



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA  
BARCELONATECH  
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE GRAU

## Grau en Enginyeria de l'energia

El destí dels microplàstics en mars i oceans: un estudi de mecànica de fluids sobre l'agregació de partícules



## Memòria i Annexos

**Autor:** Dídac Martínez i Bachs  
**Director:** Lluís Jofre Cruanyes  
**Convocatòria:** Gener 2021



## **Resum**

La presència de microplàstics en mars i oceans suposa una problemàtica pels ecosistemes marins afectant directament la salut dels éssers vius que s'hi troben. Els microplàstics col·lisionen amb biopartícules, per efecte de mecanismes de turbulència i càustiques, formant agregats que provoquen la dispersió vertical d'aquests microplàstics fet que suposa una dificultat afegida per la seva possible extracció de les aigües marines. Aquest treball té com a objectiu estudiar la dinàmica de la ràtio de col·lisions i la formació d'agregats entre microplàstics i biopartícules al mar, així com determinar la importància dels grups adimensionals que regeixen les interaccions entre elles. Els resultats que es presenten s'han obtingut a través de simulacions computacionals que han permès obtenir la ràtio de col·lisió i les característiques constitutives dels agregats formats. S'ha utilitzat un model teòric per determinar en quines configuracions inicials predomina l'efecte de la turbulència o l'efecte de la càustica en la mecànica de producció de col·lisions.

## Resumen

La presencia de microplásticos en mares y océanos supone una problemática para los ecosistemas marinos afectando directamente la salud de los seres vivos que ahí se encuentran. Los microplásticos colisionan con biopartículas, por efecto de mecanismos de turbulencia y causticas, formando agregados que provocan la dispersión vertical de estos microplásticos, hecho que supone una dificultad añadida para su posible extracción de aguas marinas. Este trabajo tiene como objetivo estudiar la dinámica de la ratio de colisión i la formación de agregados entre microplásticos y biopartículas en el mar, así como determinar la importancia de los grupos adimensionales que rigen las interacciones entre ellas. Los resultados que se presentan se han obtenido a través de simulaciones computacionales que han permitido obtener la ratio de colisiones y las características constitutivas de los agregados formados. Se ha usado un modelo teórico para determinar en cuáles configuraciones iniciales prima el efecto de la turbulencia o el de la cáustica en el mecanismo de producción de colisiones.

## **Abstract**

The presence of microplastics in seas and oceans is a problem for marine ecosystems, directly affecting the health of living organisms being there. Microplastic collide with bioparticles due to the effect of turbulence and caustic mechanisms, creating aggregates that cause the vertical dispersion of these microplastics, which is an added difficulty to their possible extraction from sea. This work aims to study the dynamics of the collision rate and the formation of aggregates between microplastic and bioparticles in the sea, as well as to determine the importance of the dimensionless groups that govern the interactions between them. The results presented have been obtained through computational simulations that have made possible to obtain the collision rate and the constitutive characteristics of formed aggregates. A theoretical model has been used to determine in which initial configurations the effect of turbulence or the effect of caustics predominates on collision production mechanisms.

## Agraïments

M'agradaria agrair al tutor d'aquest treball de final de grau, en Lluís Jofre Cruanyes, per tota l'ajuda que m'ha ofert durant la realització d'aquest treball, tant per les eines i coneixements que m'ha prestat per a poder dur-lo a terme, com per la oportunitat de participar en aquest projecte d'estudi de la dinàmica dels microplàstics en agregacions motivades per turbulència que està duent a terme. Així mateix, també m'agradaria agrair a la Mona Rahmani que també m'hagi permès formar part d'aquest projecte que comparteix amb en Lluís Jofre.

## Glossari

|   |  |
|---|--|
| $\eta$                                  | Microescala de Kolmogorov [m]  |
| $\lambda$                               | Microescala de Taylor [m]  |
| $\Lambda$                               | Escala Integral [m]  |
| $u_{RMS}$                               | Mitjana quadràtica de fluctuacions de velocitats [m/s]                           |
| $\tau_\eta, \tau_\lambda, \tau_\Lambda$ | Períodes de relaxació de Kolmogorov, de Taylor i Integral [s]                    |
| $\tau_{Pi}$                             | Temps de relaxació de la família de partícules k [s]                             |
| $\nu_f, \mu_f$                          | Viscositat cinemàtica [m <sup>2</sup> /s] i viscositat dinàmica [Pa·s] del fluid |
| $\epsilon$                              | Ràtio de dissipació d'energia [m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]                  |
| $\rho, P$                               | Densitat [kg/m <sup>3</sup> ] i Pressió [Pa] i                                   |
| $k$                                     | Energia cinètica turbulent [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]                     |
| $d, m$                                  | Diàmetre [m] i Massa [kg]  |
| $N_{Pi}$                                | Nombre de partícules de la família "i"   |
| $N_g$                                   | Nombre de famílies o grups de partícules   |
| $n_p$                                   | Densitat numèrica de partícules [prts/m <sup>3</sup> ]                           |
| $\vec{x}$                               | Vector de posició [m]  |
| $\vec{u}_f$                             | Vector velocitat del fluid [m/s]   |
| $\vec{u}_p$                             | Vector velocitat particular del fluid en la posició de la partícula [m/s]        |
| $\vec{x}_p$                             | Vector velocitat de la partícula [m/s]   |
| $\delta$                                | Funció d'impuls o Delta de Dirac [m <sup>-3</sup> ]                              |
| $MLR_i$                                 | Fracció de càrrega massica de partícules en el fluid [-]                         |
| $St_{\lambda_i}$                        | Nombre de Stokes de Taylor del tipus de partícula i [-]                          |
| $Re_\lambda, Re_\eta, Re_\Lambda$       | Nombres de Reynolds de Taylor [-], de Kolmogorov [-] i Integral [-]              |
| $R$                                     | Ràtio de Col·lisions [-]   |
| $R_{caust}$                             | Efecte de la càustica en la ràtio de col·lisions [-]                             |
| $R_{adv}$                               | Efecte de la turbulència en la ràtio de col·lisions [-]                          |
| $L$                                     | Longitud del domini o del volum d'estudi [m]                                     |
| $C_R$                                   | Coefficient de restitució  |
| $v_{A_{AI}}, v_{B_{AI}}$                | Velocitat de les partícules A i B abans de l'impacte [m/s]                       |
| $v_{A_{DI}}, v_{B_{DI}}$                | Velocitat de les partícules A i B després de l'impacte [m/s]                     |
| $f_{TWC}$                               | Força d'acoblament bidireccional   |
| $F_D, F_H$                              | Força d'arrossegament de Stokes i Força de memòria                               |

### Superíndex

\* Variable adimensional

### Subíndex

$f$  Referent al fluid

$P$  Referent a les partícules

$i$  Família o tipus de partícula (1 pels microplàstic i 2 per les biopartícules)

MP, BP Microplàstic i Biopartícula

### Acrònims

HIT Turbulència Isotròpica Homogènia

NSF National Science Foundation

TACC Texas Advanced Computer Center

# Índex

|  |            |
|--|------------|
| <b>RESUM</b>   | <b>I</b>   |
| <b>RESUMEN</b>   | <b>II</b>  |
| <b>ABSTRACT</b>  | <b>III</b> |
| <b>AGRAÏMENTS</b>  | <b>IV</b>  |
| <b>GLOSSARI</b>  | <b>V</b>   |
| <b>1. OBJECTIUS I ABAST DEL TREBALL</b>  | <b>9</b>   |
| 1.1. Objectius del treball.....  | 9          |
| 1.2. Abast del treball.....  | 9          |
| <b>2. INTRODUCCIÓ</b>  | <b>10</b>  |
| 2.1. Presència i sorgiment de microplàstics en sistemes marins.....  | 10         |
| 2.2. Factors involucrats en la dispersió: .....  | 12         |
| 2.3. Potencials impactes pels ecosistemes i per la humanitat. ....   | 14         |
| <b>3. MODEL FÍSIC I MARC DE TREBALL MATEMÀTIC</b>  | <b>17</b>  |
| 3.1. Forma dimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules .....  | 18         |
| 3.2. Forma adimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules ..... | 20         |
| 3.3. Grups adimensionals i discussió física .....  | 21         |
| <b>4. COL·LISIÓ DE PARTÍCULES I AGREGACIONS</b>  | <b>23</b>  |
| 4.1. Escales de mesura d'un flux turbulent .....   | 23         |
| 4.2. Agregació per col·lisió degut a la turbulència .....  | 25         |
| 4.3. Ràtio de Col·lisió i eficiència .....   | 26         |
| 4.4. Formació d'agregats .....   | 31         |
| <b>5. EXPERIMENTS COMPUTACIONALS</b>   | <b>32</b>  |
| 5.1. Descripció del problema i configuració inicial.....   | 32         |
| 5.2. Estratègia computacional .....  | 34         |
| 5.3. Anàlisi computacional i resultats .....   | 36         |
| <b>CONCLUSIONS</b>   | <b>51</b>  |



|                                      |           |
|--------------------------------------|-----------|
| <b>ANÀLISI ECONÒMIC DEL PROJECTE</b> | <b>53</b> |
| <b>BIBLIOGRAFIA</b>                  | <b>55</b> |
| <b>ANNEX A</b>                       | <b>59</b> |
| A1. Càlculs de dimensionat .....     | 59        |



# 1. Objectius i abast del treball

## 1.1. Objectius del treball

Els objectius d'aquest treball són comprendre com interactuen la turbulència marina i la barreja de partícules que conformen els microplàstics i les biopartícules en la formació d'agregats, així com determinar quins paràmetres regeixen tals comportaments en les situacions experimentades. També és interessant conèixer la distribució de les partícules en els agregats formats, i les característiques físiques d'aquests agregats.

## 1.2. Abast del treball

Per tal de poder analitzar tots aquests factors, és necessari un marc introductor que contextualitzi la problemàtica que suposa l'acumulació de microplàstics en ecosistemes marins, com també un resum explicatiu dels processos involucrats en la dispersió, tant vertical com horitzontal, de partícules en aquests ecosistemes i un breu llistat dels efectes que pot tenir en els propis ecosistemes i en l'espècie humana continuar amb el models de consum i abocament de plàstics actuals.

Tot seguit s'analitzarà, per mitjà d'un anàlisi matemàtic, els processos físics que permeten a les partícules i al fluid interactuar. Per tal de decidir quins models matemàtics usar, es considerarà la naturalesa dels experiments a realitzar i quins requeriments necessiten. Aquest anàlisi matemàtic serà útil per a reduir el volum de paràmetres a variar, adaptant les equacions donades a certs grups adimensionals de la mecànica de fluids. L'anàlisi però, només servirà per a reduir el volum de dades amb les que es treballi. Per tal de modelitzar el procés de col·lisions en un fluid turbulent, es provarà d'adaptar l'estudi sobre la ràtio de col·lisions en partícules suspeses en un fluid realitzat per **Pumir (2016)**, als nostres casos d'estudi. Per tal propòsit serà necessària una explicació més profunda sobre la turbulència, identificant-ne els components que la regeixen, així com les escales de longitud que la quantifiquen.

Tot i això, aquest model teòric, al tractar-se d'un model lineal, només serà aplicable, si és que ho pot arribar a ser, a determinades configuracions inicials. Per tal d'assolir els objectius descrits en el punt 2.1 serà necessària la simulació d'aquests casos d'estudi en un superordinador, ja que el volum de dades tractades és molt alt. Es descriurà breument l'estratègia computacional escollida per a modelitzar el moviment i el moment del fluid i de les partícules, així com el comportament d'aquestes últimes en front a col·lisions. Finalment, es procedirà a l'anàlisi i comprensió de les dades resultants de les simulacions.

## 2. Introducció

### 2.1. Presència i sorgiment de microplàstics en sistemes marins.

El ús compulsiu de plàstics que ha promogut el model socioeconòmic capitalista actual durant més de seixanta anys, havent augmentat la producció mundial anual de plàstics de 0,5 milions en l'any 1960 (**Avio, Gorbi i Regoli 2017**) a 359 milions en l'any 2018 (**Europe i EPRO 2019**), i la dificultat per a reutilitzar molts d'ells, ja que solen ser dissenyats només per a un sol ús, ha derivat en l'abocament del 10% (**Europe i EPRO 2019**) d'aquests plàstics produïts anualment en ecosistemes marítims. L'any 2002 es considerava que els plàstics representaven entre el 60% i el 80% de tota la brossa marítima, fet que va motivar que anys després, entre el 2007 i el 2013, es portessin a terme un total de 24 experiments en la majoria d'oceans i mars, com per exemple el mediterrani, per tal d'estimar l'abundància i el pes total del plàstic present en ecosistemes marins. Va resultar que com a mínim hi havia un total de 5,25 bilions (**Europe i EPRO 2019**) de partícules de plàstic amb un pes total de 269 mil tones en ecosistemes marins entre aquells anys.

Aquesta gran quantitat de plàstic està formada per plàstics de mides i longituds molt diverses, i a mesura que s'han començat a estudiar, s'ha requerit classificar-los segons l'extensió del seu diàmetre. Actualment es diferencien cinc tipus de plàstics seguint aquesta pauta de classificació:

- **Megaplàstics:** són grans objectes de plàstic que tenen un diàmetre superior igual o més gran a 1 metre, és a dir, que si es traça una línia entre els dos punts més oposats del megaplàstic, la llargada d'aquesta línia haurà de ser igual o superior a 1 metre.
- **Macroplàstics:** són objectes de plàstic de mida mitjana, amb un diàmetre màxim entre els 2,5 cm i el metre.
- **Mesoplàstics:** són petites partícules de plàstic amb un valor d'entre 5mm i 2,5 cm de diàmetre superior.
- **Microplàstics:** són partícules microscòpiques de plàstic amb un diàmetre superior d'entre 1 micrometre i 5 mil·límetres.
- **Nanoplàstics:** són partícules de plàstic amb un diàmetre màxim inferior a 1 micrometre. Molts cops també son considerats una subcategoria de microplàstics, i així és com es considerarà en aquest treball.

Moltes de les partícules de plàstic que es poden trobar en ecosistemes marins tenen un diàmetre superior menor a 5mm, fet característic pel qual, com s'ha comentat anteriorment, se les anomena microplàstics. Però, tot i que la seva presència en ecosistemes marítims es deu única i fonamentalment a l'exercici de diferents activitats antropogèniques, el seu origen com a microplàstic pot no estar

relacionat directament amb aquestes activitats. I és que tot i que alguns microplàstics són creats com a tals per poder complir la seva funció creativa, d'altres s'originen per processos de degradació a partir d'objectes de plàstic més grans. És per això que aquesta diferència els divideix en les següents dues categories a) i b):

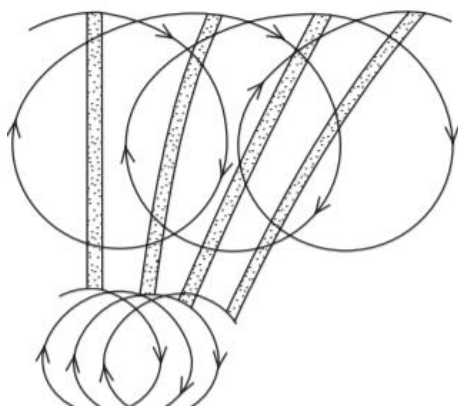
- a) **Microplàstics primaris:** són aquelles partícules de plàstic que van ser concebudes en la seva creació industrial com a microplàstics, i que per tant no són resultat de la degradació d'objectes de plàstics més grans. Alguns dels microplàstics primaris usuals són les microfibras, procedents sobretot de la indústria tèxtil; les microgotes de plàstic provinents d'indústries variades com la cosmètica o la pintura/pigmentació; o els micrograns de plàstic, propis de la cosmètica. Aquest tipus de microplàstics acostuma a arribar a ecosistemes marins a través de l'abocament domèstic i industrial d'aigües residuals, en rius, mars i oceans, degut a la seva mida tan reduïda que els fa extremadament difícils d'extreure en la majoria de tractaments que es realitzen en aigües residuals.
- b) **Microplàstics secundaris:** són aquelles partícules de plàstics que sorgeixen de la fragmentació/degradació d'objectes de plàstic més grans durant o després del seu ús creatiu, és a dir que poden sorgir de megaplàstics, macroplàstics, mesoplàstics o fins i tot de microplàstics amb diàmetres amb ordres de magnitud majors. Aquesta fragmentació és causada per processos ambientals com la biodegradació, la degradació tèrmica, la fotodegradació, la hidròlisi i la degradació termo-oxidativa. Alguns dels macroplàstics que es poden trobar en bosses de deixalles d'ecosistemes marins són ampolles d'aigua o altres refrescs i bosses de plàstic. Aquests objectes provenen majoritàriament de la indústria de la manufactura i arriben allà després de complir el seu propòsit creatiu, que en la majoria de casos es tracta del transport de productes que contenen en el seu interior, i a més la seva funcionalitat tendeix a estar limitada a pocs usos. També contribueixen a l'increment de la pol·lució marina les activitats que es duen a terme en el propi mar, com la pesca o la navegació, tan turística com comercial. Tot i que s'ha diferenciat ambdós tipus de microplàstics, s'ha de remarcar que la major part dels microplàstics són microplàstic secundaris i tenen un origen comú en la degradació de les deixalles plàstiques marines.

Normalment, els microplàstics tendeixen a romandre surant en la capa superficial del mar, degut a que tenen una densitat inferior a l'aigua, però de forma ocasional formen agregats amb biopartícules de densitat superior o igual a l'aigua, derivant el procés en l'enfonsament de l'agregat cap a capes marítimes inferiors, i per tant, a l'enfonsament del microplàstic que en forma part. Aquest fenomen es coneix com dispersió vertical dels microplàstics en el mar, i ha provocat que actualment una gran part dels microplàstics, presents en tots els mars i oceans, no es trobin situats en la superfície marítima, sinó en capes de profunditat desconeguda pels científics, i fins i tot en sòl marí.

## 2.2. Factors involucrats en la dispersió:

La dispersió de les partícules de microplàstics pel llarg de la superfície vertical de fluid marí no es deu únicament a la força gravitatòria que provoca l'enfonsament dels agregats comentats anteriorment, sinó que també hi prenen part altres factors com la turbulència del fluid, les col·lisions entre partícules, les possibles agregacions resultants de les prèviament mencionades col·lisions, les subseqüents desagregacions quan les partícules superen un determinat volum crític o la velocitat d'assentament de cada partícula.

Es coneix com a turbulència al fenomen que ocorre estrictament en fluids, caracteritzat per la formació de remolins periòdics a l'interior d'un fluid, creant així fluxos caòtics, on les partícules que hi circulen es mouen de forma desordenada tot seguint les trajectòries irregulars marcades per tals fluxos. En el mar, la turbulència és generada principalment pel vent a l'incidir sobre la superfície marítima, creant una pertorbació que es trasllada de partícula en partícula d'aigua marítima formant fluxos verticals circulars, la meitat superiors dels quals es coneix com a onada. Aquest fluxos es transmeten a capes inferiors, transmetent l'energia cinètica cedida pel vent a capes de massa marítima inferiors gràcies al fenomen d'arrossegament de Stokes, que reproduïx aquests remolins que es formen en la superfície marítima, a capes marítimes més profundes, reduint però la grandària dels remolins en funció de la profunditat en que es troben.



**Figura1.1.** Arrossegament de Stokes.

Els remolins turbulents transporten partícules, ja siguin biopartícules que conformen el plàncton marítim o microplàstics, participant així en el fenomen de la dispersió vertical de les partícules en el fluid.

El procés d'arrossegament de Stokes es pot produir a partir de qualsevol remolí amb diàmetre major a cert límit (conegut com a microescala de kolmogorov i que s'explicarà en el punt 3), es trobi aquest en la capa que es trobi, indistintament de la seva profunditat. El que és clar, és que a més profunditat,

més petits seran els remolins i menor serà la turbulència que s'experimentarà en aquella capa marítima degut a la interacció entre el vent i la superfície marítima.

Un factor inherent a la dispersió de les partícules és la viscositat del fluid. La viscositat d'un fluid és la resistència que mostra aquest a fluir. Un exemple per entendre com funciona la viscositat és imaginar-se el volum d'un fluid com un conjunt de capes que llisquen entre elles, i en aquest context la viscositat seria la resistència de fricció entre aquestes capes. Com menys viscos sigui un fluid, més fàcilment lliscaran les capes, però si es tracta d'un fluid molt viscos, la força de fricció s'oposarà a la inèrcia del moviment entre capes, i aquestes no lliscaran gaire bé. La viscositat bàsicament s'encarrega de reduir la turbulència del sistema, marcant un límit inferior a partir del qual els remolins es dissipen per acció de la viscositat.

Un altre factor involucrat en la dispersió vertical de les partícules anteriorment mencionades és la col·lisió entre tals partícules. Aquestes partícules són arrastrades per remolins turbulents, en trajectòries irregulars i variades, incrementant la possibilitat de que xoquin entre elles, així com la velocitat que portin quan aquesta col·lisió es produeixi. Si la velocitat és suficient i una d'elles és mínimament viscosa, com és el cas de les biopartícules, aquestes partícules s'enganxaran entre elles, formant el que el coneixem com a agregat. Aquests agregats, contra més partícules incorporen, més pesats es tornen, i més probabilitats tenen de tendir a enfonsar-se, contribuint així a la dispersió vertical de les partícules.

Quan una agregació o macropartícula esdevé suficientment gran (fenomen determinat per la longitud dels vòrtexs més petits) es pot produir un procés de desagregació per esforç de cisallament que s'explicarà en l'apartat 4.2, que espargeix les partícules que en formen part en diferents direccions.

El cisallament, però, no és l'únic mètode de desagregació. Les pròpies col·lisions, que acostumen a afavorir l'aparició i el creixement d'agregats, poden ser en ocasions una arma de doble fil. Quan una partícula impacta a un agregat, si porta prou inèrcia, pot despendre algunes partícules que conformen l'agregat, o si l'agregat és prou petit, desfer-lo totalment.

Tot i que la desagregació és un procés que s'ha de tenir en compte per tal de realitzar un estudi físic rigorós de l'evolució dels agregats en un medi aquàtic, s'ha decidit descartar tal procés en l'estudi actual, ja que incorporar processos de desagregació incrementaria de forma exponencial la quantitat de temps destinat a càlcul computacional, i això comportaria la possibilitat de no disposar de prou temps per a completar l'estudi.

La velocitat d'assentament és la velocitat d'enfonsament d'una partícula i és resultat de la diferència entre la força gravitatòria i la força de fregament que exerceix el fluid cap a la partícula, que frena a la força exercida per la gravetat. El valor d'aquesta velocitat es veurà afectat per la massa i la forma de la partícula, així com per la viscositat del fluid de treball. Aquesta velocitat sempre afectarà a la partícula però, ja sigui per la inèrcia dels fluxos turbulents o per l'energia cinètica transmesa per una altra partícula en una col·lisió, es veurà contrarestada constantment.

En aquest estudi no s'ha tingut en compte el seu efecte sobre les partícules de treball, degut en part a l'addició exponencial de temps que comporta afegir més elements a un estudi com aquest, i en part a que per la relació quasi unitària entre les densitats del fluid i de les partícules, aquestes no s'enfonsen. Això últim fa que aquesta velocitat només sigui rellevant per escales de temps superiors a les de Taylor.

### 2.3. Potencials impactes pels ecosistemes i per la humanitat.

Els impactes de la presència de plàstic en la brossa marítima són variats, però tots es caracteritzen per ser perjudicials pels ecosistemes marins i la vida que resideix en ells.

En la fauna, els megaplàstics afecten directament sobretot als mamífers marins de gran envergadura com orques i balenes, els macroplàstics a peixos i mamífers de mitjana envergadura com els taurons o els dofins i els mesoplàstics a petits peixos i ocells. Tots aquests tipus de plàstic poden produir en els organismes lesions sufocants, tant internes com externes, doloroses nafres, bloqueig o taponament de conductes de l'aparell digestiu, falsa sensació de sacietat, afectacions en la capacitat d'alimentació, inanició, debilitament de l'organisme, limitació de la capacitat d'evasió de depredadors o la mort.

**(Gregory 2009)**

Tot i això, els microplàstics són, sense cap mena de dubte, les partícules que afecten a una major proporció de la fauna marina. De fet, en diferents estudis realitzats, s'han trobat microplàstics en organismes propis tant de les zones bènica com pelàgica, amb estratègies alimentàries variades i que ocupen diferents nivells tròfics **(Graham i Thompson 2009)**. S'han trobat microplàstics en organismes bènics com llamàntols, musclos, amfípodes, cucs, percebes i cogombres de mar **(Eerkes-Medrano, Thompson i Aldridge 2015)** els quals mostren una tendència preocupant a ingerir microplàstics sobre altres tipus de partícules. En la zona pelàgica, els microplàstics s'han trobat en un gran rang d'espècies de zooplankton **(Cole et al. 2013 ; Setälä, Fleming-Lehtinen i Lehtiniemi 2014)** i en peixos, tant larvals com adults **(Carpenter et al. 1972 ; Browne et al. 2013 ; Lusher, McHugh i Thompson 2013)**, degut a que els confonen amb plàncton.

Però els microplàstics no afecten només als organismes que els ingereixen de forma directa, sinó que també ho fan a organismes de nivells tròfics superiors, que ingereixen animals que ja contenen microplàstics en el seu organisme com és el cas de taurons del mar de Cortés (també conegut com a golf de Califòrnia) o de balenes del mar mediterrani, en els cossos dels quals s'han trobat microplàstics **(Germanov et al. 2018)**. Aquesta transferència tròfica de microplàstics suposa un prolongat increment de la concentració de microplàstics a mesura que s'augmenta el nivell tròfic de l'espècie d'estudi. Un exemple clar d'aquest fenomen és el rang de concentracions de microplàstics trobades en lleons



marins nadius d'illes subantàrtiques, on es van trobar concentracions entre 22 i 160 vegades superiors a les que es van trobar en l'única espècie de la seva dieta que contenia microplàstics (**Eriksson i Burton 2003**). Però els ecosistemes marins no es redueixen només a fauna subaquàtica, i és que també s'han trobat microplàstics en un gran rang d'espècies d'aus marines com gavines o xatracos (**Hays i Cormons 1974 ; Ryan, Connell i Gardner 1988 ; Tanaka et al. 2013**).

Anàlisis realitzats en animals identificats com a portadors de microplàstics insinuen que les cavitats digestives on s'acumulen els microplàstics i els mètodes de retenció d'aquests varien en funció de la densitat i diàmetre (**Brillant i MacDonald 2000 ; Ramos, Barletta i Costa 2012**). La majoria d'aquests anàlisis també indiquen que els efectes usuals que els microplàstics produeixen en els propis animals són una considerable reducció de l'absorció nutricional i una falsa sensació de sacietat. En algunes espècies la presència de microplàstics pot tenir també afectacions a nivell cel·lular, causant inflamacions en els diversos teixits de l'aparell digestiu, això com una reducció de l'estabilitat de les seves membranes cel·lulars. En ocasions, algunes partícules de microplàstics poden, fins i tot, traslladar-se de l'aparell digestiu al circulatori, on poden persistir fins a 48 dies (**Browne et al. 2008**).

Anàlisis realitzats sobre una espècie de peix japonès, anomenada Medaka, mostra efectes com estrès hepàtic (típicament manifestat per una disminució de glucògen, formació de vacúols grassos i necrosi monocel·lular) i reducció dels temps de vida necessari per a l'inici de formacions de tumors. (**Eerkes-Medrano, Thompson i Aldridge 2015**)

Però la presència de microplàstics en mars i oceans no afecta només a la fauna pròpia de cada ecosistema, sinó que també afecta a la seva flora a través de les acumulacions de microplàstics, tant en la superfície marina com en capes més profundes de les zones pelàgica i bènica, que redueixen la quantitat de llum solar que arriba a la flora submarina o a la barreja produïda per partícules de terra i roca que conformen el sòl marí amb microplàstics, que produeix alteracions en les propietats del sòl marí.

Les acumulacions de microplàstics en les capes marines mencionades amb anterioritat alteren la quantitat i qualitat de la llum que incideix a capes marítimes inferiors, afectant als cicles biogeoquímics típics de l'ecosistema, com el procés conegut com a fotosíntesi, duta a terme per la flora marítima en zones marítimes continentals. Al disminuir la quantitat de llum que aquesta flora, situada en nivells marítimes inferiors que el de les acumulacions de microplàstics, rep de forma prolongada, pot provocar que la densitat numèrica de flora subaquàtica en ecosistemes marins es vegi reduïda, així com que la seva salut empitjori, comportant que la quantitat total de diòxid de carboni que la flora submarina pot transformar en oxigen actualment es vegi dràsticament disminuïda.

La barreja produïda entre partícules de terra i roca, que conformen el sòl marí, i microplàstics varia certes característiques físiques i químiques dels sediments marins com ara el la grandària dels grans que els conformen, el diàmetre i profunditat de les seves porositats, la seva riquesa nutricional o la seva capacitat per amarrar les plantes. Aquests factors poden repercutir en la salut i desenvolupament de flora marina. (**Chatterjee i Sharma 2019**)

Finalment, l'impacte que pot suposar per a la salut humana la presència de microplàstics en ecosistemes marins encara ha de ser estudiat en profunditat, tot i així és raonable suposar que el

procés de multiplicació del factor de concentració de microplàstics a l'anar augmentant de nivell tròfic és aplicable també per a la humanitat, una espècie que s'alimenta en part d'animals propis d'ecosistemes marins. Ja fa uns anys es va provar la presència de tals microplàstics en ostres i mol·luscs comprats en supermercats, provinents de l'Oceà Atlàntic, en l'article **(Van Cauwenberghe i Janssen 2014)** i, recentment s'ha aconseguit demostrar una alta presència de microplàstics en el cos humà per mitjà de l'anàlisi de 4 placentes de nadons recent nascuts, tal com explica l'article **(Ragusa et al. 2021)**

Respecte als efectes produïts per tal contaminació en el cos humà, encara s'ha de dur a terme molta recerca, però és realista plantejar com una possibilitat que efectes similars als que s'han vist en animals, es puguin produir en cossos humans.

### 3. Model físic i marc de treball matemàtic

Per tal de modelitzar el comportament del fluid i de les partícules que participen en els experiments, és necessari desenvolupar equacions que ens descriguin el comportament del fluid i de les partícules que participen en els experiments, per tant es procedirà a representar matemàticament els seus respectius moments i moviments.

Es parteix dels següents axiomes:

- a. El fluid de treball, aigua marina, és un fluid incompressible.
- b. Els diàmetres de les partícules són significativament més petits que la longitud de la menor de les escales hidrodinàmiques, la microescala de Kolmogorov.
- c. Com s'ha comentat en l'apartat 2.2, els efectes de la velocitat d'assentament són descartats degut a la seva poca rellevància, ja que la relació de densitats entre fluid i partícules, que és quasi unitària, dificulta que aquestes s'enfonsin.
- d. Les partícules seran modelades seguint una aproximació lagrangiana PP en que la força d'arrossegament  $F_D$  (causada per la càustica) es considera la força de més importància (Maxey & Riley 1983). Aquesta assumptió és vàlida, de forma asimptòtica, en el límit en que les partícules són denses en comparació amb el fluid, quan la proporció de densitats entre el fluid i les partícules és similar o superior a 1, com és el cas. D'altra banda, la força de memòria  $F_H$  de les partícules, en principi, també hauria de ser considerada, però un estudi detallat del comportament d'aquesta força revela que  $F_H$  només esdevé important per a  $\rho_p/\rho_f < 10$  (Pumir & Wikilson 2016), que la seva relació amb la força d'arrossegament de Stokes escala de la següent forma  $\|F_H\|/\|F_D\| \sim d_p/\eta$  (Daitche 2015) i que típicament presenta impactes relativament petits en la distribució de les partícules (Armenio & Fioroto 2001).
- e. Les partícules es troben disperses de forma aleatòria per tot el volum d'estudi i no formen agregats en la configuració inicial de les simulacions.

Tal com indica l'anàlisi descrit en l'article **Balachandar (2020)**, el nostre cas de partícules suspeses en un flux de fluid, és un exemple d'un flux dispers multifase. Aquest fluxos estan caracteritzats per una fase de dispersió que és distribuïda a l'interior d'una fase de conducció. La representació matemàtica de tal flux es pot basar en dues formulacions, la idoneïtat de les quals depèn de l'estratègia escollida per a descriure les partícules i les fases del fluid:

- **Formulació Euleriana-Euleriana (EE):** és una aproximació en que ambdós tipus de flux, fluxos de dispersió i fluxos de conducció, són representats com a camps aleatoris en una estructura Euleriana.

- **Formulació Euleriana-Lagrangiana (LE):** és una aproximació basada en punts en que la fase de dispersió es presenta com un procés estocàstic, és a dir que es produeix de forma fortuïta, en un escenari Lagrangian i la fase de conducció es representa com un camp aleatori en un marc Eulerià.

Aquest treball usa una aproximació point particle (PP) direct numerical simulation (DNS) LE ja que les seves propietats són beneficioses per a l'aplicació d'interès. Per exemple, la seva aplicabilitat és possible per a una gran varietat de fracció de càrrega massica i nombres de Stokes, el que ens permet estudiar diferents casos amb diferents valors dels principals grups adimensionals. També permet representar les col·lisions entre partícules, que ens proporcionarà informació del procés de formació d'agregats.

Una simulació de tipus DNS amb partícules completament resoltes és el model d'aproximació amb la més alta fidelitat possible, ja que totes les característiques del flux de partícules pròximes són resoltes. Aquest nivell extrem de resolució però, comporta fer ús de recursos computacionals extremadament cars i per això les simulacions acostumen a estar restringides a pocs centenars o milers de partícules. En els casos en que els diàmetres de les partícules són significativament inferiors a les escales de flux més petites, una alternativa pràctica és representar les partícules com a punts Lagrangians infinitesimalment petits.

Aquesta descripció mesoscòpica (escala situada entre la macroscòpica i la microscòpica) redueix significativament el cost computacional de simular un flux dispers multifase, però requereix assumir models per representar els termes de transferència interfàsica, com les forces d'acceleració de les partícules. Els models dimensional i adimensional de les equacions de conservació que descriuen un flux dispers multifase seguint una representació PP-DNS són introduïts a continuació en els apartats 3.1, 3.2 i 5.2. (Jofre et al. 2017, 2020a)

### 3.1. Forma dimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules

Assumint condicions de flux isotèrmic, les equacions dimensionals de moviment de fluid que descriuen un flux dispers multifase incompressible són l'equació de la continuïtat i les equacions de Navier Stokes:

- Equació de la Continuitat:

Pel moviment del fluid, es pren com a referència la primera llei de Newton, la coneguda com a llei de la conservació de massa. En el cas de fluids incompressibles, aquesta llei pren la forma de la llei d'incompressibilitat:

$$\nabla \cdot \vec{u}_f = 0 \quad (\text{Eq. 3.1.1})$$

On  $\vec{u}_f$  és el vector velocitat del fluid i Nabla és una divergència, que ens indica que s'ha de derivar les components del vector velocitat  $\vec{u}_f$ , per les seves respectives coordenades:

$$\nabla \cdot \vec{u}_f = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \quad (\text{Eq. 3.1.2})$$

Per tant, el que indica aquesta equació és la divergència de velocitat, com canvia cada component de la velocitat mentre em moc en la direcció de les seves coordenades respectives.

Si les variacions de velocitat es contraresten o s'anul·len entre elles, és a dir, si aquesta divergència és igual a zero, aleshores es pot afirmar que la massa es conserva. Com en aquest estudi es treballarà sobre un volum de fluid tancat, aquesta igualtat ha de donar zero.

b. Equacions de Navier-Stokes:

La segona llei de Newton estableix que la massa d'un cos multiplicada per la seva acceleració ha de ser igual a la suma de forces a la que es troba sotmès el cos.

$$\rho_f \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_f \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\nabla P + f_{TWC} + \mu_f \cdot \Delta \vec{u}_f \quad (\text{Eq. 3.1.3})$$

On  $\rho_f$ ,  $P$  i  $\mu_f$  són respectivament la densitat, la pressió i la viscositat dinàmica del fluid.

En el cas d'un fluid, s'usa la seva densitat, enlloc de la seva massa. L'acceleració del fluid en un punt determinat no serà la mateixa que en un altre punt, per tant es diferencia entre acceleració local, l'acceleració a la qual es troba sotmès un element de fluid concret, i l'acceleració advectional del fluid, que és l'acceleració a la qual es troba sotmès el conjunt del fluid de treball i que vindria a ser una mitjana de les acceleracions locals del fluid. Finalment s'ha construït la totalitat de l'equació:

$$1) \rho_f \frac{\partial u}{\partial t}, \quad 2) \rho_f \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f), \quad 3) -\nabla P, \quad 4) \mu_f \Delta \vec{u}_f, \quad 5) f_{TWC} \quad (\text{Eq. 3.1.3.a})$$

1) Acceleració local del fluid:

Primer de tot, es té l'acceleració local del fluid, que fa referència a l'acceleració a la qual està sotmès un determinat element de fluid, com podria ser un petit volum d'aigua que es troba dins d'un dels diversos remolins turbulents que es formen dins el volum de fluid d'estudi.

2) Acceleració advectional del fluid:

Fa referència a la mitjana d'acceleracions locals a la que està sotmès tot el fluid contingut en el volum d'estudi.

Respecte a les forces, es troba que hi ha dos tipus. El primer d'aquests dos tipus, és el que es coneix com a forces internes, aquestes forces són:

3) Gradient de pressió:

Indica com canvien les components del vector pressió del fluid respecte les seves coordenades. Si la divergència és diferent de zero, significarà que un punt del fluid disposa

de pressions més altres que un altre, i acabarà causant que el fluid es mogui enmig o a través del gradient de pressions.

4) Viscositat:

La viscositat és la resistència d'un fluid a fluir, a variar la seva forma. La força produïda per aquesta viscositat és producte de la viscositat dinàmica, és a dir, de la resistència de fricció ocasionada per la viscositat quan el fluid està en moviment, i de la velocitat de tal fluid.

5) El segon tipus de forces, és les forces externes, i en aquest cas sols es té en compte una, la força d'acoblament bidireccional  $f_{TWC}$ :

$$f_{TWC} = \sum_{i=1}^{Ng} \frac{m_{Pi}}{Z_{Pi}} \sum_{P=1}^{N_{Pi}} (\vec{u}_P - \vec{u}_f) \delta(\vec{x} - \vec{x}_P) \quad (\text{Eq. 3.1.4})$$

Com a resultat directe de l'axioma c de l'apartat 5.1, l'arrossegament causat per la càustica és l'única força considerada en l'estudi i la descripció dimensional de la posició i velocitat de les partícules ve donada per:

c. Equació de moviment de partícules:

Altre cop es formula la primera llei de Newton, la llei de la conservació de massa, però aquest cop es realitza per a una partícula. El diferencial de moviment d'una partícula ha de ser igual a la seva velocitat.

$$\frac{d\vec{x}_P}{dt} = \vec{v}_P \quad (\text{Eq. 3.1.5})$$

d. Equació de moment de partícules:

El diferencial de velocitat d'una partícula en un fluid és determinat per la força d'arrossegament de Stokes i ha de ser igual a la diferència entre la velocitat del fluid en el punt on es troba la partícula i la velocitat de la partícula, dividit tot per  $Z_{Pi}$ .

$$\frac{dv_P}{dt} = \frac{(\vec{u}_P - \vec{v}_P)}{\tau_{Pi}} \quad (\text{Eq. 3.1.6})$$

### 3.2. Forma adimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules

És necessari adimensionar les equacions anteriors per tal de poder reduir els paràmetres que regeixen el comportament del fluid, els paràmetres que ens quedin els anomenarem grups adimensionals. Per tal d'adimensionar les equacions s'han proposat els següents escalaments:

$$\vec{x} = \lambda \vec{x}^*, \vec{v} = u_{RMS} \vec{v}^*, t = \left( \frac{\lambda}{u_{RMS}} \right) t^*, P = \rho_f u_{RMS}^2 P^*, \nabla = \frac{1}{\lambda} \nabla^*, \delta = \frac{1}{\lambda^4} \delta^* \quad (\text{Eq. 3.2.1})$$

Un cop fetes les substitucions dels escalaments, i després de simplificar les equacions resultants, aquestes queden de la següent forma:

- a. Equació de la Continuitat:

$$\nabla^* \overline{u_f^*} = 0 \quad (\text{Eq. 3.2.2})$$

- b. Equacions de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) \quad (\text{Eq. 3.2.3})$$

$$= -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{MLR_i}{St_{\lambda_i} N_{pi}} \sum_{p=1}^{N_{pi}} (\overline{u_p^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x^*} - \overline{x_p^*}) + \frac{1}{Re_{\lambda}} \Delta^* \overline{u_f^*}$$

- c. Equació de moviment de la partícula:

$$\frac{d\overline{x_p^*}}{dt^*} = \overline{v_p^*} \quad (\text{Eq. 3.2.4})$$

- d. Equació de moment de la partícula:

$$\frac{d\overline{v_p^*}}{dt^*} = \frac{(\overline{u_p^*} - \overline{v_p^*})}{St_{\lambda_i}} \quad (\text{Eq. 3.2.5})$$

Ens han quedat les equacions que descriuen el comportament del fluid i de les partícules que conté el fluid en funció de certs paràmetres adimensionals que es descriuran a continuació.

### 3.3. Grups adimensionals i discussió física

$N_{pi}$ : Indica el nombre de partícules del tipus "i" o de la família "i", en aquest cas el nombre de microplàstics o de biopartícules presents en l'estudi.

$MLR_i$ : Fa referència a la ràtio de càrrega massica (sigles en anglès) de cada família de partícules "i", és a dir, és un percentatge que representa la massa total de cada família de partícules vers la massa total del fluid. La variació del valor d'aquesta variable, en els casos d'estudi analitzats, serà directament proporcional a la variació establerta en el paràmetre  $N_{pi}$ , ja que la quantitat d'aigua dels problemes a analitzar sempre serà la mateixa.

$$MLR_i = \frac{N_{pi} \cdot m_{pi}}{\rho_f \cdot L^3} \quad (\text{Eq. 3.3.1})$$

$Re_{\lambda}$ : Fa referència al nombre de Reynolds en la microescala de Taylor (Eq.4.1.6) i caracteritza el moviment del fluid, identificant-ne la naturalesa turbulent o laminar segons s'escaigui. Per variar

aquest grup adimensional en l'estudi, és necessari variar el paràmetre "k", d'energia cinètica turbulent, que representa l'energia cinètica com es mostrarà en el pròxim apartat (Eq.4.1.7).

$St_{\lambda_i}$ : Fa referència al nombre de Stokes de la família de partícules i en la microescala de Taylor. Aquest nombre indica si el moviment d'una partícula és determinat pels fluxos turbulents d'un fluid, o si pel contrari, el moviment de la partícula és aliè a aquests. Les partícules amb nombres de stokes petits són totalment influenciades o arrossegades pels fluxos turbulents del fluid, mentre que les partícules amb nombre de Stokes alts tendeixen a no variar les seves trajectòries per la presència de fluxos turbulents al seu voltant, d'alguna forma intenten "escapar" d'aquests fluxos turbulents. El valor d'aquest grup adimensional es pot alterar al variar el diàmetre de cada família de partícules.

$$St_{p_i} = \frac{\tau_{p_i}}{\tau_{\lambda}} \quad (\text{Eq. 3.3.2})$$

On  $\tau_{\lambda}$  ve donat per l'Eq.4.1.5 i  $\tau_{p_i}$  per la següent expressió:

$$\tau_{p_i} = \frac{d_{p_i}^2 \rho_{p_i}}{18\mu_f} \quad (\text{Eq. 3.3.3})$$



## 4. Col·lisió de partícules i agregacions

### 4.1. Escales de mesura d'un flux turbulent

La turbulència és un fenomen físic que s'esdevé en fluids i que es produeix degut a l'aparició de remolins de diferents mides i sentits de gir en el seu interior. Per tal de proporcionar informació bàsica de com es desenvolupaven aquests remolins que tenien lloc en els fluids turbulents van sorgir les escales de turbulència.

- a) **Microescala de Kolmogorov:** Andrei Nikolaevich Kolmogorov va postular que la turbulència en un fluid està formada per remolins de diferents mides, però els més grans d'aquests es tornen inestables, degut a que la seva longitud característica és similar a l'ordre de domini del fluid, i van transferint la seva energia a remolins de mida menor, i aquests a altres remolins encara més petits, creant l'anomenada cascada d'energia. Aquesta cascada es produeix consecutivament, fins al punt en que els remolins són tan menuts que no es dissipen per la inèrcia de la cascada d'energia, sinó que ho fan degut a l'afecte de la viscositat del fluid, cosa que interromp la cascada. La microescala de Kolmogorov pren aquest punt com a referència (**López Díaz**).

$$\eta = \sqrt{\frac{\nu_f}{\epsilon}} u_{RMS} = \sqrt[4]{\frac{\nu_f^3}{\epsilon}} \quad (\text{Eq. 4.1.1})$$

Com es pot veure en l'equació 4.1.1 el valor de la microescala de Kolmogorov depèn de la viscositat cinemàtica del fluid " $\nu$ " i la taxa d'energia dissipada " $\epsilon$ " i la fluctuació mitjana quadràtica de velocitats " $u_{RMS}$ ". El valor de la viscositat de fluid en aquest cas es calcula fàcilment:

$$\nu_f = \frac{\mu_f}{\rho_f} \quad (\text{Eq. 4.1.2})$$

On  $\mu_f$  i  $\rho_f$  són respectivament la viscositat dinàmica i la densitat del fluid. En aquest cas, ambdós paràmetres són coneguts, ja que el fluid de treball és aigua marítima a  $10^\circ\text{C}$ . Respecte a la taxa de dissipació d'energia, el seu càlcul és el següent:

$$\epsilon = \frac{15\nu_f}{\tau_\lambda^2} \quad (\text{Eq. 4.1.3})$$

Finalment, el valor fluctuació mitjana quadràtica de velocitats s'escull en funció de la longitud de la microescala de Taylor per tal de representar una determinada turbulència.

- b) **Microescala de Taylor:** La microescala de Taylor, coneguda altrament com a escala de turbulència de Taylor, és una escala de longitud intermèdia, localitzada entre la microescala de Taylor i la escala integral, en la que la viscositat del fluid afecta significativament la dinàmica dels seus remolins turbulents. Aquesta escala és usada bàsicament per a caracteritzar tals fluxos en fluids turbulents.

La longitud de la microescala de Taylor es pot a partir de la relació de proporcions entre la longitud de la microescala de Taylor i la de la microescala de Kolmogorov:

$$\lambda = \eta\sqrt{15} \quad (\text{Eq. 4.1.4})$$

El temps de relaxació o dissipació dels remolins, basat en la microescala de Taylor, serà:

$$\tau_\lambda = \frac{\lambda}{u_{RMS}} \quad (\text{Eq. 4.1.5})$$

El nombre de Reynolds per la microescala de Taylor es calcula de la següent forma:

$$Re_\lambda = \frac{u_{RMS}\lambda}{\nu_f} \quad (\text{Eq. 4.1.6})$$

- c) **Escala integral:** L'escala integral és la major de les escales de turbulència en l'espectre energètic. Els remolins amb una longitud integral obtenen energia del flux mitjà del fluid i de les interaccions que es produeixen entre ells i l'alliberen a l'iniciar el fenomen conegut com a cascada de Kolmogorov. Per tant, un remolí amb una longitud menor a aquesta escala no pot iniciar el procés conegut com a cascada de Kolmogorov o escala de dissipació (**Wang i George 2002**).

Per a trobar la longitud de l'escala integral, primer és necessari calcular el valor de l'energia cinètica turbulent produïda per les onades per efecte del vent, representada usualment amb el caràcter "k":

$$k = \frac{3}{2}u_{RMS}^2 \quad (\text{Eq. 4.1.7})$$

Un cop calculada l'energia cinètica turbulent, es pot procedir al càlcul del nombre de Reynolds en l'escala integral, el qual permetrà posteriorment calcular la longitud "L".

$$Re_L = \frac{k^2}{\nu_f \epsilon} \quad (\text{Eq. 4.1.8})$$

Finalment, la longitud de l'escala integral resulta ser:

$$\Lambda = \eta Re_{\Lambda}^{3/4} \quad (\text{Eq. 4.1.9})$$

Com en les altres escales, es pot obtenir el temps de relaxació del fluid dividint la fluctuació mitjana quadràtica de velocitats a la longitud de l'escala:

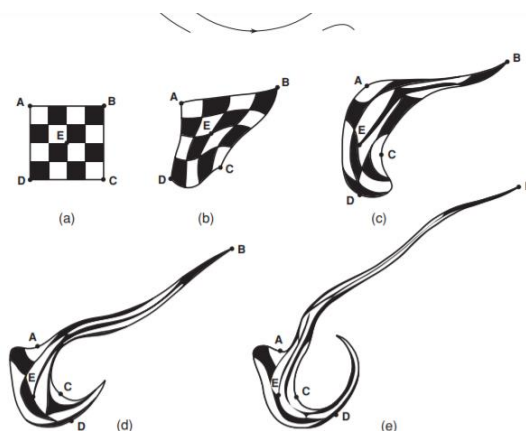
$$\tau_{\Lambda} = \frac{\Lambda}{u_{RMS}} \quad (\text{Eq. 4.1.10})$$

## 4.2. Agregació per col·lisió degut a la turbulència

### a) Afecte de la turbulència a l'agregació per col·lisió

La turbulència produeix dos processos, l'anomenat remenat i la difusió molecular, el segon sent conseqüència directa del primer. Si s'imagina un fluid en un domini cúbic, dividit aquest domini en particions cúbiques més petites que formen una malla tridimensional, i el fluid a l'interior de cada partició disposa d'unes propietats característiques, el remenat vindria a ser la deformació que produeixen els remolins turbulents sobre aquestes particions, convertint-les en estretes distribucions volumètriques amb la forma de filaments. Això incrementa la superfície de contacte entre les diverses particions, millorant la difusió molecular, i per tant homogeneïtzant les propietats del fluid en tot el seu contingut (**Thorpe 2005**).

Per la interacció entre partícules, però, només és interessant l'estudi del comportament del fluid a conseqüència del fenomen de remenat. Com s'ha comentat, aquest fenomen produït per remolins turbulents, produeix distribucions volumètriques filamentoses que actuen com a carreteres per les partícules que es troben en aquella zona del fluid, dirigint les partícules en la direcció de gir dels seus respectius remolins .



**Figura 4.2.1.** Representació gràfica del fenomen del remenat (Thorpe 2005).

Depenent de la relació entre les densitats de les partícules i la densitat del fluid, dependència que per cert es deu a un altre fenomen anomenat concentració preferencial, les trajectòries que segueixin les partícules es poden trobar en la part central o en la part exterior dels remolins. Si la densitat de les partícules és superior o similar a la densitat del fluid, aquestes partícules tendiran a concentrar-se en zones amb alts índexs d'estrès, és a dir, al llarg de la longitud exterior dels remolins, on són susceptibles de ser afectades per les forces dels diversos remolins contigus. Però si la densitat de les partícules és força inferior a la densitat del remolí, aquestes es sentiran més atretes pels vòrtexs i tendiran a romandre en el centre del remolins.

En el cas d'estudi, en que les densitats de les partícules són iguals o similars, les partícules circularan per l'exterior dels remolins, i quan dos d'aquests fluxos turbulents que actuen com trajectòries es creuin o desemboquin en el mateix lloc, sempre que condueixin partícules, es poden produir col·lisions.

Tot i això, el creuament d'aquests fluxos turbulents no és l'única forma de que es produeixi una col·lisió entre diferents partícules. Si el nombre de Stokes d'una partícula és prou alt, la partícula no seguirà fidelment els fluxos turbulents, sinó que tendirà a avançar seguint la seva direcció prèvia, podent xocar de forma aleatòria amb les partícules que es trobin situades en la seva direcció de moviment.

#### b) Límit de l'agregació per col·lisió degut a la turbulència

A partir de certa grandària d'agregat, els remolins més petits del sistema de turbulència, aquells amb una longitud similar a la longitud de l'escala de Kolmogorov, realitzen forces en direccions i sentits contraris sobre diferents parts de l'agregat, podent arribar a produir una ruptura en la unió de les partícules que conformen l'agregat, separant l'agregat en dos o més agregats de menor diàmetre o fins i tot desfent l'agregat en simples partícules altre cop. Aquest valor de diàmetre d'agregat, a partir del qual es poden produir desagregacions per l'acció de fluxos turbulents, es coneix com a límit de l'agregació per col·lisió degut a la turbulència.

### 4.3. Ràtio de Col·lisió i eficiència

La col·lisió entre partícules o agregats de radis  $r_A$  i  $r_B$  és la freqüència en que el vector distància entre els centres d'ambdues partícules i/o agregats es troba situat dintre d'una esfera de radi igual a la suma dels radis de les partícules i/o agregats  $r_A + r_B$ , condició que indica que s'ha produït una col·lisió.

Tot i que trobar aquesta taxa de col·lisió pot semblar un procés de fàcil consecució en un fluid qualsevol, la presència del fenomen conegut com a turbulència complica els processos de càlcul necessaris per a conèixer aquesta taxa, dificultant-ne l'estudi (**Pumir i Wilkinson 2016**). Aquesta taxa de col·lisió s'espera que depengui dels respectius radis, que sigui proporcional a la densitat numèrica de les partícules i que sigui funció de la velocitat relativa com s'ha caracteritzat en la col·lisió de kernel  $\Gamma(r_A, r_B)$ , que és una propietat del moviment del fluid, independent dels radis i de la densitat numèrica.

En particular, si  $N_P(r_A)dr_A$  és la densitat numèrica de les partícules amb radi  $r_A$  en el petit interval  $[r_A, r_A + dr_A]$ , la taxa de col·lisió es defineix com:

$$\mathbf{R}(r_A) = \int_0^{\infty} \Gamma(r_A, r_B) n_P(r_B) dr_B \quad (\text{Eq. 4.3.1})$$

En un fluid amb distribució monodispersa on totes les partícules tenen un radi similar, com és el cas d'estudi ( $r_A \sim r_B$ ), l'expressió es redueix a  $R = \Gamma(r_p, r_p) n_P$  on  $r_p \sim r_A, r_B$  i  $n_P = \int_0^{\infty} N_P(r_P)$

Partícules amb nombres de Stokes petits, és a dir, que porten una inèrcia negligible, segueixen essencialment el flux independentment de la seva forma o densitat. En aquest cas, els gradients de velocitat generats per la turbulència accentuen el moviment relatiu entre partícules i conseqüentment incrementa la possibilitat que es donin a terme interaccions entre partícules així com prediu el límit de Saffman-Turner (**Saffman i Turner 1956**) expressat en termes de ràtio de col·lisió per barreges monodisperses com a:

$$R = \sqrt{\frac{8\pi n_p d_p^3}{15 \tau_\eta}} \quad (\text{Eq. 4.3.2})$$

Aquesta estimació de R es basa únicament en assumir que les partícules es troben uniformement distribuïdes, mentre que proveeix una aproximació per a sistemes amb partícules suspeses com poden ser les bombolles, en que les partícules mostren una tendència a acumular-se totes juntes (**Pumir i Wilkinson 2016**)

Quan la inèrcia de les partícules esdevé substancial, és a dir, quan el seu nombre de stokes és prou alt, sorgeixen efectes addicionals que impedeixen a la ràtio de col·lisió ser descrita solament en termes de moviment relatiu del fluid. Per exemple, és quelcom conegut que les partícules poden mostrar grans acumulacions per a números de stokes finits (**Balachandar i Eaton 2010**). L'acumulació de partícules incrementa la taxa de col·lisió, a mesura que moltes partícules o agregats, al ser expulsats dels vòrtexs per forces centrífugues, comencen a congregar-se en el que s'anomenen regions d'alt estrès, és a dir, en les zones més exteriors dels vòrtexs, on les partícules són afectades també per la turbulència dels remolins contigus amb els que entren en contacte.

A mesura que incrementa la importància dels efectes inercials, les partícules comencen a poder moure's independentment del fluid, i per tant augmenten les probabilitats de col·lisió amb altres partícules. Aquest fenomen implica l'existència de singularitats fase-espacials que s'anomenen càustiques (**Crisanti et al. 1992**). Aquestes càustiques poden conduir a un important creixement de la ràtio de col·lisió al fer augmentar el nombre de Stokes. En particular, **Falkovich, Fouxon i Stepanov (2002)** va demostrar que quan la inèrcia és prou alta, partícules expulsades de vòrtexs adquireixen velocitats que poden diferir molt de la velocitat del fluid i per tant xocar contra altres partícules amb grans velocitats relatives, el que s'anomena efecte tirador. Aquest mecanisme càustic proveeix la contribució dominant a la ràtio de col·lisió quan el nombre de Stokes és  $St \gtrsim 0.5$  (**Pumir and Wilkinson 2016**).

En el cas límit en el que la turbulència és molt gran, com quan  $Re \gg 1$  i  $\tau_p$  també és alt, les partícules viatgen grans distàncies a través del fluid sense ser influenciades per remolins turbulents de petita escala. Per exemple, en un flux turbulent amb el temps de relaxació de major escala, el de l'escala integral  $\tau_\Lambda$ , característic del moviment o força de conducció propi dels fluxos turbulents, si  $\tau_p \ll \tau_\Lambda$ , les partícules seran propulsades pels remolins de més longitud i immunes a remolins amb temps de relaxació menors a  $\tau_p$ . En aquestes condicions, un anàlisi teòric basat en arguments dimensionals desenvolupat per **Mehlig, Uski i Wilkinson (2006)**, que considera l'assumpció de kolmogorov segons la qual  $\epsilon$  és l'únic paràmetre que entra en la descripció en el rang d'inèrcia, estima que la taxa de col·lisió en altes escales de flux turbulent en:

$$R_{caust} \sim \frac{n_p r_p^2 \eta}{\tau_\eta} \sqrt{St} \quad (\text{Eq. 4.3.3})$$

Com s'ha discutit anteriorment, alguns mecanismes són responsables de facilitar col·lisions entre partícules suspeses en un flux turbulent. El component de cisallament de la turbulència causa col·lisions entre partícules arrastrades pel fluid en la ràtio estimada per **Saffman & Turner (1956)** en l'eq.4.3.2. A més a més, els efectes inercials indueixen dos fenòmens diferents:

- Concentració preferencial: fa referència a l'acumulació de partícules en zones de màxima influència vòrtica (com en les zones centrals dels remolins) o en regions d'alt estrès (com en les regions frontereres entre remolins) depenent de la relació entre la densitat del fluid i la de les partícules, tal com ja s'ha explicat en el punt 4.2.
- Incorporacions càustiques generades per partícules situades en la mateixa localització espacial amb velocitats molt diferents.

Finalment, en el cas límit en que es tenen nombres de Stokes molt alts, s'ha argumentat que els moviments de les partícules deixen de correlacionar-se entre ells, i una simple forma asimptòtica per la ràtio de col·lisió donada per l'eq.4.3.3 pot ser usada. Seguint els estudis de **Wilkinson, Mehlig**

i **Bezuglyy (2006)** i **Ducasse i Pumir (2009)** la ràtio de col·lisions pot ser teòricament descomposta en dues components. Algunes col·lisions sorgeixen per partícules que segueixen trajectòries similars per extensos períodes de temps i que eventualment entren en contacte per moviments de cisallament dels fluxos turbulents. Quan els números de Stokes esdevenen petits, i per tant les partícules actuen com a traçadores de fluid, aquest és l'únic mecanisme identificat. La ràtio de col·lisions que es deu a aquest mecanisme s'ha anomenat  $R_{adv}$  i és funció de la ràtio local de cisallament i de la densitat numèrica o concentració local de partícules. Les col·lisions entre partícules que no segueixen les línies o camins traçats pel fluid, que ocorren quan les càustiques comencen a formar-se, dona lloc a una contribució molt diferent anomenada  $R_{caust}$ . Aquestes dues contribucions difereixen de forma essencial per la seva dependència en el radi  $r_p$  de les partícules. Aquests dos mecanismes operen de forma independent, però les seves contribucions són additives, tal que:

$$R = R_{adv} + R_{caust} \quad (\text{Eq. 4.3.4})$$

Aquesta descomposició va ser proposada a l'analitzar diferents models teòrics i simulacions de models numèrics simplificats. Per tant, no hi ha cap criteri exacte que distingeixi entre col·lisions advectives i col·lisions dirigides per càustica, de manera que l'eq.4.3.4. ha de ser considerada una aproximació. Tot i això, per a valors de  $Re$  i  $St$  donats, ambdós termes difereixen de forma essencial com a resultat de la seva dependència en la mida  $r_p$  de les partícules. Concretament  $R_{adv}$  varia  $r_p^2$  mentre que  $R_{caust}$  és funció de  $r_p^D$  amb  $D > 2$  (**Pumir i Wilkinson 2016**). Aquesta diferència pot ser utilitzada per a separar les dues contribucions diferents en experiments.

Seguidament, les formules de  $R_{adv}$  i  $R_{caust}$  són derivades:

- a) Interpretació matemàtica de l'aportació de la turbulència a la ràtio de col·lisions.

En el límit  $St \ll 1$ , la ràtio de col·lisions és determinada per moviments de cisallament, sense efectes inercials importants, i conseqüentment  $R$  es redueix de forma asimptòtica a l'eq.4.3.2. La concentració preferencial causa l'acumulació de partícules amb valors petits de  $St$ . La densitat numèrica de partícules a una distància  $r$  d'una partícula qualsevol testejada és  $n_p \mathcal{C}(r)$ , on  $\mathcal{C}(r)$  és una funció de correlació radial. Una observació important és que l'efecte inercial que condueix a l'acumulació de partícules no provoca un augment significatiu de la velocitat relativa de les partícules, contràriament a la càustica. De fet, partícules amb grans diferències de velocitat no es troben juntes, de forma que no contribueix a la concentració preferencial. Com a resultat, el terme  $R_{adv}$  és l'únic que contribueix en la concentració local al voltant de les partícules, el que queda com:

$$R_{adv} = \sqrt{\frac{8\pi n_p d_p^3}{15 \tau_\eta}} c(d_p) \quad (\text{Eq. 4.3.5})$$

Aquesta funció de correlació radial s'obté a través de la realització de nombrosos experiments amb configuracions similars, que permeten aproximar-lo per aquelles configuracions particulars. No s'ha trobat funcions de correlació radial calculades per a les configuracions inicials dels experiments que es realitzaran en aquest treball, i tampoc es pretén calcular-les un cop obtinguts els resultats d'aquests experiments, ja que aquests són pocs i difereixen força en les seves respectives configuracions inicials, i per tant s'usarà l'aproximació descrita en l'eq.4.3.2 per a calcular l'aportació de la turbulència a la ràtio de col·lisions. Aquesta equació permet obtenir la taxa de col·lisió per partícula, metre cúbic i segon, però per tal de comparar experiments amb diferents configuracions és convenient obtenir la forma adimensional de l'equació. A més, com en alguns d'aquests casos interactuen partícules amb diàmetres diferents, la distància de col·lisió entre partícules s'expressarà com la suma dels radis de cada una. Finalment, com els experiments computacionals es realitzaran considerant la microescala de Taylor com a referent, és necessària ajustar l'escala d'aquesta equació i adimensionar-la. Per tant, l'eq.4.3.2 passa a ser:

$$R_{adv}[-] \sim \frac{\sqrt{8\pi} n_{p1} (r_1 + r_1)^3 + \sqrt{8\pi} n_{p2} (r_2 + r_2)^3 + \sqrt{8\pi} (n_{p1} + n_{p2}) (r_1 + r_2)^3}{\sum_i n_{pi} L^3} \quad (\text{Eq. 4.3.6})$$

On L representa la longitud d'un dels costats del volum d'estudi que es crearà per a realitzar els càlculs computacionals.

- b) Interpretació matemàtica de l'aportació de la càustica a la ràtio de col·lisions ( $St > 0,2$ )

En el règim dominat per la càustica, una expressió pot ser obtinguda seguint les idees discutides per **Mehlig, Uski i Wilkinson (2006)** de la fórmula (**Pumir & Wilkinson 2016**):

$$R_{caust} = \frac{n_p r_p^2 \eta}{\tau_\eta} \sqrt{St_\eta} e^{-S/St_\eta} \quad (\text{Eq. 4.3.7})$$

On K i S són constants a determinar alterant la ràtio de col·lisió en experiments, K caracteritza la ràtio de col·lisions asimptòtica a nombres de Stokes molt alts i S determina el punt d'encreuament on el mecanisme càustic esdevé important. Aquests paràmetres però, com ja s'ha dit, solament es poden conèixer a través d'un estudi exhaustiu de casos similars, que permetin calcular-los, i cada valor sols s'aplica a certs particulars.



Com ja s'ha explicat en la interpretació matemàtica de l'aportació de la turbulència, pels casos d'estudi d'aquest treball s'usarà l'aproximació de l'anterior equació, és a dir, l'eq.4.3.3.

$$R_{caust}[-] \sim \frac{n_{p1}}{\sum_i n_{pi}} \frac{r_1^2 \lambda}{L^3} \sqrt{St_{\lambda_1}} + \frac{n_{p2}}{\sum_i n_{pi}} \frac{r_2^2 \lambda}{L^3} \sqrt{St_{\lambda_2}} \quad (\text{Eq. 4.3.8})$$

## 4.4. Formació d'agregats

### a) Paràmetres que regeixen l'agregació

Tipus de xoc: Una col·lisió pot descriure's com un xoc parcialment o completament elàstic o com un xoc parcialment o totalment inelàstic. En el primer cas, les partícules xocaran, però rebotaran, conservant tota o gran part de l'energia cinètica que contien, sense formar agregats. En el segon cas, les partícules es deformaran al xocar, perdent gran part de l'energia cinètica que tenien anteriorment. Com més baixa sigui la fracció de xoc elàstic, més probable serà que es formi un agregat.

Adherència: És una propietat que mostren les partícules al xocar, i determina la resistència d'una partícula a separar-se d'una altra un cop han xocat. Aquesta propietat sol ser força constant en el cas de biopartícules, però en el cas dels microplàstics pot variar en funció de si es forma o no una capa de bacteris i microalgues sobre la superfície del microplàstic i del gruix d'aquesta capa formada (**Michels et al. 2018**).

### b) Paràmetres d'estudi

Hi ha uns diversos paràmetres que són objectius d'estudi d'aquests experiments.

El primer i més important és la dependència de l'índex de col·lisions vers als grups adimensionals, així que es variaran aquests paràmetres inicials per tal de determinar quin afecte té cada grup en les col·lisions.

També és interessant conèixer les propietats dels agregats formats en cada experiment, i veure si diferents característiques de les partícules suspeses en el fluid poden afectar en la forma com s'agreguen les partícules i/o agregats. Un altre dada interessant a estudiar és el de l'evolució de les propietats dels agregats al llarg del temps, és a dir, com es desenvolupa la formació d'agregats. Les respostes a aquesta pregunta ens poden donar informació sobre l'aportació dels grups adimensionals a la formació d'agregats.

Una pregunta que no es resoldrà és en quin moment aquests agregats es comencen a separar degut a que la seva mida és prou gran com perquè l'agregat sigui afectat per més d'un remolí. El fenomen de la desagregació es va tenir en compte en l'inici de la concepció del treball, però es va desestimar degut que la introducció d'un paràmetre com aquest provocaria que els temps de simulació escalessin de forma notòria respecte als actuals, que ja són força grans.

## 5. Experiments Computacionals

### 5.1. Descripció del problema i configuració inicial

Es pretén estudiar com interactuen les partícules de microplàstics i les biopartícules en un entorn similar al que es podria trobar en un ecosistema marí. Per aquest propòsit s'han creat un seguit d'experiments on es simula aquest entorn mitjançant el superordinador Stampede i un solver descrit en l'apartat 5.2.

Els experiments tenen com a propòsit investigar de forma detallada la contribució que representa a la col·lisió el fet de variar els grups adimensionals comentats anteriorment. En un inici es va valorar realitzar un experiment per grup adimensional, és a dir, partint d'un mateix escenari o problema, realitzar un cas on es variés el nombre de Reynolds, un altre on es variés la densitat numèrica de cada tipus de partícula, i per associació, la seva ràtio de càrrega massica, i un últim on s'alterés el nombre de Stokes de família de partícules. Tot i això, l'augment exponencial dels temps de simulació dels experiments que significava alterar el nombre de Reynolds, va comportar el replantejament de l'estratègia inicial.

Finalment s'ha optat per a realitzar tres experiments:

- El primer cas pretén simplement estudiar la ràtio de col·lisió i la formació d'agregats d'un cas típic de presència de microplàstics en un ecosistema marí. S'ha ideat un estudi exploratori a partir d'un valor  $Re_\lambda = 61$  que permet caracteritzar la turbulència mitjana en mars i oceans.
- El segon cas està dividit en dues simulacions, en la primera d'elles se li concedirà un alt nombre de partícules a una de les dues famílies de partícules i un baix nombre de partícules a l'altra família, mentre que en la segona simulació s'invertiran els nombre de partícules de cada família respecte a l'anterior simulació. Això permetrà estudiar si la heterogeneïtat de tipus de partícules comporta una suma de diferents comportaments enfront a la turbulència, o si més no una suma de diferents ràtios de col·lisió, o si pel contrari tal heterogeneïtat és aparent, i les ràtios son les mateixes invariablement de la família de partícules dominant en el sistema. També permetrà comprendre quina aportació té la reducció i multiplicació del nombre de Stokes en cada partícula a la taxa de col·lisió i a la formació d'agregats. En un principi es volia partir de les condicions del cas 1, però la baixíssima ràtio de col·lisions, ha fet que es decidís augmentar el diàmetre d'ambdues famílies de partícules de forma substancial.
- Finalment, en el tercer i últim cas, es vol saber quin afecte tindrà la multiplicació del nombre de Stokes de cada família de partícules, en les mateixes condicions inicials que el primer cas estudiat, sobre els seus resultats. Per tal propòsit, s'ha fet una simulació on únicament s'ha

elevat substancialment el diàmetre d'una de les famílies de partícules, i un altra simulació on s'ha elevat només el diàmetre de la família restant.

L'objectiu del conjunt d'experiments és comprendre la importància de la influència dels diversos grups adimensionals estudiats sobre el sistema i quins són els límits d'influència de cada un d'aquests.

La configuració inicial del problema considera un domini cúbic periòdic de mida  $L=0.5\text{m}$  que conté una barreja de turbulència homogènia isotròpica (HIT) i partícules. El fluid de treball té una densitat  $\rho_f=11027\text{ kg/m}^3$  i una viscositat cinemàtica  $\mu_f=0.00141\text{ Pa}\cdot\text{s}$ , que representen les característiques físiques de l'aigua marina a  $10\text{ }^\circ\text{C}$ , i és accionat volumètricament per mitjà d'un disseny d'inducció de turbulència (**Bassenne et al. 2016**) orientat a produir energia cinètica turbulent (eq.5.4) tal que la ràtio entre la mida del domini i l'escala longitudinal de Kolmogorov sigui  $L/\eta \sim \mathcal{O}(10^2)$  i que així les característiques de les escales de petita longitud no siguin afectades per les fronteres periòdiques triples. La mitjana quadràtica de fluctuacions de velocitat serà  $u_{RMS}=4.3\cdot 10^{-3}$  i la longitud de la microescala de Taylor  $\lambda = 1.95 \cdot 10^{-2}\text{m}$  es seleccionen per representar una turbulència induïda per vent de  $Re_\lambda = 61.04$ , que caracteritza típicament la turbulència superficial marina. Les partícules que prenen part en el problema són microplàstics i biopartícules. En el cas dels microplàstics, l'article **Eerkes-Medrano, Thompson i Aldridge (2015)** defineix que un microplàstic propi d'entorns marins té un diàmetre  $d_{p1} < 5 \cdot 10^{-3}\text{m}$ , que la seva densitat es troba dintre dels marges  $850\text{ kg/m}^3 < \rho_{p1} < 1400\text{ kg/m}^3$ , i la seva densitat numèrica es troba compresa entre  $1000\text{ kg/m}^3 < n_{p1} < 100000\text{ kg/m}^3$ . Mentre que l'article **Nowald et al. (2006)** delimita el diàmetre de les biopartícules en  $1\cdot 10^{-6}\text{m} < d_{p2} < 1\cdot 10^{-3}\text{ m}$ , la seva densitat entre  $1050\text{ kg/m}^3 < \rho_{p2} < 1500\text{ kg/m}^3$ , i la seva densitat numèrica dintre els marge  $1\cdot 10^3\text{ prts} < n_{p2} < 1\cdot 10^6\text{ prts}$

S'han realitzat tres casos, en dos dels quals s'han realitzat dos experiments iguals però variant un dels grups adimensionals que interessin. Per a tots els casos s'ha seleccionat una  $\rho_{p1}=1000\text{ kg/m}^3$  i una  $\rho_{p2}= 1200\text{ kg/m}^3$ , ja que es consideren les densitats mitjanes típiques de cada tipus de partícula.

| Paràmetres introduïts                | Valor                | Paràmetres calculats | Valor                |
|--------------------------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| $\rho_f$ [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]  | 1027                 | $Re_\lambda$ [-]     | 61.04                |
| $\mu_f$ [ $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ] | $1.41 \cdot 10^{-3}$ | $\tau_\lambda$ [s]   | 4.535                |
| $\lambda$ [m]                        | $1.95 \cdot 10^{-2}$ | $\eta$ [m]           | $1.27 \cdot 10^{-2}$ |
| $u_{RMS}$ [ $\text{m}/\text{s}$ ]    | $4.3 \cdot 10^{-3}$  | $\tau_\eta$ [s]      | 1.171                |

$$\rho_{p1} [\text{kg}/\text{m}^3] \quad 1000$$

$$\rho_{p2} [\text{kg}/\text{m}^3] \quad 1200$$

**Taula 5.2.1.** Configuració inicial dels paràmetres generals en tots els casos.

Les configuracions particulars escollides de diàmetre i densitat numèrica per ambdues famílies de partícules en cada cas estan recollides en la següent taula:

|  |         | $d_{p1} [m]$      | $n_{p1} [prts]$ | $d_{p2} [m]$      | $n_{p2} [prts]$ |
|--|---------|-------------------|-----------------|-------------------|-----------------|
| Cas 1: Estudi exploratori                  |         | $1 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^4$  | $1 \cdot 10^{-4}$ | $5 \cdot 10^6$  |
| Cas 2: Inversió del $N_{pi}$ i del $MLR_i$ | Cas 2.1 | $5 \cdot 10^{-4}$ | $4 \cdot 10^6$  | $5 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^6$  |
|  | Cas 2.2 | $5 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^6$  | $5 \cdot 10^{-4}$ | $4 \cdot 10^6$  |
| Cas 3: Inversió del $St_i$                 | Cas 3.1 | $1 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^4$  | $1 \cdot 10^{-3}$ | $5 \cdot 10^6$  |
|  | Cas 3.2 | $1 \cdot 10^{-3}$ | $1 \cdot 10^4$  | $1 \cdot 10^{-4}$ | $5 \cdot 10^6$  |

**Taula 5.2.2.** Diàmetre i densitat numèrica escollides en cada cas per a microplàstics i biopartícules.

## 5.2. Estratègia computacional

En una aproximació PP, les interaccions entre partícules són típicament descrites per models de col·lisió basats en el balanç d'energia i moment totals. En el cas de col·lisions que involucren a dues partícules o agregacions A i B, les velocitats després de l'impacte,  $v_{ADI}$  i  $v_{BDI}$ , seran:

$$v_{ADI} = [m_A v_{AAI} + m_B v_{BAI} + m_B C_R (v_{BAI} - v_{AAI})] / (m_A + m_B) \quad (\text{Eq. 5.2.1})$$

$$v_{BDI} = [m_A v_{AAI} + m_B v_{BAI} + m_A C_R (v_{AAI} - v_{BAI})] / (m_A + m_B) \quad (\text{Eq. 5.2.2})$$

On  $v_{AAI}$  i  $v_{BAI}$  són les velocitats de les respectives partícules abans de l'impacte i  $0 \leq C_R \leq 1$  és el coeficient de restitució. Els límits de  $C_R$  corresponen als casos en que les partícules s'uneixen al impactar o reboten amb la mateixa velocitat relativa que abans d'impactar, 0 caracteritza una col·lisió perfectament inelàstica i 1 una col·lisió perfectament elàstica, mentre que valors intermedis representen col·lisions inelàstiques en que l'energia cinètica és dissipada.

La investigació de la formació d'agregats en aquest treball és conduïda per mitjà d'una assumptió simplificadora que les partícules s'uneixen a l'impactar, és a dir que el seu coeficient de restitució és

sempre zero. En un aproximament més profund (**Burd i Jackson 2009**), un factor de viscositat  $0 \leq \alpha \leq 1$  pot ser afegit per tal de caracteritzar la probabilitat que dues partícules s'adhereixin quan xoquen, depenent en les característiques de les seves superfícies i velocitats relatives entre elles. Tot i això, com un primer estudi del problema, aquest aproximament tan complex no s'ha considerat, com tampoc el cas que els agregats es puguin trencar o fragmentar degut a forces d'estrès hidrodinàmic (Bäbler et al. 2010 ; Babler et al. 2014). Particularment, la formació d'un agregat és modelada aproximant la seva densitat (eq.5.2.1) i diàmetre (5.2.2) en base a les partícules que formen el seu assemblatge en una configuració esfèrica compacta equivalent a assumir una dimensió fractal  $D_F = 3$  (**Bäbler, Morbidelli i Bałdyga 2008**) i considerant que segueix les equacions lagrangianes PP de moviment donades i col·lisió donades per eq.3.2.19 i 5.2.2.

$$\rho_{ag} = \frac{\sum_p m_p}{\sum_p V_p}, \quad d_{ag} = \sqrt[3]{\sum_p d_p^3} \quad (\text{Eq. 5.2.3})$$

Les equacions del fluid seran estimades per mitjà d'aproximacions de diferències finites centrades de segon ordre (**Jofre, del Rosario i Iaccarino 2020**), les versions tridimensionals de l'eq.5.2.4, implementades en un solver de flux que usa malles cartesianes no uniformes per tal de realitzar tals aproximacions. Aquest solver integra les equacions diferencials en el temps mitjançant el mètode de Runge-Kutta de quart ordre conjuntament amb un mètode d'esglaó fraccional que s'encarrega d'imposar la conservació de massa. La integració en el temps de les equacions que caracteritzen el comportament de les partícules (eq. 3.2.4 i eq.3.2.5) es realitza a la vegada que les equacions que caracteritzen el del fluid, per tal d'assegurar precisió en el càlcul de quart ordre.

$$f''(x) \approx \frac{\delta_h^2[f](x)}{h^2} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \quad (\text{Eq. 5.2.4})$$

Les equacions de conservació són resoltes en un domini computacional discretitzat per una malla uniforme amb  $196^3$  punts (**Pope 2000**) amb la mateixa resolució que la microescala de Kolmogorov, degut a que els costats del cub que delimita el domini tenen una longitud  $L = 0,5$ , i integrades en el temps conjuntament amb el moviment i col·lisió de les partícules amb una condició Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) de  $CFL=0.3$  (**Courant, Friedrichs i Lewy 1928**).

En una simulació, és molt freqüent que el time step comenci a divergir, arribant a multiplicar-se diverses vegades, i quan aquesta divergència és massa gran es poden produir resultats incorrectes. Aquest CFL permet saber a partir de quin valor de time step de simulació es comencen a poder produir aquests resultats incorrectes.

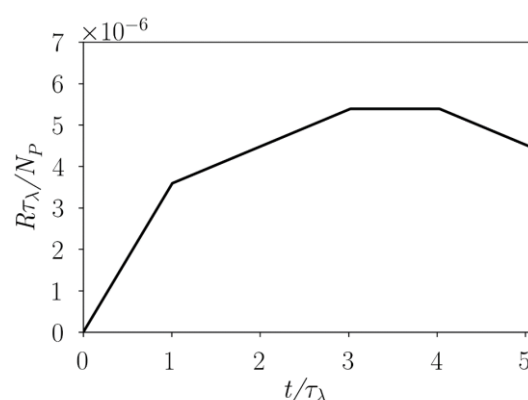
El sistema lineal resultat de l'equació de Poisson usada per a imposar la conservació de massa es soluciona per mitjà d'una solver de Transformades ràpides de Fourier (FFT). No s'ha implementat cap

model de desagregació, així que no es sabrà exactament si els diàmetres resultants són factibles en casos d'extrema agregació.

Les simulacions s'han realitzat en el superordinador Stampede 2, localitzat en el Advanced Computer Center (TACC), l'accés al qual l'ha finançat la National Science Foundation (NSF).

### 5.3. Anàlisi computacional i resultats

**Cas1: Configuració inicial de barreja de microplàstics i biopartícules en aigua marina.**



**Fig. 5.3.1.** Taxa de col·lisions adimensional del cas 1 (normalitzada per a partícula i període de relaxació).

Tal com es veu en la figura 6.3.1, pel cas 1 la ràtio de col·lisions no és del tot constant, però és factible considerar una ràtio de col·lisió mitjana com la que s'ha estipulat en la taula 5.3.1, ja que la corba de la ràtio de col·lisions no augmenta perpètuament al llarg del temps.

| Variable         | Valor                | Variable              | Valor                  |
|------------------|----------------------|-----------------------|------------------------|
| $MLR_1$          | $5.10 \cdot 10^{-9}$ | $R_{comp} [-]$        | $\sim 5 \cdot 10^{-6}$ |
| $MLR_2$          | $3.06 \cdot 10^{-6}$ | $R_{adv. teo.} [-]$   | $4.08 \cdot 10^{-8}$   |
| $St_{\lambda_1}$ | $8.69 \cdot 10^{-5}$ | $R_{caust. teo.} [-]$ | $2.06 \cdot 10^{-8}$   |
| $St_{\lambda_2}$ | $1.04 \cdot 10^{-4}$ | $R_{teo.} [-]$        | $6.14 \cdot 10^{-8}$   |

**Taula 5.3.1.** Resultats teòrics i computacionals del cas 1.

Sembla ser que el model d'aproximació escollit no es pot aplicar al cas 1, on dona un error més que significatiu en comparació al resultat computacional.

Tot seguit s'ha realitzat un estudi de les propietats de cada agregat:

- Cap agregat conté partícules de microplàstic, totes les col·lisions que s'han produït han estat entre dues biopartícules.
- El diàmetre dels agregats de biopartícules tendeix a ser de 126 micròmetres, existint una variància quasi nul·la, això ens informa de que indistintament de les condicions en que es produeix la col·lisió, el diàmetre format tendirà a ser el mateix. És interessant recordar que el diàmetre d'ambdues partícules era de 100 micròmetres. Les agregacions formades obtenen diàmetres que no són la suma dels diàmetres d'ambdós partícules, sinó que són resultat de la suma dels seus volums, fet que deriva en diàmetres substancialment menors a una suma dels diàmetres de les seves partícules, ja que cada quantitat augmentada  $n$  de diàmetre suposa un augment  $n^3$  de volum.
- La densitat sempre és 1200, i la seva variància és nul·la, degut a que totes les partícules agregades són biopartícules.

### **Cas2.1 i Cas2.2: Estudi sobre els efectes produïts per la inversió de la densitat numèrica de les dues famílies de partícules**

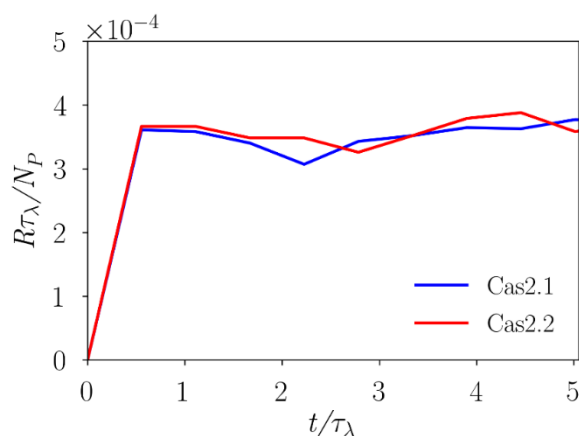
Els casos 2.1 i 2.2 estaven plantejats per a realitzar-se amb partícules de diàmetre  $d = 1 \cdot 10^{-4}$  m com en el cas 1, i anar variar la densitat numèrica imperant, però no s'han produït col·lisions en cap dels dos casos.

Això fa pensar, degut a que la densitat numèrica total de partícules (que és la suma de les densitats numèriques de cada família de partícules) és gairebé la mateixa que la del cas 1, que la diferència es troba en el percentatge de biopartícules respecte el total de partícules. En el cas 2.2 el percentatge de biopartícules és del 80%, mentre que en el cas 1 era del 99,8%. Això pot indicar dues coses:

- 1- Les biopartícules tendeixen més fàcilment a col·lidir que els microplàstics, almenys en els primers cinc períodes de relaxació, perquè al tenir una densitat 20% major a la dels microplàstics, són més sensibles a la càustica ( $St_\lambda$  és funció de  $Z_p$  i aquest és funció de  $\rho_p$ ), i per tant, els xocs que s'han produït es deuen majoritàriament a la càustica.
- 2- L'efecte que pot produir la diferència de densitats en la càustica és molt limitat, i per tant es produeixen pocs o zero xocs per interacció càustica. Per tant, les partícules amb densitat similar tendeixen a xocar més entre elles degut a la concentració preferencial. És a dir, que si una de les famílies de partícules tingués una densitat molt superior a l'altra, es produiria una probabilitat menor de col·lisió que en l'actualitat. Per tant, partícules amb mateixes densitats tindran més probabilitats d'acumular-se juntes, possibilitant l'agregació.

Els resultats de la modelització dels efectes de la turbulència i la càustica en la ràtio de col·lisions del cas 1 mostren que, en teoria, la turbulència hauria de tenir un impacte major en la ràtio. Tot i això, no es pot assegurar que sigui així en la realitat física, ja que al cap i a la fi, es tracta d'una aproximació merament teòrica que pot no tenir en compte tots els factors involucrats. Si es volgués aprofundir més en aquesta tesi, es podria realitzar un experiment amb la mateixa configuració inicial que el cas 1, però invertint la densitat numèrica. Si es produís una ràtio semblant de col·lisions voldria dir que la càustica no ha intervingut significativament en el mecanisme de col·lisió, però si aquesta ràtio fos significativament menor o fos nul·la, indicaria que la càustica ha estat el principal mecanisme de col·lisió.

L'objectiu d'aquest treball, tot i ser en part estudiar els fenòmens explicats fins ara, també és entendre la formació i característiques dels agregats, així que s'ha elevat el diàmetre d'ambdós famílies de partícules, i conseqüentment el nombre de Stokes, a  $d = 5 \cdot 10^{-4}$  m:



**Figura 5.3.2.** Ràtios de col·lisions normalitzada per partícula i període de relaxació de Taylor (adimensional) respecte al temps normalitzat per unitat de temps de relaxació de Taylor pels casos 2.1 i 2.2.

En la figura 5.3.2 es pot observar que, tot i créixer linealment durant el primer temps de relaxació en la microescala de Taylor, la ràtio de col·lisions esdevé força constant en ambdues corbes un cop superada aquesta etapa.

També es pot veure com pel cas 2.2, en que es parteix amb una densitat major de biopartícules que de microplàstics, s'obté una ràtio de col·lisions lleugerament superior a la del cas2.1 pels primes dos períodes de relaxació de Taylor, però que després ambdues corbes es creuen fins en tres ocasions, sobrepasant contínuament l'una a l'altra, i fent que la diferència entre els valors mitjans d'ambdues ràtios sigui gairebé nul·la. L'única diferència significativa entre els microplàstics del cas 2.1 i les biopartícules del cas 2.2 és que la densitat de les biopartícules és un 20% més alta que la dels microplàstics, fent palès que la variació de densitat, que hauria de comportar una variació tant de la



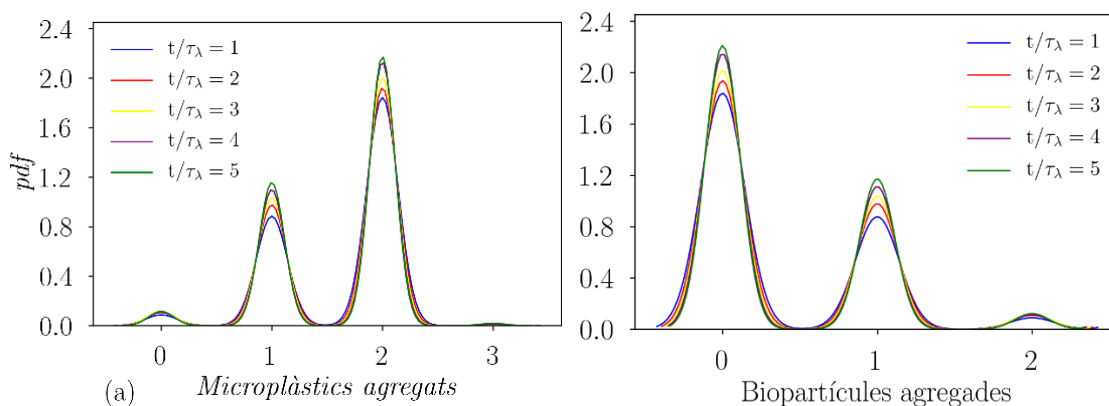
$MLR_i$  com del  $St_{\lambda_i}$  de les partícules associades, té una incidència menyspreable en la variació del valor de la ràtio de col·lisions, almenys a partir dels paràmetres inicials introduïts i dins del marge de temps simulat.

**Cas2.1: Densitat numèrica predominant de microplàstics**

| Variable         | Valor                | Variable              | Valor                    |
|------------------|----------------------|-----------------------|--------------------------|
| $MLR_1$          | $6.37 \cdot 10^{-6}$ | $R_{comp} [-]$        | $\sim 3.5 \cdot 10^{-4}$ |
| $MLR_2$          | $6.55 \cdot 10^{-5}$ | $R_{adv. teo.} [-]$   | $6.21 \cdot 10^{-7}$     |
| $St_{\lambda_1}$ | $2.17 \cdot 10^{-3}$ | $R_{caust. teo.} [-]$ | $2.53 \cdot 10^{-6}$     |
| $St_{\lambda_2}$ | $2.61 \cdot 10^{-3}$ | $R_{teo.} [-]$        | $3.15 \cdot 10^{-6}$     |

Taula 5.3.2. Resultats matemàtics i computacionals del cas 2.1.

Com ja ha passat en el cas 1, per al cas 2.1 l'aproximació segueix els resultats computacionals. Els resultats teòrics indiquen que el sistema dominant és l'agregació càustica.



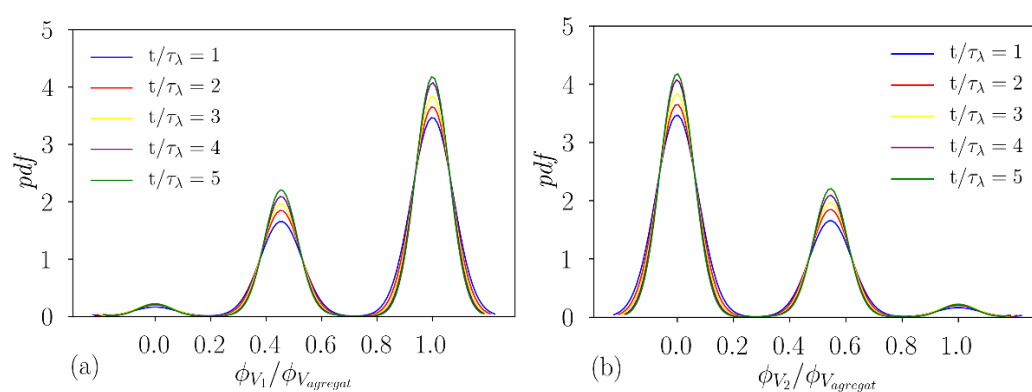
**Figura 5.3.3.** Distribució multimodal del nombre de microplàstics (a) i biopartícules (b) que formen part de cada agregat en el cas 2.1 per a cada període de relaxació de Taylor.

En el cas dels microplàstics, s'han creat de forma majoritària agregacions de 2 microplàstics (més o menys sis desenes parts de les agregacions són d'aquest tipus), seguides d'agregacions on una de les partícules conformants de l'agregat és un microplàstic, i que suposen gairebé la meitat d'agregacions que les agregacions de 2 microplàstics. En menor mesura (menys d'una desena part del total d'agregats) es troben els agregats on cap partícula de les que componen l'agregat és un microplàstic, i fins i tot podem trobar agregacions de 3 microplàstics, tot i això, aquestes agregacions de 3

microplàstics han resultat estar fetes només per microplàstics i representen un percentatge proper zero del total dels agregats.

A més a més, es pot observar en la figura 5.3.3 que contra major ha estat el període de relaxació en que es trobava el fluid, més s'ha eixamplat la diferència entre el nombre d'agregats de 1 i 2 microplàstics i els de 0 i 3 microplàstics.

Les biopartícules han format agregats amb una composició oposada a la dels microplàstics, la majoria d'agregats no contenen biopartícules, mentre que els agregats que en contenen una representen la meitat d'agregats que els que no en contenen cap. Els agregats amb dues biopartícules suposen un percentatge menor al 10% del total d'agregats, però a diferència dels microplàstics, no es troba cap agregat compost per més de dues biopartícules.

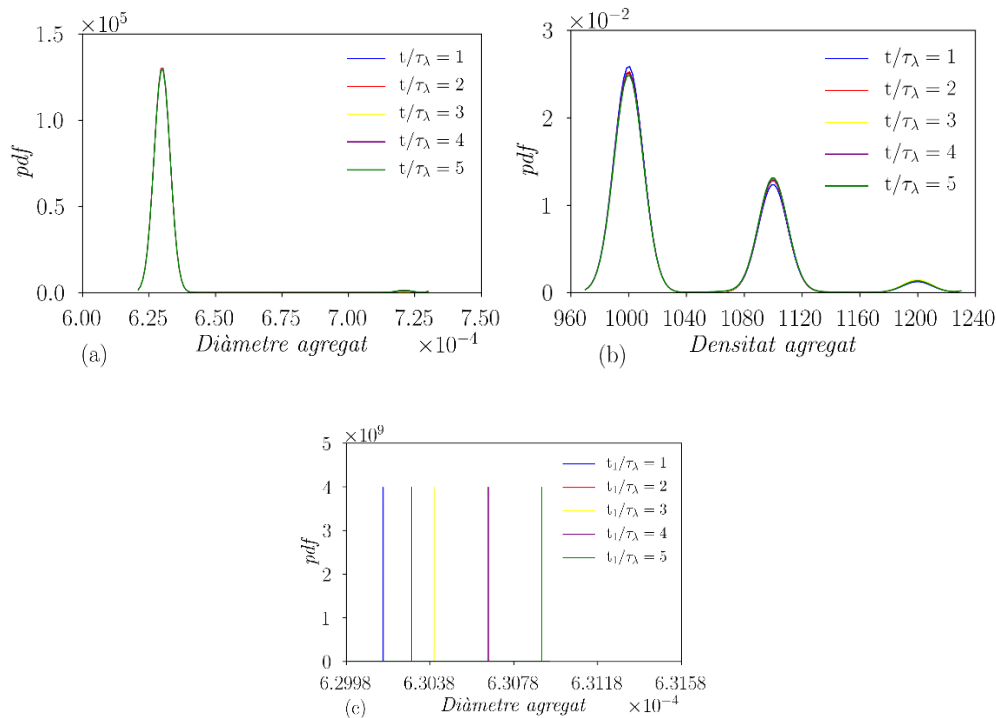


**Figura 5.3.4.** Funció de densitat de probabilitat de la fracció volumètrica de microplàstics (a) i biopartícules (b) que forma cada agregat en el cas 2.1 per a cada període de relaxació de Taylor.

Com es pot veure en les figura 5.3.4, la fracció volumètrica majoritària és la dels microplàstics, que tendeix a representar un volum total d'un 80% en el conjunt d'agregats, està repartida entre una majoria d'agregats on la fracció és unitària, un altre conjunt menor d'agregats on representa un 45,45% del volum i una petitíssima quantitat d'agregats on la fracció de microplàstics és nul·la. Mentre que la fracció volumètrica de les biopartícules suposa aproximadament un 20% del volum total dels agregats, amb una fracció volumètrica majoritària nul·la, una grup d'agregats menor on representa un 54,55% del volum i una reduïda quantitat d'agregats amb fracció unitària. Aquestes configuracions indiquen que la gran majoria d'agregats estan formats per dues partícules, ja sigui microplàstic-microplàstic, biopartícula-biopartícula o microplàstic biopartícula.

En molt menor mesura, també hi ha altres configuracions de fraccions volumètriques de microplàstics (29,41% i 62,5%), i de biopartícules (70,59% i 37,5%) indicant que es formen agregats de tres partícules, on les partícules predominants poden ser tant els microplàstics, com les biopartícules.

Les figures 5.3.4 mostren que contra major és el temps de relaxació en el que ens trobem, més ampla és la densitat de probabilitat i més modest és el pic que forma, és a dir, que la fracció volumètrica tendeix cada cop menys a ser representada per un únic valor, distribuint-se més en altres valors. Tot i això, aquest canvi és mínim si es compara amb el volum total de dades.



**Figura 5.3.5.** Distribució de densitat de probabilitat del diàmetre (a) i de la densitat (b) i distribució normal del diàmetre mig en funció del temps (c) en cas 2.1 dels agregats formats per a cada període de relaxació de Taylor.

El diàmetre mig dels agregats conformats va augmentant en funció del període de relaxació en que un es troba, el que demostra que a mesura que passa el temps, apareixen agregats compostos per més de dues partícules. Tot i això, el percentatge d'agregats amb més de dues partícules és molt petit comparat al total d'agregats formats, fet que el resultat només variï poques centèsimes de micròmetres, i un clar exemple d'això és que la variància del diàmetre dels agregats en cada període de relaxació és petitíssima, fet que mostra la enorme diferència entre el nombre d'agregats amb dues partícules i el nombre d'agregats amb 3 partícules.

La densitat, a diferència del diàmetre, es manté força constant, tendint cap a un valor mig proper als  $1040 \text{ kg/m}^3$ , el que exposa la naturalesa dels agregats, que tendeixen a estar formats per microplàstics, de densitat igual a  $1000 \text{ kg/m}^3$ .

### Cas2.2: Densitat numèrica predominant de biopartícules

| Variable         | Valor                | Variable               | Valor                    |
|------------------|----------------------|------------------------|--------------------------|
| $MLR_1$          | $2.55 \cdot 10^{-4}$ | $R_{comp} [-]$         | $\sim 3.5 \cdot 10^{-4}$ |
| $MLR_2$          | $7.66 \cdot 10^{-5}$ | $R_{adv. tero.} [-]$   | $1.28 \cdot 10^{-6}$     |
| $St_{\lambda_1}$ | $2.17 \cdot 10^{-3}$ | $R_{caust. teor.} [-]$ | $2.06 \cdot 10^{-5}$     |
| $St_{\lambda_2}$ | $2.61 \cdot 10^{-3}$ | $R_{teor.} [-]$        | $2.18 \cdot 10^{-5}$     |

Taula 5.3.3. Resultats teòrics i computacionals del cas 2.2.

Com en el cas 2.1 i el cas 1, la col·lisió teòrica no coincideix amb la computacional. En aquest cas però, la diferència entre elles és menor, mostrant l'impacte que té la diferència de densitats en l'augment d la càustica.

En el cas 2.2 es produeixen més agregacions que en el cas 2.1, resultat de l'augment de col·lisions entre aquest i l'anterior cas. Tot i això, el procés de formació d'agregats sembla ser idèntic al del cas 2.1, havent-se format una proporció similar d'agregats per cada col·lisió, i havent el mateix nombre de partícules, invariablement del tipus de partícula, en cada agregat. Com ja havia succeït en els anteriors casos, el model matemàtic de la ràtio de col·lisions no ha resultat ser aplicable.

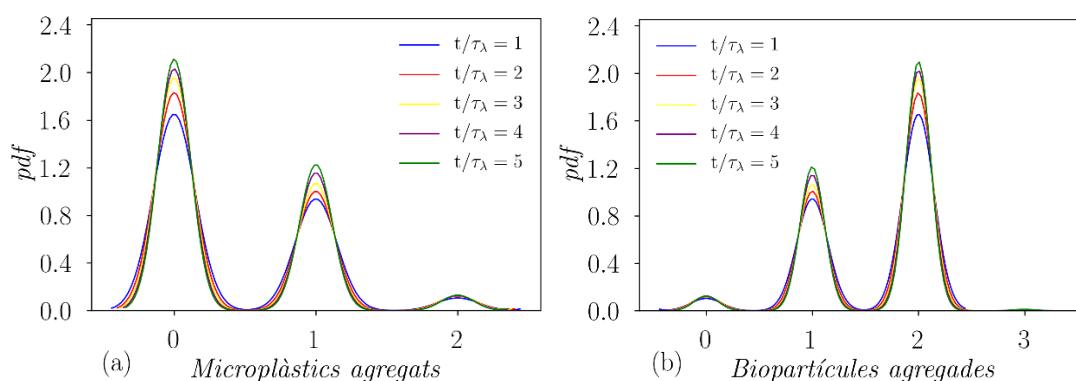
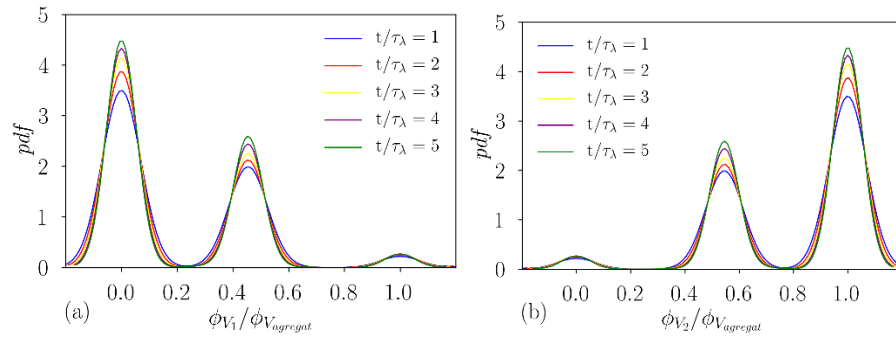


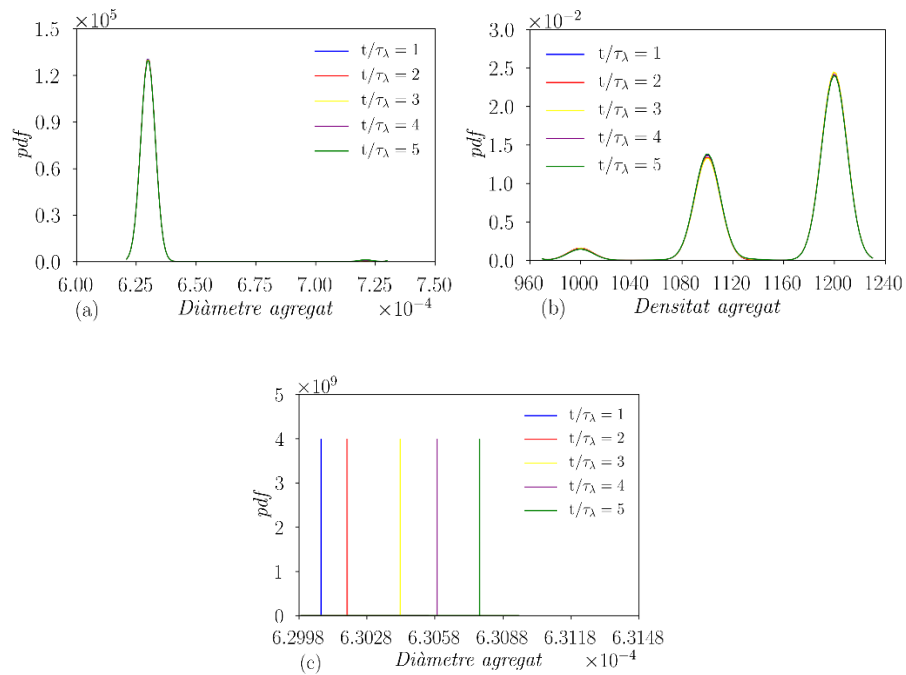
Figura 5.3.6. Distribució multimodal del nombre de microplàstics i del nombre de biopartícules que formen part de cada agregat per a cada període de relaxació de Taylor.

En aquest cas, i contràriament que en l'anterior, el tipus de partícula imperant en els agregats és la biopartícula, que acostuma a tenir dues partícules en cada agregat. Els microplàstics, en canvi, no solen estar presents en els agregats formats en el aquest cas. Respecte a les distribucions, semblen ser les mateixes que en el cas anterior, però invertides segons el tipus de partícula.



**Figura 5.3.7.** Funció de densitat de probabilitat de la fracció volumètrica de: (a) microplàstics i (b) biopartícules que forma cada agregat per a cada període de relaxació de Taylor.

Tal com ha succeït amb les distribucions del nombre de partícules de cada tipus que formen cada agregat, en la fracció volumètrica les distribucions també han resultat pertànyer al tipus de partícula oposat a la que pertanyien en el cas 2.1. Per tant, en aquest cas, la fracció volumètrica dels microplàstics ha tendit cap al 20% i la de les biopartícules al 80%.

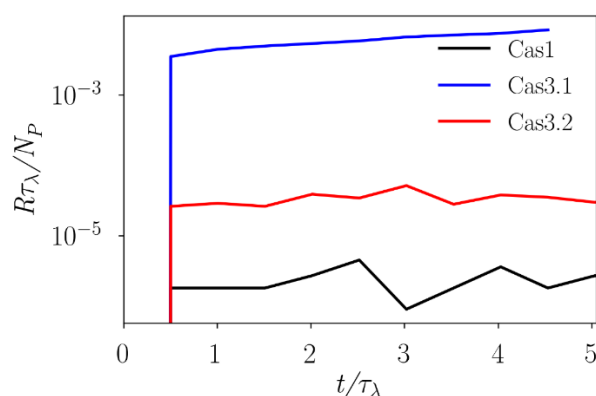


**Figura 5.3.8.** Funció de densitat de probabilitat del diàmetre(a) de la densitat de cada agregat(b) i distribució normal del diàmetre mig en funció del temps (c) en el cas 2.2 per a cada període de relaxació de Taylor.

Si es compara les figures 5.3.8 es pot observar que el diàmetre mig dels agregats en l'actual cas creix més lentament que en el cas 2.1, denotant que els microplàstics afavoreixen més la creació d'agregats de més de dues partícules que les biopartícules, encara que aquestes facilitin més l'aparició d'agregats simples (agregats de dues partícules).

Pel que fa a la densitat dels agregats formats en el cas 2.2, sembla que es formen agregats amb densitats de 1000, 1100 i 1200 kg/m<sup>3</sup>, el que demostra la presència d'agregats MP-MP, BP-BP i MP-BP, aquests últims compostos únicament per a dues partícules, ja que si fossin més, la densitat seria un terme mig entre 1100 i qualsevol de les altres, depenent del tipus de partícula dominant en l'agregat.

**Cas3.1 i Cas3.2: Estudi sobre els efectes produïts per l'increment dels diàmetre d'una de les família de partícules sobre la configuració inicial i per la inversió de diàmetres d'aquesta nova configuració.**



**Figura 5.3.9.** Ràtios de col·lisions normalitzades per partícula i període de relaxació de Taylor (adimensional) respecte el temps normalitzat per període de relaxació de Taylor pels casos 3.1 i 3.2.

Clarament el cas 3.1 produeix més col·lisions que el cas 3.2, però això era esperable, ja que s'ha introduït una molt major densitat numèrica de biopartícules que de microplàstics, per tal de no alterar el cas de referència. Per altra banda, l'impacte d'incrementar el diàmetre sembla ser proporcionalment semblant en ambdós casos si es té en compte l'enorme diferència en la densitat numèrica d'ambdues partícules i es compara amb la corba de ratió de col·lisions del cas inicial, el cas 1, on els dos diàmetres eren iguals. Tot i això, estaria bé portar a terme un estudi d'un cas on la densitat numèrica fos la mateixa en ambdós tipus de partícula per tal de comprovar que variar el diàmetre de cada una per separat fa augmentar la ràtio de col·lisió de forma similar.

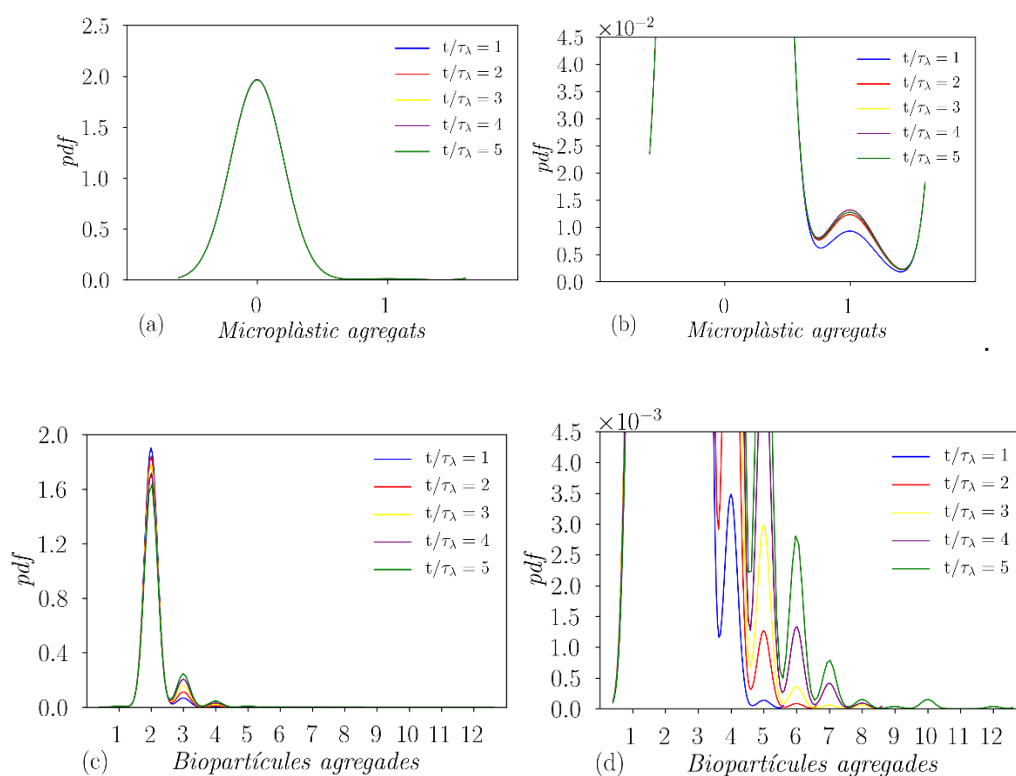
La informació més interessant que aporta la figura 5.3.9 però, és que el paràmetre que té més incidència sobre la ràtio de col·lisions és l'increment diametral, i per tant, el grup adimensional del nombre de Stokes. ent més factible en ecosistemes marins reals que augmentar altres grups adimensionals, ajuda a incrementar més la ràtio de col·lisió que els altres grups estudiats, per les condicions establertes en l'experiment dut a terme.

**Cas3.1: El major diàmetre correspon a les biopartícules**

| Variable         | Valor                | Variable               | Valor                  |
|------------------|----------------------|------------------------|------------------------|
| $MLR_1$          | $5.10 \cdot 10^{-9}$ | $R_{comp} [-]$         | $\sim 5 \cdot 10^{-3}$ |
| $MLR_2$          | $3.06 \cdot 10^{-3}$ | $R_{adv. teor.} [-]$   | $1.28 \cdot 10^{-6}$   |
| $St_{\lambda_1}$ | $8.69 \cdot 10^{-5}$ | $R_{caust. teor.} [-]$ | $2.06 \cdot 10^{-5}$   |
| $St_{\lambda_2}$ | $1.04 \cdot 10^{-2}$ | $R_{teor.} [-]$        | $2.18 \cdot 10^{-5}$   |

**Taula 5.3.4.** Resultats teòrics i computacionals del cas 3.1.

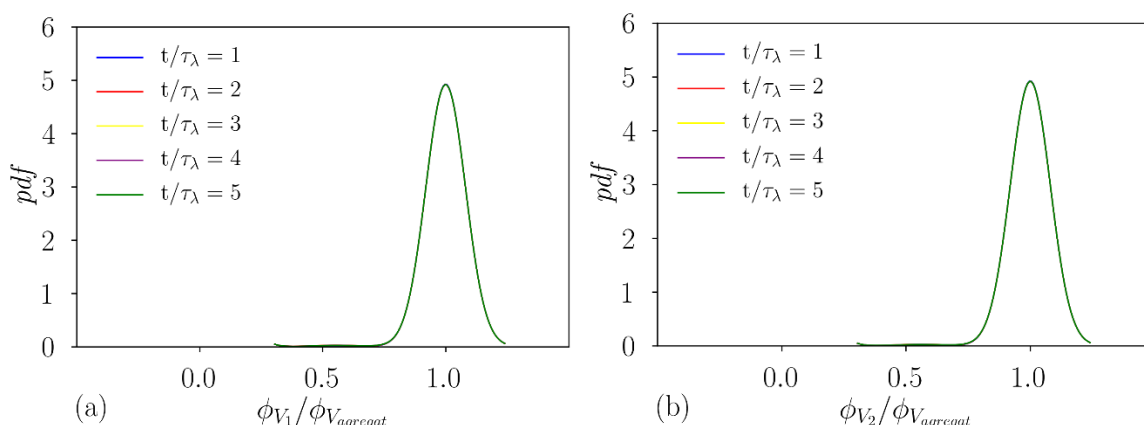
Comparant els resultats obtinguts dels càlculs realitzats i els resultats computacionals d'aquest cas amb els anteriors, s'arriba a la conclusió que la divergència del model escollit s'amplia a mesura que creix la ràtio de col·lisions.



**Figura 5.3.10.** Funció de densitat de probabilitat del nombre de microplàstics (a),(b) i biopartícules (c), (d) que formen part de cada agregat en el cas 3.1 per a cada període de relaxació de Taylor.

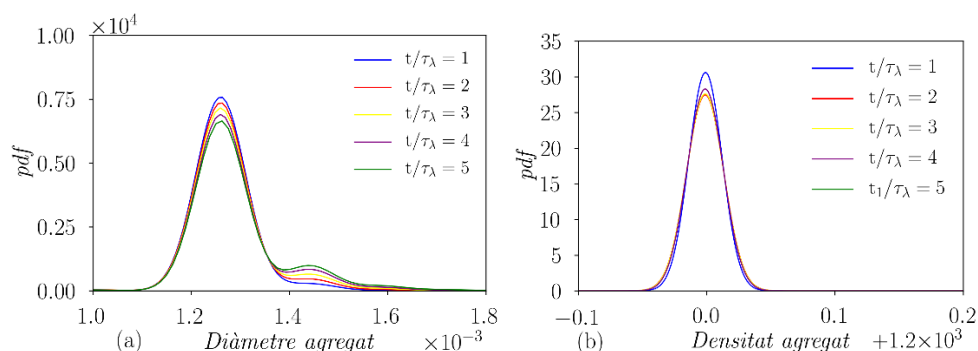
Els microplàstics mostren una tendència previsible a no formar part dels agregats, ja que com s'ha mencionat anteriorment suposen una petítíssima part de la configuració inicial de les partícules del

sistema. Pel que fa a les biopartícules, és interessant comprovar que ja es formen agregats de fins a 5 partícules només en el primer període de relaxació. Tot i que en aquest període es mostra una clara tendència a que els agregats estiguin formats només per dues partícules, aquesta tendència es va reduint conforme s'augmenta el període de relaxació, el que indica que cada cop es creen més agregats complexos i a més, aquesta complexitat augmenta. En l'últim període es creen agregats de fins i tot 12 partícules.



**Figura 5.3.11.** Funció de densitat de probabilitat de la fracció volumètrica de microplàstics (a) i biopartícules (b) que forma cada agregat en el cas 3.1 per a cada període de relaxació de Taylor.

Les fraccions volumètriques resulten ser les esperades, properes a 0 per als microplàstics i a 1 per a les biopartícules. La tendència evolutiva però, és creixent en el cas dels microplàstics i, conseqüentment, decreixent en les biopartícules.



**Figura 5.3.11.** Funció de densitat de probabilitat del diàmetre (a) i la densitat (b) dels agregats formats en el cas 3.1 per a cada període de relaxació de Taylor.

Degut a la riquesa i grandària d'alguns agregats, és possible que en aquest cas el fenomen de la desagregació hagués entrat en escena si s'hagués pogut incorporar, uniformitzant els agregats a certes característiques màximes. La longitud de Kolmogorov és  $\eta = 0.001268$ , per tant és probable que



alguns agregats de vàries partícules que han format diàmetres majors a la longitud de Kolmogorov, com mostra la figura 5.3.11 (a), haguessin patit un procés de desagregació per cisallament.

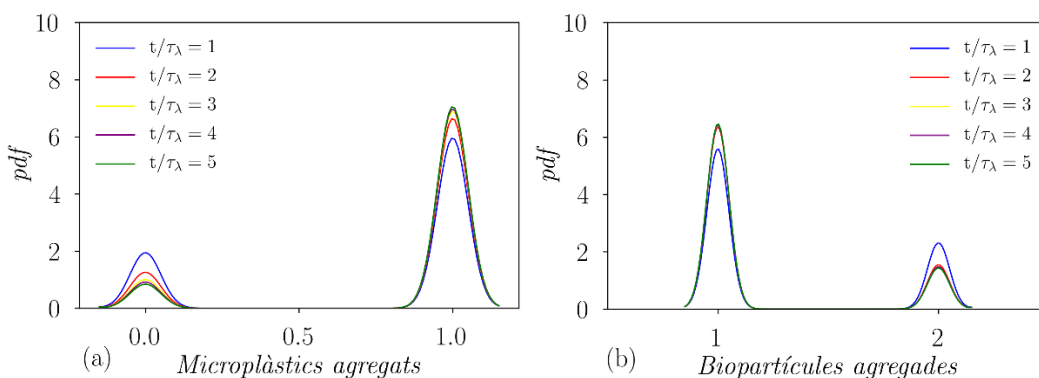
La corba de la figura 5.3.11 (b) mostra una densitat mitjana de  $1200 \text{ kg/m}^3$  amb una variància reduïda, degut a que quasi la totalitat de partícules són biopartícules, i una tendència a disminuir en funció del temps, que denota l'augment continu de la fracció volumètrica de microplàstics al llarg del temps (amb densitat menor a les biopartícules).

**Cas3.2: El major diàmetre es correspon als microplàstics.**

| Variable         | Valor                | Variable               | Valor                    |
|------------------|----------------------|------------------------|--------------------------|
| $MLR_1$          | $5.10 \cdot 10^{-6}$ | $R_{comp} [-]$         | $\sim 2.5 \cdot 10^{-5}$ |
| $MLR_2$          | $3.06 \cdot 10^{-6}$ | $R_{adv. teor.} [-]$   | $1.48 \cdot 10^{-7}$     |
| $St_{\lambda_1}$ | $8,67 \cdot 10^{-3}$ | $R_{caust. teor.} [-]$ | $5.81 \cdot 10^{-8}$     |
| $St_{\lambda_2}$ | $1.04 \cdot 10^{-4}$ | $R_{teor.} [-]$        | $2.06 \cdot 10^{-7}$     |

**Taula 5.3.5.** Resultats teòrics i computacionals del cas 3.2.

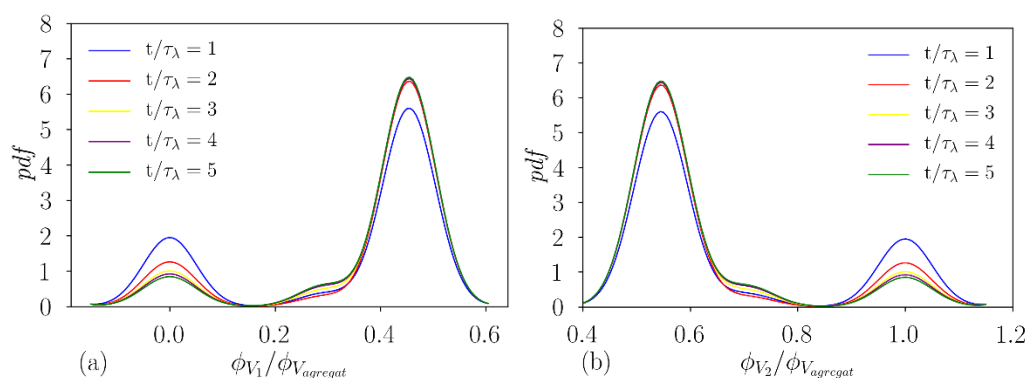
Com s'ha observat en el cas anterior, el model teòric establert de ràtio de col·lisions divergeix més contra major són els grups adimensionals usats en la configuració inicial. Aquest cas però, posa de manifest que per a baixes densitats numèriques, augmentar el diàmetre de les partícules comporta un creixement de l'efecte càustic en la  $R$  menor que el de la turbulència, efecte contrari al que succeeix per a altes densitats numèriques.



**Figura 5.3.12.** Funció de densitat de probabilitat de microplàstics (a) i biopartícules (b) que formen part de cada agregat en el cas 3.2 per a cada període de relaxació de Taylor.

Aquesta distribució resulta molt interessant, fins ara sempre s'havia obtingut una família amb un nombre de partícules predominant, i una altra amb un nombre de partícules escàs. Aquest cop però, la distribució està molt equilibrada i sols varia en que els agregats tendeixen a estar formats en molt menor mesura per dues biopartícules, cas particular en que no es troba cap microplàstic en l'agregat.

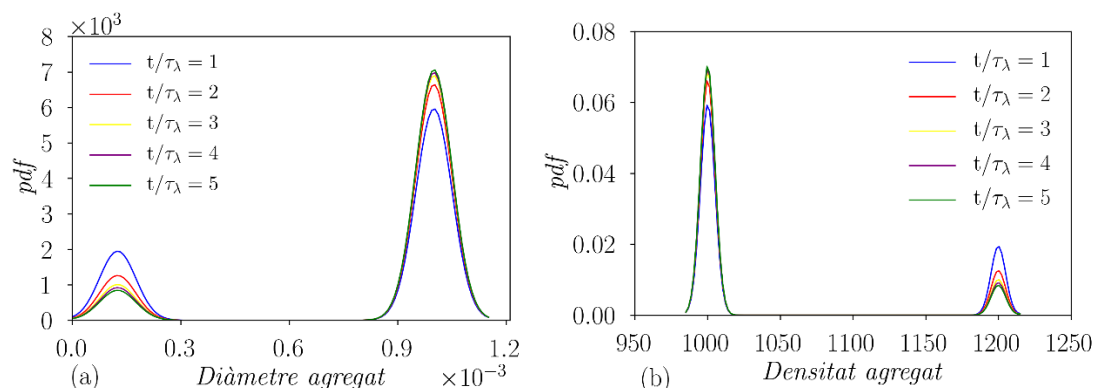
Sembla ser, però, que la ràtio de col·lisions no és prou alta com per que es formin agregats de més de tres partícules.



**Figura 5.3.13.** Funció de densitat de probabilitat de la fracció volumètrica de microplàstics (a) i biopartícules (b) que forma cada agregat en el cas 3.2 per a cada període de relaxació de Taylor.

En la figura 5.3.13 es posa en relleu la importància d'augmentar el diàmetre d'una partícula (i per tant també el seu  $St_{\lambda_i}$ ) pels dos mecanismes de producció de col·lisions. Per una  $N_{Pi}$  i un  $MLR_i$  de biopartícules 500 vegades majors als dels micoplàstics s'obté una fracció volumètrica força equilibrada per ambdues famílies de partícules, i això és sols pel fet que s'ha concedit un  $St_k$  10 vegades més gran als microplàstics que a les biopartícules.

Aquest és un cas on la càustica i la turbulència es troben força equilibrades, per tant és lògic afirmar que per a diàmetres inicials iguals o majors a  $d = 1 \cdot 10^{-3}$  m i un  $Re_\lambda = 61$ , el domini de la ràtio de col·lisions serà càustic, independentment del nombre de partícules introduït en cada família que, òbviament, es trobi dintre del rang de partícules comentat en l'apartat 5.1.



**Figura 5.3.14.** Funció de densitat de probabilitat del diàmetre (a) i la densitat (b) dels agregats formats en el cas 3.2 per cada període de relaxació.

Els diàmetres dels agregats BP-MP són  $d = 1 \cdot 10^{-3}m$ , que és el mateix diàmetre que un sol microplàstic, i  $d = 1.26 \cdot 10^{-3}m$ . El fenomen de creixement diametral reduït ja ha succeït en anteriors casos. En aquest cas però, aquest creixement és nul, i això es deu a que la densitat del microplàstic és menor a la de la biopartícula, fent que quan l'agregació es produeix, la quantitat de massa d'ambdós partícules es barregi, redistribuint-se per tal de mostrar una densitat uniforme en tot el seu nou volum, que resulta en un diàmetre igual al dels microplàstics.

La densitat mitjana d'agregats va disminuint durant tots els períodes fins arribar a 1120. Com l'equilibri en la distribució volumètrica no és perfecte, tenint una mica més de fracció de biopartícules que de microplàstics, la densitat mitjana no és 1100. Tot i això, contra més temps transcorre, més s'aproxima a aquest valor i segurament si es deixés transcórrer el temps suficient s'acabaria obtenint tal equilibri.



## Conclusions

S'ha comprovat que el model matemàtic escollit per tal d'aproximar el comportament de la ràtio de col·lisions no ha actuat tal com es preveia, induint en errors substancials en els resultats finals. A més a més, s'ha observat que contra més complexa és la configuració inicial de l'experiment, més divergeix el resultat teòric del computacional. Tot i això, en aquest treball s'ha usat una aproximació del model matemàtic proposat per **Pumir i Wilkinson (2016)**, i el model exacte depèn dels paràmetres  $K$  i  $S$ . Per tant es proposa realitzar un estudi d'aquests paràmetres, per tal d'intentar elaborar una configuració fidedigne de la modelització de la ràtio de col·lisions per certs casos determinats.

L'aproximació teòrica usada potser no ha servit per a predir la ràtio de col·lisions, però

ha permès observar que el mètode de col·lisió imperant per la majoria de casos és el càustic. Tot i així, és interessant fixar-se que incrementar el diàmetre de les partícules a partir d'un cas on el domini és càustic acostuma a comportar que la predominança sobre la ràtio de col·lisions continuï sent càustica, però també pot comportar un domini de la turbulència, depenent del valor de densitat numèrica. Per a densitats numèriques mínimes, la turbulència té un paper hegemònic, mentre que per altes i mitjanes densitats numèriques, és el contrari i la càustica domina a la turbulència.

Pel que fa a la ràtio de col·lisions computacional, tant microplàstics com biopartícules mostren un comportament similar front a la turbulència per a configuracions inicials equilibrades i valors moderats de  $St_{\lambda_i}$ . S'ha provat que en casos com els esmentats, invertir únicament certs grups adimensionals que no aporten a la càustica,  $N_{p_i}$  i  $MLR_i$ , per a les dues famílies de partícules, no altera significativament el valor de les ràtios de col·lisions obtingudes, tot i que els càlculs teòrics predeien el contrari.

Sembla ser que per a diàmetres inferiors o similars a  $d = 1 \cdot 10^{-4}m$  i un nombre de Reynolds de 61, variacions en la densitat numèrica (i per tant en els grups adimensionals  $N_{p_i}$  i  $MLR_i$ ) dins dels rangs estipulats tenen una incidència petita en el nombre d'agregats creats, si és que s'arriben a crear agregats. És a dir, que la turbulència (la càustica no té gaire importància per a diàmetres inferiors  $d = 1 \cdot 10^{-4}m$ ) no és suficient per a crear agregats de forma generalitzada.

El grup adimensional dels estudiats que té més importància en la formació d'agregats per als casos estudiats és el nombre de Stokes. Aquesta importància es deu sobretot a que  $N_{p_i}$  i  $MLR_i$  tenen una relació lineal amb la densitat numèrica, mentre que el  $St_{\lambda_i}$  té una relació quadràtica amb el diàmetre. Això comporta que qualsevol increment de  $St_{\lambda_i}$  escali més que un augment dels altres grups adimensionals.

En els casos estudiats els microplàstics i les biopartícules no tenen adherència, ja que els xocs són purament inelàstics, el que els permet tenir un comportament similar en front de col·lisions. Això però, pot no ser així, ja que tot i que els microplàstics acostumen a estar coberts per una fina capa de fitoplàncton, que pot variar en adherència i grossor. Per tant, es proposa realitzar futurs experiment amb microplàstics amb diferents adherències i observar com varia el percentatge de col·lisions que formen agregats respecte cada valor d'adherència.

Pel que respecta a la formació d'agregats, quan els diàmetres de les dues famílies de partícules són els mateixos, s'obté un diàmetre d'agregat únic per a cada agregat de  $n$  partícules. És a dir, que el diàmetre del agregats en aquests casos (cas 2.1 i 2.2) varia únicament en funció del nombre de partícules que conformen l'agregat, independentment de quins tipus de partícula en formen part. Per tant, és la densitat la que varia, la que s'adapta. En aquests casos, la densitat tendeix a 1100, ja que la majoria d'agregats de MP-BP estan compostos per dues partícules, però si estiguessin formats per més de dues partícules, les densitats adoptades serien funció de la fracció volumètrica de les partícules de l'agregat.

## Anàlisi econòmic del projecte

Es considera al realitzador del treball com a titulat de 1r cicle universitari i el tutor encarregat de la revisió com a titulat de 3r cicle universitari. A partir de la jornada màxima de treball efectiu en còmput anual, 1792 hores, i els salaris mínims anuals d'ambdós cicles universitaris per respectivament per a l'any 2020\*: 18074,56€\*\* i 26323,57€, estipulats en el conveni col·lectiu nacional d'empreses d'enginyeria i oficines tècniques (**BOE.es - Documento BOE-A-2019-14977 2019**), es calcula el cost horari del personal associat (taula 5.3.2).

|          | Temps d'ús computacional (h) | Mitjana de nodes usats | Preu per hora i node | Costs computacionals |
|----------|------------------------------|------------------------|----------------------|----------------------|
| Stampede | 420                          | 4                      | 0***                 | 0                    |

**Taula AEC.1.1.** Costs Computacionals.

|                             | Temps dedicat (h) | Preu per hora (€/h) | Cost (€) |
|-----------------------------|-------------------|---------------------|----------|
| Recerca documental          | 160               | 10.086              | 161.76   |
| Experiments computacionals  | 75                | 10.086              | 756.45   |
| Tractament de dades         | 180               | 10.086              | 1815.48  |
| Redacció memòria            | 160               | 10.086              | 1613.76  |
| Revisió Projecte            | 40                | 14.7                | 588      |
| Costs del Personal Associat |                   |                     | 4935.45  |

**Taula AEC.1.2.** Costs del personal associat.

El cost total del projecte, a falta d'altres costs, serà el mateix que el del personal associat, 4935.45€.

\*Els salaris anuals per l'any 2021 encara no havien estat publicats per la DGT en la data de presentació d'aquest treball.

\*\*Es considera que al titulat de 1r cicle universitari se li aplica la restricció comentada en l'article 33 de la disposició, que anul·la el cobrament del plus de conveni durant el primer any per a persones que accedeixen al seu primer ofici com a titulat de 1r cicle.

\*\*\*Servei finançat per la National Science Foundation (NSF)





## Bibliografia

- Avio, C.G., Gorbi, S. i Regoli, F., 2017. Plastics and microplastics in the oceans: From emerging pollutants to emerged threat. A: *Marine Environmental Research* [en línia]. Elsevier Ltd, Vol. 128, p. 2-11. ISSN 18790291. DOI 10.1016/j.marenvres.2016.05.012. Disponible a: <http://dx.doi.org/10.1016/j.marenvres.2016.05.012>.
- Babler, M.U. et al., 2014. Numerical simulations of aggregate breakup in bounded and unbounded turbulent flows. A: *Journal of Fluid Mechanics* [en línia]. Cambridge University Press, Vol. 766, núm. 2, p. 104-128. DOI 10.1017/jfm.2015.13. [Consulta: 12 gener 2021]. Disponible a: <http://arxiv.org/abs/1406.2842>.
- Bäbler, M.U. et al., 2010. Structure and kinetics of shear aggregation in turbulent flows. I. Early stage of aggregation. A: *Langmuir* [en línia]. American Chemical Society, Vol. 26, núm. 16, p. 13142-13152. ISSN 07437463. DOI 10.1021/la1015516. [Consulta: 12 gener 2021]. Disponible a: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/la1015516>.
- Bäbler, M.U., Morbidelli, M. i Baldyga, J., 2008. Modelling the breakup of solid aggregates in turbulent flows. A: *Journal of Fluid Mechanics* [en línia]. Vol. 612, p. 261-289. ISSN 00221120. DOI 10.1017/S002211200800298X. [Consulta: 12 gener 2021]. Disponible a: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2008JFM...612..261B/abstract>.
- Balachandar, S. i Eaton, J.K., 2010. Turbulent Dispersed Multiphase Flow. A: *Annual Review of Fluid Mechanics* [en línia]. Annual Reviews, Vol. 42, núm. 1, p. 111-133. ISSN 0066-4189. DOI 10.1146/annurev.fluid.010908.165243. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev.fluid.010908.165243>.
- Bassenne, M. et al., 2016. Constant-energetics physical-space forcing methods for improved convergence to homogeneous-isotropic turbulence with application to particle-laden flows. A: *Physics of Fluids* [en línia]. American Institute of Physics Inc., Vol. 28, núm. 3, p. 035114. ISSN 10897666. DOI 10.1063/1.4944629. [Consulta: 15 gener 2021]. Disponible a: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4944629>.
- BOE.es - Documento BOE-A-2019-14977., 2019. *Disposición 14977 del BOE núm. 251 de 2019* [en línia]. [Consulta: 10 gener 2021]. Disponible a: <http://www.boe.es>.
- Brillant, M.G.S. i MacDonald, B.A., 2000. Postingestive selection in the sea scallop, *Placopecten magellanicus* (Gmelin): The role of particle size and density. A: *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*. Elsevier, Vol. 253, núm. 2, p. 211-227. ISSN 00220981. DOI 10.1016/S0022-0981(00)00258-6.
- Browne, M.A. et al., 2008. Ingested microscopic plastic translocates to the circulatory system of the mussel, *Mytilus edulis* (L.). A: *Environmental Science and Technology* [en línia]. American Chemical Society, Vol. 42, núm. 13, p. 5026-5031. ISSN 0013936X. DOI 10.1021/es800249a. [Consulta: 5 gener 2021]. Disponible a: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/es800249a>.
- Browne, M.A. et al., 2013. Microplastic moves pollutants and additives to worms, reducing functions linked to health and biodiversity. A: *Current Biology*. Cell Press, Vol. 23, núm. 23, p. 2388-2392. ISSN 09609822. DOI 10.1016/j.cub.2013.10.012.
- Burd, A.B. i Jackson, G.A., 2009. Particle Aggregation. A: *Annual Review of Marine Science* [en línia]. Annual Reviews Inc., Vol. 1, núm. 1, p. 65-90. ISSN 1941-1405. DOI 10.1146/annurev.marine.010908.163904. [Consulta: 12 gener 2021]. Disponible a: <http://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev.marine.010908.163904>.
- Carpenter, E.J. et al., 1972. Polystyrene spherules in coastal waters. A: *Science* [en línia]. American Association for the Advancement of Science, Vol. 178, núm. 4062, p. 749-750. ISSN 00368075. DOI 10.1126/science.178.4062.749. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://science.sciencemag.org/content/178/4062/749>.
- Chatterjee, S. i Sharma, S., 2019. Microplastics in our oceans and marine health. A: *Field Actions Science Report*. Vol. 2019, núm. Special Issue 19, p. 54-61. ISSN 1867-8521.
- Cole, M. et al., 2013. Microplastic ingestion by zooplankton. A: *Environmental Science and Technology* [en línia]. American Chemical Society, Vol. 47, núm. 12, p. 6646-6655. ISSN 0013936X. DOI 10.1021/es400663f. [Consulta: 5 gener 2021]. Disponible a: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/es400663f>.

Courant, R., Friedrichs, K. i Lewy, H., 1928. Über die partiellen Differenzgleichungen der mathematischen Physik. A: *Mathematische Annalen* [en línia]. Springer-Verlag, Vol. 100, núm. 1, p. 32-74. ISSN 00255831. DOI 10.1007/BF01448839. [Consulta: 12 gener 2021]. Disponible a: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01448839>.

Crisanti, A. et al., 1992. Dynamics of passively advected impurities in simple two-dimensional flow models. A: *Physics of Fluids A*. Vol. 4, núm. 8, p. 1805-1820. ISSN 08998213. DOI 10.1063/1.858402.

Ducasse, L. i Pumir, A., 2009. Inertial particle collisions in turbulent synthetic flows: Quantifying the sling effect. A: *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* [en línia]. American Physical Society, Vol. 80, núm. 6, p. 066312. ISSN 15393755. DOI 10.1103/PhysRevE.80.066312. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.80.066312>.

Eerkes-Medrano, D., Thompson, R.C. i Aldridge, D.C., 2015. Microplastics in freshwater systems: A review of the emerging threats, identification of knowledge gaps and prioritisation of research needs. A: *Water Research* [en línia]. Elsevier Ltd, Vol. 75, p. 63-82. ISSN 18792448. DOI 10.1016/j.watres.2015.02.012. Disponible a: <http://dx.doi.org/10.1016/j.watres.2015.02.012>.

Eriksson, C. i Burton, H., 2003. Origins and Biological Accumulation of Small Plastic Particles in Fur Seals from Macquarie Island. A: *Ambio*. Royal Swedish Academy of Sciences, Vol. 32, núm. 6, p. 380-384. ISSN 00447447. DOI 10.1579/0044-7447-32.6.380.

Europe, P. i EPRO., 2019. Plastics - the Facts 2019. A: [en línia]. Disponible a: <https://www.plasticseurope.org/en/resources/market-data>.

Falkovich, G., Fouxon, A. i Stepanov, M.G., 2002. Acceleration of rain initiation by cloud turbulence. A: *Nature* [en línia]. Nature Publishing Group, Vol. 419, núm. 6903, p. 151-154. ISSN 00280836. DOI 10.1038/nature00983. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://arizona.pure.elsevier.com/en/publications/acceleration-of-rain-initiation-by-cloud-turbulence>.

Germanov, E.S. et al., 2018. Microplastics: No Small Problem for Filter-Feeding Megafauna. A: *Trends in Ecology and Evolution* [en línia]. Elsevier Ltd, Vol. 33, núm. 4, p. 227-232. ISSN 01695347. DOI 10.1016/j.tree.2018.01.005. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <http://www.cell.com/article/S0169534718300090/fulltext>.

Graham, E.R. i Thompson, J.T., 2009. Deposit- and suspension-feeding sea cucumbers (Echinodermata) ingest plastic fragments. A: *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*. Vol. 368, núm. 1, p. 22-29. ISSN 00220981. DOI 10.1016/j.jembe.2008.09.007.

Gregory, M.R., 2009. *Environmental implications of plastic debris in marine settings- entanglement, ingestion, smothering, hangers-on, hitch-hiking and alien invasions* [en línia]. Royal Society. DOI 10.1098/rstb.2008.0265. [Consulta: 5 gener 2021]. Disponible a: <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rstb.2008.0265>.

Hays, H. i Cormons, G., 1974. Plastic particles found in tern pellets, on coastal beaches and at factory sites. A: *Marine Pollution Bulletin*. Pergamon, Vol. 5, núm. 3, p. 44-46. ISSN 0025326X. DOI 10.1016/0025-326X(74)90234-3.

Jofre, L., Del Rosario, Z.R. i Iaccarino, G., 2020. Data-driven dimensional analysis of heat transfer in irradiated particle-laden turbulent flow. A: *International Journal of Multiphase Flow* [en línia]. Elsevier Ltd, Vol. 125, p. 103198:1-103198:15. ISSN 03019322. DOI 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2019.103198. [Consulta: 15 gener 2021]. Disponible a: <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/188105>.

López Díaz, I. Simulación numérica directa de turbulencia. A: .

Lusher, A.L., McHugh, M. i Thompson, R.C., 2013. Occurrence of microplastics in the gastrointestinal tract of pelagic and demersal fish from the English Channel. A: *Marine Pollution Bulletin*. Pergamon, Vol. 67, núm. 1-2, p. 94-99. ISSN 0025326X. DOI 10.1016/j.marpolbul.2012.11.028.

Mehlig, B., Uski, V. i Wilkinson, M., 2006. Colliding Particles in Highly Turbulent Flows. A: *Physics of Fluids* [en línia]. American Institute of Physics Inc., Vol. 19, núm. 9. DOI 10.1063/1.2768931. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <http://arxiv.org/abs/nlin/0612008>.

Michels, J. et al., 2018. Rapid aggregation of biofilm-covered microplastics with marine biogenic particles. A: *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*. Vol. 285, núm. 1885. ISSN 14712954. DOI



10.1098/rspb.2018.1203.

Nowald, N. et al., 2006. Distribution and transport processes of marine particulate matter off Cape Blanc (NW-Africa): results from vertical camera profiles. A: *Ocean Science Discussions*. Vol. 3, núm. 4, p. 903-938. ISSN 1812-0822. DOI 10.5194/osd-3-903-2006.

Pope, S.B., 2000. *Turbulent Flows* [en línia]. Cambridge University Press. ISBN 9780521591256. DOI 10.1017/CBO9780511840531. [Consulta: 15 gener 2021]. Disponible a: <https://www.cambridge.org/core/product/identifier/9780511840531/type/book>.

Pumir, A. i Wilkinson, M., 2016. Collisional Aggregation Due to Turbulence. A: *Annual Review of Condensed Matter Physics*. Vol. 7, p. 141-170. ISSN 19475462. DOI 10.1146/annurev-conmatphys-031115-011538.

Ragusa, A. et al., 2021. Plasticenta: First evidence of microplastics in human placenta. A: *Environment International*. Elsevier BV, Vol. 146, p. 106274. ISSN 01604120. DOI 10.1016/j.envint.2020.106274.

Ramos, J., Barletta, M. i Costa, M., 2012. Ingestion of nylon threads by Gerreidae while using a tropical estuary as foraging grounds. A: *Aquatic Biology* [en línia]. Vol. 17, núm. 1, p. 29-34. ISSN 1864-7782. DOI 10.3354/ab00461. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <http://www.int-res.com/abstracts/ab/v17/n1/p29-34/>.

Ryan, P.G., Connell, A.D. i Gardner, B.D., 1988. Plastic ingestion and PCBs in seabirds: Is there a relationship? A: *Marine Pollution Bulletin*. Pergamon, Vol. 19, núm. 4, p. 174-176. ISSN 0025326X. DOI 10.1016/0025-326X(88)90674-1.

Saffman, P.G. i Turner, J.S., 1956. On the collision of drops in turbulent clouds. A: *Journal of Fluid Mechanics* [en línia]. Cambridge University Press, Vol. 1, núm. 1, p. 16-30. ISSN 14697645. DOI 10.1017/S0022112056000020. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/on-the-collision-of-drops-in-turbulent-clouds/AF8E2769ACC937E577BB49A016BAE89E>.

Setälä, O., Fleming-Lehtinen, V. i Lehtiniemi, M., 2014. Ingestion and transfer of microplastics in the planktonic food web. A: *Environmental Pollution*. Elsevier Ltd, Vol. 185, p. 77-83. ISSN 18736424. DOI 10.1016/j.envpol.2013.10.013.

Tanaka, K. et al., 2013. Accumulation of plastic-derived chemicals in tissues of seabirds ingesting marine plastics. A: *Marine Pollution Bulletin*. Pergamon, Vol. 69, núm. 1-2, p. 219-222. ISSN 0025326X. DOI 10.1016/j.marpolbul.2012.12.010.

Thorpe, S.A., 2005. *The turbulent ocean* [en línia]. Cambridge University Press. ISBN 9780511819933. DOI 10.1017/CBO9780511819933. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://www.cambridge.org/core/books/turbulent-ocean/1F9A34350F4AA077CA27641C6884B61B>.

Van Cauwenberghe, L. i Janssen, C.R., 2014. Microplastics in bivalves cultured for human consumption. A: *Environmental Pollution*. Elsevier Ltd, Vol. 193, p. 65-70. ISSN 18736424. DOI 10.1016/j.envpol.2014.06.010.

Wang, H. i George, W.K., 2002. The integral scale in homogeneous isotropic turbulence. A: *Journal of Fluid Mechanics* [en línia]. Cambridge University Press, Vol. 459, p. 429-443. ISSN 00221120. DOI 10.1017/S002211200200811X. [Consulta: 17 gener 2021]. Disponible a: <https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-fluid-mechanics/article/abs/integral-scale-in-homogeneous-isotropic-turbulence/F9756DBC73DF9463A597C7DC5E8C489D>.

Wilkinson, M., Mehlig, B. i Bezuglyy, V., 2006. Caustic activation of rain showers. A: *Physical Review Letters* [en línia]. American Physical Society, Vol. 97, núm. 4, p. 048501. ISSN 00319007. DOI 10.1103/PhysRevLett.97.048501. [Consulta: 6 gener 2021]. Disponible a: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.97.048501>.



## Annex A

### A1. Càlculs de dimensionat

Es necessita desenvolupar equacions que ens descriguin el comportament del fluid i les partícules que participen en els experiments, per tant s'haurà de formular matemàticament el seu moviment i el seu moment.

#### - Forma dimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules

- a. Equació de la Continuitat:

$$\nabla \cdot \vec{u}_f = 0$$

- b. Equació del moment del fluid:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\frac{1}{\rho_f} \cdot \nabla P + F + \nu_f \cdot \nabla^2 \vec{u}_f$$

Multipliquem per  $\rho_f$

$$\rho_f \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_f \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\nabla P + \rho_f F + \rho_f \cdot \nu_f \cdot \nabla^2 \cdot \vec{u}_f$$

$$\text{Igualtats: } \mu_f = \rho_f \nu_f \quad | \quad \nabla^2 = \Delta \quad | \quad f_{TWC} = \rho_f F$$

$$\rho_f \cdot \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_f \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) = -\nabla P + f_{TWC} + \mu_f \cdot \Delta \vec{u}_f$$

- c. Equació del moviment de partícules:

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \vec{v}_p$$

- d. Equació del momento de partícules:

$$\frac{dv_p}{dt} = \frac{(\vec{u}_p - \vec{v}_p)}{\tau_{Pk}}$$

- Forma adimensional de la descripció Euleriana del fluid i de la representació Lagrangiana de les partícules.

Escalaments:

$$\vec{x} = \lambda \vec{x}^*, \vec{v} = u_{RMS} \vec{v}^*, t = \left( \frac{\lambda}{u_{RMS}} \right) t^*, P = \rho_f u_{RMS}^2 P^*, \nabla = \frac{1}{\lambda} \nabla^*, \delta(\vec{x}) = \frac{1}{\text{escalament}(x)^n} \delta^*(x)$$

On “n” és el nombre de dimensions del domini, en aquest cas 3.

e. Equació de la Continuitat:

$$\begin{aligned} \nabla \vec{u}_f &= 0 \\ \nabla^* \vec{u}_f^* \frac{u_{RMS}}{\lambda} &= 0 \\ \frac{u_{RMS}}{\lambda} &\neq 0 \\ \nabla^* \vec{u}_f^* &= 0 \end{aligned}$$

f. Equació de Navier-Stokes:

$$\begin{aligned} \rho_f \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_f \nabla \cdot (\vec{u}_f \otimes \vec{u}_f) &= -\nabla P + f_{TWC} + \mu_f \Delta \vec{u}_f \\ \rho_f \frac{\partial u^*}{\partial t^*} \frac{u_{RMS}^2}{\lambda} + \rho_f \nabla^* \cdot (\vec{u}_f^* \otimes \vec{u}_f^*) \frac{u_{RMS}^2}{\lambda} &= -\nabla^* P^* \frac{\rho_f u_{RMS}^2}{\lambda} + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\tau_{Pk}} \sum_{P=1}^{Npk} (\vec{u}_P^* - \vec{u}_f^*) \delta^*(\vec{x}_P^* - \vec{x}_f^*) \frac{u_{RMS}}{\lambda^3} \\ &+ \mu_f \frac{u_{RMS}}{\lambda^2} \Delta^* \vec{u}_f^* \end{aligned}$$

Es multiplica per  $\frac{\lambda}{\rho_f u_{RMS}^2}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\vec{u}_f^* \otimes \vec{u}_f^*) &= -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\tau_{Pk}} \sum_{P=1}^{Npk} (\vec{u}_P^* - \vec{u}_f^*) \delta^*(\vec{x}_P^* - \vec{x}_f^*) \frac{\lambda}{\lambda^3} \frac{u_{RMS}}{\rho_f u_{RMS}^2} \\ &+ \frac{\mu_f}{\rho_f u_{RMS} \lambda} \Delta^* \vec{u}_f^* \end{aligned}$$

Es substitueix el nombre de Reynolds de Taylor:  $Re_\lambda = \frac{\rho_f u_{RMS} \lambda}{\mu_f}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) \\ = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\tau_{Pk}} \frac{\lambda}{\rho_f u_{RMS} \lambda^3} \sum_{P=1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) \\ = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\rho_f \lambda^3} \frac{\lambda}{\tau_{Pk} u_{RMS}} \sum_{Pa>1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\rho_f \lambda^3} \frac{\tau_\lambda}{\tau_{Pk}} \sum_{P=1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*}$$

Es substitueix el nombre de Stokes de Taylor:  $St_\lambda = \frac{\tau_\lambda}{\tau_{Pk}}$

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{m_{Pk}}{\rho_f \lambda^3} \frac{1}{St_\lambda} \sum_{P=1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*}$$

Es multiplica per  $\frac{N_{Pk}}{N_{Pk}} (= 1)$

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{N_{Pk}}{N_{Pk}} \frac{m_{Pk}}{\rho_f \lambda^3} \frac{1}{St_\lambda} \sum_{P=1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*}$$

- a. Es substitueix la ràtio de càrrega massica:  $MLR_k = \frac{N_{Pk} m_{Pk}}{\rho_f L^3}$  (Com s'ha realitzat l'adimensionat usant la microescala de Taylor, aleshores  $L = \lambda$ )

$$\frac{\partial u^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\overline{u_f^*} \otimes \overline{u_f^*}) = -\nabla^* P^* + \sum_{k=1}^{Ng} \frac{MLR_k}{St_{\lambda k} \cdot N_{Pk}} \sum_{P=1}^{Npk} (\overline{u_P^*} - \overline{u_f^*}) \delta^* (\overline{x_P^*} - \overline{x_f^*}) + \frac{1}{Re_\lambda} \Delta^* \overline{u_f^*}$$

- b. Equació del moviment partícules:

$$\frac{d\vec{x}_P}{dt} = \vec{v}_P$$

$$\frac{d\vec{x}_P}{dt} \lambda \frac{u_{RMS}}{\lambda} = \vec{v}_P^* u_{RMS}$$

$$\frac{d\vec{x}_P^* u_{RMS}}{dt^* u_{RMS}} = \vec{v}_P^*$$

$$\frac{d\vec{x}_P^*}{dt^*} = \vec{v}_P^*$$

c. Equació del moment de partícules:

$$\frac{dv_P}{dt} = \frac{(\vec{u}_P - \vec{v}_P)}{\tau_{Pk}}$$

$$\frac{dv_P^* u_{RMS}^2}{dt^* \lambda} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*)}{\tau_{Pk}} u_{RMS}$$

$$\frac{dv_P^*}{dt^*} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*) \lambda u_{RMS}}{\tau_{Pk} u_{RMS}^2}$$

$$\frac{dv_P^*}{dt^*} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*) \lambda}{\tau_{Pk} u_{RMS}}$$

$$Z_\lambda = \frac{\lambda}{u_{RMS}}$$

$$\frac{dv_P^*}{dt^*} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*)}{\tau_{Pk}} \tau$$

$$\frac{dv_P^*}{dt^*} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*)}{\frac{\tau_{Pk}}{\tau_\lambda}}$$

$$St_{\lambda k} = \frac{\tau_{Pk}}{\tau_\lambda}$$

$$\frac{dv_P^*}{dt^*} = \frac{(\vec{u}_P^* - \vec{v}_P^*)}{St_{\lambda k}}$$