x}, v_{p,z})$, gustoćom ρ_p , karakterističnom dimenzijom d_p i koeficijentom sferičnosti ψ_p . U tu svrhu je u prvom redu potrebno provesti diskretizaciju vremenskih derivacija jednadžbi gibanja odnosno diskretizaciju vremenske domene. Predloženi algoritam koristi ekvidistantnu vremensku diskretizaciju. Na početku svakog vremenskog koraka u trenutku n sve su relevantne mehaničke veličine unaprijed poznate (iz početnih uvjeta ili prethodnog vremenskog koraka), dok se na kraju vremenskog koraka u trenutku $n+1$ definiraju aproksimacijom rješenja jednadžbi gibanja (2) i (3). Aproksimacija vremenskih derivacija se provela Eulerovom metodom diferencijacije unaprijed (10).

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{v^{(n+1)} - v^{(n)}}{\Delta t} \quad (10)$$

S obzirom na to da se predmetne analize odnose na relativno velike prostorne domene toka, unutar kojih je potrebno sagledati pronos čestica MP-a (npr. rijeke, morski zaljevi, itd.), te radi relativno male brzine v_p u odnosu na brzinu tekućine v_f koji pronosi čestice MP, numerički algoritam je potrebno definirati na

način da osigura numeričku stabilnost za relativno velike vremenske korake Δt . U te svrhe će se primijeniti implicitna numerička shema u okviru koje se veličine desne strane aproksimiraju na kraju vremenskog intervala odnosno u trenutku $n+1$ čime se formira sustav algebarskih jednadžbi. Direktnom supstitucijom vremenskih derivacija u njihovim aproksimacijama (10), diskretizacijski oblik jednadžbe gibanja (2) u x smjeru koordinatnog sustava poprima aproksimacijski oblik

$$m_p \cdot \frac{v_{p,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}| \quad (11)$$

te se analogno može definirati i diskretizacijski oblik jednadžbe gibanja u z smjeru koordinatnog sustava

$$m_p \cdot \frac{v_{z,p}^{(n+1)} - v_{z,p}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}| \quad (12)$$

Kako bi se omogućilo modeliranje utjecaja piknokline na trajektoriju čestica MP-a, gustoća tekućine ρ_f na desnoj strani jed. (11) i (12) odnosno u modelu sile otpora oblika je definirana kao funkcija visinske koordinate čestice MP-a z_p . Isto tako, treba primijetiti kako je predznak sile otpora oblika definiran razlikom komponenti brzine tekućine i čestice MP-a pa se tako za primjer može sagledati slučaj u kojem je $v_{p,x} > v_{f,x}$ pa sila otpora oblika ima suprotnu orijentaciju od pravca gibanja (i obrnuto).

Diskretizacijski oblik jednadžbi gibanja (11) i (12) definira sustav od dvije nelinearne algebarske jednadžbe koji je za zadane početne uvjete potrebno riješiti kroz iteracijski postupak. U tu svrhu se koristila Newtonova metoda koja u svakom iteracijskom koraku

provodi korekciju pretpostavljenog rješenja na temelju ustanovljene pogreške odnosno reziduala. Rezidual jednadžbe gibanja u x smjeru koordinatnog sustava prema jed. (11) poprima oblik

$$f_x(v_{p,x}, v_{p,z}) = v_{p,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n)} + \frac{\Delta t}{m_p} \left[\frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,x}^{(n+1)} - v_{p,x}^{(n+1)}| \right] \quad (13)$$

dok za z smjer koordinatnog sustava (12) poprima oblik

$$f_z(v_{p,x}, v_{p,z}) = v_{p,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n)} + \frac{\Delta t}{m_p} \left[\frac{1}{2} \cdot c_d(v_p^{(n+1)}, v_f^{(n+1)}) \cdot \rho_f(z_p^{(n+1)}) \cdot A_p(d_p) \cdot (v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}) \cdot |v_{f,z}^{(n+1)} - v_{p,z}^{(n+1)}| \right] \quad (14)$$

U svrhu razlikovanja rješenja sustava između iteracijskih ciklusa, uvodi se brojač iteracijskog ciklusa k . Na taj način se za početnu pretpostavku rješenja sustava, koja se može definirati rješenjem sustava s kraja prethodnog vremenskog koraka ($v_p^{(k=0),(n+1)} = v_p^{(n)}$), u prvoj iteraciji definiraju inkrementi korekcije pretpostavke rješenja $\delta v_{p,x}$ i $\delta v_{p,z}$ koristeći matricnu jednadžbu

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \frac{\partial f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,x}} & \frac{\partial f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,z}} \\ \frac{\partial f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,x}} & \frac{\partial f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)})}{\partial v_{p,z}} \end{bmatrix}}_J \cdot \underbrace{\begin{Bmatrix} \delta v_{p,x} \\ \delta v_{p,z} \end{Bmatrix}}_{\delta} = - \underbrace{\begin{Bmatrix} f_x(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)}) \\ f_z(v_{p,x}^{(k)}, v_{p,z}^{(k)}) \end{Bmatrix}}_r \quad (15)$$

u kojoj je matrica koeficijenata J Jakobijana sustava, δ vektor korekcija pretpostavki rješenja te vektor desne strane r rezidual sustava. Matricni sustav (15) je u svakom iteracijskom ciklusu k potrebno riješiti te dobivenim vektoru δ provesti korekciju pretpostavljenog rješenja prema obrascu

$$\begin{aligned} v_{p,x}^{(n+1),(k+1)} &= v_{p,x}^{(n+1),(k)} + \delta v_{p,x} \\ v_{p,z}^{(n+1),(k+1)} &= v_{p,z}^{(n+1),(k)} + \delta v_{p,z} \end{aligned} \quad (16)$$

Na kraju iteracijskog ciklusa se provodi ažuriranje iteracijskog koraka $k \rightarrow k+1$ te se navedeni postupak ponavlja (15)-(16) sve dok razlika normi vektora $r^{(k+1)}$ i $r^{(k)}$ iteracijskog ciklusa ne postane manja od neke

unaprijed definirane tolerancije ϵ čime je definiran uvjet konvergencije. Računalna implementacija algoritma zahtijeva izračun članova Jakobijane J što zahtijeva simbolički izračun parcijalne derivacije funkcije reziduala (13 i 14) po komponentama rješenja sustava $v_{p,x}$ i $v_{p,z}$ te se time može definirati član $J_{1,1}$

$$\frac{\partial f_x(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,x}} = \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot c_d(v_p, v_f)}{2 \cdot m_p} \cdot \left(|v_{f,x} - v_{p,x}| + \text{sign}(v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot (v_{f,x} - v_{p,x}) \right) + \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,x}}}{2 \cdot m_p} \cdot (v_{p,x} - v_{f,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| + 1 \quad (17)$$

član $J_{1,2}$

$$\frac{\partial f_x(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,z}} = - \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p)}{2 \cdot m_p} \cdot \rho_f(z_p) \cdot (v_{f,x} - v_{p,x}) \cdot |v_{f,x} - v_{p,x}| \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,z}} \quad (18)$$

član $J_{2,1}$

$$\frac{\partial f_z(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,x}} = - \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p)}{2 \cdot m_p} \cdot \rho_f(z_p) \cdot (v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot |v_{f,z} - v_{p,z}| \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,x}} \quad (19)$$

te član $J_{2,2}$

$$\frac{\partial f_z(v_{p,x}, v_{p,z})}{\partial v_{p,z}} = \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot c_d(v_p, v_f)}{2 \cdot m_p} \cdot \left(|v_{f,z} - v_{p,z}| + \text{sign}(v_{f,z} - v_{p,z}) \cdot (v_{f,z} - v_{p,z}) \right) + \frac{\Delta t \cdot A_p(d_p) \cdot \rho_f(z_p) \cdot \frac{\partial c_d(v_p, v_f)}{\partial v_{p,z}}}{2 \cdot m_p} \quad (20)$$

gdje funkcija *sign* definira predznak argumenta odnosno razlike komponente brzine lokalnog volumena tekućine i brzine čestice MP. Kako je funkcija faktora otpora oblika c_d (8) sastavni dio sustava (11 i 12), jer zavisi o rješenju sustava i time uvodi potrebu za formiranjem sustava diferencijalnih jednadžbi, uz ostale poznate numeričke vrijednosti na desnoj strani, članovi Jakobijane *J* sadrže i parcijalne derivacije funkcije c_d obzirom na rješenje sustava $v_{p,x}$ i $v_{p,z}$. Za poopćeni oblik funkcije faktora otpora oblika c_d (8), koji se proteže kroz mjerodavnu domenu broja Re_p i uključuje utjecaj otpora oblika čestica MP-a putem indeksa sferičnosti ψ_p , parcijalna derivacija funkcije (8) obzirom na komponentu brzine $v_{p,x}$ postaje

geometriji eksperimentalnog korita koje se nalazi u hidrotehničkom laboratoriju Građevinskog fakulteta u Rijeci (Slika 2). Ovakav izbor je proveden s namjerom pripreme eksperimentalnog postupka putem kojeg će se istražiti različiti uvjeti pronosa čestica MP-a u realnim okolnostima toka (kao npr. De Leo et al., 2021) te osigurati preduvjeti za kalibraciju numeričkog modela odnosno uvođenje fenomenoloških korekcija u funkciji c_d . U skladu s navedenim, valja primijetiti kako predloženi numerički model ne uzima u obzir rotaciju čestica MP-a što će zasigurno utjecati na definiranje faktora otpora oblika c_d , a u numeričkom modelu zahtijevati definiranje tenzora momenta tromosti *I* čestica MP-a i uvođenja rotacijskih

$$\frac{\partial c_d(\mathbf{v}_p, \mathbf{v}_f)}{\partial v_{p,x}} = \frac{12 \cdot \mu \cdot v_{d,x} \left(c_1 \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{c_2} + 1 \right)}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot v_r^{3/2}} - \frac{12 \cdot c_1 \cdot c_2 \cdot v_{d,x} \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{c_2-1}}{v_r} - \frac{c_3 \cdot c_4 \cdot \mu \cdot v_{d,x}}{2 \cdot d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \left(\frac{c_4 \cdot \mu}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}} + 1 \right)^2 \cdot v_r^{\frac{3}{2}}} \quad (21)$$

te obzirom na komponentu brzine $v_{p,z}$

$$\frac{\partial c_d(\mathbf{v}_p, \mathbf{v}_f)}{\partial v_{p,z}} = \frac{12 \cdot \mu \cdot v_{d,z} \left(c_1 \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{c_2} + 1 \right)}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot v_r^{3/2}} - \frac{12 \cdot c_1 \cdot c_2 \cdot v_{d,z} \cdot \left(\frac{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}}{\mu} \right)^{c_2-1}}{v_r} - \frac{c_3 \cdot c_4 \cdot \mu \cdot v_{d,z}}{2 \cdot d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \left(\frac{c_4 \cdot \mu}{d_p \cdot \rho_f(z_p) \cdot \sqrt{v_r}} + 1 \right)^2 \cdot v_r^{\frac{3}{2}}} \quad (22)$$

gdje je $v_r = 2 \cdot v_{f,x} - 2 \cdot v_{p,x} + v_{d,x} = 2 \cdot v_{f,x} - 2 \cdot v_{p,x}$ te $v_r = (v_{f,x} - v_{p,x})^2 + (v_{f,z} - v_{p,z})^2$. U svrhu testiranja prikazanog numeričkog modela, isti je implementiran u programskom jeziku Python te su karakteristični numerički primjeri prikazani u nastavku. Valja primijetiti kako je izrada numeričkih algoritama neophodna u kontekstu unaprijeđenih spoznaja vezanih za modeliranje pronosa čestica MP-a u ekosustavu (Hardesty et al., 2017), ali je isto tako posebno važno rezultate istih dovesti pred eksperimentalnu provjeru što je predmet nadolazećih istraživačkih aktivnosti.

4. NUMERIČKI PRIMJER

Prostorna domena toka tekućine, unutar koje će se promatrati dinamika gibanja čestica MP-a, je za izradu numeričkih primjera odabrana prema

stupnjeva slobode. Istovremeno, u svrhu pripreme eksperimentalnog postupka, prikazani numerički model je korišten u pogledu definiranja parametara čestica MP-a te geometrijskih i kinematičkih karakteristika toka u okviru kojih se postiže sedimentacija čestica MP-a unutar vremenske domene eksperimentalnog postupka i unutar prostorne domene eksperimentalnog žlijeba. Drugim riječima, izbor navedenih parametara mora biti prikladan odabran radi optimizacije eksperimentalnog postupka odnosno provjeren prethodno provedbi eksperimenta radi utvrđivanja očekivanog rasporeda sedimentiranih čestica. Eksperimentalni postupak će tako omogućiti komparaciju modelski predviđenih i eksperimentalno izmjerenih kinematičkih karakteristika čestica MP-a, ali i ujedno utjecaj interakcije čestica na dinamiku gibanja. Naime, upuštajući čestice MP na



Slika 2. Fotografija eksperimentalnog žlijeba u hidrotehničkom laboratoriju Građevinskog fakulteta u Rijeci unutar kojeg će se provoditi ispitivanja dinamike gibanja čestica MP-a u različitim uvjetima toka tekućine (vode)



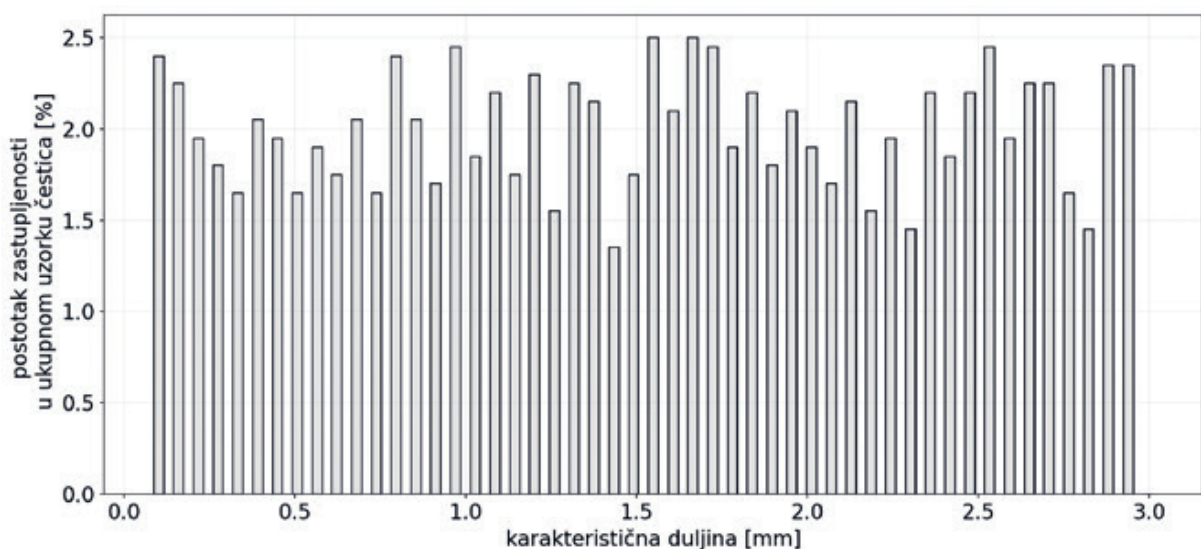
Slika 3. Fotografija 3D printera korištenog za pripremu uzorka čestica mikroplastike s unaprijed definiranim oblicima. Fotografija prikazuje i pripremu uzorka čestica mikroplastike različitih oblika koji uključuju čestice kategorizirane kao (i) prostorni objekti, one kategorizirane kao (ii) ravninski objekti te one kategorizirane kao (iii) linijski objekti. Na fotografiji izrađenih uzorka čestica MP-a valja razlikovati sam uzorak čestice od okolnog podupirućeg materijala koji se uklanja ispiranjem i koji 3D printer koristi za potrebe izrade zadane geometrije.

jednom kraju eksperimentalnog korita, te prethodno provodeći prikladan izbor parametara čestica MP-a i parametara toka tekućine tako da se duž korita ostvari sedimentacija pojedinih uzoraka čestica MP-a, moguće je pratiti izdvajanje čestica MP-a iz sveukupnog uzorka (uslijed taloženja) te time isključiti njihov daljnji utjecaj na preostale čestice koje se još nalaze u struji tekućine. Za ponovni eksperimentalni postupak bez prisustva prethodno istaloženih čestica ostvaruju se pretpostavke za komparaciju dinamike nesedimentiranih čestica MP-a i time otvara mogućnost kvantificiranja indeksa interakcije između čestica.

Kako bi se ispunio zahtjev za kontroliranim uvjetima eksperimentalnog postupka, potrebno je adekvatno definirati sve karakteristične parametre čestica MP-a. U tom smislu je posebno izazovno definiranje veličine čestica MP-a d_p te naročito njihov oblik. U tu svrhu će se koristiti visoko precizan 3D printer koji topi različite vrste plastike i pretvara u zadane oblike s točnosti izrade do 32 mikrona i minimalnom veličinom uzorka od 0,4 mm što ulazi u prethodno definirani raspon čestica MP-a. Na Slici 3 je prikazana fotografija

korištenog 3D printera te fotografija izrađenih testnih uzoraka čestica MP između kojih se mogu prepoznati uzorci s tri dominantne dimenzije (3D uzorci), uzorci s dvije dominantne dimenzije (2D uzorci) te uzorci s jednom dominantnom dimenzijom (1D uzorci). Ovakva geometrija uzorka se može direktno dovesti u vezu s ranije uvedenim konceptom indeksa sferičnosti ψ te se tako opravdava osnova za nadolazećom komparativnom analizom između rezultata modela i eksperimenta.

Izbor prostorne domene toka je bio motiviran geometrijom eksperimentalnog žlijeba koji ima radnu sekciju dugu 12,5 m i poprečni presjek širine 30,9 cm te visine 45,0 cm. Polje brzine toka je isto tako zadano u skladu s eksperimentalnim mogućnostima ovog laboratorijskog uređaja te tako po visini poprečnog presjeka definiran eksponencijalan profil brzina. Prethodno provedenim mjerenjima je utvrđeno da se profil brzine u eksperimentalnom žlijebu može aproksimirati



Slika 4. Statistička distribucija karakteristične duljine d_p zadanog uzorka od 2000 čestica MP

modelom $v_{f,x} = v_{f,max} \cdot ((z+h)/h)^\alpha$ unutar kojeg je h dubina vode u žlijebu, z visinska koordinata mjerena od dna žlijeba, $v_{f,max}$ brzina horizontalnog toka na površini vode te α parametar za definiranje geometrije profila koji se za potrebe ovog rada usvojio jednakim 0,3. Maksimalna brzina toka na površini vode $v_{f,max}$ je zadana s iznosom od 0,1 m/s te se gibanje čestica unutar struje tekućine promatra kroz vremensku domenu od 180 sekundi. Valja primijetiti da je vremenska domena veća od one za koju bi površinski sloj vode dosegao kraj prostorne domene, a motivacija za navedeno slijedi iz neravnomjernog profila brzine, odnosno iz potrebe osiguravanja uvjeta toka u okviru kojih i čestice MP-a na visinskim kotama s manjom brzinom tekućine dosegnu drugi kraj prostorne domene toka (eksperimentalnog žlijeba). Vremenski korak je zadan u iznosu od 0,5 sekundi te je tako definirano ukupno 360 vremenskih koraka.

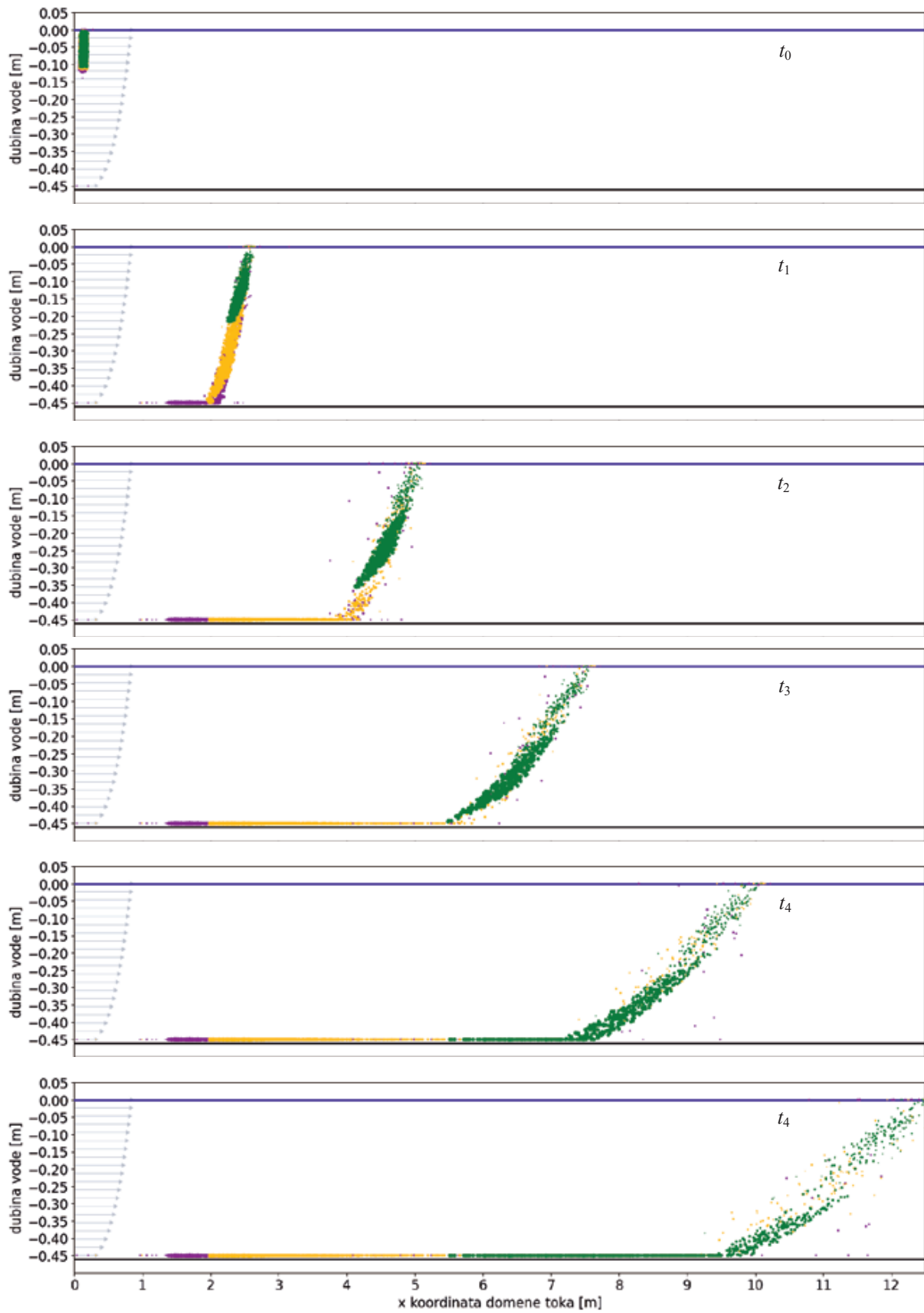
Numerički primjer je proveden za 2000 čestica MP-a te je gustoća čestica zadana Gaussovom statističkom distribucijom sa srednjom vrijednosti $1035,0 \text{ kg/m}^3$ te standardnom devijacijom od 10 kg/m^3 . Gustoća vode je definirana s iznosom od 1000 kg/m^3 . Karakteristična veličina čestica je zadana uniformnom statističkom distribucijom putem koje je karakteristična dimenzija čestica MP-a zadana između granica od 0,1 do 3,0 mm (Slika 4). Indeks sferičnosti čestica MP-a je definiran u tri kategorije: (i) čestice mikroplastike s tri dominantne dimenzije (3D uzorci), (ii) čestice s dvije dominantne dimenzije (2D uzorci) te (iii) čestice s jednom dominantnom dimenzijom (1D uzorci).

Na slici 5 je prikazana sekvenca položaja čestica mikroplastike u jednolikim vremenskim razmacima od 25 sekundi. Iako je modelom uvažena promjena oblika čestica MP-a, sve su čestice na slikama prikazane u obliku kruga gdje veličina promjera kruga iskazuje relativni odnos između čestica i ne predstavlja apsolutnu veličinu čestice obzirom na domenu toka. Na svim slikama je prikazan i profil brzina vode u domeni toka prema ranije definiranom modelu.

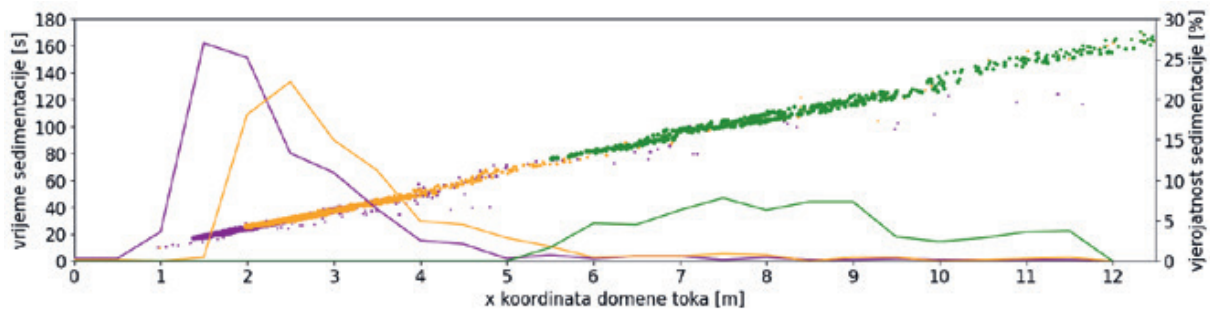
Na slici 5 trenutak t_0 prikazuje inicijalni položaj čestica MP-a (valja primijetiti da su uzdužna i vertikalna dimenzija domene toka prikazane u distorziranom mjerilu). Za zadani uzorak čestica MP-a prva se taloženja na dno domene toka događaju nakon 10 sekundi analize te se prvenstveno odnose na čestice s najmanjim otporom oblika odnosno čestice s indeksom sferičnosti ψ bliskim 1. U trenutku t_1 se navedeno može prepoznati jer veći dio čestica s najmanjim faktorom c_d dosežu dno domene toka. Pritom, valja primijetiti kako se u grafičkom prikazu čestice prikazuju redosljedom: ljubičaste čestice, žute čestice te potom zelene čestice pa se uslijed preklapanja položaja ne vide svi zastupljeni oblici sve dok se pojedina grupacija čestica ne taloži na dno. U trenutku t_2 su gotovo sve čestice s najvećim indeksom sferičnosti na dnu domene toka te je i veći dio čestica sa srednjim indeksom sferičnosti dosegao dno domene. U ovom prvom dijelu domene toka, prepoznaje se diferencijacija u prostornom rasporedu čestica na

dnu domene toka, ali pritom valja primijetiti da postoji područje u kojem se nalazi mješavina ljubičastih i žutih čestica. Ovaj detalj je važno prepoznati u kontekstu nadolazećih laboratorijskih ispitivanja jer će uvjetovati postupak analize prikupljenih podataka odnosno uzorkovanje s dna eksperimentalnog korita. Za razliku od navedenoga, čestice s najvećim faktorom otpora oblika c_d odnosno najmanjim indeksom sferičnosti ψ (zelene čestice) uspijevaju se jasno diferencirati u pogledu taloženja od preostalih čestica time što je vertikalna putanja istih bila pod utjecajem najveće sile otpora. Interesantno je pritom primijetiti kao je navedeni efekt izražen i posljedica nelinearnosti jednadžbi gibanja i funkcije faktora otpora oblika. U narednim trenucima se može pratiti proces taloženja samo zelenih čestica koje zahtijeva veći vremenski period radi većih sila otpora oblika, a time ujedno i rezultira većim prostornim rasporedom taloženih čestica na dno domene toka. Isto tako valja primijetiti da probabilistički izbor gustoće te karakteristične duljine čestica MP-a (koje utječu na vertikalnu komponentu sile) rezultiraju česticama koje su dosegle kraj domene toka bez prethodnog taloženja te se u tom pogledu može prepoznati da se navedeno odnosi na sve zastupljene oblike, ali u različitim omjerima. Daleko najveći broj čestica koje su dosegle kraj prostorne domene i izbjegle taloženje, pripada grupaciji s najvećim faktorom otpora oblika c_d odnosno najmanjim indeksom sferičnosti ψ . Osim najvećeg faktora otpora oblika c_d u navedenu grupaciju pripadaju čestice s najmanjom karakterističnom dimenzijom d_p koja je utjecala na iznos rezultirajuće vertikalne sile. Prostorni raspored sedimentiranih čestica MP-a se može sagledati primjenom statističke analize (Kooi, Koelmans, 2019) na način da se definira vjerojatnost taloženja za pojedinu grupaciju čestica MP-a odnosno za čestice koje imaju isti ili slični faktor sferičnosti ψ . Vjerojatnost taloženja se može definirati omjerom sedimentiranih čestica na nekoj konačnoj dužini Δx prostorne domene toka i ukupnog broja čestica u toj grupaciji. U te svrhe je dno prostorne domene toka podijeljeno na 25 segmenata od 0,5 m i u istima se provodilo prebrojavanje taloženih čestica. Funkcija gustoće vjerojatnosti taloženja tako definira vjerojatnost da se čestica iz pojedine grupacije nalazi na određenom dijelu dna prostorne domene toka. Kako su razmatrane 3 kategorije oblika, definirane su i tri zasebne funkcije gustoće vjerojatnosti. Rezultat ovakve analize je prikazan na Slici 6 na kojoj su površine ispod funkcija gustoća vjerojatnosti jednake za sve tri grupacije ispitanih uzoraka čestica MP-a.

Valja primijetiti kako se funkcija gustoće vjerojatnosti za slučaj čestica MP-a s tri dominantne dimenzije (ljubičasta krivulja) i čestica s dvije dominantne dimenzije (žuta krivulja) u dobrom dijelu preklapaju te da su nesimetrične. Pritom je funkcija gustoće vjerojatnosti čestica MP-a s manjim faktorom otpora oblika (žuta krivulja) pomaknuta u desno i ima manju vršnu vrijednost, ali i veće rasipanje uzduž domene toka. Isto tako, valja primijetiti kako je na potezu od 5 do 6 metra domene toka



Slika 5. Prostorni raspored ispitano uzorka od 2000 čestica MP-a u 6 jednoliko razmaknutih vremenskih trenutaka između kojih je proteklo 25 sekundi. Ljubičasta boja ilustrira prostorne čestice (3D), žuta boja ravninske čestice (2D) te zelena boja linijske čestice (1D).



Slika 6. Za pojedinu česticu MP-a dijagram na lijevoj ordinati prikazuje proteklo vrijeme do trenutka kada je čestica dotakla dno prostorne domene (točkasti prikaz čestica), dok se na desnoj ordinati nalazi vjerojatnost taloženja tri ispitanih grupacija čestica prema zadanom obliku odnosno indeksu sferičnosti (puna linija prikazuje funkciju gustoće vjerojatnosti za pojedinu grupaciju čestica MP-a)

sedimentacija minimalna te da se tako jasno diferencira područje sedimentacije čestica MP-a s najmanjim otporom oblika (zelena krivulja). Za slučaj ove grupacije čestica MP-a, ustanovljeno je najveće rasipanje uzduž domene toka s malim razlikama u vjerojatnosti taloženja. Dijagram na Slici 6 isto tako prikazuje vrijeme proteklo za pojedinu česticu MP-a do dosezanja dna domene toka. Ovaj dio je ilustriran točkastim prikazom čestica MP-a te ordinatom na lijevoj strani na kojoj se nalazi proteklo vrijeme do trenutka sedimentacije. Grupiranje čestica po pravcu slijedi iz činjenice da s relativno velikim uzorkom različitih čestica MP-a u svakom trenutku postoji visoka vjerojatnost taloženja.

5. ZAKLJUČAK

U radu je prikazan teorijski model gibanja čestica MP-a koji uvažava relevantne geometrijske i mehaničke karakteristike čestica: (i) gustoću ρ_p , (ii) karakterističnu dimenziju d_p te (iii) oblik čestica MP-a. U svrhu uvažavanja razlika u oblicima čestica mikroplastike, korišten je koncept sferičnosti putem kojeg se mjeri odstupanje oblika čestice MP-a od kugle promjera d_p te se tako varijabilni oblici čestica mogu kategorizirati u tri osnovne skupine oblika: (i) čestice s tri dominantne dimenzije (3D uzorci), (ii) čestice s dvije dominantne dimenzije (2D uzorci) te (iii) čestice s jednom dominantnom dimenzijom (1D uzorci). Ovakvom simplifikacijom je ostvarena pretpostavka definiranja jedinstvene funkcije faktora otpora oblika c_d koristeći poopćeni Clift-Gauvinov model. Na taj način model faktora otpora oblika c_d uvažava promjene u geometrijskim karakteristikama čestica MP-a te zavisi o 4 parametra c_1 , c_2 , c_3 i c_4 čija je vrijednost zavisna o indeksu sferičnosti ψ . Jednadžbe gibanja čestica MP-a su definirane za slučaj laminarnog strujanja tekućine, a utjecaj turbulencije nije uključen u predmetnu analizu te će biti predmet narednih adaptacija modela. U svrhu definiranja pripadajućeg numeričkog algoritma, korištena je Eulerova metoda diferencijacije unaprijed dok su varijable formiranog sustava diferencijalnih jednadžbi na desnoj strani definirane na kraju vremenskog koraka kako bi se postigla bezuvjetna numerička stabilnost karakteristična za implicitnu shemu integracije. Rezultirajući sustav nelinearnih algebarskih jednadžbi

je unutar svakog vremenskog koraka riješen primjenom Newtonove iteracijske metode. U svrhu izrade numeričkih primjera, formirani numerički algoritam implementiran je u programskom jeziku Python. Numerički primjer je proveden za domenu toka koja odgovara radnoj sekciji eksperimentalnog žlijeba na Građevinskom fakultetu u Rijeci te je ovakav izbor bio motiviran nadolazećim eksperimentalnim ispitivanjima koja će se prvenstveno provoditi u svrhu evidentiranja utjecaja oblika čestica MP-a na dinamiku gibanja, ali i utjecaje eventualne mehaničke interakcije između čestica. Numerički primjer je proveden za 2000 čestica MP-a u kojem je zadana grupacija od 3 indeksa sferičnosti kojima se nastojalo modelirati uzorke s tri dominantne prostorne dimenzije (3D uzorci), s dvije dominantne dimenzije (2D uzorci) te s jednom dominantnom dimenzijom (1D uzorci). Strujanje tekućine unutar domene toka je zadano s maksimalnom brzinom od 0,1 m/s na površini vode i s eksponencijalnim profilom brzina koji odgovara profilu brzina koji se može ostvariti u navedenom eksperimentalnom žlijebu. Numerička analiza ide u prilog tezi da se predloženim eksperimentalnim postupkom u stanovitoj mjeri mogu diferencirati područja taloženja čestica različitih oblika te time isključiti utjecaj čestica koje su dotakle dno domene toka na preostali dio koji se još giba strujom tekućine. Isto tako, za čestice s najvećim faktorom otpora oblika odnosno najmanjim indeksom sferičnosti, jasno se ukazuju veća područja taloženja i ujedno područje unutar kojeg se nisu istaložile čestice preostalih oblika. S druge strane, prostorne i ravninske čestice dijele područje dna korita na kojem su se istaložile, ali se pritom u funkciji vjerojatnosti taloženja može prepoznati prostorni pomak. Izloženi numerički model nudi mogućost modeliranja 3 dominantna parametara s kojima je uvjetovana dinamika gibanja čestica MP-a (gustoća, dimenzija i oblik) te je cjelovito prikazan i relativno jednostavan za implementaciju u druga programska okruženja (npr. OpenFOAM) s kojima se modelira polje brzine tekućine i tako omogućuje analizu gibanja suspendiranih čestica MP-a. U nadolazećim istraživačkim aktivnostima će se prikazani numerički model staviti pred eksperimentalnu kušnju. ■

6. ZAHVALE

Ovaj rad je nastao kao rezultat rada na projektu *Računalni model strujanja, poplavlivanja i širenja onečišćenja u rijekama i obalnim morskim područjima* (referentni broj KK.05.1.1.02.0017) koji financira Ministarstvo zaštite okoliša i energetike iz operativnog programa Konkurentnost i Kohezija sufinanciranim sredstvima iz Europskog fonda za regionalni razvoj. Za

potrebe provedbe eksperimentalnih istraživanja (koja su u tijeku), korištena je laboratorijska oprema koja je na Građevinskom fakultetu u Rijeci dopremljena kroz projekt *Razvoj istraživačke infrastrukture na kampusu Sveučilišta u Rijeci* (RC.2.2.06-0001) koji je sufinanciran iz Europskog fonda za regionalni razvoj i Ministarstva znanosti, obrazovanja i sporta RH.

7. LITERATURA

- Andrady, A.L. (2011): Microplastics in the marine environment, *Marine Pollution Bulletin*, Vol. 62, pp. 1596-1605.
- Chan-Mou, T. (1947): Equation of Motion for a Particle Suspended in a Homogeneous Field, *Mean Value and Correlation Problems connected with the Motion of Small Particles suspended in a turbulent fluid*, Springer.
- Chubarenko I., Bagaev A., Zobkov M., Esiukova E. (2016): On some physical and dynamical properties of microplastic particles in marine environment, *Marine Pollution Bulletin*, Vol. 108, No. 1-2, pp. 105-112.
- Clift, R.; Gauvin, W.H. (1970): The motion of particles in turbulent gas streams, *Proc. Chemeca*, Vol. 70, pp. 14-28.
- De Leo, A.; Cutroneo, L.; Sous, D.; Stocchino, A. (2021): Settling Velocity of Microplastics Exposed to Wave Action, *J. Mar. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 2, pp. 2-16.
- Fuente, R.; Drótos, G.; Hernández-García, E.; López, C.; van Sebille, E. (2021): Sinking microplastics in the water column: simulations in the Mediterranean Sea, *Ocean Science*, Vol 17, No. 2, pp. 431-453.
- Fytianos, G.; Ioannidou, E.; Thysiadou, A.; Mitropoulos, A.C.; Kyzas, G.Z. (2021): Microplastics in Mediterranean Coastal Countries: A Recent Overview, *J. Mar. Sci. Eng.*, Vol. 9, No. 1, pp. 1-13.
- Haider, A.; Levenspiel, O. (1988): Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Non-Spherical Particles, *Powder Tehnology*, Vol. 58, pp. 67-70.
- Hantoro, I.; Löhr, A.J.; van Belleghem, F.G.A.J.; Widanarko, B.; Ragas, Ad.M.J. (2019): Microplastics in coastal areas and seafood: implications for food safety, *Food Additives & Contaminants: Part A*, Vol. 36, No. 5.
- Hardesty, B.D.; Harari, J.; Isobe, A.; Lebreton, L.; Maximenko, N.; Potemra, J.; van Sebille, E.; Vethaak, A.D.; Wilcox, C. (2017): Using Numerical Model Simulations to Improve the Understanding of Microplastic Distribution and Pathways in the Marine Environment, *Frontiers in Marine Science*, Vol. 31.
- Horton, A.A.; Dixon, S.J. (2017): Microplastics: An introduction to environmental transport processes, *Wires Water*, Vol. 5, No. 2.
- Khatmullina, L.; Chubarenko, i. (2019): Transport of marine microplastic particles: why is it so difficult to predict?, *Canadian Science Publishing, Anthropocene Coasts*, Vol. 2, pp. 293-305.
- Khatmullina, L.; Isachenko, I. (2017): Settling velocity of microplastic particles of regular shapes, *Marine Pollution Bulletin*, Vol. 114, No. 2, pp. 871-880.
- Kooi, M.; Koelmans, A.A. (2019): Simplifying Microplastic via Continuous Probability Distributions for Size, Shape, and Density, *Environmental Science & Tehnology Letters*, Vol. 6, pp. 551-557.
- Llorcaa, M.; Álvarez-Muñoz, D.; Ábalosa, M. Rodríguez-Mozaz, S.; Santos, L.H.M.L.M. Leónd, V.M.; Campillod, J.A.; Martínez-Gómez, C.; Abada, E.; Farré, M. (2020): Microplastics in Mediterranean coastal area: toxicity and impact for the environment and human health, *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, Vol. 27.
- Long, M.; Moriceau, B.; Gallinari, M.; Lambert, C.; Huvet, A.; Raffray, J.; Soudant, P. (2015): Interactions between microplastics and phytoplankton aggregates: Impact on their respective fates, *Marine Chemistry*, Vol. 175, pp. 39-46.
- Petersen, F.; Hubbart, J.A. (2021): The occurrence and transport of microplastics: The state of the science, *Science of The Total Environment*, Vol. 758.
- Sundt, P.; Schulze, P-E.; Syversen, F. (2014): Sources of microplastic-pollution to the marine environment, Report no M-321/2015, *Asker: Mepex Consult*.
- Traugott, H.; Liberzon, A. (2017): Experimental study of forces on freely moving spherical particles during resuspension into turbulent flow, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 88, pp. 167-178.
- Zhang, H. (2017): Transport of microplastics in coastal seas, Estuarine, *Coastal and Shelf Science*, Vol. 199, pp. 74-86.
- Wadell, H. (1932): Volume, shape, and roundness of rock particles. *Journal of Geology*, Vol. 40, pp. 443-451.

MODEL OF MICROPLASTIC PARTICLE MOVEMENT IN INHOMOGENEOUS AND LAMINAR VELOCITY FIELDS

Abstract. From the sustainable development perspective, non-degradability and a constant microplastic particle increase in aquatic recipients require urgent development of protection measures against unfavourable environmental consequences. In order to do that, we firstly need an understanding of the microplastics genesis and the mechanics of its movement in the biosphere. This requires research activities documented in this paper. They are related to the presentation of a selected theoretical basis for modelling the movement of microplastic particles, and a relatively simple numerical algorithm developed for modelling the transport of microplastic particles in inhomogeneous field of fluid velocity in planar and laminar flow. The Lagrange's description of the movement of microplastic particles is necessary because it is impossible to define the subject REV and the continuous concentration field. Analyses of practical importance require a relatively large number of microplastic particles, so it is necessary to develop a numeric algorithm through a compromise solution that attempts to minimise the computational time and maximise the impact of all dominant physical processes. Therefore, the proposed model is based on a system of two ordinary, nonlinear differential equations. In order to introduce the possibility of modelling particles of different shapes, the resistance factor of c_{dshape} is modelled by a generalised four-parameter Clift and Gauvin model, where the parameters are defined by the spherical factor of a microplastic particle or the measure of a particle shape deviation from the sphere. The proposed modelling approach can be incorporated into some available software solutions (e.g. OPENFOAM). The end of the paper contains the presentation of a numerical example obtained by implementing the algorithm in the Python programming language and a review of the next experimental activities.

Key words: resistance factor of a shape, microplastics, ordinary differential equations, generalised Clift and Gauvin model, transport of microplastic particles

MODELL FÜR DIE STRÖMUNG VON MIKROPLASTIKPARTIKELN IM INHOMOGENEN UND LAMINAREN GESCHWINDIGKEITSFELD

Zusammenfassung. Im Rahmen der nachhaltigen Entwicklung ist es wegen der Nichtabbaubarkeit und ständiger Erhöhung der Anzahl von Mikroplastikpartikeln in Gewässern erforderlich, Schutzmaßnahmen gegen ungünstige Umweltauswirkungen dringend zu entwickeln. Das impliziert, dass die Entstehung der Mikroplastik und die Bewegungsmechanik dieser Schadstoffe in der Biosphäre schon gut verstanden sind. Das war auch die Motivation für die hier beschriebenen Untersuchungen, die auch eine Darstellung der theoretischen Grundlage für das Modellieren der Mikroplastikpartikelbewegung einbeziehen sowie einen relativ einfachen numerischen Algorithmus, der zum Zwecke der Modellierung des Transportes von Mikroplastikpartikeln im inhomogenen Flüssigkeitgeschwindigkeitsfeld in ebener und laminarer Strömung entwickelt worden ist. Die Lagrangesche Darstellung der Bewegung von Mikroplastikpartikeln ist unentbehrlich, weil das gegenständliche repräsentative Elementarvolumen (REV) und das kontinuierliche Konzentrationsfeld nicht definiert werden können. Da praxisrelevante Analysen eine relative große Anzahl von Mikroplastikpartikeln benötigen, ist es notwendig, den numerischen Algorithmus als eine Kompromisslösung zu gestalten, im Rahmen derer die Berechnungszeit minimiert und der Einfluss aller dominanten physikalischen Prozesse maximiert wird. Das vorgeschlagene Modell basiert auf einem System von zwei gewöhnlichen und nichtlinearen Differenzgleichungen. Um dabei auch die Modellierung von Partikeln unterschiedlicher Form zu ermöglichen, wurde der Formwiderstandsfaktor c_{dshape} anhand des verallgemeinerten Vier-Parameter-Modells von Clift und Gauvin modelliert, in dem die Parameter durch die Sphärizität des Mikroplastikpartikels bzw. Maß für die Abweichung der Partikelform von der Kugel definiert werden. Der vorgeschlagene Ansatz zur Modellierung kann in frei erhältliche Simulationspakete (z.B. OpenFOAM) übernommen werden. Am Ende der Arbeit wird ein numerisches Beispiel der Umsetzung des Algorithmus in die Programmiersprache Python dargestellt, und zukünftige Untersuchungsaktivitäten werden erwähnt.

Schlüsselwörter: Formwiderstandsfaktor, Mikroplastik, gewöhnliche Differenzgleichungen, verallgemeinertes Modell von Clift und Gauvin, Transport von Mikroplastikpartikeln