



**UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA**

**DEPARTAMENTO DE EXPRESIÓN GRÁFICA, DISEÑO Y PROYECTOS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA INDUSTRIAL**

**CARACTERIZACIÓN GEOMÉTRICA DE
AGLOMERADOS GRANULADOS CUASI-
FRACTALES**

TESIS DOCTORAL

PRESENTADA POR

Gema María Martín González

DIRIGIDA POR

Dr. José Ramón de Andrés Díaz

Octubre, 2015



Publicaciones y
Divulgación Científica

AUTOR: Gema María Martín González

 <http://orcid.org/0000-0001-6252-9119>

EDITA: Publicaciones y Divulgación Científica. Universidad de Málaga



Esta obra está bajo una licencia de Creative Commons Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 4.0 Internacional:

Cualquier parte de esta obra se puede reproducir sin autorización pero con el reconocimiento y atribución de los autores.

No se puede hacer uso comercial de la obra y no se puede alterar, transformar o hacer obras derivadas.

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/legalcode>

Esta Tesis Doctoral está depositada en el Repositorio Institucional de la Universidad de Málaga (RIUMA): riuma.uma.es



UNIVERSIDAD DE MÁLAGA

**DEPARTAMENTO DE EXPRESIÓN GRÁFICA, DISEÑO Y PROYECTOS
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA INDUSTRIAL**

EL DOCTOR **D. JOSÉ RAMÓN DE ANDRÉS DÍAZ**, PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD DEL ÁREA DE CONOCIMIENTO PROYECTOS DE INGENIERÍA DE LA UNIVERSIDAD DE MÁLAGA

HACE CONSTAR

Que la Tesis Doctoral realizada por **Dña. GEMA M^a MARTÍN GONZÁLEZ**, con el título **CARACTERIZACIÓN GEOMÉTRICA DE AGLOMERADOS GRANULADOS CUASI-FRACTALES**, de la cual es director, ha sido proyectada y desarrollada bajo su supervisión. Y que el mencionado trabajo de investigación reúne todas las características científicas y técnicas para poder ser defendido públicamente, por lo que **AUTORIZA** la presentación a trámite de esta Tesis Doctoral para su posterior lectura y defensa pública.

En Málaga a 6 de octubre de 2015

EL DIRECTOR DE LA TESIS

Fdo. José Ramón de Andrés Díaz

*A mi marido,
Fran, a mis hijos,
Javier y Gonzalo,
y a mis padres*

Agradecimientos

Sin duda, he tenido a mi lado a grandes personas apoyándome y ayudándome incondicionalmente, para que este sueño se haga realidad.

Por un lado, quisiera dar las gracias a mi director de tesis doctoral, José Ramón de Andrés Díaz, por su dedicación incondicional, por su profesionalidad y dedicación para que este documento llegara a su fin.

Por otro lado, estoy muy agradecida a mi marido y amigo, Francisco Javier Martos Ramos, por todo lo que llevamos vivido juntos, y porque sin su apoyo, tanto anímico, logístico como doméstico, y sin su paciencia y entereza, de la cual me ha contagiado, este trabajo de investigación no se hubiese podido llevar a término en fecha debido a su inminente plazo límite. Además, le doy las gracias por su lectura detenida, de la cual surgieron comentarios que han enriquecido muy positivamente este documento.

Cómo no, también quisiera dar las gracias a mi padre, José Luís Martín Ruíz, y mi madre, María del Carmen González Alcántara, a los que adoro, por su empuje incansable hacia las metas que se me van planteando, por sus innumerables favores y por su dedicación a mis hijos en cuerpo y alma durante esta última etapa, y en todas las etapas, para poder así disponer del máximo tiempo posible para la realización de este documento.

A mis hijos, Javier y Gonzalo, que son mi vida, por entender el motivo por el que he estado tanto tiempo encerrada trabajando, en detrimento del tiempo que les he dedicado a ellos y que intentaré compensar próximamente.

A mis compañeros del área de Ingeniería de Fabricación, por su comprensión y ánimo desde que supieron el estado en el que se encontraba mi tesis, en especial a María José Cano, y Alfonso Gago que me han ido guiando, cada uno por su lado, en cuanto al orden de prioridades que debía seguir en mi camino dentro de la universidad.

A mi hermano Pepe, por su bondad y por estar ahí siempre que lo necesito, y a mi tío Coco, por su cariño y su empuje para conseguir los retos laborales que se me plantean. A mis primos, tíos y a toda mi familia, por ser tan cercanos siempre. A mis cuñados, que cada domingo hacen que recupere fuerzas para seguir trabajando, en especial a Maribel. A mis amigos, por los buenos momentos pasados. A Eva y Manolo, por llevarse a mis hijos a jugar con los suyos mientras trabajaba. A Jesús y Bea y todos los demás, por esas salidas tan necesarias de vez en cuando.

A mis compañeros y amigos de Birmingham, en especial Martín, Isaline, María y Clara, por hacer más agradable y llevadera la estancia allí a pesar de las dificultades que se me plantearon. Y a todos aquellos que de alguna manera han ayudado para que esta tesis llegue al estado actual.

Índice

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Motivación y antecedentes.....	3
1.2. Objetivos	4
1.3. Metodología	4
1.4. Desarrollo del documento	5
1.5. Referencias bibliográficas	6
2. CONSIDERACIONES SOBRE AGLOMERADOS	7
2.1. Introducción.....	9
2.2. Efectos fisiológicos y medioambientales	11
2.2.1. Introducción	11
2.2.2. Efectos sobre la salud pública	12
2.2.3. Impacto medioambiental.....	15
2.3. Diámetros equivalentes y funciones de distribución.....	16
2.3.1. Diámetros equivalentes	16
2.3.2. Funciones de distribución	18
2.4. Naturaleza fractal	20
2.4.1. Introducción	20
2.4.2. Definición del fractal y de la dimensión fractal.....	21
2.4.3. Homogeneidad espacial, invariancia por cambio de escala y autosemejanza	22
2.4.4. Relación entre longitud, área y volumen.....	23
2.5. Morfología de los aglomerados	25
2.5.1. Geometría fractal	25
2.5.2. Ley de potencia. Dimensión fractal de un aglomerado	26
2.6. Referencias bibliográficas	29
3. EL PREFACTOR DE LA LEY DE POTENCIAS	35
3.1. Introducción.....	37

3.2.	El prefactor de la ley de potencias.....	38
3.3.	Definiciones preliminares. Momento de inercia y diámetro de giro.....	40
3.3.1.	Momento de inercia.....	40
3.3.2.	Diámetro de giro.....	42
3.4.	Dimensión fractal igual a 1	43
3.4.1.	Aglomerado en forma de cadena lineal.....	43
3.4.2.	Aglomerado en forma de cruz con dos ramas.....	48
3.4.3.	Aglomerado en forma de cruz con tres ramas	54
3.4.4.	Resumen.....	57
3.5.	Dimensión fractal igual a 2	59
3.5.1.	Aglomerado en forma de plano hexagonal compacto	59
3.5.2.	Aglomerado formado por dos planos hexagonales compactos ortogonales	64
3.5.3.	Aglomerado formado por tres planos hexagonales compactos ortogonales	67
3.5.4.	Resumen.....	70
3.6.	Dimensión fractal igual a 3	72
3.7.	Resumen de resultados.....	72
3.8.	Extensión a otras configuraciones de empaquetamiento	75
3.9.	Modelo propuesto.....	78
3.10.	Conclusiones	81
3.11.	Referencias bibliográficas.....	82
4.	EL FACTOR Y EL EXPONENTE DE SOLAPE	87
4.1.	Introducción	89
4.2.	Factor de solape lineal.....	89
4.2.1.	Consideraciones generales	89
4.2.2.	Dimensión fractal igual a 1.	91
4.2.2.1.	<i>Introducción.</i>	91
4.2.2.2.	<i>Aglomerado en forma de cadena lineal</i>	93
4.2.2.3.	<i>Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número impar de partículas</i>	97
4.2.2.4.	<i>Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número par de partículas</i>	108
4.2.2.5.	<i>Resumen.</i>	132

4.2.3. Dimensión fractal igual a 2.	133
4.2.3.1. <i>Introducción.</i>	133
4.2.3.2. <i>Ángulos de giro.</i>	133
4.2.3.3. <i>Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo α.</i>	137
4.2.3.4. <i>Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo φ.</i>	141
4.2.3.5. <i>Área solapada duplicada en partículas tangentes dos a dos</i>	146
4.2.3.6. <i>Área solapada duplicada en partículas tangentes.</i>	151
4.2.3.7. <i>Área proyectada por el aglomerado</i>	156
4.2.3.8. <i>Factor de solape lineal</i>	157
4.2.4. Dimensión fractal igual a 3.	160
4.2.4.1. <i>Introducción.</i>	160
4.2.4.2. <i>Aglomerado con compactación cúbica simple.</i>	161
4.2.4.3. <i>Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.</i>	161
4.2.4.4. <i>Aglomerado con compactación hexagonal compacta.</i>	162
4.2.4.5. <i>Aglomerado con compactación aleatoria.</i>	163
4.2.4.6. <i>Resumen.</i>	163
4.2.5. Comparación de los distintos casos. Modelo propuesto.....	164
4.3. Exponente de solape.....	168
4.3.1. Consideraciones generales.....	168
4.3.2. Dimensión fractal igual a 1	170
4.3.2.1. <i>Aglomerado en forma de cadena lineal.</i>	170
4.3.2.2. <i>Aglomerado en forma de cruz con número impar de partículas.</i>	171
4.3.2.3. <i>Aglomerado en forma de cruz con número par de partículas.</i>	171
4.3.3. Dimensión fractal igual a 2.	171
4.3.4. Dimensión fractal igual a 3.	172
4.3.4.1. <i>Aglomerado con compactación cúbica simple.</i>	172
4.3.4.2. <i>Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.</i>	172
4.3.4.3. <i>Aglomerado con compactación hexagonal compacta.</i>	173

4.3.4.4. <i>Aglomerado con compactación aleatoria.</i>	173
4.3.5. Modelo propuesto.	174
4.4. Conclusiones	178
4.5. Referencias bibliográficas.....	180
5. MODELO PROPUESTO. APLICACIÓN REAL.....	183
5.1. Introducción	185
5.2. Hipótesis del método. Un caso real	185
5.3. Procedimiento de cálculo.....	187
5.4. Densidad aparente del aglomerado.....	193
5.5. Dominio de soluciones.....	193
5.6. Validación del método propuesto. Aplicación real.	195
5.6.1. Introducción.....	195
5.6.2. Consistencia del método	196
5.6.3. Comparación con resultados obtenidos por regresión directa	199
5.7. Referencias bibliográficas.....	201
6. CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS.....	203
6.1. Conclusiones	205
6.1.1. Introducción.....	205
6.1.1. Relativas al prefactor de la ley de potencias.....	205
6.1.2. Relativas al exponente de solape	206
6.1.3. Relativas al método de caracterización de la irregularidad de las partículas	207
6.2. Sugerencias para desarrollos futuros	207
REFERENCIAS BILIOGRÁFICAS	209
APÉNDICE.....	221
A.1. Introducción	223
A.2. Instrumentación utilizado y técnicas de medida asociadas a las emisiones de partículas	223
A.2.1. Sonda de termofóresis	223
A.2.2. Obtención y tratamiento de las imágenes digitales	224
A.2.2.1. <i>Microscopio de transmisión de electrones</i>	224
A.2.2.2. <i>Clasificación de las imágenes</i>	226

A.2.2.3. <i>Tratamiento de las imágenes</i>	227
A.3. Ejemplos de Fotografías	227
A.4. Referencias Bibliográficas.....	232
SUMMARY	233
1. Motivation.....	235
2. Objectives	236
3. Methodology.....	236
4. Development of the document	237
5. Introduction to the method proposed.....	237
6. Hypothesis of the method. Real case.....	238
7. Proposed method.....	240
8. Apparent density of the agglomerate.....	246
9. Field of solutions.	246
10. Validation of proposed method. Real application	248
10.1. Introduction.....	248
10.2. Consistency of the method	248
10.2. Comparison with the results of direct regression	252
CONCLUSIONS AND FUTURE WORK	255
1. Conclusions.....	257
1.1. Introduction.....	257
1.2. Conclusions concerning the prefactor of power law.....	257
1.3. Conclusions concerning the overlapping exponent.....	258
1.4. Conclusions about the method for characterization the irregularity of particle	259
2. Suggestions for future developments.....	259

Índice de Figuras

Figura 2.1.	Deposición alveolar de las partículas diésel en función de su tamaño, adaptado de D.B. Kittelson [5] y de J.M. Desantes <i>et al</i> [14].....	13
Figura 2.2.	a) Fotografía de una partícula diésel típica. b) Fotografía de una partícula perteneciente al humo del tabaco. Imágenes obtenidas del TEM.....	14
Figura 2.3.	Algunas propiedades de las partículas en relación a su tamaño	17
Figura 2.4.	Distribución típica de tamaños de partículas de un motor diésel, adaptado de J.M. Desantes <i>et al</i> [14].....	19
Figura 2.5.	Fotografía de un brocoli. Ejemplo de una forma fractal	25
Figura 2.6.	Típica partícula diésel fotografiada con TEM	26
Figura 3.1.	Prefactor de la ley de potencias frente a la dimensión fractal expuestos en la tabla 3.1	40
Figura 3.2.	Representación de la proyección de una esfera y de un casquete esférico	41
Figura 3.3.	Aglomerado en cadena lineal con un número impar de partículas primarias.....	44
Figura 3.4.	Aglomerado en cadena lineal con un número par de partículas primarias	44
Figura 3.5.	Diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro de la partícula primaria frente al número de partículas primarias para un aglomerado lineal.....	47
Figura 3.6.	Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para una cadena lineal	48
Figura 3.7.	Aglomerado en forma de cruz con un número impar de partículas primarias.....	49
Figura 3.8.	Aglomerado en forma de cruz con un número par de partículas primarias	49
Figura 3.9.	Diámetro de giro de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número impar de partículas primarias frente al número de partículas primarias.....	50

Figura 3.10. Evolución del prefactor de la ley de potencias de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número impar de partículas primarias frente al número de partículas primarias que lo compone	51
Figura 3.11. Diámetro de giro de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número par de partículas primarias frente al número de partículas primarias	53
Figura 3.12. Evolución del prefactor de la ley de potencias de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número par de partículas primarias frente al número de partículas primarias que lo compone	54
Figura 3.13. Aglomerado en forma de cruz con tres ramas.....	55
Figura 3.14. Diámetro de giro de una cadena lineal formada por tres cadenas lineales frente al número de partículas primarias que lo constituyen	56
Figura 3.15. Evolución del prefactor de la ley de potencias de un aglomerado formado por tres cadenas lineales frente al número de partículas primarias que lo compone.....	57
Figura 3.16. Diámetro de giro de aglomerados con $D_f=1$ frente al número de partículas primarias	58
Figura 3.17. Prefactor de la ley de potencias de aglomerados con $D_f=1$ frente al número de partículas primarias	58
Figura 3.18. Aglomerado plano con compactación hexagonal compacta	59
Figura 3.19. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de plano	63
Figura 3.20. Evolución del prefactor de la ley de potencias de un aglomerado plano frente al número de partículas primarias que lo compone	64
Figura 3.21. Aglomerado plano compuesto por dos planos ortogonales con compactación hexagonal compacta.....	65
Figura 3.22. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de dos planos perpendiculares.....	66
Figura 3.23. Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para un aglomerado en forma de dos planos perpendiculares entre sí	67

Figura 3.24. Aglomerado plano compuesto por tres planos ortogonales con compactación hexagonal compacta	68
Figura 3.25. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de tres planos cortantes entre sí	69
Figura 3.26. Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para un aglomerado en forma de tres planos cortantes entre sí	70
Figura 3.27. Diámetro de giro de aglomerados con $D_f=2$ frente al número de partículas primarias	71
Figura 3.28. Prefactor de la ley de potencias de aglomerados con $D_f=2$ frente al número de partículas primarias	71
Figura 3.29. Prefactor de la ley de potencias como una función del número de partículas primarias para diferentes configuraciones geométricas	73
Figura 3.30. Valores del prefactor obtenidos a partir de métodos geométricos y a partir de correlaciones, como una función de la dimensión fractal	74
Figura 3.31. Valores del prefactor en función de la dimensión fractal y de la configuración de compactación	77
Figura 3.32. Prefactor en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado	79
Figura 3.33. Zoom de la figura 3.32. Prefactor en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado cuando la dimensión fractal está entre 1.6 y 2.2	80
Figura 3.34. Prefactor frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$	80
Figura 3.35. Diámetro de giro adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal	81
Figura 3.36. Diámetro de giro adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal representada como curvas de nivel	82
Figura 4.1. Solape entre dos esferas que están en contacto	91
Figura 4.2. Factor de solape para las dos esferas, en función del ángulo φ	92
Figura 4.3. Solape entre un alto número de partículas primarias alineadas y su proyección	93

Figura 4.4.	Factor de solape para una cadena lineal de partículas primarias en función de φ y n_{po}	94
Figura 4.5.	Semiesfera visible que recoge todas las orientaciones posibles de la cadena de partículas primarias alineadas	95
Figura 4.6.	Factor de solape de una cadena lineal en función de n_{po}	96
Figura 4.7.	Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas.....	97
Figura 4.8.	Nomenclatura de las cadenas que componen el aglomerado	98
Figura 4.9.	Identificación de los planos en los que se encuentran las cadenas de aglomerado en forma de cruz para una pareja de ángulos α y β cualesquiera.....	99
Figura 4.10.	Ángulos de proyección de la pareja de cadenas que forman el aglomerado	100
Figura 4.11.	Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=13$	103
Figura 4.12.	Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=101$	104
Figura 4.13.	Semiesfera visible que abarca las posibles orientaciones del aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas primarias	104
Figura 4.14.	Evolución del factor de solape lineal en función del número de partículas primarias para un aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas primarias.....	107
Figura 4.15.	Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas	108
Figura 4.16.	Nomenclatura de las cadenas que forman el aglomerado en forma de cruz con número par de partículas	109
Figura 4.17.	Planos sobre los que se encuentran las cadenas del aglomerado en forma de cruz para una pareja de ángulos α y β cualesquiera... ..	109
Figura 4.18.	Geometría de las partículas centrales respecto al origen de ordenadas.....	111
Figura 4.19.	Ángulo límite para que no exista solape entre dos partículas no tangentes.....	112
Figura 4.20.	Solape entre dos partículas no tangentes de una misma cadena	113

Figura 4.21. Área solapada entre dos partículas.....	114
Figura 4.22. Solape entre partículas tangentes de distintas cadenas	115
Figura 4.23. Coordenadas de las partículas centrales para unos ángulos α y β arbitrarios.....	116
Figura 4.24. Solape entre dos partículas primarias de distintas cadenas.....	117
Figura 4.25. Solape entre dos partículas primarias de distintas cadenas.....	118
Figura 4.26. Área solapada por duplicado en las partículas centrales.....	121
Figura 4.27. Vértices del área de solape duplicada	122
Figura 4.28. Ángulos para el cálculo del área de solape duplicada	123
Figura 4.29. Punto medio y distancia al vértice	124
Figura 4.30. Arco de circunferencia definido por dos vértices	126
Figura 4.31. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=12$	129
Figura 4.32. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=100$	129
Figura 4.33. Semiesfera visible que abarca las posibles orientaciones del aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas primarias.....	130
Figura 4.34. Evolución del factor lineal de solape medio para un aglomerado con $D_f=1$, con dos ramas y número par de partículas primarias.....	131
Figura 4.35. Comparación de los tres factores de solape lineal medio para aglomerados con $D_f=1$	132
Figura 4.36. Aglomerado plano con compactación hexagonal	134
Figura 4.37. Izquierda, aglomerado formando un ángulo α con el plano horizontal. Derecha, Aglomerado formando una pareja de ángulos α y β	135
Figura 4.38. Ejes móviles del aglomerado plano	136
Figura 4.39. Pareja de partículas del eje t	136
Figura 4.40. Áreas solapadas debido a un ángulo α con el plano XY . Vista en planta.....	138

Figura 4.41. Partículas afectadas por el área de solape $A_{h\alpha}$	138
Figura 4.42. Solape entre dos partículas de cadenas horizontales contiguas debido a un ángulo α	139
Figura 4.43. Partículas afectadas una vez (izquierda) o dos veces (derecha) por el área de solape $A_{h\mu}$	140
Figura 4.44. Áreas solapadas debido a un ángulo φ con el plano XY . Vista en planta	141
Figura 4.45. Solape entre dos partículas de cadenas horizontales contiguas debido a un ángulo φ	142
Figura 4.46. Partículas afectadas una vez (izqda.) o dos veces (dcha.) por el área de solape $A_{h\varphi}$	143
Figura 4.47. Solape entre partículas no tangentes	144
Figura 4.48. Solape entre dos partículas no tangentes	145
Figura 4.49. Doble solape entre partículas tangentes dos a dos	146
Figura 4.50. Definiciones del área de solape duplicada para partículas tangentes dos a dos	148
Figura 4.51. Partículas a las que afecta el área de solape duplicada A_{ds1}	150
Figura 4.52. Doble solape entre partículas tangentes entre sí	151
Figura 4.53. Definiciones del área de solape duplicada para partículas tangentes entre sí	153
Figura 4.54. Partículas a las que afecta el área de solape duplicada A_{ds2}	155
Figura 4.55. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=19$, ($n=3$)	158
Figura 4.56. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=271$, ($n=10$)	158
Figura 4.57. Evolución del factor lineal de solape medio para un plano	160
Figura 4.58. Efecto del número de partículas primarias sobre el factor de solape, para $D_f = 3$ en función de la compactación del aglomerado	164
Figura 4.59. Factor de solape lineal frente al número de partículas primarias para todos los casos estudiados	165

Figura 4.60. Factor de solape lineal en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado.....	166
Figura 4.61. Zoom en la figura 4.60 para D_f entre 1 y 2. Factor de solape lineal frente a la dimensión fractal y número de partículas primarias	167
Figura 4.62. Factor de solape lineal frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$	168
Figura 4.63. Efecto del número de partículas primarias sobre el solape exponencial, en función del tipo de compactación del aglomerado.....	175
Figura 4.64. Solape exponencial en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado.....	176
Figura 4.65. Zoom de la figura 4.64. Solape exponencial en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado cuando la dimensión fractal está entre 1 y 2.2	177
Figura 4.66. Solape exponencial frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$	178
Figura 4.67. Área proyectada adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal.....	179
Figura 4.68. Área proyectada adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal representada como curvas de nivel	180
Figura 5.1. Fotografía obtenida con un TEM de un aglomerado cuasi-fractal producido por un motor diésel y compuesto por partículas primarias esféricas.....	186
Figura 5.2. Prefactor de la ley de potencias y exponente de solape frente a la dimensión fractal cuando el número de partículas primarias tiende a infinito	190
Figura 5.3. Diagrama de bloques para el cálculo iterativo.....	191
Figura 5.4. Dimensión fractal frente a área proyectada y diámetro de giro de aglomerados	192
Figura 5.5. Número de partículas primarias con tamaño medio de 25 nm frente a área proyectada y diámetro de giro de aglomerados	192

Figura 5.6.	Ábaco de soluciones posibles que caracterizan los aglomerados. Isolíneas de dimensión fractal, de número de partículas primarias y de densidad aparente ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	195
Figura 5.7.	Fotografías de partículas diésel con D_f diferentes	198
Figura 5.8.	Ábaco de posibles soluciones incluyendo la localización de las 1616 fotografías válidas	199
Figura 5.9.	Obtención de la dimensión fractal media, del exponente de solape medio y del prefactor de la ley de potencias medio	200
Figura A.1.	Fotografía de rejilla para el TEM de diámetro 3mm y porta-rejillas para transportarlas de un sitio a otro. Se observa en la punta de la pinza una rejilla.....	223
Figura A.2.	Fotografías de la sonda termoforética	224
Figura A.3.	Vista del TEM utilizado, perteneciente a la Universidad de Málaga.....	226

Índice de Tablas

Tabla 2.1.	Capacidad de penetración pulmonar de las partículas	10
Tabla 3.1.	Revisión bibliográfica del prefactor de la ley de potencias	39
Tabla 4.1.	Revisión bibliográfica de z'	169
Tabla 5.1.	Comparación de los resultados obtenidos por los dos métodos.....	201

Nomenclatura

LATINOS

<i>A</i>	área
<i>C</i>	concentración de partículas en masa por volumen de gas, (mg/m ³)
<i>D</i>	dimensión
<i>I</i>	integral
<i>I</i>	momento de inercia
<i>N</i>	número de estructuras elementales
<i>O</i>	centro de coordenadas
<i>P</i>	punto
<i>R</i>	coeficiente de correlación
<i>R</i>	radio
<i>V</i>	volumen
<i>V</i>	vértice
<i>d</i>	diámetro
\bar{d}	diámetro medio aritmético
$\underline{\underline{d}}$	diámetro medio geométrico
<i>d</i>	derivada
<i>f</i>	función de distribución de tamaños
<i>h</i>	distancia entre centros
<i>h</i>	distancia entre dos puntos
<i>i</i>	i-ésimo
<i>i</i>	número de capas o anillos
<i>j</i>	j-ésimo
<i>k</i>	prefactor de la ley de potencias
<i>m</i>	masa
<i>n</i>	número de partículas
<i>n</i>	número
<i>n</i>	n-ésimo
<i>p</i>	índice de compactación o empaquetamiento
<i>r</i>	radio
<i>s</i>	eje móvil
<i>t</i>	eje móvil
<i>x</i>	coordenadas cartesianas
<i>y</i>	coordenadas cartesianas
<i>z</i>	coordenadas cartesianas
<i>z</i>	factor de solape lineal
<i>z'</i>	exponente de solape

GRIEGOS

Γ	función gamma
α	ángulo de proyección
β	ángulo de proyección
γ	ángulo
δ	ángulo
θ	ángulo de solape
θ	ángulo en coordenadas esféricas
μ	ángulo
ξ	ángulo
π	número pi
ρ	densidad
σ	desviación típica
σ	ángulo
τ	ángulo
φ	ángulo de proyección

SUBÍNDICES

ALFABÉTICOS

G	centro de gravedad
T	topológica
bcc	cúbica centrada en las caras
ds	doblemente solapada
f	fractal
g	giro
h	hollín
h	solapado o escondido
h	inherente
hc	hexagonal compacta
ht	triángulo
i	i-ésimo
j	j-ésimo
lim	límite
max	máximo
m	medio
n	número
p	partícula o aglomerado
po	partícula primaria
r	aleatoria
sc	cúbica simple

NUMÉRICOS

1	tamaño inicial
1	una rama o cadena
2	tamaño final

ABREVIATURAS

PAH	Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
SMPS	Scanning Mobility Particle Sizer
TEM	Transmission Electron Microscopy

Capítulo 1. Introducción.

1.1. MOTIVACIÓN Y ANTECEDENTES	3
1.2. OBJETIVOS.....	4
1.3. METODOLOGÍA	4
1.4. DESARROLLO DEL DOCUMENTO.....	5
1.5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	6

1.1. MOTIVACIÓN Y ANTECEDENTES

En las últimas décadas se ha producido un notable incremento del uso de automóviles diésel tanto en España, como en Europa, e incluso, en el mundo. Éste crecimiento de la venta y uso de vehículos diésel se debe a sus características de fiabilidad, consumo y prestaciones frente a su gran competidor actual que es el motor de gasolina. Este aumento también se debe a diferentes mejoras que se han ido produciendo en este tipo de motores, en conceptos en los que anteriormente presentaban grandes desventajas frente a los motores de gasolina.

Sin embargo, aún quedan pendientes mejoras en el campo de las emisiones contaminantes. En concreto, el problema de este tipo de motores son las emisiones de óxido de nitrógeno y partículas (también llamadas aglomerados) [1]. Debido a la creciente preocupación de la sociedad por el aspecto medioambiental se han sucedido las normativas que limitan cada vez más la emisión de estos dos contaminantes, no siendo sencilla la reducción de ambos de forma simultánea [1] y [2].

Hasta el momento todas las normativas que han aparecido limitan la emisión másica de partículas y, por tanto, todos los esfuerzos han sido dirigidos a aplicar medidas que reduzcan la masa de partículas emitidas sin prestar especial atención ni al número de partículas ni al tamaño ni a las formas de las mismas. Sin embargo debe tenerse en cuenta que los efectos perjudiciales de las partículas están muy influenciados por el tamaño y las formas de las mismas, siendo más peligrosas las de menor tamaño [3]. Por este motivo, en las normativas Euro V, que entró en vigor en septiembre de 2009 y en Euro VI, que entró en vigor en el año 2014, no sólo se regula la masa de partículas sino también el número, y quizás posteriormente se regule también el tamaño.

Estas circunstancias han motivado un creciente interés de la comunidad científica por el estudio de las emisiones de partículas y su morfología.

Son precisamente los importantes efectos de la morfología de las partículas emitidas sobre la salud humana, sobre el medio ambiente y sobre el clima, los que justifican la realización de este trabajo de investigación, con el cual se logra caracterizar un tipo determinado de partículas, granuladas cuasi-fractales, entre las que se encuentran las partículas emitidas por un motor diésel o de gasolina actual de inyección directa (GDI). Este tipo de partículas son emitidas en aquellos procesos de combustión en los que las moléculas de oxígeno tienen muy poco tiempo para reaccionar con las moléculas de hidrocarburos, de forma que aquellas que no han podido reaccionar con el oxígeno, y debido a las altas temperaturas de combustión, sufren pirolisis dando como resultado carbón (grafito), lo que es extremadamente cancerígeno y

contaminante, saliendo así al ambiente. Dependiendo de la forma y tamaño de estos aglomerados, su repercusión será mayor o menor, puesto que las más pesadas caerán al suelo mientras que las más pequeñas podrán ser inhaladas o afectar a la contaminación ambiental.

Por tanto, como se ha indicado ya, debido a la importancia de la caracterización morfológica de estas partículas, se plantea esta tesis doctoral. Como antecedentes a este trabajo, existen estudios experimentales de caracterización morfológica que necesitan una población extensa de aglomerados para determinar la caracterización morfológica de la población y no de aglomerados individuales, y por otro lado existen modelos para determinar las características morfológicas de aglomerados individuales que se sustentan en parámetros de ajuste. Sin embargo, en esta tesis se propone un modelo completo de caracterización morfológica de aglomerados individuales que no se sustenta en ningún parámetro de ajuste y que además se realimenta de algunas variables medidas experimentalmente.

1.2. OBJETIVOS.

El objetivo fundamental de esta tesis doctoral es proponer un modelo para determinar la morfología de las partículas diésel y en general de cualquier partícula granulosa cuasi-fractales. Uno de los aspectos de la morfología de las partículas diésel es el tamaño de éstas. Este aspecto ha sido estudiado en numerosos trabajos y las técnicas para su medición están muy desarrolladas, aunque al proceder dichos desarrollos del ámbito de los muestreos medioambientales, la metodología de aplicación a las emisiones de motores no es unánime. Sin embargo, otro aspecto morfológico de las partículas diésel como es su irregularidad, no dispone de un método que la cuantifique sin que se apoye en variables de ajuste. Es por esta razón por la que en esta tesis doctoral el método teórico-experimental que se propone cuantifica la irregularidad de las partículas individuales y no se sustenta en ninguna variable de ajuste.

1.3. METODOLOGÍA

El planteamiento metodológico de esta tesis se basa en la combinación de técnicas experimentales no excesivamente sofisticadas con desarrollos teóricos, igualmente de escasa complejidad matemática, para obtener resultados que serían imposibles de obtener desde planteamientos puramente experimentales o puramente teóricos, ni siquiera en el caso de que estos fueran mucho más complejos que los aquí planteados. En este sentido, puede afirmarse que se ha tratado de explotar al máximo la sinergia entre las técnicas experimentales y las teóricas.

Las técnicas experimentales utilizadas han sido las correspondientes a la visualización de las partículas diésel mediante microscopía de transmisión de electrones (TEM, cuyas características se muestran en el apéndice), y su posterior tratamiento digital. Los resultados de estas técnicas son de tipo geométrico y son los parámetros necesarios para la entrada al modelo planteado sobre morfología de las partículas.

Por tanto, con el método geométrico propuesto en esta tesis, se pueden determinar todos los parámetros morfológicos de aglomerados o partículas a partir de las imágenes obtenidas en el microscopio.

Todo el estudio morfológico presentado en esta tesis se basa en el muestreo de aglomerados recogidos del gas de escape caliente y sin diluir del proceso de combustión de un motor diésel, el cual está sujeto a un conjunto de condiciones de ensayo fácilmente controlables. A los aglomerados recogidos se les denomina indistintamente aglomerados o partículas diésel, como se puede observar a lo largo de este documento.

1.4. DESARROLLO DEL DOCUMENTO

La memoria de esta tesis doctoral se compone de seis capítulos y en este epígrafe se muestra lo que se desarrolla en cada uno de ellos.

- Capítulo 1. Se introduce y se justifica el porqué de la realización de este trabajo de investigación. Además se expone la metodología seguida para la realización de la tesis.
- Capítulo 2. Se comentan las implicaciones de la morfología y tamaño de las partículas diesel sobre el medio ambiente y sobre la salud pública. Se comentan las distintas maneras de definir el tamaño de éstas y las funciones de distribución típicas. Y finalmente se describe la geometría fractal y los parámetros utilizados para definir las características morfológicas de las partículas.
- Capítulo 3. Se describe y justifica el modelo que se ha creado para determinar el prefactor de la ley de potencias y se demuestra cómo éste es parte de la caracterización morfológica de las partículas.
- Capítulo 4. Se describe y justifica el modelo que se ha realizado para determinar el exponente de solape.
- Capítulo 5. Se describe y justifica el método para la determinación de las características morfológicas de un aglomerado real a partir de imágenes obtenidas en el microscopio de transmisión de electrones.

• Capítulo 6. Se exponen las conclusiones finales de este documento así como una breve descripción de los trabajos futuros que pueden realizarse en posteriores investigaciones.

1.5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Heywood, J.B. (1988). Internal combustion engine fundamentals. *McGrawHills Book Company*. New York. USA.
- [2] Eastwood, P. (2008). Particulate emissions from vehicles. *John Wiley & Sons*. Chichester. England.
- [3] Kittelson, D.B. (1998). Engines and nanoparticles: a review. *Journal of Aerosol Science* **9**, 575-588.

Capítulo 2. Consideraciones sobre Aglomerados.

2.1. INTRODUCCIÓN	9
2.2. EFECTOS FISIOLÓGICOS Y MEDIOAMBIENTALES	11
2.2.1. Introducción.....	11
2.2.2. Efectos sobre la salud pública	12
2.2.3. Impacto medioambiental	15
2.3. DIÁMETROS EQUIVALENTES Y FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN	16
2.3.1. Diámetros equivalentes	16
2.3.2. Funciones de distribución.....	18
2.4. NATURALEZA FRACTAL	20
2.4.1. Introducción.....	20
2.4.2. Definición del fractal y de la dimensión fractal	21
2.4.3. Homogeneidad espacial, invariancia por cambio de escala y autosemejanza	22
2.4.4. Relación entre longitud, área y volumen.....	23
2.5. MORFOLOGÍA DE LOS AGLOMERADOS	25
2.5.1. Geometría fractal	25
2.5.2. Ley de potencia. Dimensión fractal de un aglomerado	26
2.6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	29

2.1. INTRODUCCIÓN

El humo es una suspensión en el aire de pequeñas partículas sólidas que resultan de la combustión incompleta de un combustible. Es un subproducto no deseado de la combustión, producido en fogatas, brasas, motores de gasolina y diésel. Cuando una combustión es correcta y completa, los únicos subproductos son agua, dióxido de carbono y compuestos de diversos elementos.

La inhalación del humo es la causa primaria de asfixia y muerte en las víctimas de incendios. El humo mata por intoxicación debido a sus componentes tóxicos, como el monóxido de carbono y lo que compete en esta tesis, las pequeñas partículas sólidas que taponan o intoxican de agentes contaminantes los alvéolos pulmonares.

Por otro lado, se entiende por polvo, la dispersión de partículas sólidas en el ambiente. La exposición a polvo en el lugar de trabajo es un problema que afecta a muchos y muy diversos sectores (minería, fundición, canteras, textil, panaderías, agricultura, etc.). Las partículas de polvo pueden ser de muy diversas formas según la composición del material del que parte, entre ellas se puede encontrar partículas de aglomerados, como las que se van a considerar en esta tesis.

Por respirar polvos se producen muchos casos de enfermedades como neumoconiosis (exposición a polvos) y enfermedades respiratorias (asma, bronquitis crónica, enfisema pulmonar) en las que la exposición a polvo juega un papel fundamental.

Según el tipo de partículas, los efectos sobre la salud pueden ser más o menos graves. En general, el polvo provoca irritación de las vías respiratorias y, tras exposiciones repetidas, puede dar lugar a bronquitis crónica. Otros tipos de polvo (amianto, sílice, plomo) provocan enfermedades específicas. Hay tipos de polvo que, además, pueden ser explosivos en ambientes confinados (carbón, caucho, aluminio).

Para conocer el tipo de polvo, a veces, es suficiente con saber la composición del material que lo origina. Otras veces, hay que recurrir al análisis químico de muestras de aire.

Las partículas más pequeñas y las más ramificadas (cuasi-fractales) son las más peligrosas: permanecen más tiempo en el aire (por su bajo peso y por las ramificaciones) y pueden penetrar hasta los lugares más profundos de los bronquios. El mayor riesgo está, pues, en el polvo que no se ve. Por esto suele medirse no el total de polvo atmosférico, sino sólo el llamado «polvo respirable».

El «polvo respirable» es la fracción de polvo que puede penetrar hasta los alvéolos pulmonares.

Tabla 2.1. Capacidad de penetración pulmonar de las partículas.

Tamaño de las partículas	Capacidad de penetración pulmonar
50 micras	No pueden inhalarse
10-50 micras	Retención en nariz y garganta
< 2.5 micras	Penetran hasta el alvéolo pulmonar

1 micra = 0,001mm.

Algunos problemas pueden identificarse sin necesidad de mediciones: nubes visibles de polvo, escapes de polvo de máquinas o instalaciones, acumulación de polvo en suelos o paredes, incorrecto funcionamiento de extractores, etc. Sin embargo, la forma de saber con exactitud cuánto hay es pesar el polvo recogido en una muestra de aire mediante filtros apropiados. Se separa la fracción respirable y se mide su masa (en mg/m³) por un método denominado gravimetría. La toma de muestras puede hacerse por medio de muestreadores personales (la persona lleva consigo el aparato) o mediante muestreo estacionario (aparato fijo en un punto).

Puesto que hoy día la población mundial está en continuo contacto con vehículos diésel, y para poder entender qué son las partículas o aglomerados, su morfología y los efectos fisiológicos y medioambientales que producen, se van a analizar aquí aquellas partículas que son emitidas por un motor diésel, las cuales son granuladas cuasi-fractales.

Durante el proceso de combustión del combustible líquido en un motor diésel, el combustible se combina con el oxígeno para producir calor, luz, vapor de agua y dióxido de carbono. Sin embargo, la propia composición del combustible, las heterogeneidades de la mezcla aire-combustible y las temperaturas locales dentro de la cámara de combustión hacen que se formen otros compuestos como son el monóxido de carbono, dióxido y trióxido de azufre, compuestos oxigenados de nitrógeno, hidrocarburos y partículas [1].

Los estudios de la mayoría de autores están enfocados a la formación de las partículas en el interior de la cámara de combustión. En otros se estudian los efectos de las partículas fuera del vehículo, cuando llegan a la atmósfera, [2] y [3]. La razón por la que predominan estos estudios es porque tanto en la cámara de combustión como en la atmósfera, la actividad química es muy importante, a pesar de que en la cámara lo es con cinéticas muy rápidas (tiempos de residencia muy cortos) y en la atmósfera lo es con cinéticas muy lentas (tiempos de residencia muy largos). Por esto mismo hay pocos autores que estudien la evolución de las partículas a lo largo del tubo de escape. Si se estudia la

morfología de las partículas, el tránsito de éstas por el tubo de escape no las deja inalteradas.

Las características morfológicas que se derivan del modelo presentado en esta tesis son el tamaño y la irregularidad de las partículas de aglomerado. Este capítulo comienza con un resumen de los distintos efectos que tienen las partículas diesel sobre la salud humana y sobre el medio ambiente. Tras ello, se exponen las distintas definiciones de los diámetros característicos de las partículas y las funciones de distribución que los representan. La irregularidad de las partículas se caracteriza mediante la dimensión fractal. La realización de estudios como éste, que tienen como objetivo conocer más y mejor la morfología de los aglomerados, permite diseñar estrategias más adecuadas para reducir, en la medida de lo posible, el impacto que tienen este tipo de partículas sobre la salud pública y sobre el medio ambiente.

2.2. EFECTOS FISIOLÓGICOS Y MEDIOAMBIENTALES

2.2.1. INTRODUCCIÓN

Se puede decir que uno de los mayores problemas medioambientales atribuidos a los vehículos es la emisión de partículas de hollín. Fue cuantificado en el trabajo europeo APHEIS [4] los efectos de la emisión de partículas diesel sobre la salud, tanto en términos de mortalidad prematura como en términos de ingresos en los hospitales.

Si se observan las partículas de hollín que emite un motor diesel, en general, la irregularidad en dichas partículas lleva a varias conclusiones:

- Cuanto más irregulares son las partículas mayor es la relación entre el área superficial y el volumen, haciendo que aumente la capacidad de absorción de hidrocarburos inquemados a la salida de la cámara de combustión.
- A mayor irregularidad de las partículas mayor capacidad tienen éstas de extinguir o absorber la radiación luminosa incidente sobre ellas, por lo que afecta a la opacidad del gas portador de las partículas, haciendo que ésta aumente.
- La irregularidad de las partículas también afecta al comportamiento aerodinámico de éstas, disminuyendo su velocidad de sedimentación con lo que aumenta, por tanto, su probabilidad de entrar en las vías respiratorias humanas.

- La irregularidad de las partículas aumenta la eficiencia de filtrado de los sistemas de retención de partículas tanto artificiales (filtros) como las propias del cuerpo humano, [5]. Concretamente tiene especial interés el conocimiento de la morfología de las partículas para el diseño de los sistemas de postratamiento de los gases de escape del motor diesel (Trampas de partículas).

Otros efectos asociados a la irregularidad de las partículas son los referentes a las propiedades del transporte, como son la difusión energética y de cantidad de movimiento, y las propiedades de radiación de calor, etc. [6].

La manera de cuantificar la irregularidad de las partículas es mediante la dimensión fractal, D_f , como se explica en B.B. Mandelbrot [7]. Algunos autores como R.J. Samson *et al* [8], C. Van Gulijk *et al* [9], A.V. Filippov *et al* [10], K.O. Lee *et al* [11], han utilizado esta manera de cuantificar la irregularidad para muchos ejemplos de gran interés práctico.

2.2.2. EFECTOS SOBRE LA SALUD PÚBLICA

Al respirar, en la inspiración el ser humano no sólo inhala oxígeno, nitrógeno y el resto de gases que componen el aire, sino que además se introducen en las vías respiratorias las partículas de pequeño tamaño que están en suspensión en el aire. Las partículas con diámetros entre $2.5 \mu\text{m}$ y 100nm se llaman partículas finas y tienen una deposición alveolar pequeña ya que son interceptadas o filtradas con anterioridad en la parte bronquial. El mayor problema está con las partículas ultrafinas, de tamaño inferior a 100nm , que sí llegan a la región alveolar y además la tasa de deposición alveolar es muy elevada, [12], como se ve en la figura 2.1.

La deposición alveolar de las partículas ultrafinas se agrava por la mayor concentración de éstas en el aire. Los motores diesel actuales producen mayor número de partículas ultrafinas que sus predecesores, si bien no existen correlaciones evidentes entre el tipo de motor diesel y su antigüedad con el tipo de partículas emitidas, [13].

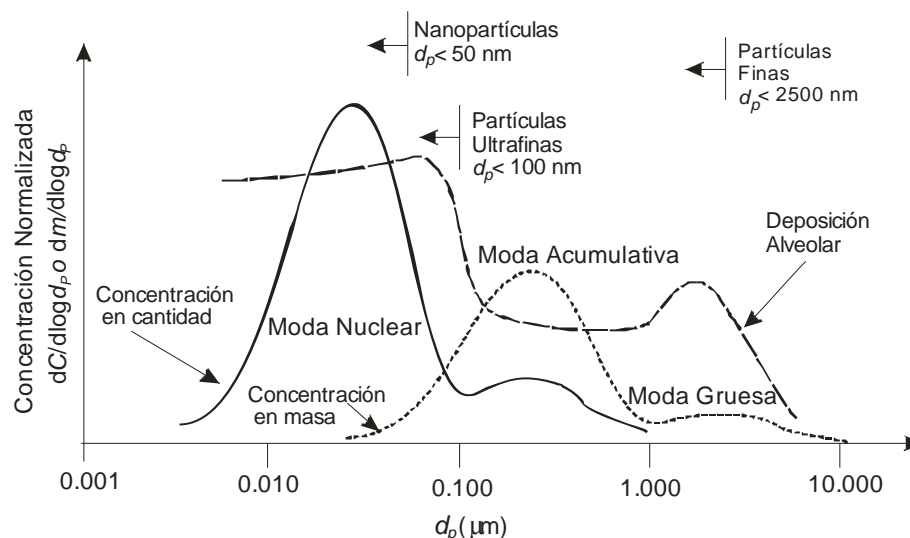


Figura 2.1. Deposición alveolar de las partículas diésel en función de su tamaño, adaptado de D.B. Kittelson [5] y de J.M. Desantes *et al* [14].

El humo producido por los motores diésel tiene menor tasa de deposición en los pulmones que el producido por el tabaco y que el producido por los motores de gasolina, [15]. Este estudio experimental comprobó que la tasa de deposición del humo de un motor diésel sobre los pulmones es del 30%, frente a la del humo del tabaco que es del 36% y la del humo de un motor de gasolina, que es del 41%. Estas cifras no son directamente proporcionales a los tamaños medios de movilidad de las partículas que son para el humo del tabaco de 183 nm, para el humo de un motor diésel de 125 nm y para el humo de un motor de gasolina de 69 nm. Tampoco son iguales las tendencias de la tasa de deposición pulmonar al variar el tamaño de las partículas, por ejemplo, la tasa de deposición del humo de tabaco apenas se ve afectada por el tamaño de las partículas, mientras las de los humos de los motores disminuyen al aumentar los tamaños. Los autores atribuyen tales diferencias precisamente a la diferente morfología de las partículas y de las unidades esféricas que las componen (mucho mayores en el caso del humo del tabaco), y señalan mecanismos como la deposición en bifurcaciones bronquiales, que afectan mucho más a las estructuras enracimadas que a las compactas, como puede comprobarse en la figura 2.2.

Como se observa en la figura 2.2, un aglomerado está compuesto por un número determinado de partículas primarias.

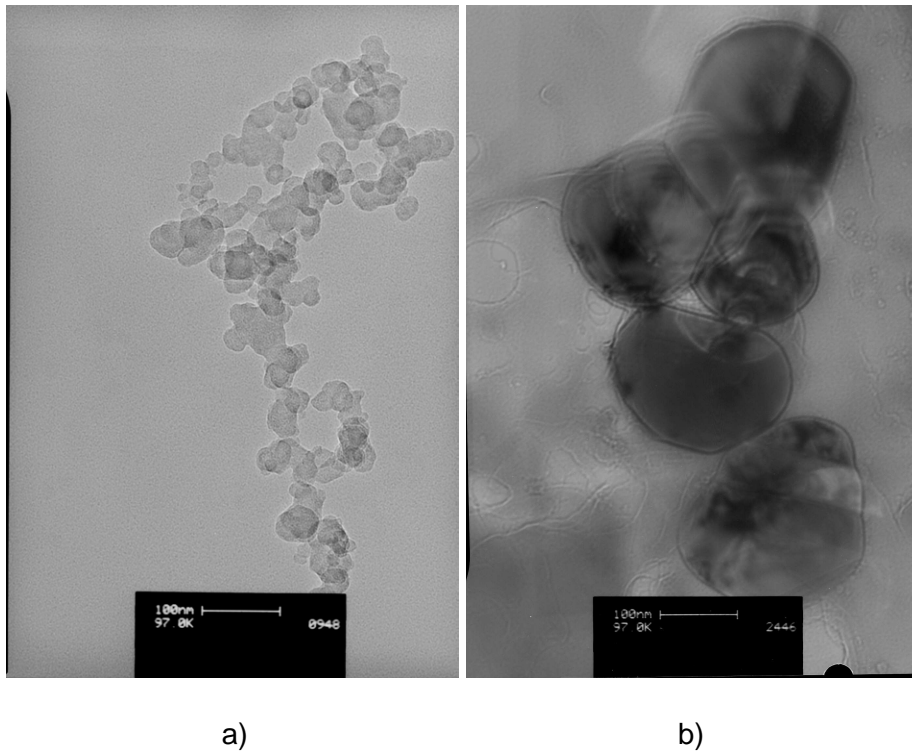


Figura 2.2. a) Fotografía de una partícula diésel típica. b) Fotografía de una partícula perteneciente al humo del tabaco. Imágenes obtenidas del TEM.

Otros efectos que pueden producir las partículas sobre la salud humana son los derivados de la propia naturaleza de estas partículas y de los distintos compuestos químicos que pueden llevar absorbidos en su superficie. G. Oberdörster [16] y A. Seaton *et al* [17] constataron que la inhalación de partículas lleva consigo la inflamación de las vías respiratorias, provocando un considerable daño en las mismas y en el sistema cardiovascular. La parte soluble de la partícula puede traspasar la membrana alveolar pasando a la sangre y distribuyendo su toxicidad por todo el cuerpo, mientras que la parte insoluble se queda alojada en las vías respiratorias, disminuyendo, por tanto la capacidad respiratoria. Por otro lado las partículas están compuestas por PAH (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*) que son compuestos cancerígenos, [18]. Todos estos efectos son, por tanto, consecuencia indirecta de la morfología de las partículas, en la medida en que ésta influye decisivamente sobre la probabilidad de inhalación de las mismas, y sobre la capacidad de absorción de sustancias tóxicas.

Este estudio se centra en una única tipología de partículas, granuladas cuasi-fractales o enracimadas, las cuáles se observan al mirar las partículas diésel mediante microscopia. La morfología de este tipo de partículas son las que se analizan en esta tesis.

2.2.3. IMPACTO MEDIOAMBIENTAL

El impacto medioambiental de las partículas diesel es muy diverso. Las partículas juegan un papel muy importante en la contaminación ambiental y pueden tener un posible efecto sobre el cambio climático, [19], [20] y [21].

Las nubes son pequeñas gotas de agua formadas a partir de la condensación del vapor de agua alrededor de un núcleo ya condensado. Las partículas en suspensión son base o núcleos alrededor de los cuáles puede condensar vapor de agua, promoviendo la formación de nubes con consecuencias climáticas adversas, [22]. El hollín en suspensión incrementa la dispersión y la absorción de la radiación solar, [23], por lo que reduce la radiación solar que incide sobre la superficie terrestre, afectando por consiguiente el clima terrestre, [24]. Además, puede alterarse la estructura térmica de la atmósfera, reduciendo la probabilidad de lluvias y haciendo, por tanto, menos eficiente la eliminación de contaminantes de la atmósfera, [25].

Existe un fenómeno llamado gravito-fotofóresis por el cuál las partículas tienden a subir en la atmósfera hasta alcanzar alturas desde 20 km hasta 83 km, [26]. De esta forma, las partículas quedan suspendidas en la atmósfera según su tamaño. Las más pequeñas quedan en capas superiores y las de tamaño entorno al micrómetro, en capas más bajas de la atmósfera. La presencia de estas capas aumenta tanto la reflexión de la luz solar incidente sobre el planeta, como la dispersión de luz. Al margen de la consecuente disminución de visibilidad, este efecto puede ser tan grande que puede disminuir el flujo neto de energía solar que llega a la corteza terrestre, [27], provocando un enfriamiento en ésta, opuesto al efecto invernadero. Este efecto es más intenso cuanto mayor es la emisividad de la superficie terrestre. Por el contrario, cuando la superficie terrestre es brillante, la radiación solar que le llega se refleja hacia las capas de partículas suspendidas, en las que, una parte de la radiación vuelve a reflejarse, afectando así al efecto invernadero. Coincide, además, que la potenciación del efecto invernadero tiene lugar en zonas más cálidas y desérticas (con superficies más reflectantes) y el enfriamiento superficial, en las zonas más frías y húmedas (por lo general más absorbente). En cualquiera de los dos casos el carácter regional o zonal de este efecto, frente al global del efecto invernadero hace que, más que mitigar o potenciar éste, el efecto más notable de la presencia de las capas de partículas sea el de dificultar la observación del efecto invernadero. El comportamiento óptico de las partículas, responsable de los fenómenos descritos, depende mucho del tamaño y de la irregularidad de las partículas y de la posible presencia en su superficie de hidrocarburos condensados, [3].

Por otra parte, las partículas son portadoras de sustancias que pueden reaccionar con los distintos gases de la atmósfera o que pueden catalizar reacciones no deseadas en el ambiente, [28]. Por ejemplo las partículas de hollín pueden contener SO_2 , el cual puede reaccionar con el agua y producir ácido

sulfúrico. El ácido sulfúrico es arrastrado por la lluvia haciendo que ésta sea muy corrosiva, lo que se denomina lluvia ácida.

El impacto medioambiental de las partículas diesel depende directamente de la concentración, de la irregularidad y del tamaño de las partículas que estén en suspensión en el ambiente. El tiempo medio de residencia en suspensión es mayor cuanto mayor es la irregularidad de las partículas y cuanto menor es el tamaño de éstas, por lo que cuanto mayor es la irregularidad de las partículas y menor el tamaño de éstas, mayor es el impacto medioambiental de las partículas diesel.

2.3. DIÁMETROS EQUIVALENTES Y FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN

2.3.1. DIÁMETROS EQUIVALENTES

Se puede definir el diámetro equivalente de una partícula como el diámetro de la esfera que tendría el mismo valor de una propiedad física particular que la partícula irregular considerada. De esta manera, en función de la propiedad física fijada se define el diámetro equivalente considerado, [29].

En el esquema de la figura 2.3 se presentan algunas propiedades físicas de las partículas relacionadas con el diámetro junto con el rango de tamaños en el que tal medida es posible o en el que se mantiene tal relación.

Se muestra en la figura 2.3 que la resistencia del medio al movimiento de las partículas es proporcional al cuadrado del tamaño de las partículas, si éstas son del orden de pocos nanómetros, [30]. En cambio, esta propiedad física es proporcional al tamaño de las partículas cuando éstas tienen un tamaño del orden de micrómetros. La frecuencia de colisiones con coagulación tiene su máximo cuando las partículas tienen un tamaño del orden de pocos nanómetros. La dispersión de luz por las partículas es proporcional al tamaño de éstas elevado a la sexta potencia, si el tamaño de las partículas es de pocos nanómetros. En cambio, si el tamaño de las partículas es del orden de micrómetros, la dispersión de luz es proporcional al cuadrado del tamaño de las mismas, [30].

También se muestra en la figura 2.3 la región de visibilidad microscópica, por medio de microscopios ópticos, que está en el orden de micrómetros, y la región de visibilidad ultramicroscópicas, por medio de microscopios electrónicos, que puede incluso llegar a pocos nanómetros. Por último, se muestra en la figura 2.3 que el movimiento de partículas con tamaños de pocos nanómetros es predominantemente difusivo, mientras que el movimiento de

partículas con tamaños del orden de micrómetros es predominantemente convectivo o de sedimentación.

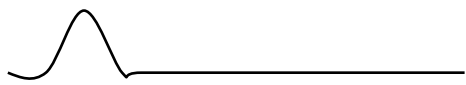
Radio de las partículas, nm	1	10	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵
Resistencia del medio	$\propto d^2$		$\propto d$			
Frecuencia de colisiones con coagulación						
Dispersión de la luz	$\propto d^6$			$\propto d^2$		
Región de visibilidad microscópica						
Región de visibilidad ultramicroscópica						
Predominio de difusión o de sedimentación	Difusión			Sedimentación		

Figura 2.3. Algunas propiedades de las partículas en relación a su tamaño.

Normalmente las propiedades físicas de las partículas irregulares son muy difíciles de medir, y dependiendo de la propiedad física y con la tecnología actual, incluso pueden ser imposibles de medir. Por lo tanto, los diámetros equivalentes que se suelen definir son los que se pueden medir experimentalmente.

El diámetro aerodinámico es uno de los más comunes. Se define como aquel diámetro que tiene una partícula esférica de densidad unitaria, 1 g·cm⁻³, cuya velocidad de sedimentación o deposición es igual a la de la partícula irregular en cuestión. El diámetro aerodinámico se mide en ciclones e impactadores, [31]. Esta definición de diámetro no tiene en cuenta las trayectorias de las partículas, de manera que para partículas muy pequeñas las trayectorias pueden ser muy irregulares o incluso caóticas. Para este tipo de partículas el movimiento se caracteriza por ser predominantemente difusivo, figura 2.3.

Se define diámetro equivalente de Stokes como el de una partícula esférica que tiene la misma resistencia aerodinámica que la partícula irregular si la partícula tiene una velocidad diferente a la del fluido portador, [32]. El diámetro equivalente de Stokes no depende de la densidad de la partícula, ya que la resistencia aerodinámica depende de la densidad del fluido, del coeficiente aerodinámico, del área frontal de la partícula y de la velocidad relativa entre la partícula y el fluido.

Se define el diámetro equivalente de movilidad eléctrica como el diámetro de una esfera con igual diámetro de Stokes que la partícula irregular y que además tenga la misma carga eléctrica. De esta manera, partículas con diámetros de Stokes iguales y que además lleven idéntica carga eléctrica, tienen

igual movilidad eléctrica. El diámetro de movilidad eléctrica se puede medir experimentalmente con un SMPS (*Scanning Mobility Particle Sizer*), [9].

Las partículas de igual diámetro de Stokes que llevan idéntica carga eléctrica, tienen la misma movilidad eléctrica. Si además el campo eléctrico es unitario, el diámetro de Stokes y el diámetro equivalente de movilidad eléctrica se igualan.

El diámetro de giro es el diámetro de un anillo toroidal que tiene la misma inercia que la que tiene la partícula irregular. La ventaja de utilizar esta definición de diámetro característico radica en que es un parámetro puramente geométrico que sólo depende de la posición espacial de las partículas primarias que componen el aglomerado. Otros autores como K.H. Naumann [33] lo denominan diámetro geométrico de la partícula irregular.

El diámetro másico equivalente es el diámetro de una esfera que tiene la misma masa que la partícula irregular, [33]. Este diámetro es muy difícil de medir directamente, por lo que se determina a partir de otras variables como el diámetro de giro.

El diámetro del volumen equivalente es el diámetro de una esfera que tiene el mismo volumen que la partícula irregular, [34].

El diámetro de proyección equivalente es el diámetro de una esfera que tiene el mismo área proyectada que la partícula irregular, [35].

2.3.2. FUNCIONES DE DISTRIBUCIÓN

El hollín en el gas de escape de un motor diesel es un aerosol polidisperso, es decir, cubre un amplio rango de tamaños de partículas. La función que caracteriza el número de partículas que tienen un determinado tamaño se denomina función de distribución de tamaños.

La clasificación modal propuesta por K.T. Whitby [36] es la más utilizada para clasificar las partículas del aerosol atmosférico. La clasificación modal se resume en la figura 2.4. La línea continua indica la concentración de partículas en el gas de escape en número, y la línea discontinua indica la concentración másica de las partículas diesel.

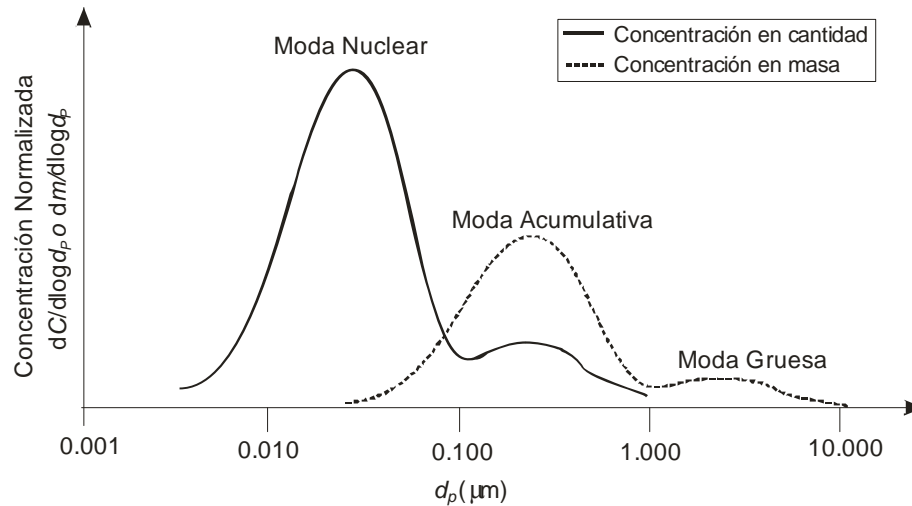


Figura 2.4. Distribución típica de tamaños de partículas de un motor diésel, adaptado de J.M.Desantes *et al* [14]

Como se muestra en la figura 2.4 las funciones de distribución siguen funciones del tipo logarítmico-normales presentando normalmente tres modas. Las tres modas son la moda núcleos, acumulación y gruesa, [37]. La moda núcleos está comprendida entre pocos nanómetros, 5 nm, a 50 nm, aproximadamente. La moda acumulación está comprendida entre 50 nm y 1000 nm, mientras que la moda gruesa son partículas mayores a 1000 nm.

La función de distribución logarítmico-normal corresponde con la siguiente expresión, tomada de [29]:

$$f(d_p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d_p \ln\sigma} \exp\left(-\frac{1}{2 \ln^2\sigma} \left(\ln d_p - \ln \bar{d}_p\right)^2\right) \quad (2.1)$$

donde σ es la desviación estándar geométrica y \bar{d}_p es el diámetro medio geométrico de la función de distribución. La desviación típica geométrica y el diámetro medio geométrico se calculan mediante las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} \ln \bar{d}_p &= \overline{\ln d_p} = \int_0^{\infty} \ln d_p f(d_p) dd_p \\ \ln^2 \sigma &= \overline{(\ln d_p - \ln \bar{d}_p)^2} = \int_0^{\infty} (\ln d_p - \ln \bar{d}_p)^2 f(d_p) dd_p \end{aligned} \quad (2.2)$$

Este diámetro se puede asociar a cualquiera de las definiciones que se han presentado en el epígrafe 2.3.1.

Otra función de distribución utilizada es la logarítmico-normal bimodal, que recoge las modas nuclear y acumulativa por medio de una sola función, [38],

$$f(d_p) = \frac{1}{3\sqrt{2\pi} d_p} \left[\frac{a}{\ln\sigma_1} \exp\left(-\frac{\left(\ln d_p - \ln \bar{d}_{p1}\right)^2}{18 \ln^2 \sigma_1}\right) + \frac{1-a}{\ln\sigma_2} \exp\left(-\frac{\left(\ln d_p - \ln \bar{d}_{p2}\right)^2}{18 \ln^2 \sigma_2}\right) \right] \quad (2.3)$$

donde los subíndices 1 y 2 representan las dos modas y a es un parámetro de ajuste que expresa la separación entre las dos modas.

2.4. NATURALEZA FRACTAL

2.4.1. INTRODUCCIÓN

En la naturaleza se encuentran multitud de formas irregulares y fragmentadas que no solo presentan un grado superior de complejidad, sino que ésta se da a un nivel completamente diferente. El número de escalas de longitud, es a efectos prácticos, infinito.

La existencia de estas formas que *Euclides* descarta por “informes”, hizo concebir y desarrollar una nueva geometría de la naturaleza, que permite describir muchas de las formas irregulares y fragmentadas que nos rodean, a las que se llaman *fractales*. Las más útiles implican *azar*, y tanto sus regularidades como irregularidades son estadísticas. También se encuentran las llamadas *escalante*, que son aquellas que su grado de irregularidad y/o fragmentación es idéntico a todas las escalas. El concepto de *dimensión fractal* también aparece relacionado con estas formas. La geometría fractal, como tal, data de 1975, pero muchos de sus útiles o conceptos son anteriores.

Fractal es una palabra acuñada por el francés B. Mandelbrot en 1975 para resumir bajo un solo nombre una gran familia de objetos que han tenido un papel histórico en el desarrollo de la matemática pura. Esta gran revolución separa la matemática clásica del siglo XIX de la matemática moderna del XX. La matemática clásica está enraizada en las estructuras regulares de la geometría de *Euclides* y en la evolución continua característica de la dinámica de *Newton*. La revolución se produjo al descubrir estructuras matemáticas que no encajaban en los patrones de *Euclides* y *Newton*. Estas nuevas estructuras fueron consideradas “patológicas” y a medida que iban apareciendo más y más fue

necesario designarlos. Así fue como, Mandelbrot acuñó el término fractal a partir del adjetivo latino *fractus* cuyo significado es “irregular”, y cuyo verbo correspondiente *frangere* significa “romper en pedazos”.

2.4.2. DEFINICIÓN DEL FRACTAL Y DE LA DIMENSIÓN FRACTAL

Según la RAE fractal se considera a *toda figura plana o espacial, compuesta de infinitos elementos, que tiene la propiedad de que su aspecto y distribución estadística no cambian cualquiera que sea la escala con la que se observe*, por lo que si dividimos un fractal en partes, cada una de esas partes es muy parecida o idéntica al todo original, y esto se repite infinitamente. Para el caso que dicha definición se cumpla pero de forma finita, podemos decir que se trata de un elemento cuasi-fractal, como ocurre en un gajo de uvas, un brócoli o en las partículas diésel. Es un término creado en 1975 por el francés B. Madelbrot.

Los matemáticos se dieron cuenta de que no es posible una comprensión correcta de lo irregular y lo fragmentado si se define la *dimensión* como número de coordenadas. Como todos los grandes progresos intelectuales, el final de esta historia admite diversas interpretaciones.

El hecho de que los fractales elementales sean dimensionalmente discordantes puede servir para dar contenido matemático al concepto hasta ahora intuitivo de fractal. Si nos centramos en dos definiciones que asignan, a cada conjunto del espacio euclídeo \mathbb{R}^E , y con independencia de lo patológico que sea, un número real que por razones intuitivas y formales merece ser llamado “su dimensión”. La más intuitiva de dichas definiciones es la dimensión topológica según Brouwer [39], Lebesgue [40], Menger [41] y Urysohn [42]. Se denota por D_T . La segunda dimensión fue formulada por Hausdorff (1919), [43] y Besicovitch [44] le dio la forma final. Se denota por D .

Siempre que se trabaje en el espacio euclideo \mathbb{R}^E , tanto D_T como D toman valores comprendidos entre 0 y E , pero aquí se acaban las analogías. Mientras D_T es siempre un entero, D no tiene por qué serlo, así ambas dimensiones no tienen por qué coincidir.

$$D \geq D_T \tag{2.4}$$

Para todas las figuras euclídeas $D=D_T$, pero para todos los conjuntos “irregulares” se satisface $D>D_T$. Tales conjuntos son los llamados *fractales* cuya definición es la siguiente:

Un fractal es un conjunto cuya dimensión de Hausdorff-Besicovitch es estrictamente mayor que su dimensión topológica.

Los conjuntos con D no entera son fractales. Sin embargo, algunos fractales pueden tener D enteros. El hecho sorprendente de que D no tenga que ser necesariamente un entero merece ser reflejado en la terminología. Si se usa el término *fracción* en sentido amplio, como sinónimo de número real no entero, algunos de los valores de D anteriormente expuestos son fraccionarios; así pues, a menudo se llama *dimensión fraccionaria* a la dimensión de Hausdorff-Besicovitch. Ahora bien, D puede tomar valores enteros estrictamente mayores que D_T . En este caso, se dirá que D es una *dimensión fractal*.

2.4.3. HOMOGENEIDAD ESPACIAL, INVARIANCIA POR CAMBIO DE ESCALA Y AUTOSEMEJANZA

La distribución homogénea sobre la recta, el plano o el espacio tienen dos propiedades muy interesantes. Es invariante por traslaciones, y es invariante por cambio de escala. Al pasar a los fractales, hay que modificar o y/o restringir el alcance de estas invariancias. Por tanto, los mejores fractales son los que presentan el máximo de invariancia.

La mayoría de fractales son invariantes por traslación y también invariantes según ciertos cambios de escala. Se dice que son *escalantes*. Un fractal que sea invariante por la transformación geométrica de semejanza se dice *autosemejante*.

En la expresión *fractal escalante* se considera *escalante* que indica orden estricto y *fractal* que suena a desorden e irregularidad.

No hay que malinterpretar la motivación que nos impulsa a suponer la homogeneidad y la invariancia por cambio de escala. Aquí, como en la geometría ordinaria de la naturaleza, nadie cree que el mundo sea estrictamente homogéneo ni escalante. La geometría ordinaria estudia las rectas como caso preliminar más simple. También la mecánica contempla el movimiento rectilíneo y uniforme como un simple primer paso.

Igual ocurre con los *fractales escalantes*, pero aquí este primer paso es más lento, ya que el papel de la línea recta lo juega ahora una multitud de posibilidades distintas. Dichos fractales, se limitan a dar una primera aproximación de las formas naturales que se quiere tratar. Lo que resulta sorprendente es que dichas primeras aproximaciones sean tan notablemente razonables.

Tras acabar con las líneas, Euclides aborda formas con otras invariancias más ricas, comúnmente denominadas "simetrías".

Los fractales no escalantes imagen de sí mismas están íntimamente relacionados con los temas más refinados y difíciles del análisis matemático

clásico. Y, en contra del tópico de que el análisis es un campo muy austero, estos fractales suelen resultar de una belleza inesperada.

Un primer tipo de fractales serían las curvas de dimensión fractal mayor que 1, como un tramo de costa. Distintas partes de la costa, consideradas por separado dan valores distintos de D , por lo que la D da una idea de longitud.

Para entender la dimensión fractal D , se obvian los fenómenos naturales, que no se pueden controlar, a las construcciones geométricas, que se pueden modificar.

Felix Hausdorff se inspiró en el hecho de que el perímetro de un polígono se calcula sumando las longitudes de sus lados. Se podría decir que estas longitudes están elevadas a la potencia $D=1$, que es la dimensión euclídea de la recta. Análogamente, el área encerrada en el interior de un polígono se calcula embaldosándolo con cuadrados y sumando los lados de los cuadrados elevados a la potencia $D=2$, la dimensión euclídea del plano. Si se usara la potencia equivocada, el resultado no daría la información correcta.

2.4.4. RELACIÓN ENTRE LONGITUD Y ÁREA

Del hecho de que la longitud de la circunferencia de radio R valga $2\pi R$ y que el área del círculo correspondiente sea πR^2 , se sigue que

$$(\text{longitud}) = 2\pi^{\frac{1}{2}}(\text{área})^{\frac{1}{2}} \quad (2.5)$$

Para los cuadrados la relación correspondiente es

$$(\text{longitud}) = 4(\text{área})^{\frac{1}{2}} \quad (2.6)$$

Y, en general, cada familia de figuras planas corrientes, geoméricamente semejante y de tamaños distintos, la razón $(\text{longitud})/(\text{área})^{1/2}$ es una constante determinada por la forma común de todas ellas.

En el espacio ($E=3$), la longitud, el $(\text{área})^{1/2}$ y el $(\text{volumen})^{1/3}$ dan evaluaciones alternativas del tamaño lineal de la figura, y la razón entre dos cualesquiera de ellas es un parámetro de forma, independiente de las unidades de medida.

La equivalencia de distintas medidas del tamaño lineal es útil en muchas aplicaciones. Y su generalización a sus magnitudes tiempo y masa es la base de una técnica muy potente que los físicos conocen como “análisis dimensional”.

No obstante, esta equivalencia entre distintos tamaños lineales resulta insidiosamente escurridiza en un número de casos cada vez mayor. Por ejemplo, para el cerebro de los mamíferos se tiene

$$(\text{volumen})^{\frac{1}{3}} \propto (\text{área})^{\frac{1}{D}} \quad (2.7)$$

con $D \approx 3$, muy superior al valor 2 que se presupone. En el caso de las cuencas del drenaje fluvial, Hack (1957), [45], midió la longitud a lo largo del río principal y encontró

$$(\text{área})^{\frac{1}{2}} \propto (\text{longitud})^{\frac{1}{D}} \quad (2.8)$$

con D definitivamente superior al valor previsto 1. Los autores interpretaban que este resultado implicaba que las cuencas fluviales no eran autosemejantes, siendo más alargadas las mayores y más rechonchas las menores. Por desgracia esta interpretación contradice la evidencia.

Se va a generar una nueva relación fractal entre la longitud y el área.

Relación fractal longitud-área

Para precisar más el argumento se considera un conjunto de islas geoméricamente semejantes con costas fractales de dimensión $D > 1$. En este contexto la razón estándar $(\text{longitud})/(\text{área})^{1/2}$ es infinita, pero tiene un equivalente fractal útil. Se denomina *G-longitud* a la longitud de la costa obtenida con una regla de longitud G , y *G-área* a la superficie de la isla medida en unidades de G^2 . Teniendo en cuenta que la dependencia de *G-longitud* respecto a G es no estándar, pero que la de *G-área* sí lo es, se define la razón generalizada

$$(G\text{-longitud})^{\frac{1}{D}} / (G\text{-área})^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

Esta razón vale lo mismo para todas las islas geoméricamente semejantes.

En consecuencia hay dos maneras de evaluar el tamaño lineal de cada isla en unidades de G : la expresión estándar $(G\text{-área})^{1/2}$ y también la no estándar $(G\text{-longitud})^{1/D}$.

Si se sustituye la regla de longitud G por otra de longitud G' , la nueva razón entre los tamaños lineales alternativos es

$$(G'\text{-longitud})^{\frac{1}{D}} / (G'\text{-área})^{\frac{1}{2}} \quad (2.10)$$

que difiere del anterior en un factor $(G'/G)^{(1/D)-1}$.

La razón entre tamaños lineales varía de un conjunto de figuras mutuamente semejantes a otra, tanto si son fractales como si no lo son. Por lo que cuantifica un aspecto de la forma de las figuras.

La relación longitud-área se puede utilizar para estimar la dimensión fractal de una curva que delimita un dominio estándar.

2.5. MORFOLOGÍA DE LOS AGLOMERADOS

2.5.1. GEOMETRÍA FRACTAL

La geometría fractal es aquella que tienen ciertos cuerpos que son autosemejantes en forma. Por tanto un cuerpo es de geometría fractal cuando cualquier parte del mismo presenta una geometría muy parecida o idéntica al todo. Se puede subdividir el cuerpo original en muchos subcuerpos y estos a su vez en otros, y así sucesivamente, de manera que todos tienen geometría autosemejante, es decir todos son parecidos o iguales en forma. En el mundo vegetal es frecuente observar geometrías fractales que iteran su autosimilitud hasta 8 y 9 veces, [46]. Por ejemplo, en la figura 2.5 se observa cómo cada cono del broccoli es semejante a los conos que a su vez lo componen.



Figura 2.5. Fotografía de un broccoli. Ejemplo de una forma fractal.

Recogiendo las ideas de Lewis Fry Richardson, publicadas en 1961, B.B. Mandelbrot, [7], generalizó el concepto de geometría fractal, le dio nombre y desarrolló el soporte matemático necesario para cuantificar el carácter fractal de dicha geometría, por medio de la dimensión fractal.

2.5.2. LEY DE POTENCIA. DIMENSIÓN FRACTAL DE UN AGLOMERADO

En la figura 2.6 se muestra un aglomerado típico de hollín generado en un motor diesel. El aglomerado está compuesto por un número finito de partículas primarias, n_{po} , [47]. Estas partículas primarias suelen ser tratadas como esféricas de diámetro característico y constante d_{po} , [48], si bien esto es solo una aproximación, como se aprecia en la figura 2.10, o como argumentan otros autores como Bonczyk, P.A. *et al*, [49].

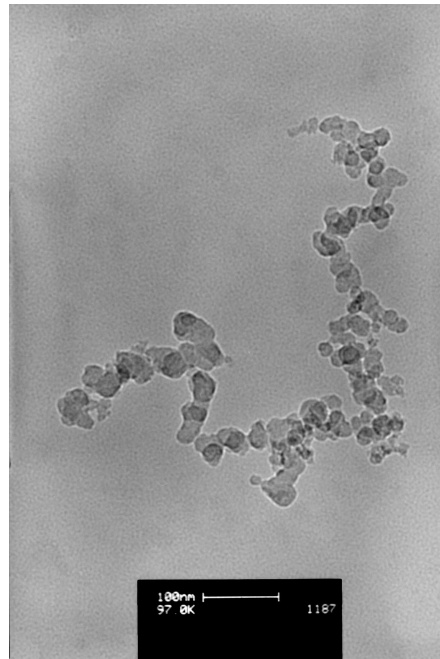


Figura 2.6. Típica partícula diesel fotografiada con TEM.

Conforme la distancia entre cualquier zona de un aglomerado respecto a su centro de gravedad aumenta, la probabilidad de que en esa zona genérica exista parte del aglomerado, disminuye. Esta probabilidad se cuantifica estadística-mente mediante la función de autocorrelación, [8]. En el caso en que el aglomerado tenga similitud en escala, el decrecimiento de la función de autocorrelación puede ser cuantificado mediante un exponente negativo que afecte a la distancia de cualquier punto del aglomerado respecto su centro de gravedad, [50] y [29].

$$c(r) = r^{-B} \quad (2.11)$$

La ecuación (2.11) es una de las expresiones típicas de la función de autocorrelación. El número de partículas primarias distanciadas r del centro de gravedad del aglomerado es la suma de todas las partículas contenidas en la

superficie de la esfera de radio r y centrada en el centro de gravedad del aglomerado, por la probabilidad de que esas partículas estén en ese lugar.

$$n_{po} = \int_0^R 4\pi r^2 r^{-B} dr \quad (2.12)$$

donde R es el radio máximo en el que puede existir alguna partícula primaria y n_{po} es el número de partículas primarias que contiene el aglomerado. Integrando la ecuación (2.12) se puede obtener el número de partículas primarias que contiene el aglomerado, resultando la siguiente proporcionalidad.

$$n_{po} \sim R^{3-B} \quad (2.13)$$

En realidad, el número de partículas primarias en el aglomerado es una variable discreta, y es por eso por lo que la igualdad de la ecuación (2.12) no es rigurosa. Se define la dimensión fractal del aglomerado como el exponente de la ecuación (2.13). La dimensión fractal es linealmente opuesta al exponente B . Un cambio rápido en la relación de decrecimiento de la función de autocorrelación provoca dimensiones fractales altas. El concepto de dimensión fractal, también denominado dimensión de Hausdorff, fue, como ya se ha dicho, inicialmente desarrollado y aplicado por B.B. Mandelbrot [7].

$$n_{po} \sim R^{D_f} \quad (2.14)$$

Esta ecuación se encuentra experimentalmente contrastada y muestra que el número de partículas primarias es proporcional al tamaño característico del aglomerado, R . En realidad la dimensión fractal se define para cuerpos de geometría fractal, es decir, semejantes a las fracciones que los componen de manera infinita –autosemejantes-. En el caso de los aglomerados de hollín el número de posibles subdivisiones autosemejantes es finito, ya que en algún momento el aglomerado que queda en realidad es una partícula primaria, que no es autosemejante al aglomerado inicial. Por esta razón la denominación que utilizan diversos autores como A.M. Brasil *et al* [51], A.V. Filippov *et al* [10], S. Manickavasagam *et al* [52], G. Skillas *et al* [53] y [54], M.K. Wu *et al* [55] o G. Yang *et al* [56] para describir las partículas de hollín es la de ‘dimensión como fractal’ (*fractal-like dimension*), o también cuasi-fractal. El sufijo comparativo hace referencia a que la ley de potencia, ecuación (2.14), aplicable estrictamente a las geometrías fractales, también es aplicable en este caso. Además, los aglomerados de hollín son estructuras fractales desordenadas, a diferencia de otras estructuras ordenadas (ver figura 2.5) en las que las subdivisiones autosemejantes son predecibles.

El valor de la dimensión fractal depende del proceso de formación del aglomerado. Para aglomerados compactos, la dimensión fractal tiende a tres,

mientras que para aglomerados cuya estructura se parezca a una cadena alargada, la dimensión fractal tiende a la unidad.

Aparte del interés intrínseco del conocimiento de la dimensión fractal de un aglomerado, por cuanto que cuantifica su irregularidad, la integración de la función de autocorrelación a todo lo largo del espacio alrededor del aglomerado permite estimar el número de partículas primarias que componen el aglomerado, como se ha mostrado en el párrafo anterior. Esta estimación puede ser expresada mediante la ley de potencia si el aglomerado es suficientemente grande, [8] y [57]. La aplicabilidad de la ley de potencia para aglomerados pequeños con un número de partículas primarias menor a 200, como suele ser el caso de las partículas diesel, fue demostrado por C.M. Megaridis *et al* [58] y ha sido utilizado por numerosos autores para la caracterización del hollín, [50], [59], [60], [61], [62] y [63].

Para hacer operativa la ecuación (2.14), son habituales en la bibliografía las siguientes operaciones:

- El diámetro característico de la partícula utilizado en la ley de potencias debe ser indicativo de su tamaño, con el fin de extender hasta él la integración planteada en la ecuación (2.12). Se ha tomado como diámetro característico el diámetro de giro por ser el más empleado en la bibliografía, [29], si bien podría tomarse igualmente el diámetro que circunscribe la partícula, [64]. Además, el diámetro de giro puede ser fácilmente obtenido a partir de las imágenes microscópicas.
- En la ecuación (2.14) la parte de la izquierda de la ley de potencia es el número de partículas primarias que componen el aglomerado. Hace falta adimensionalizar el diámetro de giro, para dar consistencia a la ecuación en cuanto a unidades. El parámetro de adimensionalización elegido es el diámetro medio de las partículas primarias, d_{p0} , [55].
- Para eliminar la proporcionalidad en la ecuación (2.14) se introduce un factor en la parte de la derecha, denominado prefactor de la ley de potencias.

Con las tres indicaciones anteriores, la ecuación (2.14) queda con la estructura utilizada por la mayoría de autores. La ecuación (2.15) es la que en esta tesis se denomina ley de potencia.

$$n_{po} = k_f \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f} \quad (2.15)$$

donde k_f es el prefactor de la ley de potencia, n_{po} es el número de partículas primarias que compone el aglomerado, d_{po} es el diámetro medio de las partículas primarias y d_g es el doble del radio de giro del aglomerado, que es lo que se define como diámetro de giro. En la bibliografía se han dado muchos valores diferentes al prefactor de la ley de potencia. Básicamente, depende de la naturaleza de los aglomerados, del número de partículas primarias que lo componen o del diámetro característico utilizado para describir el aglomerado, que en este caso es el diámetro de giro.

2.6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Ballesteros, R. (2002). Análisis experimental de las emisiones de partículas de un motor diesel con combustibles convencionales y alternativos. *Tesis Doctoral*, Universidad de Castilla-La Mancha.
- [2] Kim, D-H.; Gautam, M.; Gera, D. (2001). On the prediction of concentration variations in a dispersing heavy-duty truck exhaust plume using $k-\epsilon$ turbulent closure. *Atmospheric Environment* **35**, 5267-5275.
- [3] Siegmann, K.; Scherrer, L.; Siegmann, H.C. (1999). Physical and chemical properties of airborne nanoscale particles and how to measure the impact on human health. *Journal of Molecular Structure (Techoem)* **458**, 191-201.
- [4] APHEIS (Air Pollution and Health: A European Information System) (2004) Third year report, 2002-2003. *Institut de Veille Sanitaire*, Saint-Maurice. European Commission.
- [5] Kittelson, D.B. (1998). Engines and nanoparticles: a review. *Journal of Aerosol Science* **29**, 575-588.
- [6] Meakin, P.; Donn, B.; Mulholland, G.W. (1989). Collisions between point masses and fractal aggregates. *Langmuir* **5**, 510-518.
- [7] Mandelbrot, B.B. (1983). The fractal geometry of nature. *W.H. Freeman & Co*, New York.
- [8] Samson, R.J.; Mulholland, G.W.; Gentry, J.W. (1987). Structural analysis of soot agglomerates. *Langmuir* **3**, 272-281.
- [9] Van Gulijk, C.; Marijnissen, J.C.M.; Makkee, M.; Moulijn, J.A.; Schmidt-Ott, A. (2004). Measuring diesel soot with a scanning mobility particle

- sizer and an electrical low-pressure impactor: performance assessment with a model for fractal-like agglomerates. *Journal of Aerosol Science* **35**, 633-655.
- [10] Filippov, A.V.; Zurita, M.; Rosner, D.E. (2000). Fractal-like aggregates: Relation between morphology and physical properties. *Journal of Colloid and Interface Science* **229**, 261-273.
- [11] Lee, K.O.; Zhu, J.; Ciatti, S.; Yozgatligil, A.; Choi, M. Y. (2003). Sizes, graphitic structures and fractal geometry of light-duty diesel engine particulates. *SAE paper* 2003-01-3169.
- [12] Donalson, K.; Li, X.Y.; MacNee, W. (1998). Ultrafine (Nanometre) particle mediated lung injury. *Journal of Aerosol Science* **29**, 553-560.
- [13] Morawska, L.; Bofinger, N.D.; Kocis, L.; Nwankwoala, A. (1998). Submicrometer and supermicrometer particles from diesel vehicle emissions. *Environmental Science & Technology* **32**, 2033-2042.
- [14] Desantes, J.M.; Bermúdez, V.; García, J.M.; Fuentes, E. (2005). Effects of current engine strategies on the exhaust aerosol particle size distribution from a heavy-duty diesel engine. *Journal of Aerosol Science* **36**, 1251-1276.
- [15] Morawska, L.; Hofmann, W.; Hitchins-Loveday, J.; Swanson, C.; Mengersen, K. (2005). Experimental study of the deposition of combustion aerosols in the human respiratory tract. *Journal of Aerosol Science* **36**, 939-957.
- [16] Oberdörster, G. (2001). Pulmonary effects of inhaled ultrafine particles. *International Archives of Occupational and Environmental Health* **74**, 1-8.
- [17] Seaton, A.; MacNee, W.; Donalson, K.; Godden, D. (1995). Particulate air pollution and acute health effects. *The Lancet* **345**, 176-178.
- [18] Benner, B.A.; Bryner, N.P.; Wise, S.A.; Mulholland, G.W.; Lao, R.C.; Fingas, M.F. (1990). Polycyclic aromatic hydrocarbons emissions from the combustion of crude oil on water. *Environmental Science and Technology* **24**, 1418-1427.
- [19] Przybilla, K.R. (2002). Investigation of particles from combustion with special consideration of elemental carbon. *Ph.D. Thesis*, Swiss Federal Institute of Technology Zurich.
- [20] Pettersson, A.; Lovejoy, E.R.; Brock, C.A.; Brown, S.S.; Ravishankara, A.R. (2004). Measurement of aerosol optical extinction at 532 nm with

- pulsed cavity ring down spectroscopy. *Journal of Aerosol Science* **35**, 995-1011.
- [21] Chameides, W.L.; Bergin, M. (2002). Soot takes center stage. *Science* **297**, 2214-2215.
- [22] Zhang, L.; Michelangeli, D.V.; Taylor, P.A. (2006). Influence of aerosol concentration on precipitation formation in low-level, warm stratiform clouds. *Journal of Aerosol Science* **37**, 203-217.
- [23] Ackerman, A.S.; Toon, O.B.; Stevens, D.E.; Heymsfield, A.J.; Ramanathan, V.; Welton, E.J. (2000). Reduction of tropical cloudiness by soot. *Science* **288**, 1042-1047.
- [24] Menon, S.; Hansen, J.; Nazarenko, L.; Luo, Y. (2002). Climate effects of black carbon aerosols in China and India. *Science* **297**, 2250-2253.
- [25] Ramanathan, V.; Crutzen, P.J.; Kiehl, J.T.; Rosenfeld, D. (2001). Aerosols, climate, and hydrological cycle. *Science* **294**, 2119-2124.
- [26] Cheremisin, A.A.; Vassilyev, Y.V.; Horvath, H. (2005). Gravitophoresis and aerosol stratification in the atmosphere. *Journal of Aerosol Science* **36**, 1277-1299.
- [27] Faxvog, F.R.; Roessler, D.M. (1978). Carbon aerosol visibility vs particle size distribution. *Applied Optics* **17**, 2612-2616.
- [28] Merola, S.S.; Gambi, G.; Allouis, C.; Beretta, F.; Borghese, A.; D'Alessio, A. (2001). Analysis of exhausts emitted by I.C. engines and stationary burners, by means of u.v. extinction and fluorescence spectroscopy. *Chemosphere* **42**, 827-834.
- [29] Friedlander, S.K. (2000). Smoke, Dust and Haze. Fundamentals of aerosol dynamics. *Oxford University Press, Inc.*, New York.
- [30] Fuchs, N.A. (1989). The Mechanics of Aerosol. *Dover Publications, Inc.*, New York.
- [31] Smekens, A.; Pauwels, J.; Berghmans, P.; Grieken, R.V. (1997). Correlation study between the aerodynamic diameter and the number of primary particles of soot aggregates by STEM. *Journal of Aerosol Science* **28**, S761-S762.
- [32] Hinds, W. (1982). Aerosol Technology – Properties, behaviour and measurement of airborne particles. *Wiley, Interscience*, New York.

- [33] Naumann, K.H. (2003). COSIMA-a computer program simulating the dynamics of fractal aerosols. *Journal of Aerosol Science* **34**, 1371-1397.
- [34] Park, K.; Cao, F.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2003). Relationship between particle mass and mobility for diesel exhaust particles. *Environment Science and Technology* **37**, 577-583.
- [35] Rogak, S.N.; Flagan, R.C.; Nguyen, H.V. (1993). The mobility and structure of aerosol agglomerates. *Aerosol Science and Technology* **47**, 25-47.
- [36] Whitby, K.T. (1978). The physical characteristics of sulfur aerosols. *Atmospheric Environment* **12**, 135-159.
- [37] Kittelson, D.B.; Watts, W.F.; Arnold, M. (1998). Review of diesel particulate matter sampling methods. Aerosol dynamics, laboratory and on-road studies. *University of Minnesota*.
- [38] Kazakov, A.; Frenklach, M. (1998). Dynamic modelling of soot particle coagulation and aggregation: Implementation with the method of moments and application to high-pressure laminar premixed flames. *Combustion and Flame* **114**, 484-501.
- [39] Brouwer, L.E.J. (1975). Collected works. Ed. A. Heyting and H. Freudenthal. New York. Elsevier North Holland.
- [40] Lebesgue, H. (1972). Oeuvres scientifiques. Genève: Enseignement Mathématique.
- [41] Menger, K. (1943). What is dimension?. *American Mathematical Monthly*, **50**, 2-7.
- [42] Urysohn, P. (1927). Mémoire sur les multiplicités cantoriennes. II: les lignes cantoriennes. *Verhandelingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen te Amsterdam*.
- [43] Hausdorff, F. (1919). Dimension and äusseres Mass. *Mathematische Annalen*, **79**, 157-179.
- [44] Besicovitch, A.S. (1934). On rational approximation to real numbers. *Journal of the London Mathematical Society*, **9**, 126-131.
- [45] Hack, J.T. (1957). Studies of longitudinal streams in Virginia and Maryland. U.S. *Geological Survey Professional Papers*, **294B**.

- [46] Wagensberg, J. (2004). La rebelión de las formas, o cómo perseverar cuando la incertidumbre aprieta. *Ed. Tusquets*, Colección Metatemas, 84. Barcelona.
- [47] Medalia, A.I.; Heckman, F.A. (1969). Morphology of aggregates-II. Size and shape factors of carbon black aggregates from electron microscopy. *Carbon* **7**, 567-568.
- [48] Tian, K.; Liu, F.; Thomson, K.A.; Snelling D.R.; Smallwood, G.J.; Wang, D. (2004). Distribution of the number of primary particles of soot aggregates in a nonpremixed laminar flame. *Combustion and Flame* **138**, 195-198.
- [49] Bonczyk, P.A.; Hall, R.J. (1991). Fractal properties of soot agglomerates. *Langmuir* **7**, 1274-1280.
- [50] Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1995). Analysis of fractal cluster morphology parameters: structural coefficient and density autocorrelation function Cutoff. *Journal of Colloid and Interface Science* **171**, 470-473.
- [51] Brasil, A.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1999). A recipe for image characterization of fractal-like aggregates. *Journal of Aerosol Science* **30**, 1379-1389.
- [52] Manickavasagam, S.; Mengüç, M.P. (1997). Scattering matrix elements of fractal-like soot agglomerates. *Applied Optics* **36**, 1337-1351.
- [53] Skillas, G.; Künzel, S.; Burtscher, H.; Baltensperger, U.; Siegmann, K. (1998). High fractal-like dimension of diesel soot agglomerates. *Journal of Aerosol Science* **29**, 411-419.
- [54] Skillas, G.; Burtscher, H.; Siegmann, K.; Baltensperger, U. (1999). Density and fractal-like dimension of particles from a laminar diffusion flame. *Journal of Colloid and Interface Science* **217**, 269-274.
- [55] Wu, M.K.; Friedlander, S.K. (1993). Note on the power law equation for fractal-like aerosol agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **159**, 246-248.
- [56] Yang, G.; Biswas, P. (1999). Computer simulation of the aggregation and sintering restructuring of fractal-like clusters containing limited numbers of primary particles. *Journal of Colloid and Interface Science* **211**, 142-150.
- [57] Botet, R.; Jullien, R. (1988). A theory of aggregating systems of particles: The clustering of clusters process. *Annales de Physique* **13**, 153-221.

- [58] Megaridis, C.M.; Dobbins, R.A. (1990). Morphological description of flame-generated materials. *Combustion Science and Technology* **71**, 95-109.
- [59] Gorbunov, B.; Clarke, A.G.; Hamilton, R.S. (1999). Coagulation of soot particles and fractal dimension. *Journal of Aerosol Science* **30**, S445-S446.
- [60] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Kang, J.; Bae, C.; Shin, H. (2002). Morphological investigation of the microstructure, dimensions, and fractal geometry of diesel particulates. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 647-653.
- [61] Zurita-Gotor, M.; Rosner, D.E. (2002). Effective diameters for collisions of fractal-like aggregates: recommendations for improved aerosol coagulation frequency predictions. *Journal of Colloid and Interface Science* **255**, 10-26.
- [62] Zhu, J.; Lee, K.O.; Sekar, R.; Choi, M.Y. (2003). Morphological study of the particulate matter from a light-duty diesel engine. *Proceedings of the third joint meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute*. University of Illinois. Chicago.
- [63] Park, K.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2004). Structural properties of diesel exhaust particles measured by Transmission Electron Microscopy (TEM): Relationships to particle mass and mobility. *Aerosol Science and Technology* **38**, 881-889.
- [64] García-Ybarra, P.L.; Castillo, J.L.; Rosner, D.E. (2006). Drag on a large spherical aggregate with self-similar structure: An asymptotic analysis. *Journal of Aerosol Science* **37**, 413-428.

Capítulo 3. El Prefactor de la Ley de Potencias.

3.1. INTRODUCCIÓN	37
3.2. EL PREFACTOR DE LA LEY DE POTENCIAS	38
3.3. DEFINICIONES PRELIMINARES. MOMENTO DE INERCIA Y DIÁMETRO DE GIRO	40
3.3.1. Momento de inercia.....	40
3.3.2. Diámetro de giro.....	42
3.4. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 1.....	43
3.4.1. Aglomerado en forma de cadena lineal	43
3.4.2. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas	48
3.4.3. Aglomerado en forma de cruz con tres ramas	54
3.4.4. Resumen.....	57
3.5. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 2.....	59
3.5.1. Aglomerado en forma de plano hexagonal compacto.....	59
3.5.2. Aglomerado formado por dos planos hexagonales compactos ortogonales	64
3.5.3. Aglomerado formado por tres planos hexagonales compactos ortogonales	67
3.5.4. Resumen.....	70
3.6. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 3.....	72
3.7. RESUMEN DE RESULTADOS	72
3.8. EXTENSIÓN A OTRAS CONFIGURACIONES DE EMPAQUETAMIENTO.....	75
3.9. MODELO PROPUESTO.	78
3.10. CONCLUSIONES	81
3.11. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	82

3.1. INTRODUCCIÓN

Los aglomerados están compuestos generalmente por partículas primarias de geométrica prácticamente esférica y de tamaños uniformes, en contacto unas con otras. Este es el caso, por ejemplo, de los aglomerados de grafito que emite un motor diesel típico. Las partículas primarias que componen el aglomerado, se disponen espacialmente de manera irregular, de tal forma que hacen que los aglomerados sean diferentes en tamaño, en compactación y en densidad aparente.

Con el crecimiento de la irregularidad de los aglomerados, aumenta su superficie, por lo que crece la capacidad de absorción de hidrocarburos, también aumenta la eficiencia a la extinción de luz provocando que aumente su opacidad y por tanto afecta directamente al calentamiento global de la tierra. Por otro lado la irregularidad de los aglomerados afecta al comportamiento aerodinámico de las partículas, de manera que cuanto más irregulares son, más probabilidad tienen de mantenerse en suspensión y por consiguiente más probable es inhalarlas, afectando, por tanto, seriamente a la salud pública. La irregularidad de los aglomerados contribuye notablemente al impacto medioambiental de los seres humanos.

Los aglomerados se consideran estructuras cuasi-fractales [1], de esta manera se puede cuantificar la irregularidad de los mismos mediante la dimensión fractal, D_f , como en un principio propuso Mandelbrot [2]. Además es aceptado por la comunidad científica que cuando el número de partículas primarias que componen el aglomerado es suficientemente elevado, éste puede ser caracterizado mediante la ley de potencias, [3]:

$$n_{po} = k_f \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f} \quad (3.1)$$

donde n_{po} es el número de partículas primarias, cuyo diámetro es d_{po} , que compone el aglomerado, k_f es el prefactor dimensional de la ley de potencias y d_g es el diámetro de giro del aglomerado.

Para estimar la dimensión fractal de una población de aglomerados del flujo de escape de un motor diesel se pueden utilizar dos caminos distintos:

- Obtener la pendiente de la línea recta de regresión, que se obtiene cuando se representa en un diagrama doblemente logarítmico el número de partículas primarias frente a la relación entre el diámetro de giro del aglomerado y el diámetro medio de las partículas primarias que componen el aglomerado, [4] y [5]. Este método necesita de una colección muy numerosa de

aglomerados, y finalmente da como resultado la dimensión fractal media de la población de aglomerados. En ningún caso se obtiene como resultado la dimensión fractal de un aglomerado independiente. Por otro lado al mismo tiempo que se obtiene la dimensión fractal media, también se obtiene el prefactor de la ley de potencias medio.

- Previamente estimar el prefactor de la ley de potencias por medio de modelos de aglomeración, [6] y [7], o por medio de modelos geométricos, [8] y [9], y posteriormente resolver la dimensión fractal de cada aglomerado observado de manera individual.

En ambos casos, el número de partículas primarias es una variable desconocida, ya que la geometría del aglomerado que se observa en el microscopio es plana, es decir se observa la proyección plana del aglomerado. Usualmente las imágenes son obtenidas con el microscopio electrónico de transmisión, conocido como TEM (*Transmission Electron Microscopy*) a partir de muestras de partículas del flujo de escape del motor obtenidas con técnicas termofóricas como se propone en Dobbins y Megaridis [10] y posteriormente validado por Rosner *et al* [11]. En estas imágenes no todas las partículas primarias por independientes pueden ser observadas, ya que muchas tienen alguna parte detrás de otras y por tanto no aparecen en la fotografía. Para estimar el número de partículas primarias debe establecerse una ecuación más, con la cual se determina el solape existente entre las partículas primarias y requiere de un análisis más preciso como se argumenta en Oh y Sorensen [12], pero este fenómeno se trata en el capítulo 4.

3.2. EL PREFACTOR DE LA LEY DE POTENCIAS

El prefactor de la ley de potencias es un parámetro clave en la caracterización morfológica de los aglomerados. Aglomerados con tamaño y dimensión fractal similar pueden tener formas muy diferentes. Esta diferencia puede ser caracterizada por el prefactor de la ley de potencias. Mientras que la dimensión fractal caracteriza la irregularidad y la clusterización de los aglomerados, ya que es un factor potencial, es decir es un exponente en la ley de potencias, el prefactor expresa cómo el espacio es llenado por la masa del aglomerado, independientemente del tamaño del aglomerado y cómo las partículas primarias son empaquetadas, Wu y Friedlander [13], téngase en consideración que no es un factor exponencial sino lineal. El prefactor puede ser asociado con la lagunaridad y con la porosidad de los aglomerados, Hu y Koylu [14].

En la literatura se ha encontrado una amplia dispersión en los valores del prefactor de la ley de potencias, como se refleja en la tabla 3.1 y se representa

en la figura 3.1. Esta alta dispersión puede ser asociada con la alta dispersión en las formas de los aglomerados. Como consecuencia de este hecho, es necesario tener en cuenta el prefactor como una variable más en el modelado de los aglomerados, igual que se hace con la dimensión fractal.

Sin embargo, muy pocos de los autores revisados han propuesto reglas o modelos de variación del prefactor de la ley de potencias. Sorensen y Roberts [15] así como Gmachowski [16] (quienes se refieren al prefactor como un coeficiente estructural) proponen variaciones en el prefactor como una función de la dimensión fractal y de la densidad de empaquetamiento (en el origen del aglomerado), y como una función de la dimensión fractal (en el crecimiento del aglomerado). Las ecuaciones propuestas asumen una compactación de tipo hexagonal-compacta y predicen los valores reflejados en la tabla 3.1, como puede verse en la fila en que aparecen estos autores.

Tabla 3.1. Revisión bibliográfica del prefactor de la ley de potencias.

Referencia	Aplicación	k_f	D_f
Meakin, P. (1984) [17]	Simulación con aglomerados en general.	1.05	1.74
Samson, R.J. <i>et al</i> (1987) [18]	Experimentos con hollín procedente de acetileno.	3.49 2.67	1.40 1.47
Mountain, R.D. y Mulholland, G.W. (1988) [19]	Simulación de hollín.	5.80	1.90
Megaridis, C.M. y Dobbins, R.A. (1990) [20]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de etileno.	2.18 1.80	1.62 1.74
Wu, M.K. y Friedlander, S.K. (1993) [13]	Simulación con aglomerados en general.	1.30	1.84
Puri, R. <i>et al</i> (1993) [21]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de etano.	9.00	1.74
Cai, J. <i>et al</i> (1995) [5]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de metano.	1.23	1.74
Köylü, Ü.Ö. <i>et al</i> (1995) [22]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de acetileno, propileno, etileno y propano.	8.50	1.82
Sorensen, C.M. and Roberts G.C. (1997) [15]	Simulación de hollín.	1.57- 1.81	1-3
Brasil, A.M. <i>et al</i> (2000) [23]	Simulación de hollín.	1.27	1.82
Lee, K.O. <i>et al</i> (2002) [24]	Experimentos con hollín de motores diesel	4.95	1.83

Gmachowski, L. (2002) [16]	Simulación con aglomerados en general.	0-2.15	1-3
Park, K. <i>et al</i> (2004) [25]	Experimentos con hollín de motores diesel.	1.91	1.75
Hu, B. and Köylü, Ü.Ö. (2004) [14]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de acetileno.	1.90	1.82
Neer, A. and Köylü, Ü.Ö. (2006) [26]	Experimentos con hollín procedente de motores diesel.	1.90	1.77
Ouf, F.X. <i>et al</i> (2008) [27]	Experimentos con hollín procedente de la combustión de acetileno, tolueno y polimetil metacrilato.	2.44	1.78

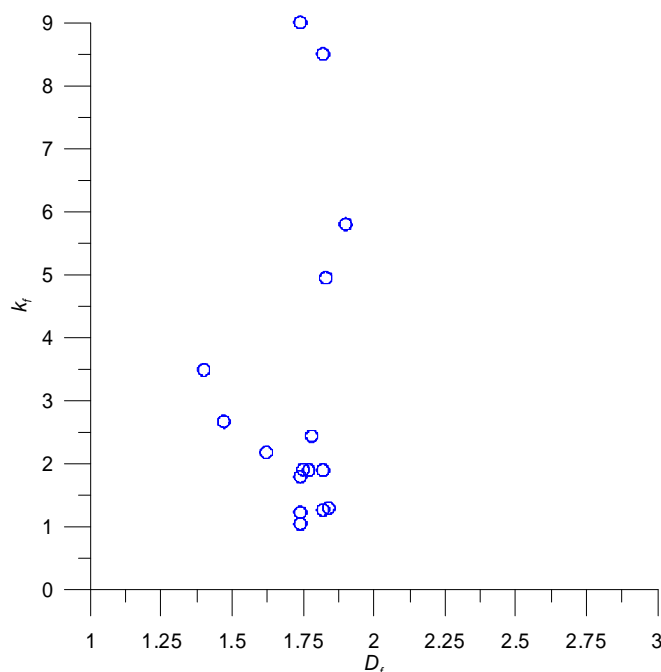


Figura 3.1. Prefactor de la ley de potencias frente a la dimensión fractal expuestos en la tabla 3.1.

3.3. DEFINICIONES PRELIMINARES. MOMENTO DE INERCIA Y DIÁMETRO DE GIRO.

3.3.1. MOMENTO DE INERCIA

El momento de inercia de un aglomerado con respecto a su centro de gravedad, I_G , es una extensión del concepto de momento de inercia con respecto a un eje, y es equivalente a la mitad de la suma de los momentos de inercia con

respecto a tres ejes ortogonales que intersectan en el centro de gravedad del aglomerado, Harrison y Neltleton [28].

El momento de inercia se puede calcular como la suma de la contribución de todos los elementos sólidos que componen el aglomerado, Tipler P.A. [29]:

$$I_G = \int r^2 dm \quad (3.2)$$

donde m es la masa del cuerpo sólido y r es el radio de cualquier punto del cuerpo con respecto al centro de gravedad del mismo. Se define el radio de giro de un cuerpo, r_g , como el radio de un anillo que tenga igual masa que el cuerpo en cuestión y el mismo momento de inercia, [29].

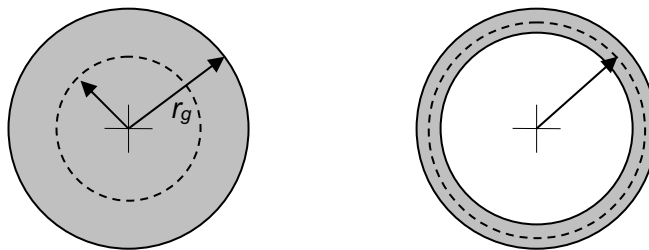


Figura 3.2. Representación de la proyección de una esfera y de un casquete esférico.

Según la definición anterior de radio de giro, la ecuación (3.2) en función del radio de giro queda:

$$I_G = m r_g^2 \quad (3.3)$$

Como se muestra en la figura 3.2 derecha, el radio geométrico del casquete esférico es igual que su radio de giro, ya que toda la masa del casquete esférico está a la distancia r_p desde el centro del mismo. En cambio, para la figura 3.2 izquierda, que corresponde a una esfera, el radio de giro es menor al radio geométrico de la esfera.

Con el teorema de Steiner se puede determinar el momento de inercia del cuerpo sólido respecto a cualquier punto del espacio, I_P , esté o no contenido en el cuerpo sólido. El teorema de Steiner se formula de la siguiente manera:

$$I_P = I_G + m r_{PG}^2 \quad (3.4)$$

donde r_{PG} es la distancia entre el centro de gravedad del cuerpo sólido y el punto desde el que se quiere determinar el momento de inercia del cuerpo.

La ecuación (3.2) aplicada a una partícula primaria esférica de radio r_{po} queda:

$$I_{G_{po}} = \int_0^{r_{po}} r^2 dm = \left\{ \begin{array}{l} dm = \rho dV \\ dV = 4\pi r^2 dr \end{array} \right\} = 4\pi\rho \int_0^{r_{po}} r^4 dr = \frac{4\pi}{5} \rho r_{po}^5 \quad (3.5)$$

donde ρ es la densidad del sólido que compone el aglomerado. La masa de la partícula primaria esférica es:

$$m_{po} = \frac{4\pi}{3} \rho r_{po}^3 \quad (3.6)$$

Sustituyendo la ecuación (3.6) en la ecuación (3.5) se obtiene el momento de inercia de la partícula primaria respecto su centro de gravedad, queda:

$$I_{G_{po}} = \frac{3}{5} m_{po} r_{po}^2 \quad (3.7)$$

Igualando la ecuación (3.7) a la ecuación (3.3) se puede obtener la relación que existe entre el radio de giro de una partícula esférica respecto su centro de gravedad y el radio geométrico de la misma.

$$I_{G_{po}} = \frac{3}{5} m_{po} r_{po}^2 = m_{po} r_g^2 \rightarrow r_g = \sqrt{\frac{3}{5}} r_{po} \quad (3.8)$$

Aplicando el teorema de Steiner, ecuación (3.4), se puede obtener el momento de inercia del aglomerado como la suma de los momentos de inercia de cada partícula primaria respecto el centro de gravedad del aglomerado. El momento de inercia del aglomerado en función del número de partículas primarias, n_{po} , de la localización de las partículas primarias y del tamaño de éstas queda:

$$I_p = \sum_{i=1}^{i=n_{po}} m_{po} \left(\frac{3}{5} r_{po}^2 + r_i^2 \right) = m_{po} \left(\frac{3}{5} n_{po} r_{po}^2 + \sum_{i=1}^{i=n_{po}} r_i^2 \right) \quad (3.9)$$

donde r_i es la distancia desde el centro de la partícula primaria al centro de gravedad del aglomerado.

3.3.2. DIÁMETRO DE GIRO

La hipótesis de la densidad uniforme permite, a partir de la conservación másica, suponer conservación en volumen, de manera que el número de partículas primarias contenido en el aglomerado es:

$$n_{po} = \frac{m_p}{m_{po}} = \frac{V_h}{V_{po}} \quad (3.10)$$

donde V_h es el volumen inherente de la partícula, es decir el volumen del aglomerado ocupado por la masa sólida, que para el caso de los aglomerados de hollín, sería el propio hollín. Si se define el diámetro de giro, d_g , como el doble del radio de giro, éste se puede obtener a partir del momento de inercia. Sustituyendo la ecuación (3.9) en la (3.3) y utilizando la ecuación (3.10) se obtiene el diámetro de giro:

$$d_g = 2 \sqrt{\frac{I_p}{m_p}} = 2 \sqrt{\frac{I_p}{n_{po} m_{po}}} = 2 \sqrt{\frac{3}{5} r_{po}^2 + \frac{\sum_{i=1}^{i=n_{po}} r_i^2}{n_{po}}} \quad (3.11)$$

Con la ecuación (3.11) se puede determinar el diámetro de giro del aglomerado conociendo la localización de las partículas primarias que lo componen, el radio geométrico de las partículas primarias y el número de partículas primarias que compone el aglomerado.

3.4. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 1

3.4.1. AGLOMERADO EN FORMA DE CADENA LINEAL

La estructura más elemental de un aglomerado con dimensión fractal igual a la unidad es la línea. En el caso de aglomerados, la dimensión fractal igual a la unidad es el límite cuando la dimensión longitudinal del aglomerado tiende a infinito o cuando las otras dos dimensiones son despreciables frente a la longitudinal del aglomerado.

Se define N como el número de estructuras elementales que constituyen el aglomerado. En este caso, los aglomerados estudiados en este apartado tienen un número de estructura elemental igual a la unidad, es decir, $N = 1$.

En principio los aglomerados con un número impar de partículas primarias deben ser tratados de manera diferente que los que están constituidos por un número par de partículas primarias. Ya que las distancias de los centros de gravedad de las partículas primarias al centro de gravedad del aglomerado es diferente, como se muestra en las figuras 3.3 y 3.4.

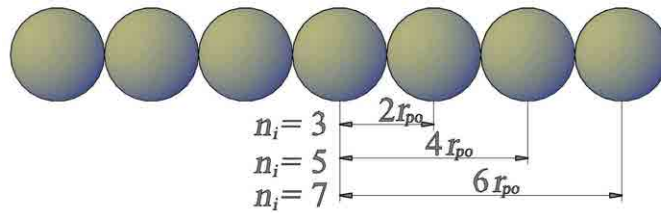


Figura 3.3. Aglomerado en cadena lineal con un número impar de partículas primarias.

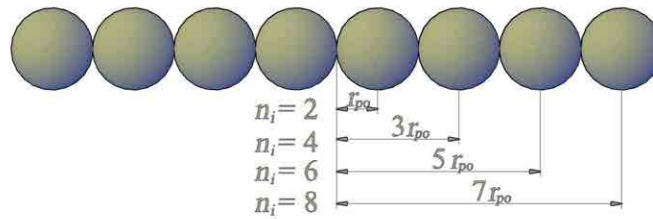


Figura 3.4. Aglomerado en cadena lineal con un número par de partículas primarias.

En el caso en el que el número de partículas primarias sea impar, el sumatorio de la ecuación (3.11) será extendido entre 1 y $(n_{po}-1)/2$ diámetros a cada lado del centro de gravedad. En el caso en el que el número de partículas primarias sea par, el sumatorio será extendido entre 0.5 y $(n_{po}-1)/2$ diámetros a cada lado del centro de gravedad. En ambos casos cada paso del sumatorio es un diámetro de la partícula primaria. Puesto que el diámetro de las partículas primarias se ha considerado constante por lo que puede salir fuera de la raíz, de manera que la ecuación (3.11) queda:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{2 \cdot \sum_{i=i_1}^{i_n} i^2}{n_{po}}} \quad (3.12)$$

Para obtener el resultado de la ecuación (3.12) hay que resolver antes el sumatorio que hay dentro de la raíz. Para resolver el sumatorio se va a utilizar una combinación de polinomios factoriales.

Empleando los números de Stirling, los polinomios factoriales de exponentes 1, 2, 3 y 4 son:

$$\begin{cases} k^{(1)} = k \\ k^{(2)} = k(k-1) = k^2 - k \\ k^{(3)} = k(k-1)(k-2) = k^3 - 3k^2 + 2k \\ k^{(4)} = k(k-1)(k-2)(k-3) = k^4 - 6k^3 + 11k^2 - 6k \\ \dots \end{cases} \quad (3.13)$$

Utilizando los polinomios factoriales expuestos en la ecuación (3.13), el factor i^2 de la ecuación (3.12) puede ser sustituido de la siguiente manera:

$$i^2 = i^{(2)} + i^{(1)} \quad (3.14)$$

Se puede sustituir el factor i^2 por una diferencia de una función, y , que evoluciona en el sumatorio de igual manera, es decir:

$$i^2 \equiv \Delta y_i \Rightarrow \begin{cases} \sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \sum_{i=i_1}^{i_n} \Delta y_i \\ \Delta y_i = i^{(2)} + i^{(1)} \end{cases} \quad (3.15)$$

En la ecuación (3.15) la función y se puede obtener por integración finita:

$$y_i = \frac{1}{3}i^{(3)} + \frac{1}{2}i^{(2)} \quad (3.16)$$

Por otro lado el sumatorio de la diferencia de la función y expuesto en la ecuación (3.15) puede ser resuelto de la siguiente manera:

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} \Delta y_i = y_{i_{n+1}} - y_{i_1} \quad (3.17)$$

El sumatorio de la ecuación (3.12) se resuelve sustituyendo la ecuación (3.16) en la ecuación (3.17) y ésta a su vez en la ecuación (3.15).

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \sum_{i=i_1}^{i_n} \Delta y_i = y_{i_{n+1}} - y_{i_1} = \left(\frac{1}{3}i_{n+1}^{(3)} + \frac{1}{2}i_{n+1}^{(2)} \right) - \left(\frac{1}{3}i_1^{(3)} + \frac{1}{2}i_1^{(2)} \right) \quad (3.18)$$

En la ecuación (3.18) al desarrollar los distintos polinomios factoriales quedan las siguientes expresiones:

$$\left(\frac{1}{3}i_{n+1}^{(3)} + \frac{1}{2}i_{n+1}^{(2)} \right) = \frac{(i_n + 1)i_n(i_n - 1)}{3} + \frac{(i_n + 1)i_n}{2} = \frac{i_n(i_n + 1)(2i_n + 1)}{6} \quad (3.19)$$

$$\left(\frac{1}{3}i_1^{(3)} + \frac{1}{2}i_1^{(2)}\right) = \frac{i_1(i_1-1)(i_1-2)}{3} + \frac{i_1(i_1-1)}{2} = \frac{i_1(i_1-1)(2i_1-1)}{6} \quad (3.20)$$

Por lo que sustituyendo las ecuaciones (3.19) y (3.20) en la (3.18) se obtiene el sumatorio:

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \frac{i_n(i_n+1)(2i_n+1)}{6} - \frac{i_1(i_1-1)(2i_1-1)}{6} \quad (3.21)$$

Concretando en los casos de este epígrafe, para el caso en que el número de partículas primaria es impar como se muestra en la figura 3.3, se tiene que:

$$\begin{cases} i_1 = 1 \\ i_n = \frac{n_{po} - 1}{2} \end{cases} \quad (3.22)$$

Sustituyendo las condiciones extremas expuestas en la ecuación (3.22) en la ecuación (3.21) se obtiene el valor el sumatorio de la ecuación (3.12) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 1)(n_{po})}{24} - \frac{1(1-1)(2-1)}{6} = \frac{n_{po}(n_{po}^2 - 1)}{24} \quad (3.23)$$

Para el otro caso en el que el número de partículas primarias es par como se muestra en la figura 3.4, se tiene que:

$$\begin{cases} i_1 = 0.5 \\ i_n = \frac{n_{po} - 1}{2} \end{cases} \quad (3.24)$$

Sustituyendo las condiciones extremas expuestas en la ecuación (3.24) en la ecuación (3.21) se obtiene el valor el sumatorio de la ecuación (3.12) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 1)(n_{po})}{24} - \frac{0.5(0.5-1)(1-1)}{6} = \frac{n_{po}(n_{po}^2 - 1)}{24} \quad (3.25)$$

Se obtiene la misma dependencia del sumatorio con respecto al número de partículas primarias, ecuación (3.23) y (3.25), y por tanto el valor del sumatorio es independiente de si el número de partículas primarias del aglomerado lineal es par o impar.

Sustituyendo la ecuación (3.23) o (3.25) en la ecuación (3.12) se obtiene la expresión con la que se puede determinar el diámetro de giro del aglomerado:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po}^2 - 1)}{12}} \quad (3.26)$$

El diámetro de giro obtenido en la ecuación (3.26) adimensionalizado con el diámetro de la partícula primaria se ha representado en la figura 3.5.

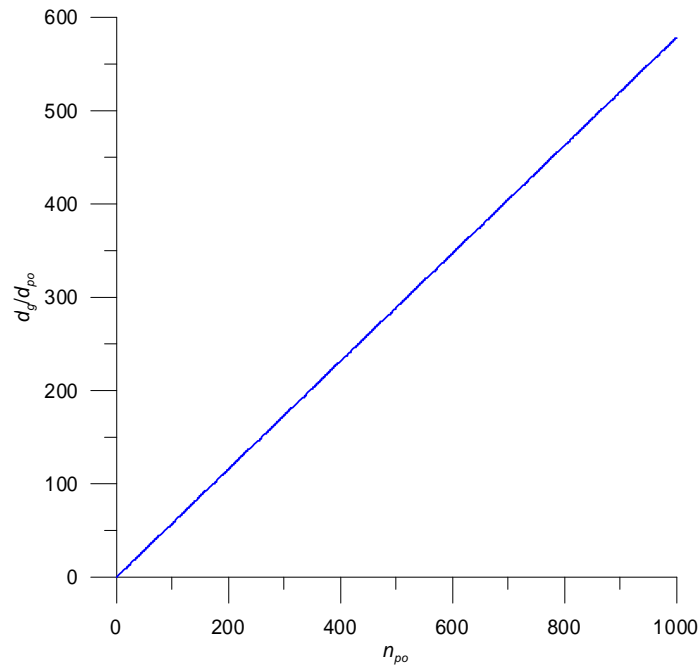


Figura 3.5. Diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro de la partícula primaria frente al número de partículas primarias para un aglomerado lineal.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.26) en la ecuación (3.1):

$$k_f (D_f \approx 1) = \frac{n_{po} d_{po}}{d_g} = \frac{n_{po}}{2 \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po}^2 - 1)}{12}}} = \frac{n_{po}}{\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{1}{3}(n_{po}^2 - 1)}} \quad (3.27)$$

Esta función del prefactor de la ley de potencias se representa en la figura siguiente.

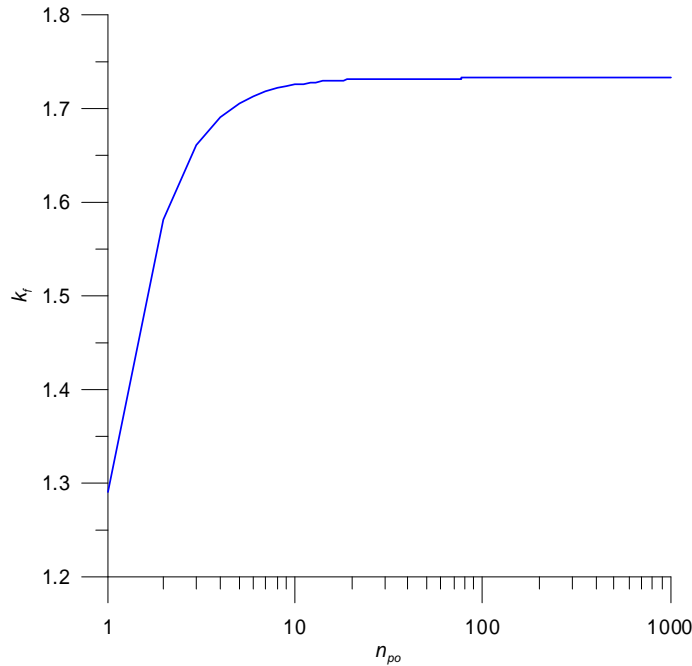


Figura 3.6. Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para una cadena lineal.

El aglomerado tiene una dimensión fractal igual a la unidad estrictamente cuando el número de partículas primarias tiende a infinito. En este caso, el tamaño de las partículas primarias llega a ser despreciable frente al tamaño del aglomerado:

$$k_f(D_f = 1) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \sqrt{3} \quad (3.28)$$

3.4.2. AGLOMERADO EN FORMA DE CRUZ CON DOS RAMAS

El aglomerado en forma de cruz (figuras 3.7 y 3.8) es un ejemplo más de aglomerados con dimensión fractal igual a la unidad, $D_f=1$, ya que el volumen crece linealmente conforme crece el diámetro exterior que circunscribe el aglomerado. En este caso el número de subestructura es 2, $N=2$. Como en el epígrafe 3.4.1, tienen que ser estudiados por separado el caso en el que el número de partículas primarias que compone el aglomerado es impar o par.

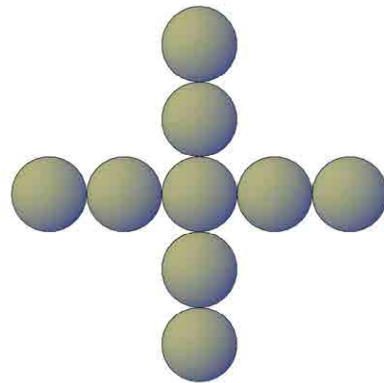


Figura 3.7. Aglomerado en forma de cruz con un número impar de partículas primarias.

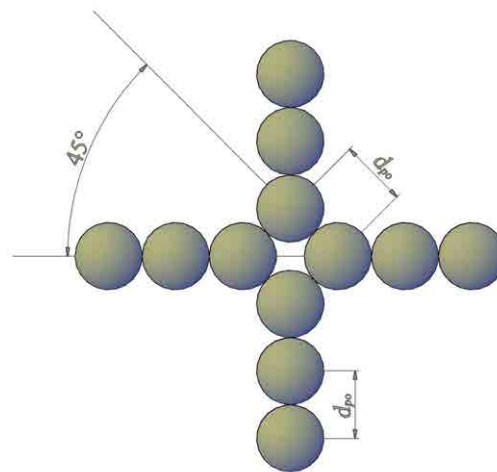


Figura 3.8. Aglomerado en forma de cruz con un número par de partículas primarias.

En ambos casos, el diámetro de giro tiene que ser obtenido a partir de la ecuación (3.11). Si el número de partículas primarias es impar, el sumatorio de la ecuación (3.11) será extendido entre 1 y $(n_{po}-1)/4$ diámetros en cada rama respecto del centro de gravedad del aglomerado. En el caso en el que el número de partículas primarias sea par, el sumatorio será extendido entre $2^{0.5}/2$ y $(n_{po}-4)/4+2^{0.5}/2$ diámetros en cada rama respecto del centro de gravedad. En ambos casos cada paso del sumatorio es un diámetro de la partícula primaria. Puesto que el diámetro de las partículas primarias se ha considerado constante por lo que puede salir fuera de la raíz, de manera que la ecuación (3.11) queda:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{4 \sum_{i=i_1}^{i_n} i^2}{n_{po}}} \quad (3.29)$$

Para el caso en que el número de partículas primaria que compone el aglomerado es impar como se muestra en la figura 3.7, el sumatorio tiene que ser extendido entre los siguientes valores:

$$\begin{cases} i_1 = 1 \\ i_n = \frac{n_{po} - 1}{4} \end{cases} \quad (3.30)$$

Sustituyendo las condiciones extremas expuestas en la ecuación (3.30) en la ecuación (3.21) se obtiene el valor el sumatorio de la ecuación (3.29) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 1)(n_{po} + 3)}{192} - \frac{1(1-1)(2-1)}{6} = \frac{(n_{po} + 3)(n_{po}^2 - 1)}{192} \quad (3.31)$$

Sustituyendo la ecuación (3.31) en la ecuación (3.29) se obtiene la expresión con la que se puede determinar el diámetro de giro del aglomerado cuando el número de partículas primarias es impar:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po}^2 - 1)(n_{po} + 3)}{48n_{po}}} \quad (3.32)$$

En este caso la evolución del diámetro de giro y el número de partículas primarias se representa

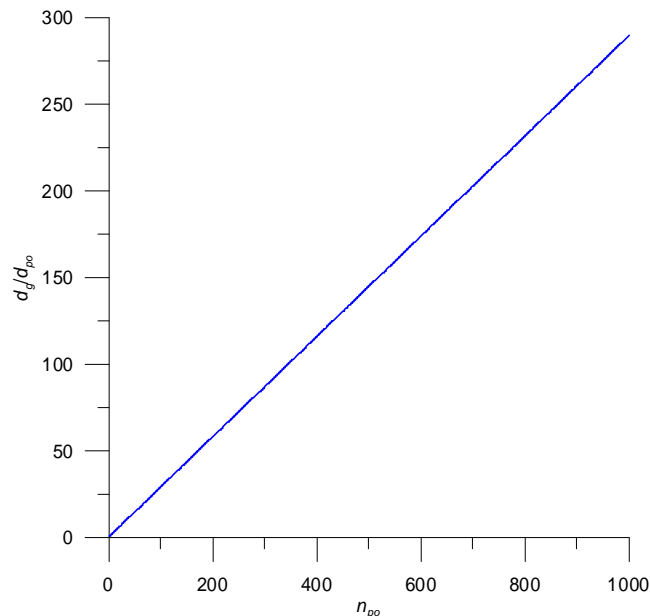


Figura 3.9. Diámetro de giro de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número impar de partículas primarias frente al número de partículas primarias.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.32) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po} d_{po}}{d_g} = \frac{n_{po}}{2 \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po}^2 - 1)(n_{po} + 3)}{48 n_{po}}}}$$

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po}}{\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{(n_{po}^2 - 1)(n_{po} + 3)}{12 n_{po}}}}$$
(3.33)

El prefactor obtenido en la ecuación (3.33) se ha representado en la figura 3.10.

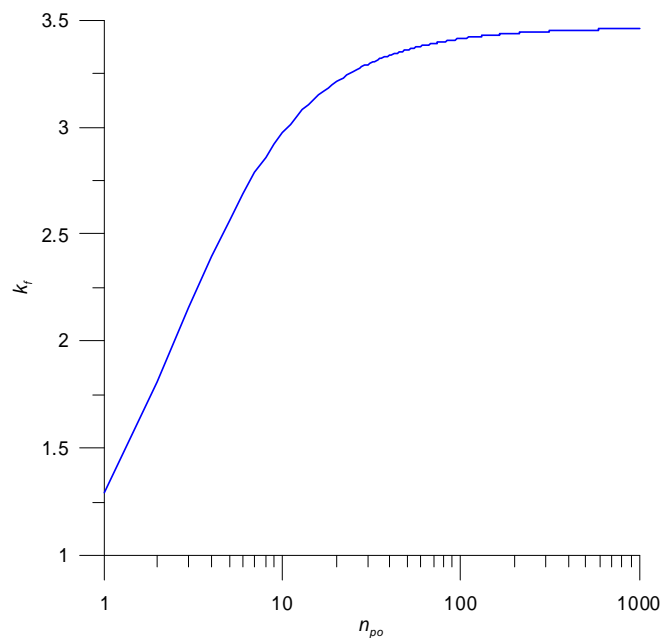


Figura 3.10. Evolución del prefactor de la ley de potencias de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número impar de partículas primarias frente al número de partículas primarias que lo compone.

El aglomerado tiene una dimensión fractal igual a la unidad estrictamente cuando el número de partículas primarias tiende a infinito. En este caso, el tamaño de las partículas primarias llega a ser despreciable frente al tamaño del aglomerado:

$$k_f(D_f = 1) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \sqrt{12} = 2\sqrt{3}$$
(3.34)

Por otro lado el caso en que el número de partículas primaria que compone el aglomerado es par como se muestra en la figura 3.8, el sumatorio tiene que ser extendido entre los siguientes valores:

$$\begin{cases} i_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} \\ i_n = \frac{n_{po} - 4}{4} + \frac{\sqrt{2}}{2} \end{cases} \quad (3.35)$$

Sustituyendo las condiciones extremas expuestas en la ecuación (3.35) en la ecuación (3.21) se obtiene el valor el sumatorio de la ecuación (3.29) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 = \frac{(n_{po} + 2\sqrt{2} - 4)(n_{po} + 2\sqrt{2})(n_{po} + 2\sqrt{2} - 2)}{192} - \frac{\sqrt{2}(\sqrt{2} - 2)(\sqrt{2} - 1)}{24} \quad (3.36)$$

Sustituyendo la ecuación (3.36) en la ecuación (3.29) se obtiene la expresión con la que se puede determinar el diámetro de giro del aglomerado cuando el número de partículas primarias es par:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{A_{n_{po}}}{48n_{po}}} \quad (3.37)$$

$$A_{n_{po}} = (n_{po} + 2\sqrt{2} - 4)(n_{po} + 2\sqrt{2})(n_{po} + 2\sqrt{2} - 2) - 8\sqrt{2}(\sqrt{2} - 2)(\sqrt{2} - 1)$$

El diámetro de giro obtenido en la ecuación (3.37) se ha representado en la figura 3.11.

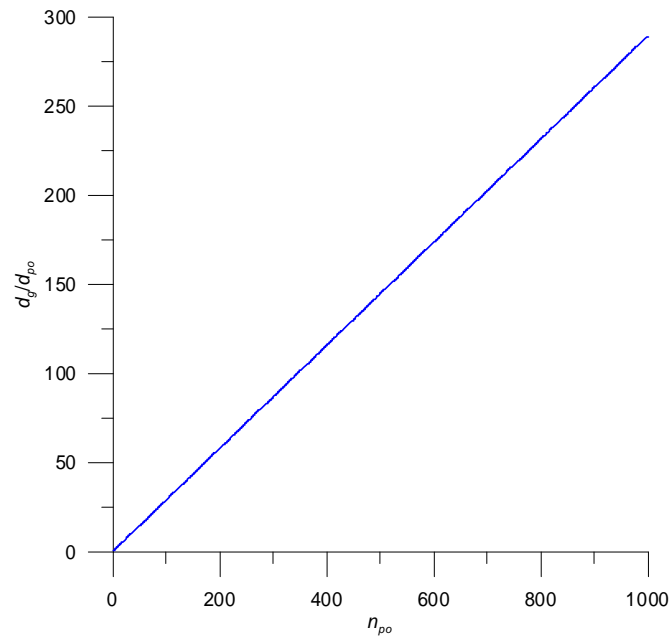


Figura 3.11. Diámetro de giro de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número par de partículas primarias frente al número de partículas primarias.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.37) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po} d_{po}}{d_g} = \frac{n_{po}}{2 \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{A_{n_{po}}}{48 n_{po}}}} \quad (3.38)$$

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po}}{\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{A_{n_{po}}}{12 n_{po}}}}$$

Este prefactor de la ley de potencias obtenido en la ecuación (3.38) se muestra en la siguiente figura.

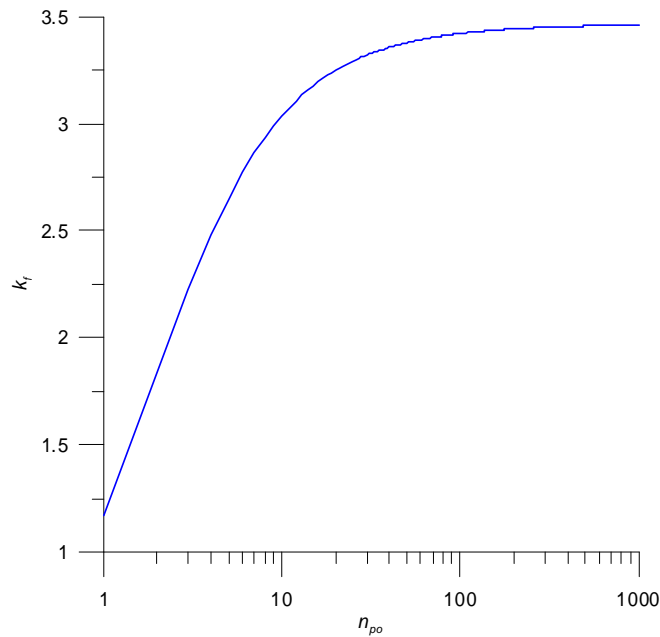


Figura 3.12. Evolución del prefactor de la ley de potencias de una cadena lineal en forma de cruz con dos ramas con un número par de partículas primarias frente al número de partículas primarias que lo compone.

En el límite cuando el aglomerado tiene una dimensión fractal igual a la unidad estrictamente el prefactor de la ley de potencias es:

$$k_f(D_f = 1) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \sqrt{12} = 2\sqrt{3} \quad (3.39)$$

A diferencia del epígrafe 3.4.1 en la que la evolución tanto del diámetro de giro del aglomerado como del prefactor de la ley de potencias en función del número de partículas primarias era igual para los dos casos estudiados, en este epígrafe esas evoluciones son ligeramente distintas para los dos casos, aunque en el caso del prefactor de la ley de potencias, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el límite es el mismo para los dos tipos de aglomerados estudiados. Esta discrepancia en los dos modelos sucede a consecuencia de la diferencia en la estructura morfológica del centro del aglomerado, y por consiguiente cuando el número de partículas primarias tiende a infinito, el centro del aglomerado tiende a ser despreciable frente al resto del aglomerado.

3.4.3. AGLOMERADO EN FORMA DE CRUZ CON TRES RAMAS

El aglomerado en forma de cruz (figura 3.13) es un ejemplo más de aglomerados con dimensión fractal igual a la unidad, $D_f=1$, ya que el volumen crece linealmente conforme crece el diámetro exterior que circunscribe el aglomerado. En este caso el número de subestructura es 3, $N=3$. Este tipo de configuración corresponde a dos clases de aglomerados. Por un lado a un

aglomerado compuesto por tres ramas lineales que sean ortogonales tridimensionalmente y que se intersectan en un punto, y por otro lado este aglomerado puede corresponder a una cruz plana o en dos dimensiones cuyas ramas forman 60° unas de otras, (todas las dimensiones están referidas al espacio euclídeo). Sólo se ha estudiado el caso en que el centro del aglomerado está ocupado por una partícula primaria que corresponde con el caso en el que el número de partículas primarias sea impar. No se ha estudiado el caso en el que el número de partículas primarias sea par porque se sobreentiende que tenderá al mismo valor límite que el caso par, como se ha comprobado en los epígrafes 3.4.1 y 3.4.2.

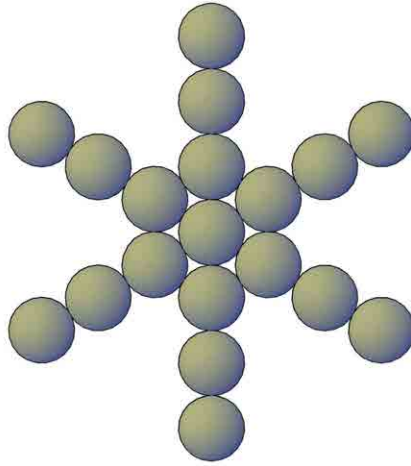


Figura 3.13. Aglomerado en forma de cruz con tres ramas.

El diámetro de giro tiene que ser obtenido a partir de la ecuación (3.11). En la ecuación (3.11) el sumatorio será extendido entre 1 y $(n_{po}-1)/6$ diámetros en cada rama respecto del centro de gravedad del aglomerado. Cada paso del sumatorio es un diámetro de la partícula primaria. Puesto que el diámetro de las partículas primarias se ha considerado constante por lo que puede salir fuera de la raíz, de manera que la ecuación (3.11) queda:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{6 \sum_{i=i_1}^{i_n} i^2}{n_{po}}} \quad (3.40)$$

El sumatorio tiene que ser extendido entre los siguientes valores:

$$\begin{cases} i_1 = 1 \\ i_n = \frac{n_{po} - 1}{6} \end{cases} \quad (3.41)$$

Sustituyendo las condiciones extremas expuestas en la ecuación (3.41) en la ecuación (3.21) se obtiene el valor el sumatorio de la ecuación (3.40) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\begin{aligned} \sum_{i=i_1}^{i_n} i^2 &= \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 5)(n_{po} + 2)}{648} - \frac{1(1-1)(2-1)}{6} = \\ &= \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 5)(n_{po} + 2)}{648} \end{aligned} \quad (3.42)$$

Sustituyendo la ecuación (3.42) en la ecuación (3.40) se obtiene la expresión con la que se puede determinar el diámetro de giro del aglomerado:

$$d_g = 2 \cdot d_{po} \cdot \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po} - 1)(n_{po} + 5)(n_{po} + 2)}{108n_{po}}} \quad (3.43)$$

La evolución del diámetro de giro del aglomerado lineal formado por tres ramas rectas se ha representado en la figura 3.14.

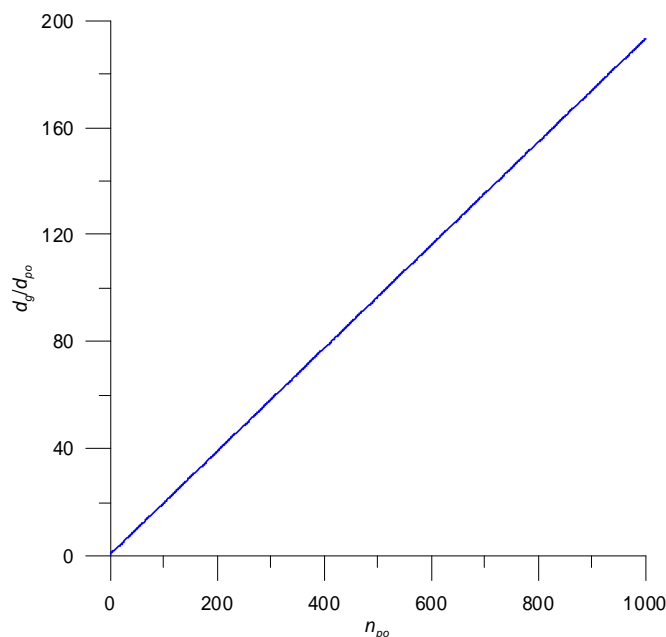


Figura 3.14. Diámetro de giro de una cadena lineal formada por tres cadenas lineales frente al número de partículas primarias que lo constituyen.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.43) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po} d_{po}}{d_g} = \frac{n_{po}}{2 \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(n_{po}-1)(n_{po}+5)(n_{po}+2)}{108 n_{po}}}}$$

$$k_f(D_f \approx 1) = \frac{n_{po}}{\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{(n_{po}-1)(n_{po}+5)(n_{po}+2)}{27 n_{po}}}}$$
(3.44)

La evolución del prefactor de la ley de potencias obtenido en la ecuación (3.44) se muestra en la figura 3.15.

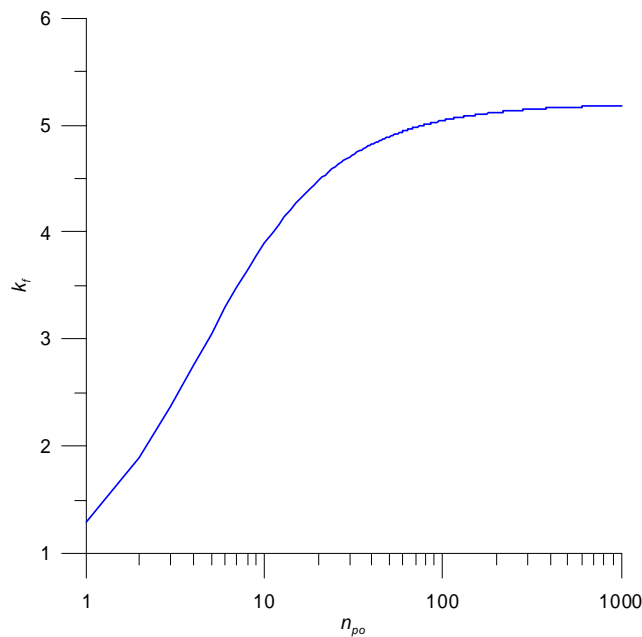


Figura 3.15. Evolución del prefactor de la ley de potencias de un aglomerado formado por tres cadenas lineales frente al número de partículas primarias que lo compone.

Otra vez, el aglomerado tiene una dimensión fractal igual a la unidad estrictamente cuando el número de partículas primarias tiende a infinito. En este caso, el tamaño de las partículas primarias llega a ser despreciable frente al tamaño del aglomerado:

$$k_f(D_f = 1) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \sqrt{27} = 3\sqrt{3}$$
(3.45)

3.4.4. RESUMEN

En las figuras 3.16 y 3.17 se representan las evoluciones del diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro medio de la partícula primaria, para la

primera figura, y el prefactor de la ley de potencias, para la segunda figura, en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado para aglomerados lineales, ya tenga una cadena, dos cadenas o tres cadenas, cuya dimensión fractal en todos ellos es la unidad.

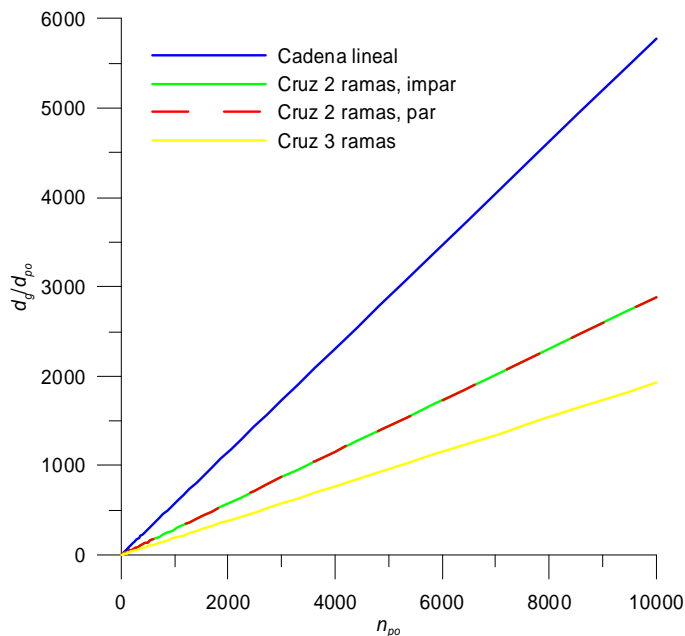


Figura 3.16. Diámetro de giro de aglomerados con $D_f=1$ frente al número de partículas primarias.

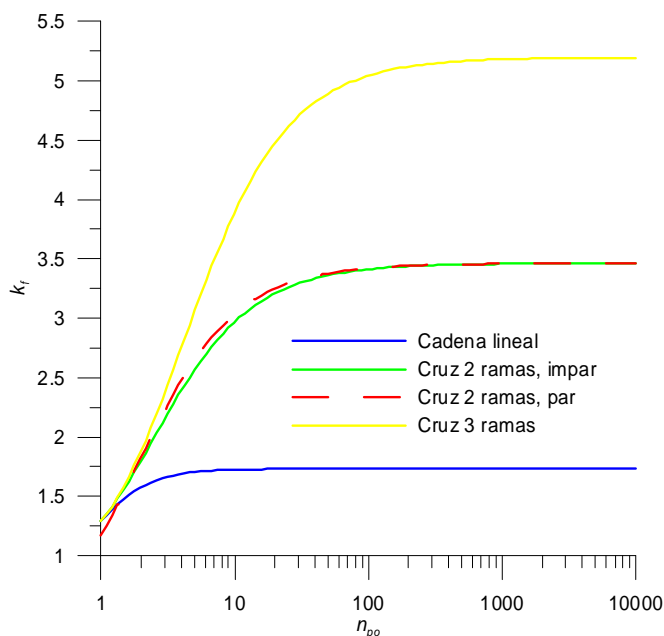


Figura 3.17. Prefactor de la ley de potencias de aglomerados con $D_f=1$ frente al número de partículas primarias.

Se observa, como se presuponía, que la evolución del diámetro de giro con respecto al número de partículas primarias es superior para aglomerados con varias cadenas que para aglomerados con una única cadena de partículas primarias. En la figura 3.17 se muestra como el prefactor también depende del número de cadenas lineales que compone el aglomerado, es decir del número de subestructura, entendiendo como subestructura aquella parte del aglomerado que se repite.

3.5. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 2

3.5.1. AGLOMERADO EN FORMA DE PLANO HEXAGONAL COMPACTO

Un aglomerado plano compuesto por partículas primarias compactadas según la configuración de hexagonal compacta ha sido considerado como la estructura más elemental con dimensión fractal igual a 2, $D_f=2$. Un ejemplo de este tipo de aglomerado se muestra en la figura 3.18. En este tipo de aglomerado el volumen crece proporcionalmente con el cuadrado del diámetro exterior que circunscribe el aglomerado, de manera que se demuestra que la dimensión fractal es 2. El aglomerado mostrado en la figura 3.18 es el caso más simple, por lo que se notará como la subestructura igual a la unidad, $N=1$.

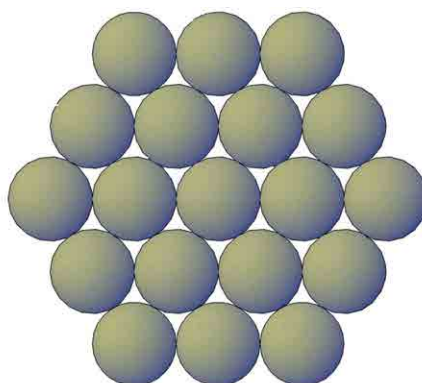


Figura 3.18. Aglomerado plano con compactación hexagonal compacta.

El número de partículas primarias que compone el aglomerado se obtiene de las series numéricas expuestas en la ecuación (3.46) que van aumentando conforme aumenta el número de anillos exteriores del aglomerado definido como i_n .

$$\begin{cases} i_n = 0 \rightarrow n_{po} = 1 \\ i_n = 1 \rightarrow n_{po} = 1 + 6 \\ i_n = 2 \rightarrow n_{po} = 1 + 6 + 12 \\ i_n = 3 \rightarrow n_{po} = 1 + 6 + 12 + 18 \\ i_n = 4 \rightarrow n_{po} = 1 + 6 + 12 + 18 + 24 \\ \dots \end{cases} \quad (3.46)$$

Por lo que la ecuación (3.46) se puede reescribir como:

$$n_{po} = 1 + 6 \sum_{i=1}^{i_n} i \quad (3.47)$$

Para resolver el sumatorio de la ecuación (3.47) se va a utilizar los polinomios factoriales expuestos en la ecuación (3.13). En este caso el factor i puede ser sustituido por:

$$i = i^{(1)} \quad (3.48)$$

Igual que en el caso del epígrafe 3.4.1 se puede sustituir el factor i por una diferencia de una función, y , que evoluciona en el sumatorio de igual manera, es decir:

$$i \equiv \Delta y_i \Rightarrow \begin{cases} \sum_{i=i_1}^{i_n} i = \sum_{i=i_1}^{i_n} \Delta y_i \\ \Delta y_i = i^{(1)} \end{cases} \quad (3.49)$$

En la ecuación (3.49) la función y se puede obtener por integración finita:

$$y_i = \frac{1}{2} i^{(2)} \quad (3.50)$$

El sumatorio de la ecuación (3.47) se resuelve sustituyendo la ecuación (3.50) en la ecuación (3.17) y ésta a su vez en la ecuación (3.49).

$$\sum_{i=i_1}^{i_n} i = \sum_{i=i_1}^{i_n} \Delta y_i = y_{i_{n+1}} - y_{i_1} = \frac{1}{2} i_{n+1}^{(2)} - \frac{1}{2} i_1^{(2)} = \frac{(i_n + 1)i_n}{2} - \frac{i_1(i_1 - 1)}{2} \quad (3.51)$$

Por lo que sustituyendo las ecuación (3.51) en la (3.47) se obtiene el número de partículas primarias en función del número de la capa última considerada:

$$n_{po} = 1 + 6 \sum_{i=1}^{i_n} i = 1 + 6 \frac{(i_n + 1)i_n}{2} - 6 \frac{1(1-1)}{2} = 1 + 3i_n(i_n + 1) \quad (3.52)$$

El anillo exterior i_n puede ser despejado de la ecuación (3.52) en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$i_n = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{n_{po}}{3} - \frac{1}{12}} = \frac{\sqrt{4n_{po} - 1}}{2\sqrt{3}} - \frac{1}{2} \quad (3.53)$$

Una vez más el diámetro de giro puede ser obtenido a partir de la ecuación (3.11), en la que el sumatorio será extendido entre 1 y i_n con pasos de un diámetro. Para deducir la función que modela el crecimiento del aglomerado se va a utilizar la función expuesta en la ecuación (3.40) que se utiliza para aglomerados con 6 ramas lineales giradas 60° , al que se le va a añadir las partículas primarias que cubren el espacio vacío existente entre las ramas, de manera que se constituye el aglomerado representado en la figura 3.18. La secuencia de distancias al centro de gravedad del aglomerado es la siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} i_n = 1 \rightarrow \sum_{i=1}^{i_n} r_i^2 = 6d_{po}^2 \\ i_n = 2 \rightarrow \sum_{i=1}^{i_n} r_i^2 = 6d_{po}^2 + 6(2d_{po})^2 + 6((2d_{po})^2 + d_{po}^2 - 2d_{po}d_{po}) \\ \dots \end{array} \right. \quad (3.54)$$

Para obtener más términos que los expuestos en la ecuación (3.54) se va a sacar factor común del factor que se repite en todos los términos, que es $6d_{po}^2$, por lo que los sumatorios expuestos en la ecuación (3.54) quedarían reducidos a la siguiente secuencia numérica:

$$\left\{ \begin{array}{l} i_n = 1 \rightarrow \Sigma = 1 \\ i_n = 2 \rightarrow \Sigma = 1 + 2^2 + (2^2 + 1 - 2 \cdot 1) \\ i_n = 3 \rightarrow \Sigma = 1 + 2^2 + (2^2 + 1 - 2 \cdot 1) + 3^2 + (3^2 + 1 - 3 \cdot 1) + \\ \quad + (3^2 + 2^2 - 3 \cdot 2) \\ i_n = 4 \rightarrow \Sigma = 1 + 2^2 + (2^2 + 1 - 2 \cdot 1) + 3^2 + (3^2 + 1 - 3 \cdot 1) + \\ \quad + (3^2 + 2^2 - 3 \cdot 2) + 4^2 + (4^2 + 1 - 4 \cdot 1) + \\ \quad + (4^2 + 2^2 - 4 \cdot 2) + (4^2 + 3^2 - 4 \cdot 3) \\ \dots \end{array} \right. \quad (3.55)$$

La secuencia numérica obtenida en la ecuación (3.55) se puede resumir en la siguiente ecuación:

$$\sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j) \quad (3.56)$$

Por lo que la ecuación con la que se puede determinar el diámetro de giro es la siguiente:

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{6 \sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j)}{n_{po}}} \quad (3.57)$$

La resolución de esta sumatoria doble se hace utilizando los polinomios factoriales como se hizo para obtener las ecuaciones (3.21) y (3.51). El doble sumatorio queda como sigue:

$$\sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j) = \frac{5}{24} i_n^4 + \frac{5}{12} i_n^3 + \frac{7}{24} i_n^2 + \frac{1}{12} i_n \quad (3.58)$$

El doble sumatorio se puede poner en función del número de partículas primarias del aglomerado sustituyendo la ecuación (3.53) en la ecuación (3.58).

$$\sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j) = \frac{5n_{po}^2 - 4n_{po} - 1}{216} \quad (3.59)$$

Por lo que sustituyendo la ecuación (3.59) en la ecuación (3.57) se puede obtener el diámetro de giro del aglomerado en función del número de partículas primarias que lo componen.

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{5n_{po}^2 - 4n_{po} - 1}{36n_{po}}} \quad (3.60)$$

La evolución del diámetro de giro con respecto al número de partículas primarias se muestra en la siguiente figura.

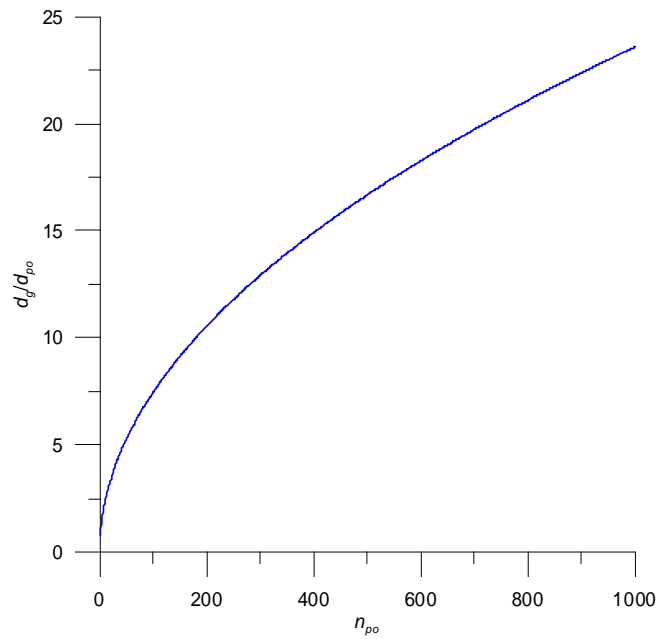


Figura 3.19. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de plano.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.60) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 2) = \frac{n_{po} d_{po}^2}{d_g^2} = \frac{n_{po}}{\frac{3}{5} + \frac{5n_{po}^2 - 4n_{po} - 1}{9n_{po}}} \quad (3.61)$$

La evolución del prefactor de la ley de potencias obtenido en la ecuación (3.61) se muestra en la siguiente figura.

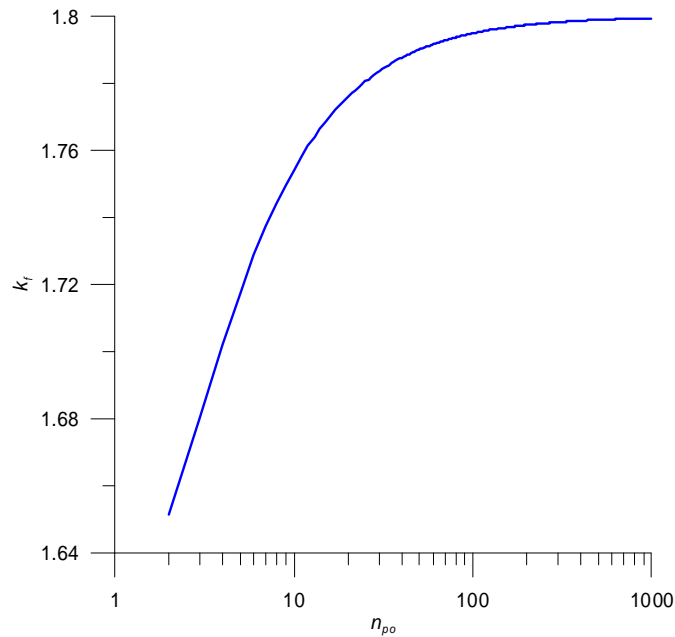


Figura 3.20. Evolución del prefactor de la ley de potencias de un aglomerado plano frente al número de partículas primarias que lo compone.

Como en los casos anteriores el aglomerado plano tiene una dimensión fractal estrictamente igual a dos cuando el número de partículas primarias tiende a infinito, en este caso, el espesor de las partículas primarias llega a ser despreciable frente al tamaño del aglomerado:

$$k_f(D_f = 2) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \frac{1}{\frac{5}{9}} = 1.8 \quad (3.62)$$

3.5.2. AGLOMERADO FORMADO POR DOS PLANOS HEXAGONALES COMPACTOS ORTOGONALES

El volumen de un aglomerado formado por dos planos ortogonales crece con el cuadrado de la longitud o tamaño característico del aglomerado, por lo que la dimensión fractal es dos, $D_f=2$. Este tipo de aglomerado es el representado en la figura 3.21, y tiene un número de subestructura igual a dos, $N=2$.

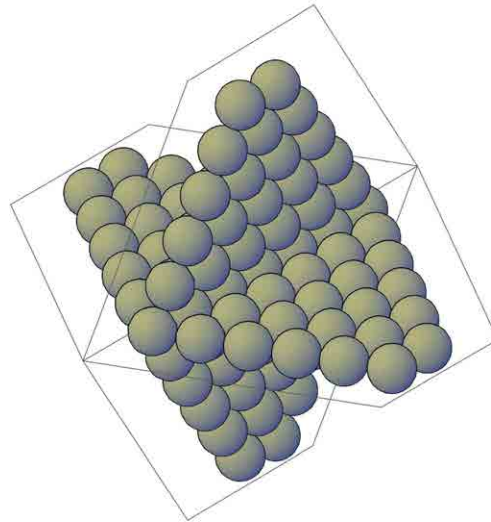


Figura 3.21. Aglomerado plano compuesto por dos planos ortogonales con compactación hexagonal compacta.

El número de partículas primarias que compone el aglomerado en función del número de la capa última considerada se obtiene a partir de la ecuación (3.52):

$$n_{po} = 2(1 + 3i_n(i_n + 1)) - (1 + 2i_n) = 1 + 4i_n + 6i_n^2 \quad (3.63)$$

Similarmente al caso anterior en la que se obtuvo la ecuación (3.57), el diámetro de giro en este caso se obtiene de la siguiente manera:

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{12 \sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j) - 2 \sum_{i=1}^{i_n} i^2}{n_{po}}} \quad (3.64)$$

Sustituyendo la ecuación (3.59) y (3.63) en la ecuación (3.64) se puede obtener el diámetro de giro del aglomerado en función del número de partículas primarias que lo componen.

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{4(9n_{po} - 13)\sqrt{6n_{po} - 2} + 45n_{po}^2 + 24n_{po} - 17}{648n_{po}}} \quad (3.65)$$

La evolución del diámetro de giro con respecto al número de partículas primarias se muestra en la siguiente figura.

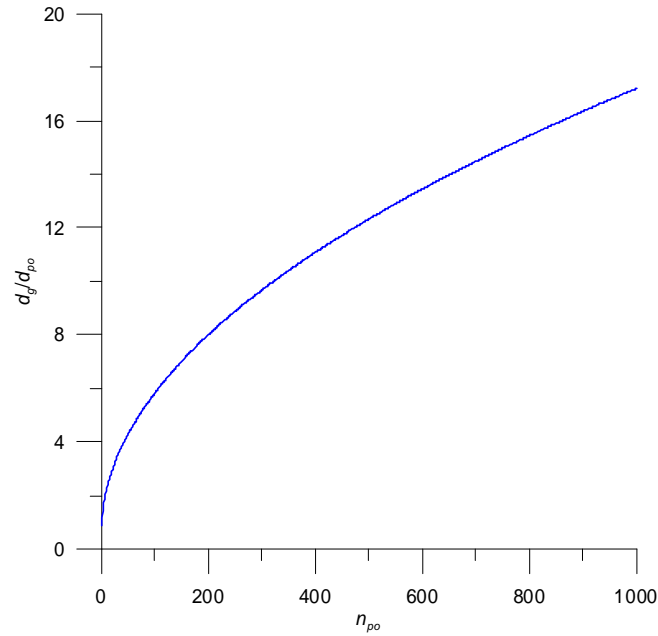


Figura 3.22. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de dos planos perpendiculares.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.65) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 2) = \frac{n_{po} d_{po}^2}{d_g^2} = \frac{n_{po}}{\frac{3}{5} + \frac{4(9n_{po} - 13)\sqrt{6n_{po} - 2 + 45n_{po}^2 + 24n_{po} - 17}}{162n_{po}}} \quad (3.66)$$

La evolución del prefactor de la ley de potencias obtenido en la ecuación (3.66) se muestra en la siguiente figura.

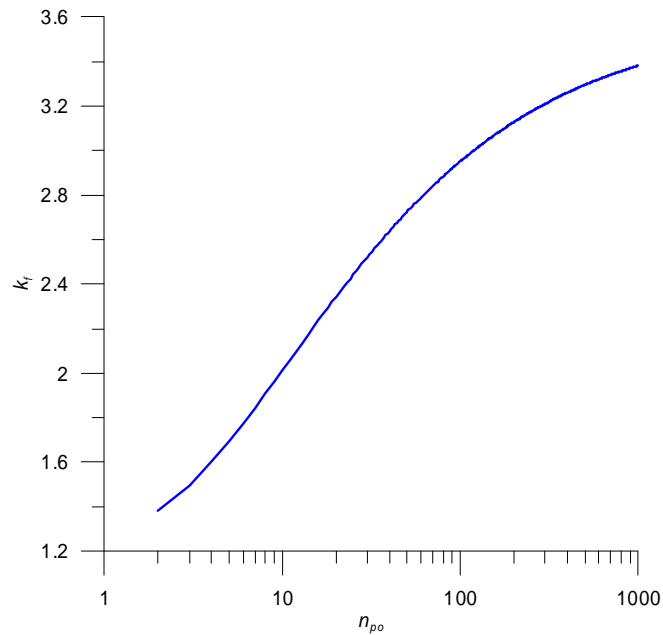


Figura 3.23. Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para un aglomerado en forma de dos planos perpendiculares entre sí.

Como en los casos anteriores el aglomerado con doble plano tiene una dimensión fractal estrictamente igual a dos cuando el número de partículas primarias tiende a infinito:

$$k_f(D_f = 2) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \frac{1}{\frac{45}{162}} = 3.6 \quad (3.67)$$

3.5.3. AGLOMERADO FORMADO POR TRES PLANOS HEXAGONALES COMPACTOS ORTOGONALES

Es otro caso de aglomerado con dimensión fractal igual a dos, $D_f=2$, en el que el número de subestructura es igual a tres, $N=3$. Este tipo de aglomerado se muestra en la figura 3.24.

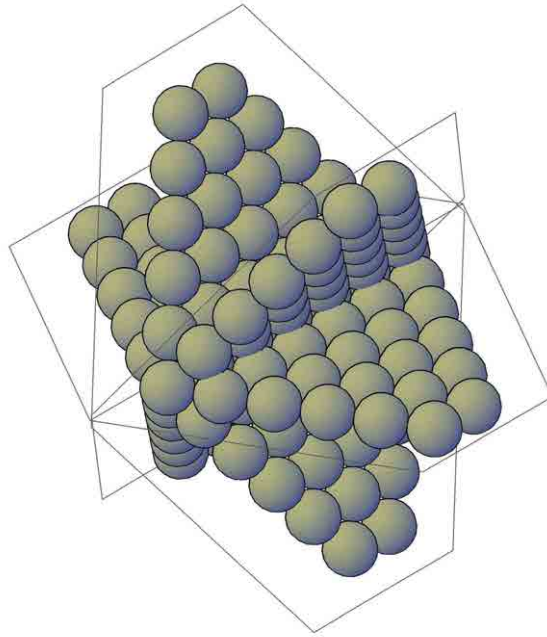


Figura 3.24. Aglomerado plano compuesto por tres planos ortogonales con compactación hexagonal compacta.

El número de partículas primarias que compone el aglomerado en función del número de la capa última considerada se obtiene a partir de la ecuación (3.52):

$$n_{po} = 3(1 + 3i_n(i_n + 1)) - 2(1 + 2i_n) = 1 + 5i_n + 9i_n^2 \quad (3.68)$$

Similarmente al caso anterior en la que se obtuvo la ecuación (3.57), el diámetro de giro en este caso se obtiene de la siguiente manera:

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{18 \sum_{i=1}^{i_n} \sum_{j=0}^{i-1} (i^2 + j^2 - i \cdot j) - 4 \sum_{i=1}^{i_n} i^2}{n_{po}}} \quad (3.69)$$

Sustituyendo la ecuación (3.59) y (3.68) en la ecuación (3.69) se puede obtener el diámetro de giro del aglomerado en función del número de partículas primarias que lo componen.

$$d_g = 2d_{po} \sqrt{\frac{3}{20} + \frac{(108n_{po} + 32)\sqrt{36n_{po} - 11} + 405n_{po}^2 - 396n_{po} - 144}{8748n_{po}}} \quad (3.70)$$

La evolución del diámetro de giro con respecto al número de partículas primarias se muestra en la siguiente figura.

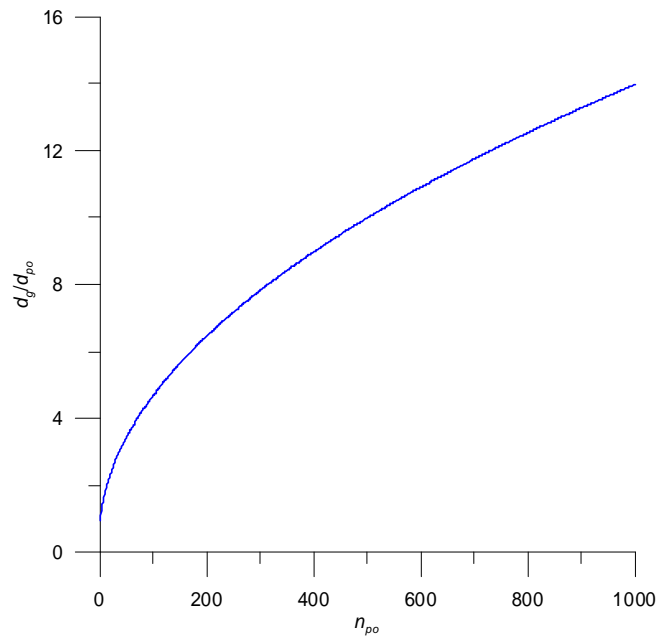


Figura 3.25. Diámetro de giro frente al número de partículas primarias para un aglomerado con forma de tres planos cortantes entre sí.

El prefactor de la ley de potencias puede ser obtenido sustituyendo la ecuación (3.70) en la ecuación (3.1):

$$k_f(D_f \approx 2) = \frac{n_{po} d_{po}^2}{d_g^2} = \frac{n_{po}}{\frac{3}{5} + \frac{(108n_{po} + 32)\sqrt{36n_{po} - 11 + 405n_{po}^2 - 396n_{po} - 144}}{2187n_{po}}} \quad (3.71)$$

La evolución del prefactor de la ley de potencias obtenido en la ecuación (3.71) se muestra en la siguiente figura.

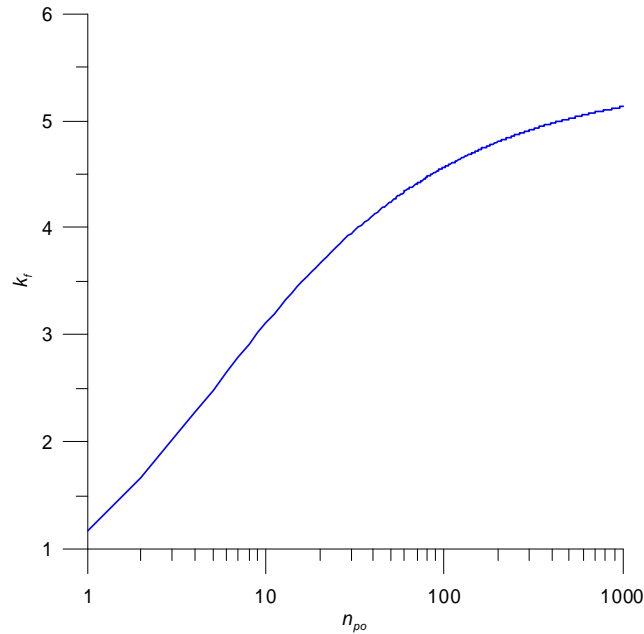


Figura 3.26. Evolución del prefactor de la ley de potencias con el número de partículas primarias para un aglomerado en forma de tres planos cortantes entre sí.

Como en los casos anteriores el aglomerado con triple plano tiene una dimensión fractal estrictamente igual a dos cuando el número de partículas primarias tiende a infinito:

$$k_f(D_f = 2) = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} k_f = \frac{1}{\frac{405}{2187}} = 5.4 \quad (3.72)$$

3.5.4. RESUMEN

En las figuras 3.27 y 3.28 se representan las evoluciones del diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro medio de la partícula primaria, para la primera figura, y el prefactor de la ley de potencias, para la segunda figura, en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado para aglomerados cuya dimensión fractal es dos, ya estén compuestos por un plano, dos planos o tres planos.

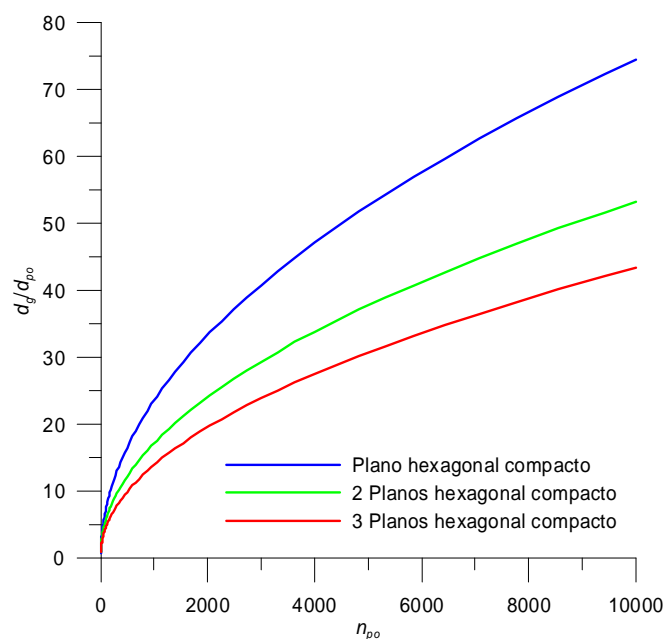


Figura 3.27. Diámetro de giro de aglomerados con $D_f=2$ frente al número de partículas primarias.

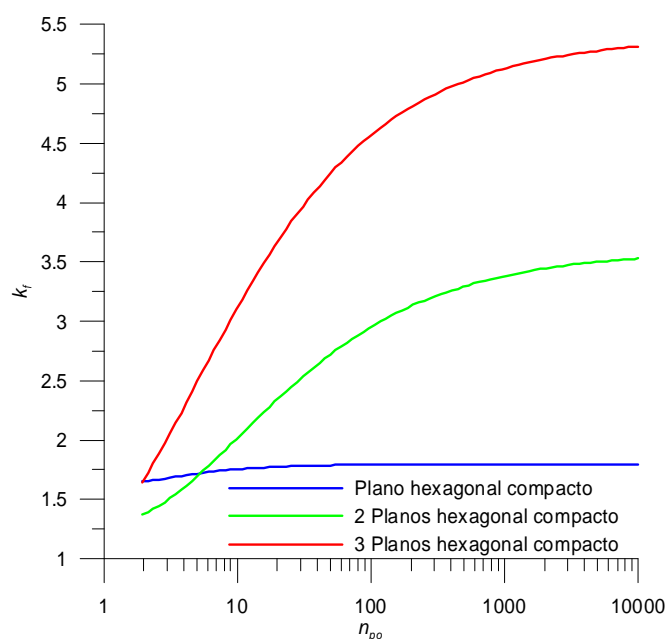


Figura 3.28. Prefactor de la ley de potencias de aglomerados con $D_f=2$ frente al número de partículas primarias.

Se observa que la evolución del diámetro de giro con respecto al número de partículas primarias es superior para aglomerados con varias subestructura que para aglomerados con una única subestructura. En la figura 3.28 se muestra como el prefactor también depende del número de planos que compone el aglomerado, es decir del número de subestructura.

3.6. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 3

El aglomerado con dimensión fractal cercana a 3 está compuesto por partículas primarias formando una esfera con una estructura hexagonal compacta. Este caso es esencialmente diferente a los casos anteriores, y no se puede distinguir aglomerados con diferentes subestructuras. La fracción de empaquetamiento se puede definir como la relación que existe entre el volumen ocupado por el material sólido y el volumen de la esfera de diámetro d_p que circunscribe el aglomerado.

$$p_{hc} = n_{po} \left(\frac{d_{po}}{d_p} \right)^3 = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \rightarrow n_{po} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \frac{d_p^3}{d_{po}^3} \quad (3.73)$$

El diámetro de giro puede ser obtenido a partir de la ecuación (3.11) suponiendo que el número de partículas primarias es suficientemente grande ($n_{po} \rightarrow \infty$). En este caso el aglomerado esférico se puede considerar homogéneo. Los huecos existentes entre las partículas primarias contribuyen a la disminución de la densidad del aglomerado con respecto a la densidad del material que lo constituye (hollín en el caso de aglomerados diesel). Así que el prefactor puede ser obtenido como una función de la fracción de empaquetamiento:

$$k_f(D_f = 3) = \frac{n_{po} d_{po}^3}{d_g^3} = p \left(\frac{5}{3} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.74)$$

El prefactor de la ley de potencias expuesto en la ecuación (3.74) particularizado para una compactación hexagonal compacta resulta:

$$k_f(D_f = 3) = p \left(\frac{5}{3} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \left(\frac{5}{3} \right)^{\frac{3}{2}} = 1.5933 \quad (3.75)$$

3.7. RESUMEN DE RESULTADOS

Con los resultados presentados en los epígrafes anteriores se puede determinar algunos valores límites del prefactor de la ley de potencias para aglomerados orientados isotrópicamente y compuestos por partículas primarias esféricas de igual tamaño. El valor del prefactor puede variar en función de las desviaciones que puedan existir en el aglomerado. La variación del prefactor con respecto a la esfericidad de las partículas primarias, [7], (como consecuencia, por ejemplo, del sinterizado) es creciente, mientras que la variación del prefactor con respecto a la orientación isotrópica del aglomerado, [30], (como

consecuencia, como ejemplo, del régimen de agregación asociado a la dinámica del aerosol) es decreciente.

Las ecuaciones obtenidas han sido representadas en la figura 3.29 en función del número de partículas primarias que componen el aglomerado. Se demuestra en todos los casos como el prefactor tiende asintóticamente al límite determinado en cada caso, y que el efecto del número de partículas primarias que componen el aglomerado es decreciente con el aumento del tamaño del mismo, de manera que el prefactor llega a ser un parámetro muy útil para describir la estructura del aglomerado independientemente de su tamaño.

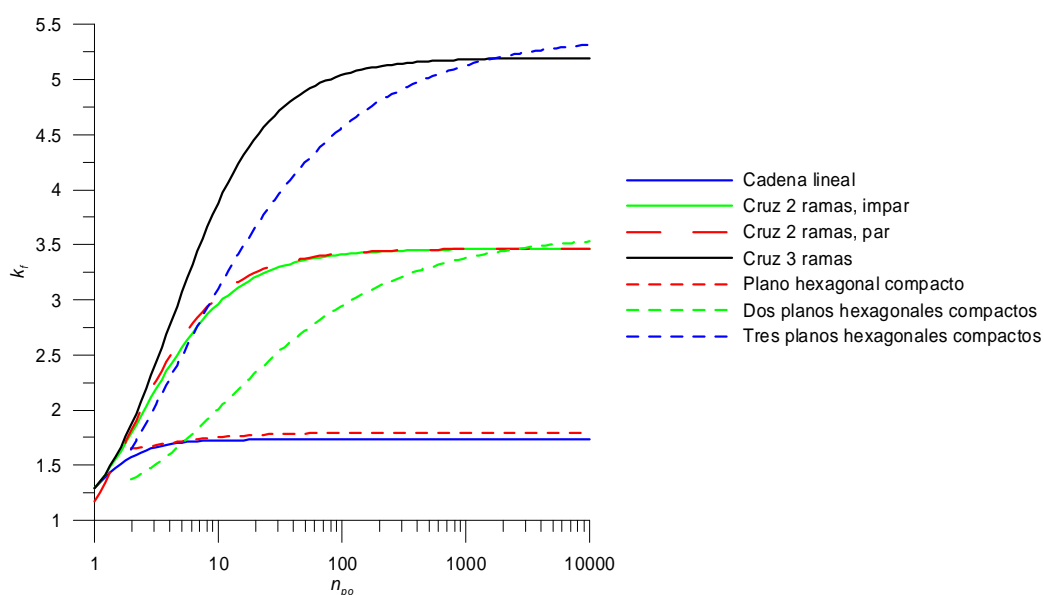


Figura 3.29. Prefactor de la ley de potencias como una función del número de partículas primarias para diferentes configuraciones geométricas.

Los valores límites mencionados son mostrados en la figura 3.30 mediante puntos aislados. Esta figura demuestra que los límites a los que tiende el prefactor cuando el número de partículas primarias que componen el aglomerado es suficientemente alto, es proporcional al número de estructuras elementales N , y a la compactación del aglomerado, incluso si la dimensión fractal del aglomerado se mantiene sin cambios. Esto justifica que el prefactor pueda ser expresado como la lagunaridad.

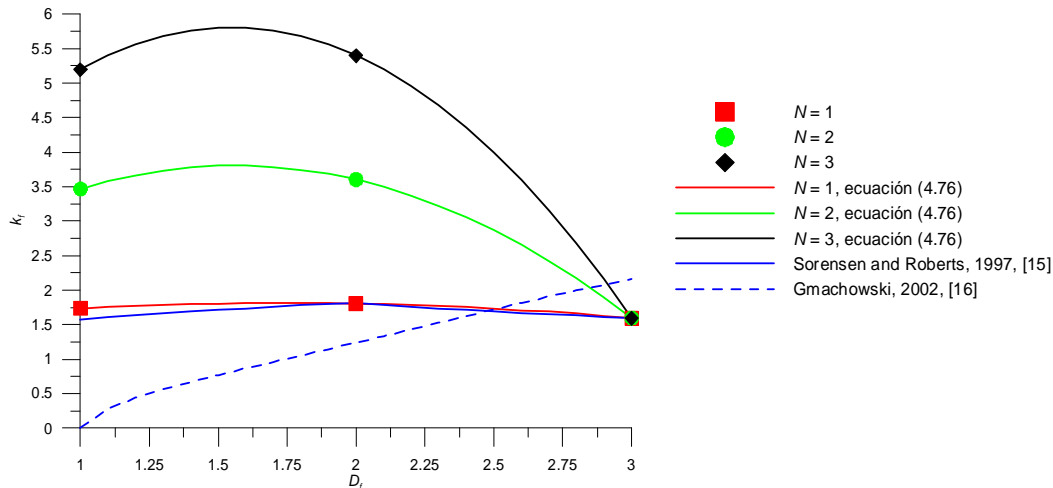


Figura 3.30. Valores del prefactor obtenidos a partir de métodos geométricos y a partir de correlaciones, como una función de la dimensión fractal.

Finalmente el rango de variación del prefactor decrece con el aumento de la dimensión fractal, tendiendo a un valor único para el caso de $D_f=3$. Esta convergencia a un valor único del prefactor se justifica porque, en el espacio euclídeo 3D, un aglomerado compuesto por diferentes subestructuras se vuelve más tridimensional (su dimensión fractal tiende a 3), de manera que las distintas subestructuras que lo componen llegarían a ser más o menos indistinguibles. Finalmente cuando el espacio se llena completamente o uniformemente, es imposible que puedan diferenciarse las diferentes subestructuras iniciales.

Los resultados de toda la colección de casos singulares pueden ser aproximados mediante una correlación polinomial dependiente de dos parámetros:

$$k_f = (0.7967 - 0.934N)D_f^2 + (-2.38985 + 2.86985N)D_f + (1.59325 - 0.20385N) \quad (3.76)$$

Esta correlación, la cuál ha sido dibujada en la figura 3.30, proporciona valores del prefactor entre los rangos $N \geq 1$ y $1 \leq D_f \leq 3$, los cuáles son consistentes con los valores propuestos en los casos estudiados, y por tanto es útil para determinar el prefactor de aglomerados que tengan como dimensión fractal valores no enteros.

Los resultados de otros métodos propuestos en la bibliografía como el de Sorensen y Roberts (1997) [15] y Gmachowski (2002) [16] han sido representados en la figura 3.30. En el primer caso se ha tomado el ajuste de hexagonal compacta para una dimensión fractal igual a 2 para aglomerados con dimensión fractal inferior a 2 y se ha identificado espacialmente para dimensiones fractales superiores a 2, como sugieren los autores. Los resultados mostrados tienen una buena coincidencia con los presentados en este trabajo

(especialmente en el rango de altas dimensiones fractales), además estos autores no consideraron la variabilidad que se presentan en los distintos casos para diferentes lagunaridades que pueden tener lugar para una dimensión fractal dada.

En el caso del método de Gmachowski, la coincidencia es ligeramente peor en todo el rango considerado, por otro lado este autor considera un factor de empaquetamiento homogéneo igual a la unidad, $p=1$, lo cual en el caso de $D_f=3$ (ecuaciones (3.73) y (3.74)) hace que el resultado del prefactor sea de $k_f=2.15$. En este caso, otra vez, el autor no consideró la variabilidad que se presenta en los distintos casos para diferentes lagunaridades que pueden tener lugar para una dimensión fractal dada.

3.8. EXTENSIÓN A OTRAS CONFIGURACIONES DE EMPAQUETAMIENTO

A parte de la configuración de empaquetamiento hexagonal compacta que es la más cercana a la unidad para un plano puramente homogéneo o un aglomerado esférico no infinito, otras configuraciones con densidades menores deberían ser consideradas también, porque esos aglomerados también tienen una dimensión fractal que tiende a 2 o a 3, según sea el caso, cuando el tamaño del aglomerado (con respecto al tamaño de las partículas primarias que lo compone) tiende a infinito.

En el caso de aglomerados planos, la integración a lo largo del radio del aglomerado tiende a seguir una relación entre el radio de giro y el radio exterior del aglomerado, r_p :

$$r_g = \frac{r_p}{\sqrt{2}} \quad (3.77)$$

De esta manera la factor de empaquetamiento puede ser determinado como la relación entre el área ocupada por el material y el área calculada con el diámetro del círculo que circunscribe el aglomerado, d_p . Con esta definición y la ecuación (3.1) se puede obtener una relación entre el prefactor de la ley de potencias y el factor de empaquetamiento.

$$p = n_{po} \left(\frac{d_{po}}{d_p} \right)^2 = \frac{k_f (D_f = 2)}{2} \quad (3.78)$$

Para una configuración de compactación cúbica simple (identificado por el subíndice sc) y cúbica centrada en las caras (identificada con bcc), el factor de

compactación resulta en las siguientes ecuaciones, (Γ es la función Gamma), [15]:

$$p_{sc}(D_f) = \frac{\pi^{\frac{D_f}{2}}}{2^{D_f} \Gamma\left(1 + \frac{D_f}{2}\right)} \quad (3.79)$$

$$p_{bcc}(D_f) = \left(\frac{D_f \pi}{16}\right)^{\frac{D_f}{2}} \frac{2}{\Gamma\left(1 + \frac{D_f}{2}\right)}$$

Estas ecuaciones resultan los siguientes valores dependiendo si los aglomerados son planos o esféricos.

$$\begin{cases} p_{sc}(D_f = 2) = \frac{\pi}{4\Gamma(2)} = \frac{\pi}{4} = 0.7854 \\ p_{sc}(D_f = 3) = \frac{\pi^{3/2}}{8\Gamma(5/2)} = \frac{\pi}{6} = 0.5236 \end{cases} \quad (3.80)$$

$$\begin{cases} p_{bcc}(D_f = 2) = \frac{\pi}{8} \frac{2}{\Gamma(2)} = \frac{\pi}{4} = 0.7854 \\ p_{bcc}(D_f = 3) = \left(\frac{3\pi}{16}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.6802 \end{cases} \quad (3.81)$$

Para una compactación aleatoria del aglomerado (identificado con r), en el caso de círculos planos ($D_f=2$), el factor de compactación es $p_c=0.82$ y ha sido obtenido de la bibliografía, [31] y [32]. En el caso de partículas esféricas monodispersas en tamaño se han encontrado en la bibliografía distintos valores para el factor de compactación, aunque en este trabajo se ha escogido el propuesto por el modelo propuesto por Shi y Zhang, [33] debido a la coincidencia con otros autores y a lo riguroso del trabajo. El valor del factor de empaquetamiento o compactación para una compactación aleatoria es $p_c=0.578$.

El prefactor de la ley de potencias se puede obtener a partir de la ecuación (3.78) para el caso del plano y para el caso esférico se utiliza la ecuación (3.74):

$$\begin{cases} k_{f,sc}(D_f = 2) = 2 p_{sc}(D_f = 2) = 1.5708 \\ k_{f,sc}(D_f = 3) = \left(\frac{5}{3}\right)^{\frac{3}{2}} p_{sc}(D_f = 3) = 1.1266 \end{cases} \quad (3.82)$$

$$\begin{cases} k_{f,bcc}(D_f = 2) = 2 p_{bcc}(D_f = 2) = 1.5708 \\ k_{f,bcc}(D_f = 3) = \left(\frac{5}{3}\right)^{\frac{3}{2}} p_{bcc}(D_f = 3) = 1.4635 \end{cases} \quad (3.83)$$

$$\begin{cases} k_{f,r}(D_f = 2) = 2 p_r(D_f = 2) = 1.64 \\ k_{f,r}(D_f = 3) = \left(\frac{5}{3}\right)^{\frac{3}{2}} p_r(D_f = 3) = 1.2437 \end{cases} \quad (3.84)$$

Los valores expuestos en las ecuaciones (3.82), (3.83) y (3.84) y sus extensiones a todo el rango $1 \leq D_f \leq 3$ y al número mayor de número de subestructuras $N \geq 1$ han sido representados en la figura 3.31, junto con los resultados previamente obtenidos para la configuración de compactación hexagonal compacta.

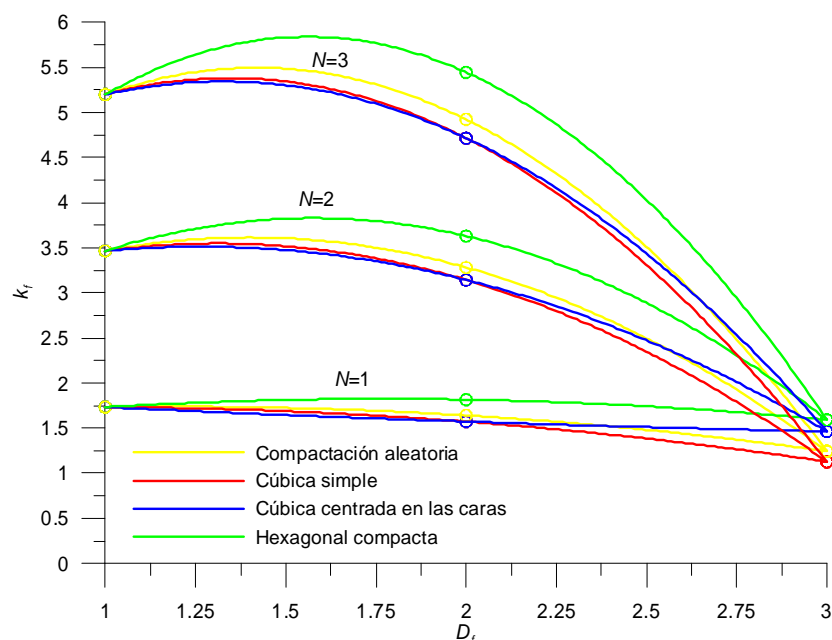


Figura 3.31. Valores del prefactor en función de la dimensión fractal y de la configuración de compactación.

Se espera que el prefactor de la ley de potencias para todas las configuraciones de compactación debiera tender a los límites ya expuestos. Los valores están en el rango entre los obtenidos con compactación hexagonal

compacta (los más altos) y simple cúbica (lo más bajos). Sin embargo, es esperable que la sinterización de las partículas primarias haga que se puedan obtener valores del prefactor superiores a los obtenidos para la compactación hexagonal compacta. Por otro lado las orientaciones anisotrópicas podrían originar valores del prefactor inferiores a los obtenidos en la compactación simple cúbica.

3.9. MODELO PROPUESTO.

Puesto que el prefactor de la ley de potencias depende de la dimensión fractal, se puede proponer un modelo polinómico de ajuste con tres parámetros, en el que el prefactor de la ley de potencias es función de la dimensión fractal.

$$k_f = a D_f^3 + b D_f^2 + c \quad (3.85)$$

Se va a tomar como caso de estudio los modelos de prefactor de la ley de potencias de los aglomerados con compactación hexagonal compacta, por ser éstos los casos más extremos. Por tanto, el modelo mostrado en la ecuación (3.85) tiene que satisfacer la ecuación (3.27) para $D_f=1$, la ecuación (3.61) para $D_f=2$ y la ecuación (3.75) para $D_f=3$. De manera que se puede definir las funciones expuestas en las ecuaciones (3.27), (3.61) y (3.75) como A, B, C:

$$\left\{ \begin{array}{l} A(n_{po}) \equiv \frac{n_{po}}{\sqrt{\frac{3}{5} + \frac{1}{3}(n_{po}^2 - 1)}} \\ B(n_{po}) \equiv \frac{n_{po}}{\frac{3}{5} + \frac{5n_{po}^2 - 4n_{po} - 1}{9n_{po}}} \\ C(n_{po}) \equiv \frac{\pi}{\sqrt{18}} \left(\frac{5}{3}\right)^{\frac{3}{2}} = 1.5933 \end{array} \right. \quad (3.86)$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.86) en (3.85) se obtiene un modelo del prefactor de la ley de potencias en función de la dimensión fractal del aglomerado y del número de partículas primarias que lo compone. Los coeficientes de la ecuación (3.85) se determinan de la siguiente manera.

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A(n_{po}) - \frac{4}{11}B(n_{po}) + \frac{3}{22}C(n_{po}) \\ b = -\frac{19}{22}A(n_{po}) + \frac{13}{11}B(n_{po}) - \frac{7}{22}C(n_{po}) \\ c = \frac{18}{11}A(n_{po}) - \frac{9}{11}B(n_{po}) + \frac{2}{11}C(n_{po}) \end{cases} \quad (3.87)$$

El prefactor de la ley de potencias obtenido con la ecuación (3.85) se ha representado en las figuras 3.32 y 3.33.

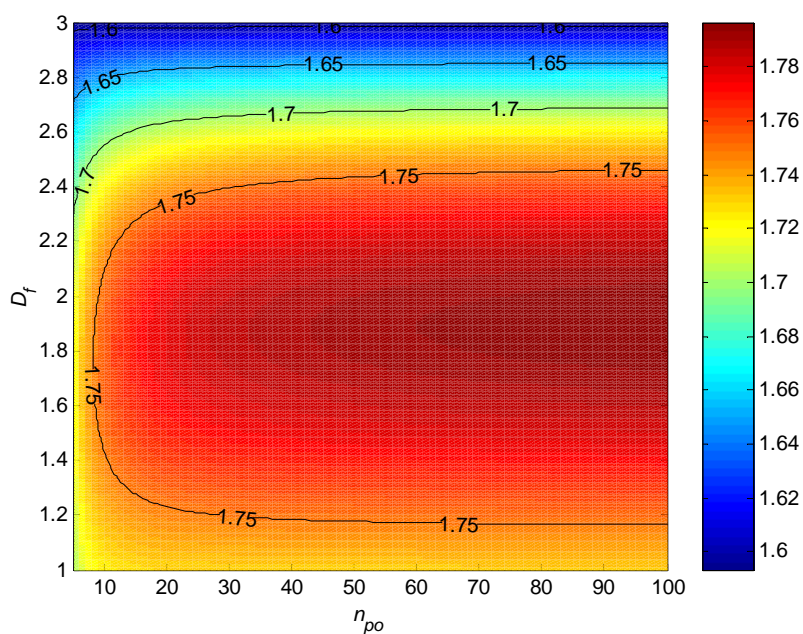


Figura 3.32. Prefactor en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

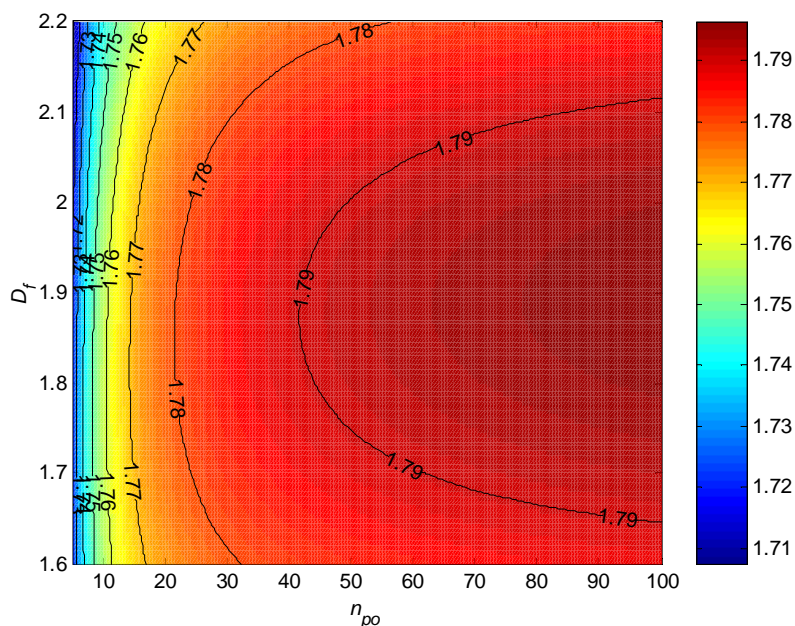


Figura 3.33. Zoom de la figura 3.32. Prefactor en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado cuando la dimensión fractal está entre 1.6 y 2.2.

En las figuras 3.32 y 3.33 se observa como el prefactor es muy estable con la variación de la dimensión fractal cuando el número de partículas primarias es superior a 20. Y también le sucede lo mismo con la variación de la dimensión fractal, cuando esta variación está entre 1 y 2.6. En la figura 3.34 se ha representado cuatro secciones de la figura 3.32.

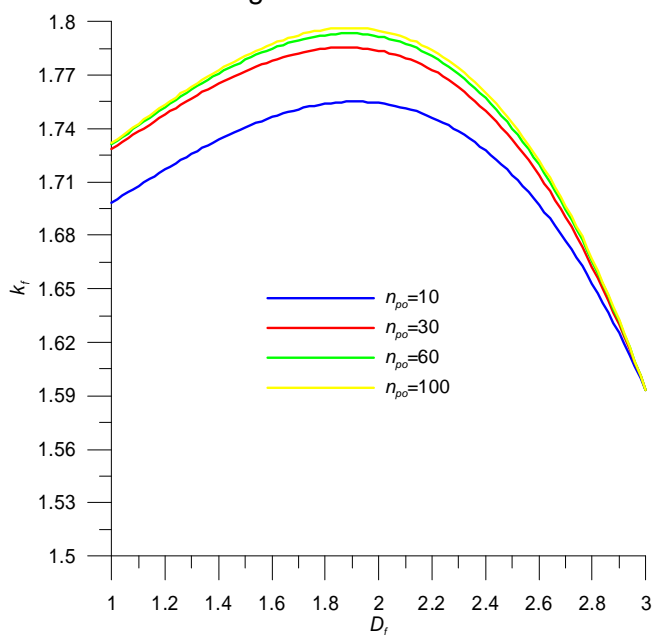


Figura 3.34. Prefactor frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$.

3.10. CONCLUSIONES

En el modelo propuesto en el epígrafe anterior, ecuación (3.85), se muestra como el prefactor depende de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado. Por tanto la ley de potencias, ecuación (3.1), queda de la siguiente forma:

$$n_{po} = k_f (D_f, n_{po}) \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f} \quad (3.88)$$

Conocido el diámetro de giro de un aglomerado real se puede saber la relación existente entre el número de partículas primarias que lo compone y la dimensión fractal de éste.

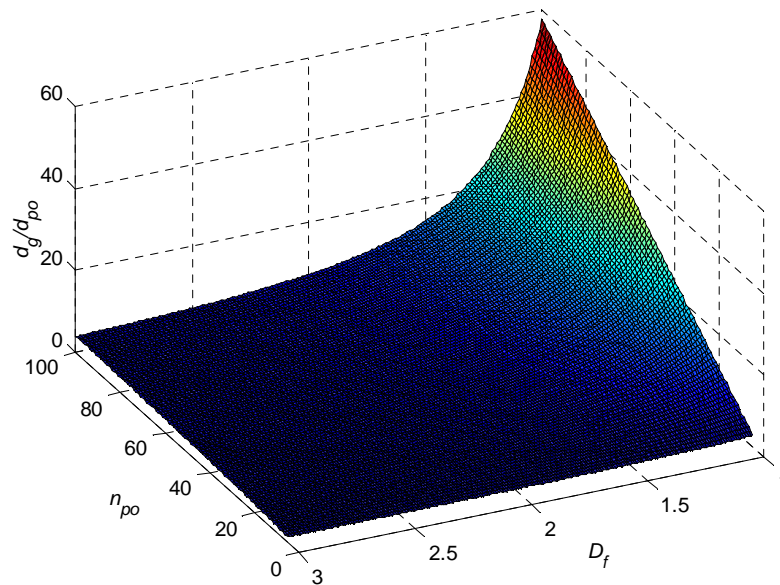


Figura 3.35. Diámetro de giro adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal.

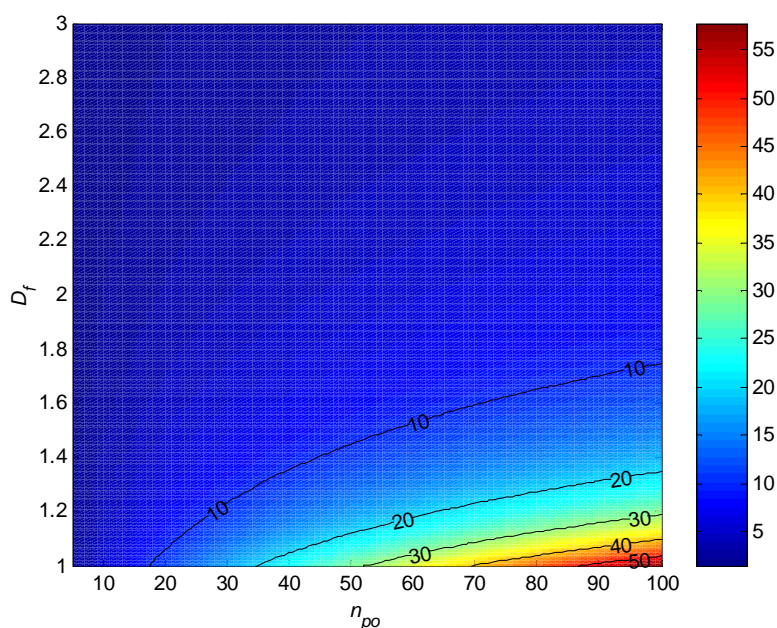


Figura 3.36. Diámetro de giro adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal representada como curvas de nivel.

De las figuras 3.35 y 3.36 se deduce que cuanto mayor es la dimensión fractal, manteniendo constante el número de partículas primarias, menor es diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro de una partícula primaria.

3.11. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Skillas, G.; Künzel, S.; Burtscher, H.; Baltensperger, U.; Siegmann, K. (1998). High fractal-like dimension of Diesel soot agglomerates. *Journal of Aerosol Science* **29**, 411-419.
- [2] Mandelbrot, B.B. (1983). The fractal geometry of nature. *W.H. Freeman & Co*, New York.
- [3] Bonczyk, P.A.; Hall, R.J. (1991). Fractal properties of soot agglomerates. *Langmuir* **7**, 1274-1280.
- [4] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Zhu, J.; Kang, J.; Bae, C. (2001). Detailed characterization of morphology and dimensions of Diesel particulates via thermophoretic sampling. *SAE paper*, 2001-01-3572.
- [5] Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1995). Analysis of fractal cluster morphology parameters: structural coefficient and density

- autocorrelation function Cutoff. *Journal of Colloid and Interface Science* **171**, 470-473.
- [6] Artelt, C.; Schmid, H.J.; Peukert, W. (2003). On the relevance of accounting for the evolution of the fractal dimension in aerosol process simulations. *Journal of Aerosol Science* **34**, 511-534.
- [7] Yang, G.; Biswas, P. (1999). Computer simulation of the aggregation and sintering restructuring of fractal-like clusters containing limited numbers of primary particles. *Journal of Colloid and Interface Science* **211**, 142-150.
- [8] Lattuada, M.; Wu, H.; Morbidelli, M. (2003). A simple model for the structure of fractal aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science* **268**, 106-120.
- [9] Lapuerta, M.; Ballesteros, R.; Martos, F.J. (2006). A method to determine the fractal dimension of diesel soot agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **303**, 149-158.
- [10] Dobbins, R.A.; Megaridis, C.M. (1987). Morphology of flame-generated soot as determined by thermophoretic sampling. *Langmuir* **3**, 254-259.
- [11] Rosner, D.E.; Mackowski, D.W.; García-Ybarra, P.L. (1991). Size- and structure-insensitivity of the thermophoretic transport of aggregated soot particles in gases. *Combustion Science and Technology* **80**, 87-101.
- [12] Oh, C.; Sorensen, C.M. (1997). Light scattering study of fractal cluster aggregation near the free molecular regime. *Journal of Aerosol Science* **28**, 937-957.
- [13] Wu, M.K.; Friedlander, S.K. (1993). Note on the power law equation for fractal-like aerosol agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **159**, 246-248.
- [14] Hu, B.; Koylu, U.O. (2004). Size and morphology of soot particulates sampled from a turbulent nonpremixed acetylene flame. *Aerosol Science and Technology* **38**, 1009-1018.
- [15] Sorensen, C.M.; Roberts, G.C. (1997). The prefactor of fractal aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science* **186**, 447-452.
- [16] Gmachowski, L. (2002). Calculation of the fractal dimensions of aggregates. *Colloids and Surfaces, A: Physicochem. Eng. Aspects* **211**, 197-203.

- [17] Meakin, P. (1984). Diffusion-limited aggregation in three dimensions: results from a new cluster-cluster model. *Journal of Colloid Interface Science* **102**, 491-504.
- [18] Samson, R.J.; Mulholland, G.W.; Gentry, J.W. (1987). Structural analysis of soot agglomerates. *Langmuir* **3**, 272-281.
- [19] Mountain, R.D.; Mulholland, G.W. (1988). Light scattering from simulated smoke agglomerates. *Langmuir* **4**, 1321-1326.
- [20] Megaridis, C.M.; Dobbins, R.A. (1990). Morphological description of flame-generated materials. *Combustion Science and Technology* **71**, 95-109.
- [21] Puri, R.; Richardson, T.F.; Santoro, R.J.; Dobbins, R.A. (1993). Aerosol dynamic processes of soot aggregates in a laminar ethene diffusion flame. *Combustion and Flame* **92**, 320-333.
- [22] Köylü, Ü.Ö.; Faeth, G.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1995). Fractal and projected structure properties of soot aggregates. *Combustion and Flame* **100**, 621-633.
- [23] Brasil, A.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (2000). Evaluation of the fractal properties of cluster-cluster aggregates. *Aerosol Science and Technology* **33**, 440-454.
- [24] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Kang, J.; Bae, C.; Shin, H. (2002). Morphological investigation of the microstructure, dimensions, and fractal geometry of Diesel particulates. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 647-653.
- [25] Park, K.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2004). Structural properties of Diesel exhaust particles measured by Transmission Electron Microscopy (TEM): Relationships to particle mass and mobility. *Aerosol Science and Technology* **38**, 881-889.
- [26] Neer, A.; Koylu, U.O. (2006). Effect of operating conditions on the size, morphology, and concentration of submicrometer particulates emitted from a diesel engine. *Combustion and Flame* **146**, 142-154.
- [27] Ouf, F-X.; Vendel, J.; Coppalle, A.; Weill, M.; Yon, J. (2008). Characterization of soot particles in the plumes of over-ventilated diffusion flames. *Combustion Science and Technology* **180**, 674-698.
- [28] Harrison, H.; Nettleton, T., (1997). *Advanced Engineering Dynamics*. Oxford, Butterworth Heinemann.

- [29] Tipler, P.A. (1989). Física. *Editorial Reverté S.A.*, Barcelona.
- [30] Fry, D.; Mohammad, A.; Chakrabarti, A.; Sorensen, C.M. (2004). Cluster shape anisotropy in irreversibly aggregating particulate systems. *Langmuir* **20**, 7871-7879.
- [31] Kausch, H.H.; Fesko, D.G.; Tschoegl, N.W. (1971). The random packing of circles in a plane. *Journal of Colloid and Interface Science* **37**, 603-611.
- [32] Sutherland, D.N. (1977). Random packing of circles in a plane. *Journal of Colloid and Interface Science* **60**, 96-102.
- [33] Shi, Y.; Zhang Y. (2008). Simulation of random packing of spherical particles with different size distributions. *Applied Physics A: Materials Science & Processing* **92**, 621-626.

Capítulo 4. El Factor y el Exponente de Solape

4.1. INTRODUCCIÓN.....	89
4.2. FACTOR DE SOLAPE LINEAL.....	89
4.2.1. Consideraciones Generales.....	89
4.2.2. Dimensión fractal igual a 1.....	91
4.2.2.1. Introducción.....	91
4.2.2.2. Aglomerado en forma de cadena lineal.....	93
4.2.2.3. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número impar de partículas.....	97
4.2.2.4. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número par de partículas.....	108
4.2.2.5. Resumen.....	132
4.2.3. Dimensión fractal igual a 2.....	133
4.2.3.1. Introducción.....	133
4.2.3.2. Ángulos de giro.....	133
4.2.3.3. Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo α	137
4.2.3.4. Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo φ	141
4.2.3.5. Área solapada duplicada en partículas tangentes dos a dos.....	146
4.2.3.6. Área solapada duplicada en partículas tangentes.....	151
4.2.3.7. Área proyectada por el aglomerado.....	156
4.2.3.8. Factor de solape lineal.....	157
4.2.4. Dimensión fractal igual a 3.....	160
4.2.4.1. Introducción.....	160
4.2.4.2. Aglomerado con compactación cúbica simple.....	161
4.2.4.3. Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.....	161
4.2.4.4. Aglomerado con compactación hexagonal compacta.....	162
4.2.4.5. Aglomerado con compactación aleatoria.....	163
4.2.4.6. Resumen.....	163

4.2.5. Comparación de los distintos casos. Modelo propuesto.....	164
4.3. EXPONENTE DE SOLAPE	168
4.3.1. Consideraciones generales.....	168
4.3.2. Dimensión fractal igual a 1.....	170
4.3.2.1. <i>Aglomerado en forma de cadena lineal.</i>	170
4.3.2.2. <i>Aglomerado en forma de cruz con número impar de partículas.</i>	171
4.3.2.3. <i>Aglomerado en forma de cruz con número par de partículas.</i>	171
4.3.3. Dimensión fractal igual a 2.....	171
4.3.4. Dimensión fractal igual a 3.....	172
4.3.4.1. <i>Aglomerado con compactación cúbica simple.</i>	172
4.3.4.2. <i>Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.</i>	172
4.3.4.3. <i>Aglomerado con compactación hexagonal compacta.</i>	173
4.3.4.4. <i>Aglomerado con compactación aleatoria.</i>	173
4.3.5. Modelo propuesto.....	174
4.4. CONCLUSIONES.....	178
4.5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	180

4.1. INTRODUCCIÓN

Algunos métodos para determinar la dimensión fractal de una población de aglomerados de cualquier tipo de naturaleza son de carácter experimental como por ejemplo, [1] y [2], basados en la obtención de la pendiente de la recta de regresión obtenida al aplicar a toda la población de aglomerados la ley de potencias en escala logarítmica.

Este tipo de método de tipo experimental tiene algunas limitaciones. Una de la más importante resulta que para aplicar la ley de potencias a la población de aglomerados es necesario conocer previamente el número de partículas primarias, pero éste es imposible de conocer a partir de imágenes planas. Las estimaciones de dicho número a partir del área proyectada [3] requieren a su vez proponer un valor para el exponente z' denominado exponente de solape, cuya estimación es arbitraria o está basada en modelos de cálculo no necesariamente desarrollados para el tipo de aerosol estudiado.

En este capítulo se determina y presenta el valor del exponente de solape en función del número de partículas primarias que lo compone para aglomerados de morfología conocida y dimensión fractal entera. En base a estas ecuaciones se puede obtener una función que relaciona el exponente de solape, la dimensión fractal y el número de partículas primarias. Esta función será utilizada en el modelo que se plantea en el capítulo siguiente para determinar el número de partículas primarias y la dimensión fractal de aglomerados reales.

4.2. FACTOR DE SOLAPE LINEAL

4.2.1. CONSIDERACIONES GENERALES

A diferencia de la relación existente entre la conservación de masa y volumen de las partículas primarias con respecto al aglomerado en el que la suma del volumen de todas las partículas primarias es el volumen del aglomerado, el área proyectada del aglomerado no es la misma que la suma de las áreas de las partículas primarias, [4], es decir el área proyectada no es conservativa. Para poder relacionar el área proyectada total del aglomerado con el área proyectada de cada partícula primaria es necesario introducir el factor de solape, z . Se define el factor de solape lineal como la relación entre el área proyectada del aglomerado con respecto a la suma de las áreas proyectadas de las partículas primarias por independiente que componen ese aglomerado. La ecuación que lo describe es:

$$z = \frac{A_p}{\sum_{i=1}^{n_{po}} A_{po_i}} \rightarrow A_p = z \sum_{i=1}^{n_{po}} A_{po_i} \quad (4.1)$$

Si se asume que todas las partículas primarias tienen el mismo radio, la ecuación (4.1) se puede simplificar a:

$$A_p = z n_{po} A_{po} \quad (4.2)$$

Esta definición de factor de solape lineal es diferente a otras definiciones propuestas en la bibliografía como [5] y [6]. C. Oh *et al* [5] definen el factor de solape como la relación entre el diámetro de la partícula primaria respecto a la distancia entre los centros de dos partículas primarias que se solapan, mientras que A.M. Brasil *et al* [6] definen el factor de solape justamente al contrario. Para estos autores, es la relación entre la distancia que hay entre los centros de dos partículas primarias que se solapan frente al diámetro de ambas partículas primarias, que es el mismo, ya que suponen que son iguales en tamaño.

Si se parte de la hipótesis de densidad uniforme en el aglomerado, se puede obtener que existe conservación en volumen a partir de la conservación másica, de manera que el número de partículas primarias queda:

$$m_p = n_{po} m_{po} \rightarrow n_{po} = \frac{m_p}{m_{po}} = \frac{\rho_h V_h}{\rho_h V_{po}} = \frac{V_h}{V_{po}} \quad (4.3)$$

Sustituyendo el número de partículas primarias de la ecuación (4.3) en la ecuación (4.2) se puede obtener una expresión del factor de solape lineal, que queda:

$$z = \frac{V_{po}}{V_h} \frac{A_p}{A_{po}} \quad (4.4)$$

Al asumir la partícula primaria como esférica, la ecuación (4.4) queda:

$$z = \frac{2 d_{po}}{3} \frac{A_p}{V_h} \quad (4.5)$$

El volumen no puede ser medido por ningún medio óptico, pero si puede ser estimado a partir del factor de solape. El factor de solape está muy ligado a la dimensión fractal, de manera que conforme la dimensión fractal aumenta el factor de solape tiene que disminuir. En línea con el capítulo anterior, a continuación se calcula analíticamente el factor de solape en los casos en los que la dimensión fractal es un número entero 1, 2 y 3. Posteriormente se

propone un modelo, que cumpliendo con estas condiciones de contorno, pueda predecir el factor de solape para un aglomerado real.

4.2.2. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 1.

4.2.2.1. Introducción.

Si el aglomerado está compuesto por dos partículas primarias con un punto de contacto común entre ambas, figura 4.1, entonces el factor de solape depende del ángulo que forma la línea que une los centros de las primarias y el plano de proyección, sobre el que se toma la imagen.

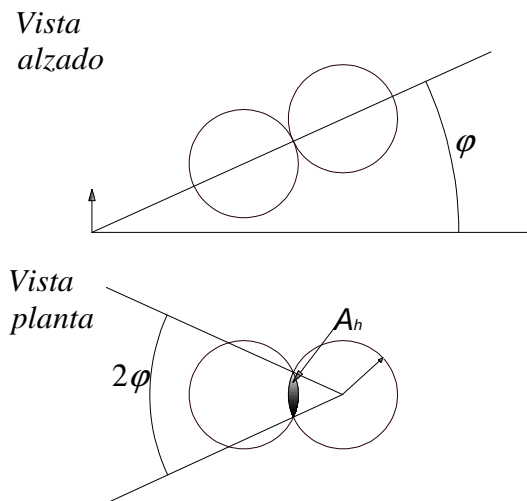


Figura 4.1. Solape entre dos esferas que están en contacto.

El área proyectada, A_p , es la suma de todas las áreas de las partículas primarias menos el área solapa o escondida, A_h .

$$A_p = 2A_{po} - A_h \quad (4.6)$$

Según la ecuación (4.2) el factor de solape es la relación entre el área proyectada y la suma de las áreas de las esferas. Se puede obtener el factor de solape en función del solape entre áreas sustituyendo la ecuación (4.4) en la ecuación (4.2).

$$z = \frac{A_p}{2A_{po}} = \frac{2A_{po} - A_h}{2A_{po}} = 1 - \frac{A_h}{2A_{po}} \quad (4.7)$$

Mediante un sencillo análisis geométrico se puede obtener el área escondida o tapada entre una esfera y la otra:

$$A_h = r_{po}^2 (2\varphi - \text{sen } 2\varphi) \quad (4.8)$$

En la ecuación (4.7) se aprecia cómo el factor de solape depende del tamaño del ángulo φ , así que en adelante se tendrá en cuenta esta dependencia. Sustituyendo la ecuación (4.8) en la (4.7) se obtiene el factor de solape entre las dos esferas.

$$z(\varphi) = 1 - \frac{r_{po}^2 (2\varphi - \text{sen } 2\varphi)}{2\pi r_{po}^2} = 1 - \frac{2\varphi - \text{sen } 2\varphi}{2\pi} \quad (4.9)$$

La figura 4.2 es la representación de la ecuación (4.9). Cuando el ángulo de proyección es nulo el solape entre las dos esferas es nulo, por lo que el factor de solape es 1. En el otro extremo, cuando el ángulo de proyección es 90° el solape entre las esferas es máximo. En este caso, el área proyectada es la mitad que la suma de las áreas de las esferas por separado, así que el factor de solape es 0.5, como puede comprobarse en la figura.

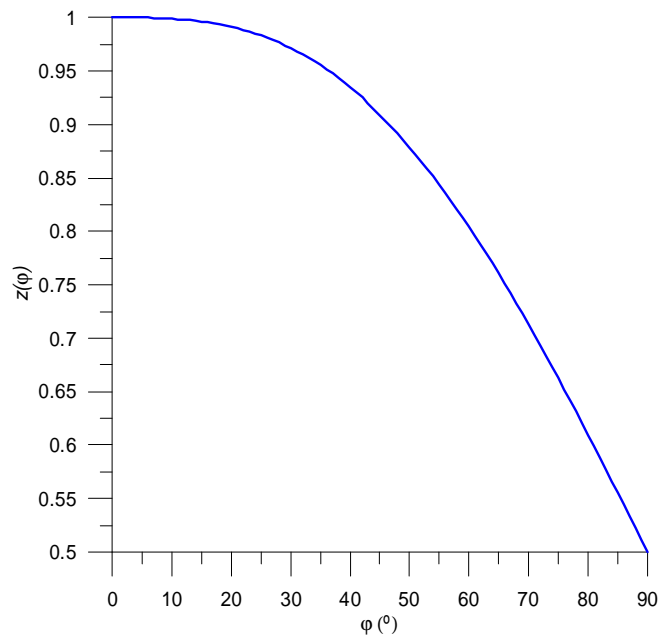


Figura 4.2. Factor de solape para las dos esferas, en función del ángulo φ .

El caso en el que en el que la dimensión fractal del aglomerado es 1, se puede encontrar tres tipos de subestructuras:

- Aglomerado en forma de cadena lineal

- Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas
- Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas.

Se va a analizar estos tres casos con la misma forma de proceder que la que se ha aplicado en una pareja de partículas. Primero se hace un estudio de las áreas solapadas en función de los distintos ángulos de proyección, a continuación se calcula el área proyectada y por último se obtiene el factor lineal de solape.

4.2.2.2. Aglomerado en forma de cadena lineal

En este aglomerado la compactación es la mínima posible. Se compone de una cadena de partículas primarias alineadas, tal como se representa en la figura 4.3. De hecho, solo en el caso en que esta cadena fuera suficientemente larga se puede decir que la dimensión fractal tiende a 1, no así en el caso de dos partículas primarias alineadas.

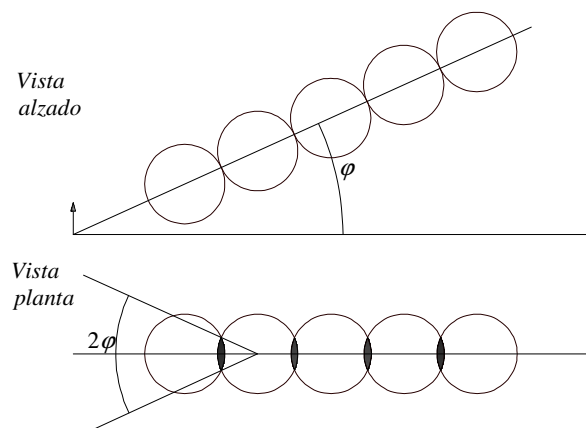


Figura 4.3. Solape entre un alto número de partículas primarias alineadas y su proyección.

Igualmente al caso de dos partículas esféricas, se puede obtener el área escondida o solapada total de la cadena de esferas de la figura anterior. Esta área es la suma de todas las áreas escondidas por cada dos partículas primarias. Únicamente la primera partícula no está solapada por ninguna otra. Por lo tanto, el área solapada total se obtiene generalizando la ecuación (4.8):

$$A_h = (n_{po} - 1)r_{po}^2 (2\varphi - \text{sen } 2\varphi) \quad (4.10)$$

Por otro lado la generalización de la ecuación (4.7) al caso representado en la figura 4.3 permite obtener el factor lineal de solape:

$$z = \frac{A_p}{n_{po} A_{po}} = \frac{n_{po} A_{po} - A_h}{n_{po} A_{po}} = 1 - \frac{A_h}{n_{po} A_{po}} \quad (4.11)$$

Sustituyendo la ecuación (4.10) en la ecuación (4.11) se puede obtener el factor de solape total de la cadena de partículas primarias.

$$z(\varphi) = 1 - \frac{A_h}{n_{po} A_{po}} = 1 - \frac{(n_{po} - 1)(2\varphi - \text{sen } 2\varphi)}{n_{po} \pi} \quad (4.12)$$

La ecuación (4.12) se ha representado en la figura 4.4. En esta figura se muestra como aumenta el factor de solape conforme aumenta el número de partículas primarias para un mismo ángulo de proyección.

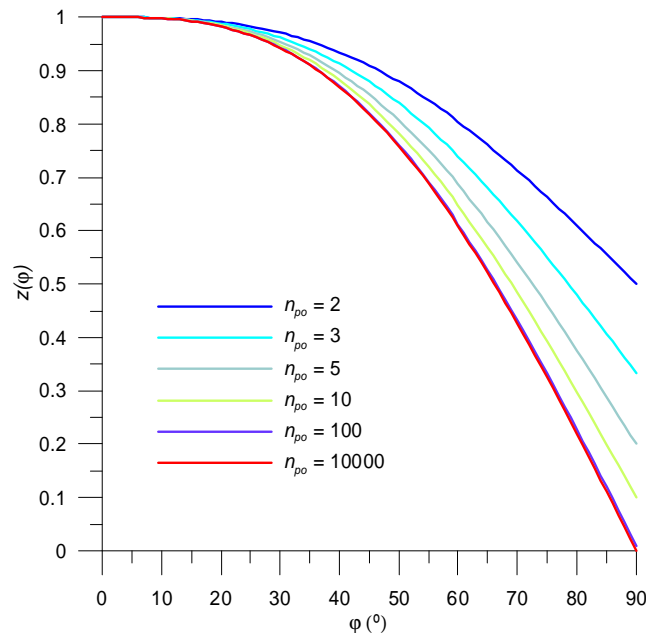


Figura 4.4. Factor de solape para una cadena lineal de partículas primarias en función de φ y n_{po} .

Debido a que el ángulo entre la cadena alineada y el plano de proyección es arbitrario, el factor de solape puede ser calculado como la media de los distintos factores de solapamiento individuales que pueden suceder para todas las orientaciones posibles en las que puede encontrarse la cadena de partículas primarias. Se obtiene esta media mediante integración extendida a la semiesfera visible utilizando coordenadas esféricas, figura 4.5. Dicha media es la relación entre la suma de todos los factores de solape en todas las orientaciones con respecto a todas las orientaciones posibles.

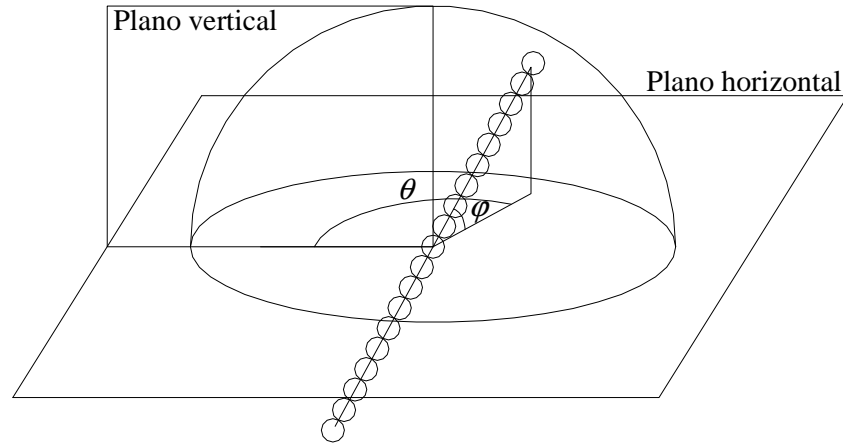


Figura 4.5. Semiesfera visible que recoge todas las orientaciones posibles de la cadena de partículas primarias alineadas.

$$z = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} z(\varphi) \cos \varphi d\varphi d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi d\theta} \quad (4.13)$$

Sustituyendo la ecuación (4.12) en la (4.13) y teniendo en cuenta que como el factor de solape no depende del ángulo θ , la primera integral es directamente 2π , por tanto:

$$\begin{aligned} z &= \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} z(\varphi) \cos \varphi d\varphi d\theta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi d\theta} = \\ &= \frac{2\pi \left[\int_0^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi - \frac{2(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \int_0^{\pi/2} \varphi \cos \varphi d\varphi + \frac{(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \int_0^{\pi/2} \sin 2\varphi \cos \varphi d\varphi \right]}{2\pi} = \\ &= \frac{2\pi \left[1 - \frac{2(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \left(\frac{\pi}{2} - 1 \right) + \frac{(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \frac{2}{3} \right]}{2\pi} = \\ &= 1 - \frac{2(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \left(\frac{\pi}{2} - 1 \right) + \frac{(n_{po} - 1)}{\pi n_{po}} \frac{2}{3} \end{aligned} \quad (4.14)$$

Reordenando los factores de la ecuación (4.14), se obtiene la expresión que modela el factor de solape para un aglomerado lineal con dimensión fractal unidad.

$$z = \frac{8}{3\pi} + \frac{1}{n_{po}} \left(1 - \frac{8}{3\pi}\right) = 0.8488 + \frac{0.1512}{n_{po}} \quad (4.15)$$

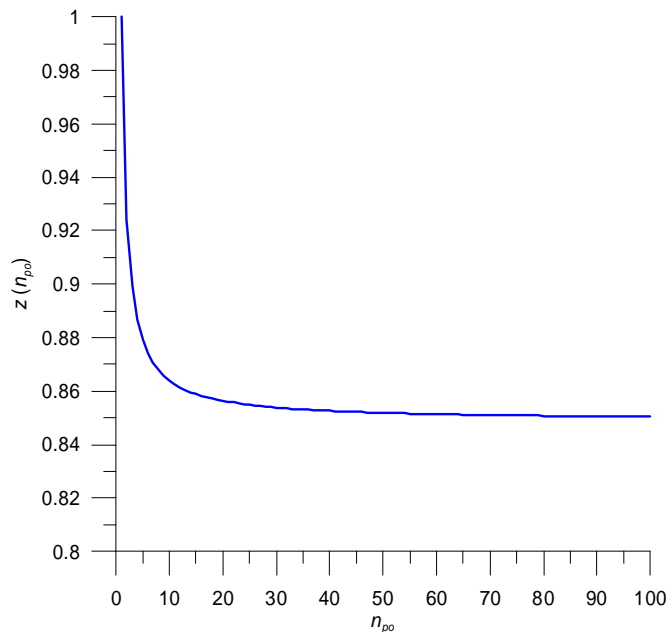


Figura 4.6. Factor de solape de una cadena lineal en función de n_{po} .

La ecuación (4.15) está representada en la figura 4.6. Para n_{po} igual a 1 el factor de solape es la unidad, y cuando el número de partículas primaria tiende a infinito el factor de solape tiende a 0.8488.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0.8488 \quad (4.16)$$

Los dos epígrafes siguientes recogen el estudio de aquellos aglomerados formados por cadenas lineales perpendiculares. En el caso anterior la cadena formaba un ángulo libre con el plano de proyección, dicho ángulo es una variable independiente. En el caso de aglomerado con dos ramas se va a suponer que una cadena puede formar un ángulo libre (como en el caso de una cadena simple) y la otra cadena formará un ángulo con el plano de proyección que será función de su propio ángulo libre y del ángulo libre de la otra cadena, así se consigue mantener la perpendicularidad entre cadenas para cualquier giro posible.

Además se distinguen dos posibilidades en función del número de partículas primarias que componen el aglomerado. Si el número de partículas es

impar tendrá una partícula situada en el cruce de las dos cadenas, es decir, habrá una partícula que pertenezca a ambas cadenas. Si el número es par, cada cadena estará formado por un número de partículas y por tanto en el cruce de las cadenas habrá un hueco. Esta singularidad en el origen de coordenadas influye en el factor de solape lineal únicamente cuando el número de partículas primarias que componen el aglomerado es pequeño. Por tanto, aunque el factor de solape tenga distintos términos en ambos casos, si el número de partículas que forman el aglomerado tiende a infinito, el factor de solape lineal debe ser el mismo.

4.2.2.3. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número impar de partículas

Partiendo de un aglomerado como el de la figura 4.7, la singularidad de la partícula situada en el origen de coordenadas hace que haya una partícula primaria que pertenezca a ambas cadenas.

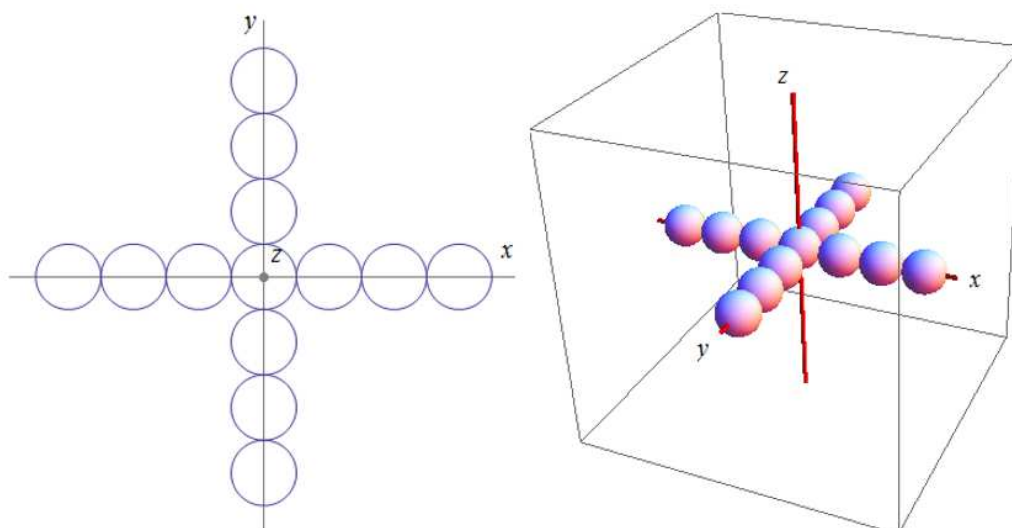


Figura 4.7. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas.

El aglomerado está formado por n_{po} partículas primarias con la particularidad de que la partícula central pertenece a ambas cadenas, como ya se ha comentado, por lo que para mayor simplicidad se considera que ambas cadenas se componen del mismo número de partículas. Suponiendo que el número de partículas de una cadena en el aglomerado de la figura anterior es n_1 , la relación entre n_1 y n_{po} vendría dada por la ecuación (4.17):

$$n_1 = \frac{n_{po} + 1}{2} \quad (4.17)$$

Y debido a que la partícula central pertenece a ambas cadenas se tiene que cumplir la ecuación:

$$n_{po} = n_1 + n_1 - 1 \quad (4.18)$$

Después de quedar definido el número de partículas primarias que forma las cadenas, se procede a estudiar las áreas proyectadas. Para ello se considera que la cadena A es la que está alineada con el eje x, y la cadena B es la que está alineada con el eje y, cuando el aglomerado está apoyado sobre el plano de proyección, tal y como se muestra en la figura 4.8.

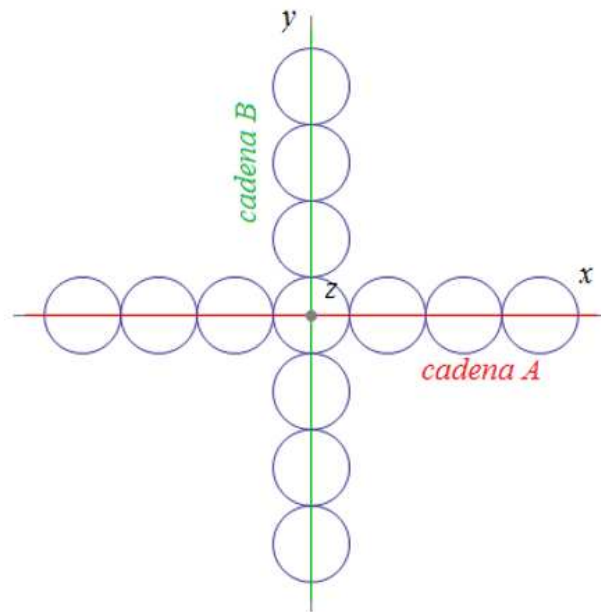


Figura 4.8. Nomenclatura de las cadenas que componen el aglomerado.

Las coordenadas iniciales de cada partícula se definen como aquellas que tienen cuando el factor de solape lineal es igual a la unidad. Si esto ocurre, el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección.

$$O_{particula} = (x_i, y_i, 0) \quad (4.19)$$

Se observa que las partículas primarias de la cadena A permanecen siempre alineadas con el eje x, por tanto su coordenada y_i siempre es nula.

En caso de que las partículas de la cadena A formen un ángulo arbitrario α con el plano horizontal, se puede obtener las coordenadas de las partículas en función de las coordenadas iniciales. Se especifican en la ecuación:

$$O_{\text{partícula A}} = \begin{cases} x = x_i \cos \alpha \\ y = 0 \\ z = x_i \operatorname{sen} \alpha \end{cases} \quad (4.20)$$

Después del giro descrito, la cadena A se sitúa en la recta indicada en la ecuación (4.21)

$$z = x \tan \alpha \quad ; \quad y = 0 \quad (4.21)$$

Al girar la cadena B forma un ángulo β con la recta perpendicular a la cadena A, la cual se sitúa en el plano descrito en la ecuación (4.21). Esto es así para mantener la perpendicularidad entre cadenas.

Según la figura 4.9, la cadena A situada en el plano verde, forma un ángulo α con el plano de proyección (plano xy). La cadena B se sitúa en el plano azul formando un ángulo β con el plano verde.

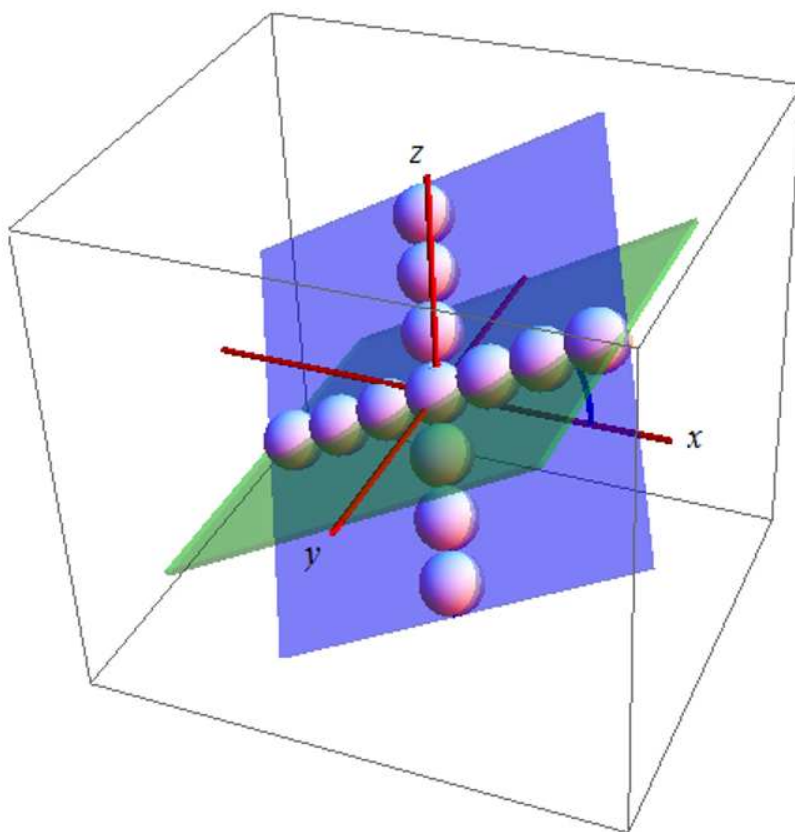


Figura 4.9. Identificación de los planos en los que se encuentran las cadenas de aglomerado en forma de cruz para una pareja de ángulos α y β cualesquiera.

Para mantener la perpendicularidad, las coordenadas de las partículas primarias de la cadena B estarán en función de su posición inicial, de su ángulo libre β y del ángulo libre, α , que forme la cadena A. Dichas coordenadas serán las de la ecuación (4.22):

$$O_{\text{cadena B}} = \begin{cases} x = x_i \cos \alpha - y_i \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta \\ y = y_i \cos \beta \\ z = x_i \operatorname{sen} \alpha + y_i \cos \alpha \operatorname{sen} \beta \end{cases} \quad (4.22)$$

Las áreas proyectadas se obtienen conociendo previamente los ángulos que forman las cadenas del aglomerado con el plano de proyección. El ángulo de la cadena A es conocido e igual a α . Con el plano de proyección la cadena B forma un ángulo φ que es función de α y β . Este ángulo se determina usando como referencia las partículas sombreadas de la cadena B de la figura 4.10

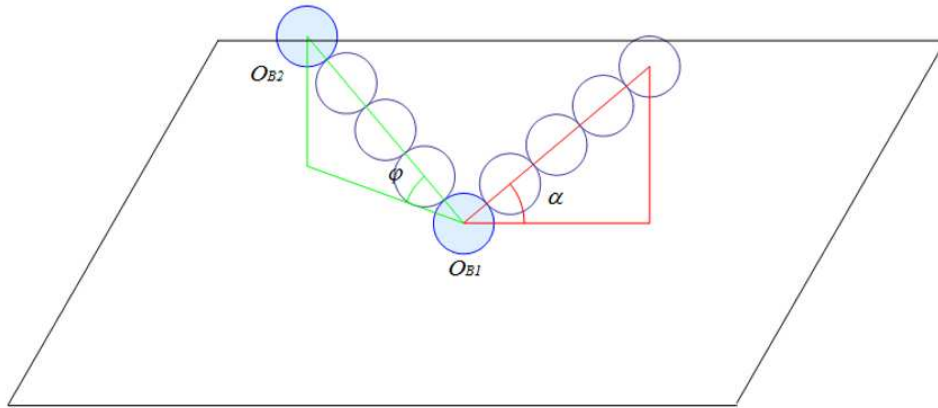


Figura 4.10. Ángulos de proyección de la pareja de cadenas que forman el aglomerado.

Las coordenadas iniciales de las partículas sombreadas vienen dadas por las ecuaciones siguientes:

$$O_{B1} = (0, 0, 0) \quad (4.23)$$

$$O_{B2} = (0, 8r_{po}, 0) \quad (4.24)$$

Al girar las cadenas unos ángulos α y β , las coordenadas se pueden calcular mediante la ecuación (4.22) y queda según las ecuaciones siguientes:

$$O_{B1} = (0, 0, 0) \quad (4.25)$$

$$O'_{B1} = (-8r_{po} \operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \alpha, 8r_{po} \cos \beta, 8r_{po} \operatorname{sen} \beta \cos \alpha) \quad (4.26)$$

La distancia entre centros no varía debido a que las partículas de una misma cadena deben permanecer tangentes en todo momento, por lo que se puede obtener el módulo de la distancia entre los centros con las ecuaciones (4.25) y (4.26); o con las ecuaciones (4.23) y (4.24). La distancia es:

$$\overline{O_{B1}O_{B2}} = \sqrt{(x_{O_{B1}} - x_{O_{B2}})^2 + (y_{O_{B1}} - y_{O_{B2}})^2 + (z_{O_{B1}} - z_{O_{B2}})^2} \quad (4.27)$$

$$\overline{O_{B1}O_{B2}} = 8r_{po} \quad (4.28)$$

Ahora se puede decir que ya son conocidos los parámetros necesarios para el cálculo del ángulo que forma la cadena B con el plano de proyección, φ . Dicho ángulo se obtiene mediante las relaciones trigonométricas de la ecuación (4.29) y su valor se refleja en la ecuación (4.30):

$$\text{sen } \varphi = \frac{z_{O_{B1}} - z_{O_{B2}}}{O_{B1} - O_{B2}} = \frac{8r_{po} \text{sen } \beta \cos \alpha}{8r_{po}} = \text{sen } \beta \cos \alpha \quad (4.29)$$

$$\varphi(\alpha, \beta) = \arcsen(\text{sen } \beta \cos \alpha) \quad (4.30)$$

Llegado a este punto, son conocidos los ángulos que forman las dos cadenas que forman el aglomerado con el plano de proyección, la cadena A forma un ángulo α y la cadena B forma un ángulo $\varphi(\alpha, \beta)$.

Para obtener las áreas solapadas y posteriormente el área proyectada se sigue el mismo procedimiento que el que se ha utilizado para una cadena simple. Sin embargo, aquí se encuentra la singularidad de que la partícula central pertenece a ambas cadenas. Para solventar esta particularidad, se tratan por separado ambas cadenas como si no tuviesen partícula central, y posteriormente se estudia ésta por separado.

Tal y como indica la ecuación (4.17) cada aglomerado en forma de cruz está formado por n_1 partículas primarias, pero como se explica al inicio del apartado, n_1 incluye la partícula central. Si para el cálculo de los solapes no se tiene en cuenta la partícula central, las cadenas estarán formadas por n'_1 partículas, como se observa en la ecuación (4.31):

$$n'_1 = n_1 - 1 \quad (4.31)$$

En la ecuación (4.8) se obtiene el área solapada entre dos partículas en función del ángulo que formen con el plano de proyección. El área solapada entre dos partículas de la cadena A que forma un ángulo α se observa en la ecuación (4.32). Y el área solapada por dos partículas de la cadena B, que forma un ángulo φ , se expone en la ecuación (4.33).

$$A_{h_A} = r_{po}^2 (2\alpha - \text{sen}2\alpha) \quad (4.32)$$

$$A_{h_B} = r_{po}^2 [2\varphi(\alpha, \beta) - \text{sen}(2\varphi(\alpha, \beta))] \quad (4.33)$$

Como ya se tiene el número de partículas primarias que componen cada cadena y las áreas solapadas que se producen en una pareja de partículas, se puede obtener el área proyectada. Las áreas proyectadas que se localizan son tres, A_A correspondiente al área proyectada por la cadena A; A_B correspondiente a la cadena B; y A_C de la partícula central. Estas áreas se pueden definir con ayuda de la figura 4.3 y la ecuación (4.10) según las ecuaciones siguientes:

$$A_A = n'_1 A_{po} - (n'_1 - 1) A_{h_A} \quad (4.34)$$

$$A_B = n'_1 A_{po} - (n'_1 - 1) A_{h_B} \quad (4.35)$$

$$A_C = A_{po} - A_{h_A} - A_{h_B} \quad (4.36)$$

Una vez obtenidas las áreas proyectadas de las cadenas y de la partícula central, se obtiene el área proyectada total como el sumatorio de las áreas anteriores, y con ella, se puede determinar el factor de solape:

$$z = \frac{A_p}{n_{po} A_{po}} = \frac{A_A + A_B + A_C}{n_{po} A_{po}} \quad (4.37)$$

Para expresar el factor de solape en función de las áreas solapadas se sustituyen las ecuaciones (4.34), (4.35) y (4.36) en la ecuación (4.37) y se obtiene:

$$z = \frac{(2n'_1 + 1)A_{po} - n'_1 (A_{h_A} + A_{h_B})}{n_{po} A_{po}} \quad (4.38)$$

Para expresar el factor de solape en función sólo de las áreas solapadas y el número de partículas primarias del aglomerado se deben sustituir en la ecuación (4.38) las ecuaciones (4.17) y (4.31), obteniendo:

$$z = \frac{n_{po} A_{po} - \left(\frac{n_{po} - 1}{2} \right) (A_{h_A} + A_{h_B})}{n_{po} A_{po}} \quad (4.39)$$

Para obtener el factor de solape en función de los ángulos que forman las cadenas con el plano de proyección y el número de partículas primarias del

aglomerado, se sustituye en la ecuación (4.39), las ecuaciones (4.32) y (4.33), obteniendo:

$$z = 1 - \frac{\left(\frac{n_{po} - 1}{2}\right)}{n_{po}\pi} [2\alpha - \text{sen}2\alpha + 2\varphi(\alpha, \beta) - \text{sen}(2\varphi(\alpha, \beta))] \quad (4.40)$$

Para este aglomerado, la variación del factor de solape lineal en función de los ángulos α y β para un número determinado de partículas se representa en las figuras 4.11 y 4.12. Los ángulos α y β son arbitrarios como ocurría en el apartado anterior.

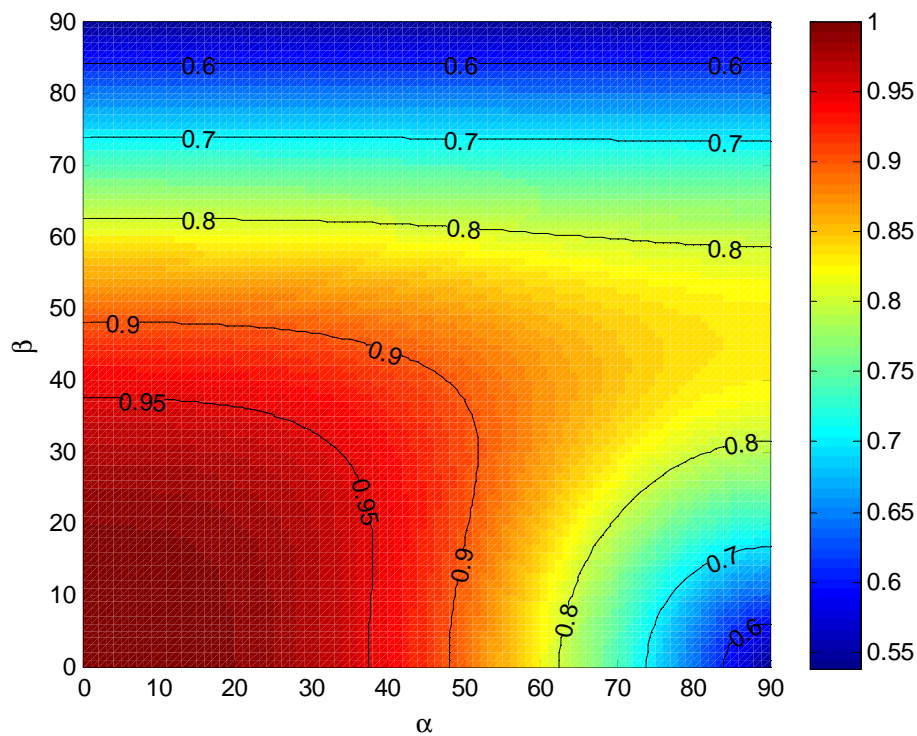


Figura 4.11. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=13$.

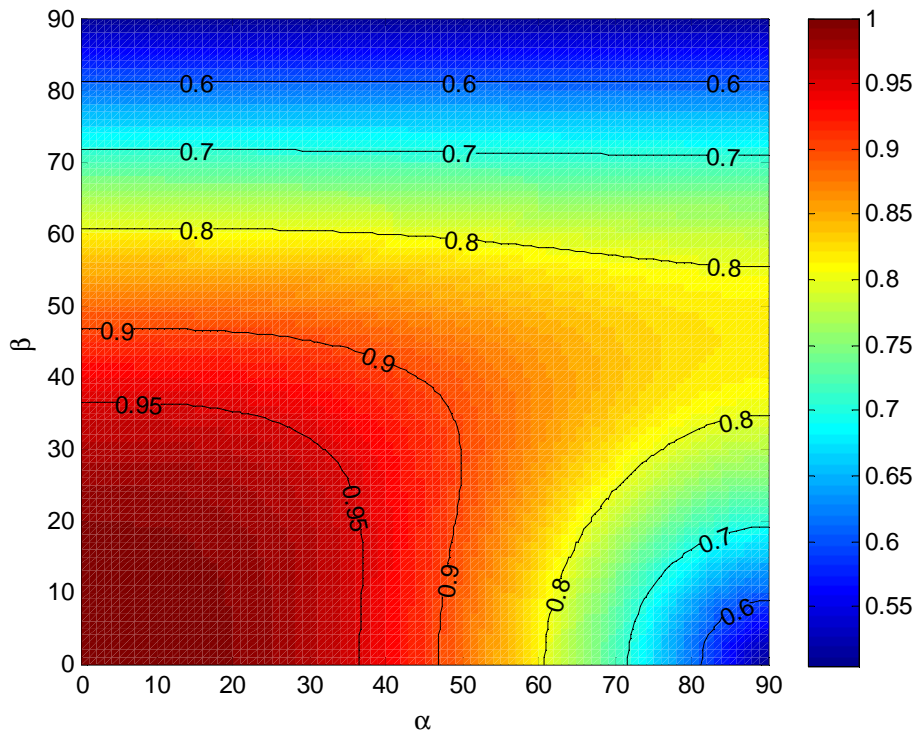


Figura 4.12. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{p0}=101$.

Para obtener una relación directa entre factor de solape lineal y el número de partículas primarias que componen el aglomerado, se realiza la media hemisférica entre todos los factores de solape que se pueden obtener para cada pareja de α y β . Dicha media hemisférica se obtiene mediante integración extendida en la semiesfera visible utilizando coordenadas esféricas como se muestra en la figura 4.13:

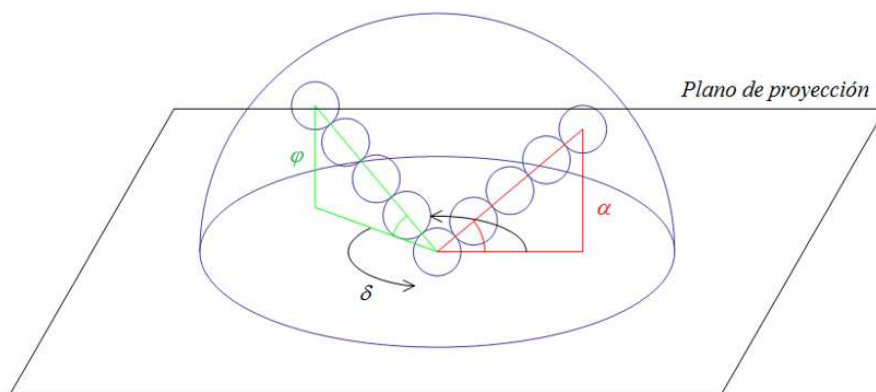


Figura 4.13. Semiesfera visible que abarca las posibles orientaciones del aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas primarias.

Cuando se analiza una única cadena, se obtiene la media con una integral doble en toda la semiesfera. En este caso, debido a que hay dos cadenas, es posible separar la ecuación (4.40) en las dos partes relativas a cada cadena y hallar la media del factor de solape de cada cadena por separado. Observando la figura 4.13, se aprecia que la cadena A está influenciada por el ángulo de proyección α , por tanto para calcular la media, la integral será función de α y δ . La cadena B sin embargo, es función de α y β , por lo que la integral correspondiente será función de α , β y δ .

Agrupando términos de la ecuación (4.40) se obtiene:

$$z = 1 - \frac{\left(\frac{n_{po} - 1}{2}\right)}{n_{po}\pi} [f(\alpha) + g(\varphi(\alpha, \beta))] \quad (4.41)$$

Por lo que integrando las funciones $f(\alpha)$ y $g(\varphi(\alpha, \beta))$ entre los límites correspondientes, se determina la media del factor de solape lineal, en la ecuación (4.42):

$$\bar{z} = 1 - \frac{\left(\frac{n_{po} - 1}{2}\right)}{n_{po}\pi} [I_1 + I_2] \quad (4.42)$$

Donde las variables I_1 e I_2 son las integrales de las funciones f y g de la ecuación (4.41). Resolviendo la primera integral, se obtiene:

$$I_1 = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(\alpha) \cos \alpha \, d\alpha \, d\delta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \alpha \, d\alpha \, d\delta} \quad (4.43)$$

$$I_1 = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (2\alpha - \text{sen} 2\alpha) \cos \alpha \, d\alpha \, d\delta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \alpha \, d\alpha \, d\delta} \quad (4.44)$$

$$I_1 = \frac{2\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} (2\alpha - \text{sen} 2\alpha) \cos \alpha \, d\alpha}{2\pi} \quad (4.45)$$

$$I_1 = \left(\pi - \frac{8}{3} \right) \quad (4.46)$$

La segunda integral está relacionada con la cadena que forma un ángulo φ con el plano de proyección. Si se observa la ecuación (4.30), para un ángulo α fijo y β variable, el ángulo de proyección φ solo puede variar entre 0 y φ_{\max} , por lo que la integral I_2 , queda:

$$I_2 = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{\max}} g(\varphi(\alpha, \beta)) \cos(\varphi(\alpha, \beta)) d\alpha d\varphi d\delta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{\max}} \cos(\varphi(\alpha, \beta)) d\alpha d\varphi d\delta} \quad (4.47)$$

La ecuación (4.47) debe estar en función de parámetros conocidos α , β y δ , en lugar de φ_{\max} , que es desconocido. El rango de φ se toma para un valor de α fijo, es decir, para hallar la relación entre $d\varphi$ y $d\beta$ se debe derivar la ecuación (4.30) respecto al ángulo variable β .

$$\text{sen} \varphi(\alpha, \beta) = \text{sen} \beta \cos \alpha \quad (4.48)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \beta} \rightarrow \cos \varphi d\varphi = \cos \beta d\beta \cos \alpha \quad (4.49)$$

Si se sustituye la ecuación (4.49) en la ecuación (4.47) se obtiene la integral en función de α y β , como sigue:

$$I_2 = \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (2\varphi(\alpha, \beta) - \text{sen}(2\varphi(\alpha, \beta))) \cos \alpha \cos \beta d\alpha d\beta d\delta}{\int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \alpha \cos \beta d\alpha d\beta d\delta} \quad (4.50)$$

Una vez sustituido la ecuación (4.30), se resuelve esta integral de manera numérica. El resultado es:

$$I_2 = 0.2558 \quad (4.51)$$

Tras resolver esas dos integrales se obtiene la relación entre el factor de solape lineal medio y el número de partículas primarias que componen el aglomerado. Se sustituyen las ecuaciones (4.46) y (4.51) en la ecuación (4.42), obteniendo:

$$\bar{z} = 1 - \frac{\left(\frac{n_{po} - 1}{2}\right)}{n_{po} \pi} \left[\pi - \frac{8}{3} + 0.2558 \right] \quad (4.52)$$

Esta ecuación se puede simplificar para obtener una relación hiperbólica en la ecuación (4.55):

$$\bar{z} = 1 - \left(\frac{1}{2\pi} - \frac{1}{2\pi n_{po}} \right) (0.7307) \quad (4.53)$$

$$\bar{z} = 1 - (0.1163) \left(\frac{0.1163}{n_{po}} \right) \quad (4.54)$$

$$\bar{z} = 0.8837 + \left(\frac{0.1163}{n_{po}} \right) \quad (4.55)$$

Al representar la ecuación (4.55), se obtiene la evolución del factor del solape lineal medio en función del número de partículas primarias. Se muestra en la figura 4.14.

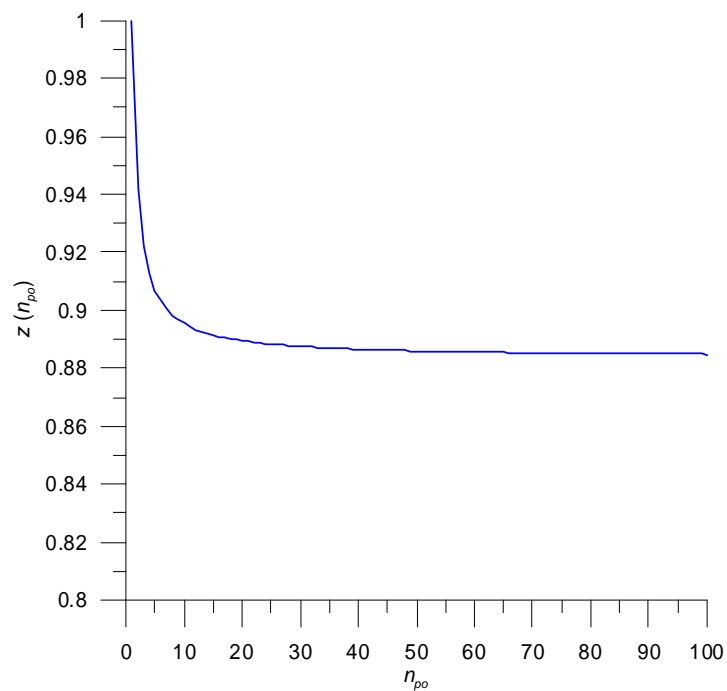


Figura 4.14. Evolución del factor de solape lineal en función del número de partículas primarias para un aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número impar de partículas primarias.

Si el número de partículas tiende a infinito, el factor de solape lineal tiende a un valor determinado, el cual se obtiene mediante el límite de la ecuación (4.55).

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0.8837 \quad (4.56)$$

4.2.2.4. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número par de partículas

En este caso, las partículas sólo pueden pertenecer a una cadena, es decir, no existe partícula central. Las cuatro partículas primarias más cercanas al origen, dos de cada cadena, tienen compactación cúbica, por ello es por lo que se forma un hueco en el origen de coordenadas que influye en el cálculo de las áreas solapadas.

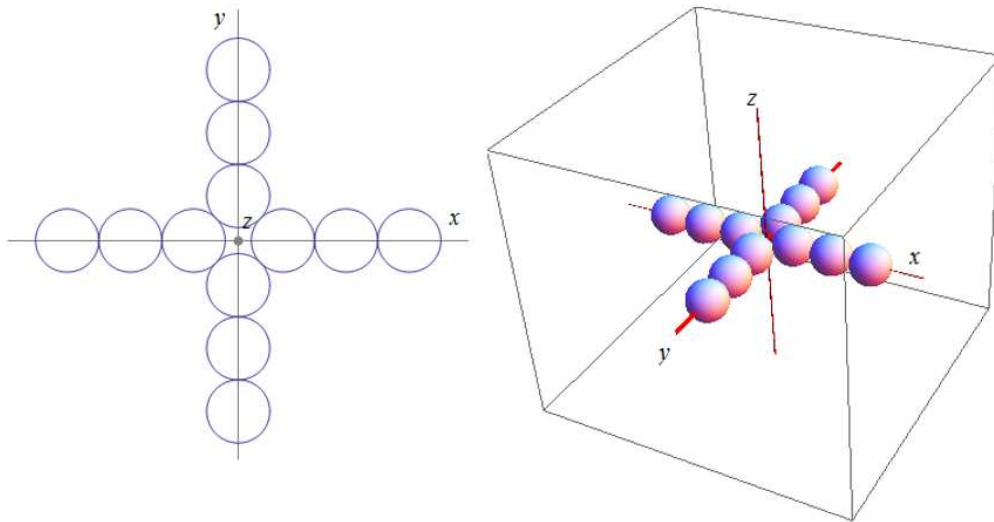


Figura 4.15. Aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas.

Suponiendo las mismas hipótesis que en el caso anterior, el número de partículas primarias que componen el aglomerado son n_{po} y ambas cadenas tienen el mismo número de partículas. Puesto que en este caso las cadenas no comparten ninguna partícula, es más sencillo calcular el número de partículas que tiene cada cadena una vez conocida n_{po} .

$$n_2 = \frac{n_{po}}{2} \quad (4.57)$$

Tras conocer el número de partículas de cada cadena, se calcula las áreas solapadas como se ha hecho en el apartado anterior, nombrando las cadenas como se indica la figura 4.16.

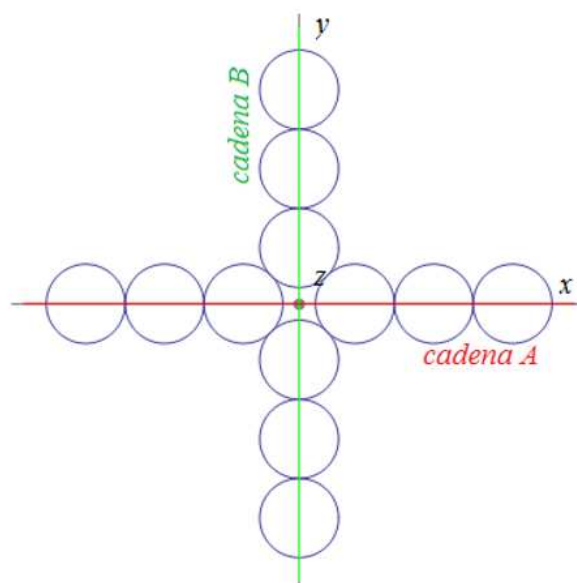


Figura 4.16. Nomenclatura de las cadenas que forman el aglomerado en forma de cruz con número par de partículas.

La cadena A, como en el caso anterior, forma un ángulo α con el plano horizontal y la cadena B forma un ángulo β con el plano en el que se encuentra la cadena A con el fin de mantener la perpendicularidad. Al girar el aglomerado unos ángulos α y β cualesquiera, la cadena A se encuentra en el plano verde, el cual formará un ángulo α con el plano con el plano de proyección XY, y la cadena B se encuentra en el plano azul, que forma un ángulo β con el plano verde, como se muestra en la figura 4.17.

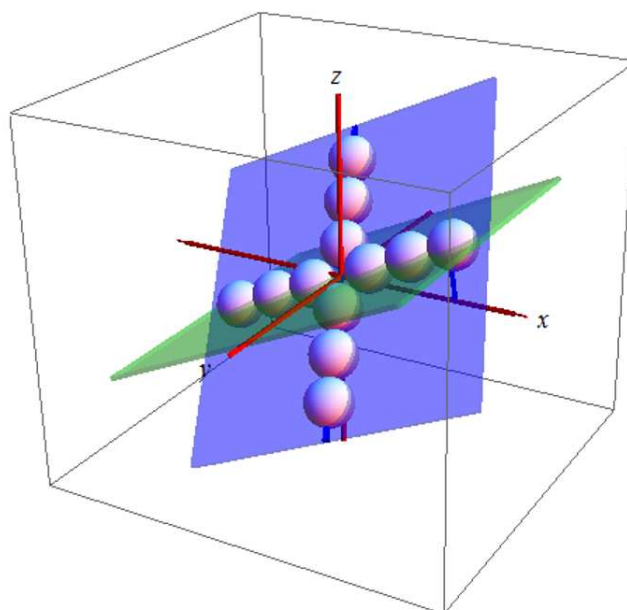


Figura 4.17. Planos sobre los que se encuentran las cadenas del aglomerado en forma de cruz para una pareja de ángulos α y β cualesquiera.

Se entiende por coordenadas iniciales aquellas que tiene la partícula cuando el factor de solape lineal es igual a la unidad, por tanto, el aglomerado se encuentra apoyado sobre el plano de proyección. Las coordenadas iniciales de cada partícula vendrán definidas por:

$$O_i = (x_i, y_i, z_i) \quad (4.58)$$

En el caso en que el aglomerado forme ángulos de giro arbitrarios α y β , las coordenadas de las partículas primarias de la cadena A son:

$$O_{particula\ A} = \begin{cases} x = x_i \cos \alpha \\ y = 0 \\ z = x_i \sin \alpha \end{cases} \quad (4.59)$$

Las coordenadas de la partícula primaria de la cadena B son:

$$O_{particula\ B} = \begin{cases} x = x_i \cos \alpha - y_i \sin \alpha \sin \beta \\ y = y_i \cos \beta \\ z = x_i \sin \alpha + y_i \cos \alpha \sin \beta \end{cases} \quad (4.60)$$

Lo cual indica que la cadena B forma un ángulo φ en función de α y β calculado en el apartado anterior. La relación entre los tres ángulos es:

$$\varphi(\alpha, \beta) = \arcsen(\sin \beta \cos \alpha) \quad (4.61)$$

Una vez conocidos los ángulos de las dos cadenas del aglomerado con el plano de proyección, es posible calcular el área solapada entre dos partículas tangentes pertenecientes a una misma cadena. Las expresiones del área solapada entre dos partículas de la cadena A (ecuación (4.62)) y de la cadena B (ecuación (4.63)), son:

$$A_{h_A} = r_{po}^2 (2\alpha - \sin(2\alpha)) \quad (4.62)$$

$$A_{h_B} = r_{po}^2 (2\varphi(\alpha, \beta) - \sin(2\varphi(\alpha, \beta))) \quad (4.63)$$

Las áreas solapadas en una cadena de partículas primarias han sido calculadas suponiendo que dichas partículas permanecen tangentes en todo momento, pero debido a la configuración de las cadenas que se describen en la figura 4.15, las partículas más próximas al centro de cada cadena no son tangentes. Por ello es necesario hacer un estudio para calcular las áreas

solapadas entre estas dos parejas de partículas no tangentes en función de los ángulos de proyección α y $\varphi(\alpha, \beta)$.

Primero se calcula la distancia de las partículas centrales al origen de coordenadas con un análisis geométrico, como el que se muestra en la figura 4.18:

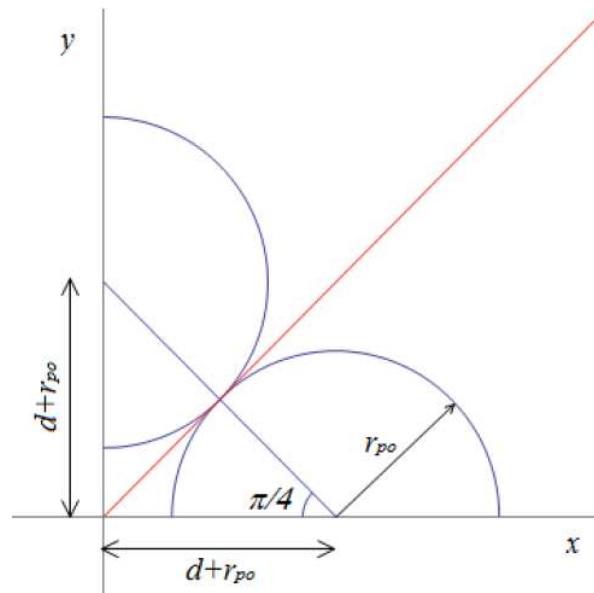


Figura 4.18. Geometría de las partículas centrales respecto al origen de ordenadas.

A partir de la ecuación (4.64) y la figura 4.18 se puede determinar la distancia del centro de las partículas centrales al origen de coordenadas. El solape entre dos partículas tangentes de una misma cadena se calcula una vez obtenida dicha distancia.

$$\cos\left(\frac{\pi}{4}\right) = \frac{d + r_{po}}{2r_{po}} \quad (4.64)$$

$$d = (\sqrt{2} - 1)r_{po} \quad (4.65)$$

La cadena A forma un ángulo α con el plano de proyección. Existe un valor límite de α , a partir del cual comienza el solape entre las partículas no tangentes. El cálculo de dicho valor límite se muestra en la ecuación (4.66) utilizando como referencia la figura 4.19:

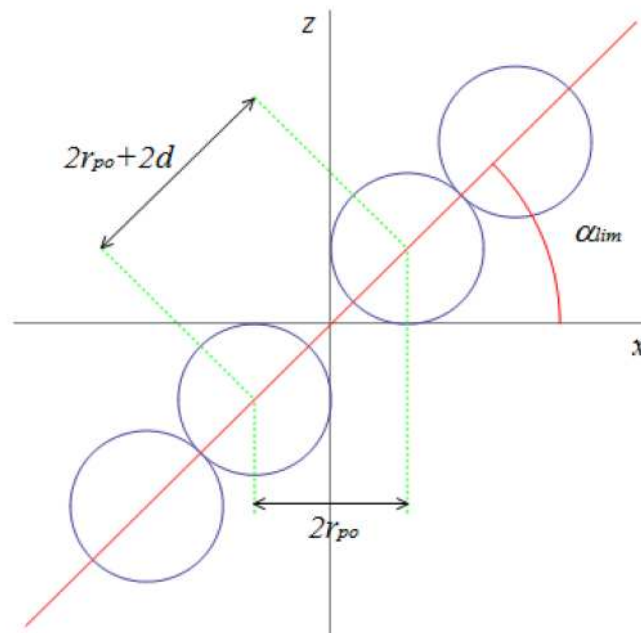


Figura 4.19. Ángulo límite para que no exista solape entre dos partículas no tangentes.

$$\cos \alpha_{lim} = \frac{2r_{po}}{2r_{po} + 2d} \quad (4.66)$$

Se obtiene el valor de α_{lim} sustituyendo la ecuación (4.65) en la (4.66):

$$\cos \alpha_{lim} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \rightarrow \quad \alpha_{lim} = \frac{\pi}{4} \quad (4.67)$$

Por tanto, para que se produzca solape entre partículas no tangentes de una misma cadena, el valor de α debe superar el valor límite de $\pi/4$. Si α se encuentra entre $[0, \pi/4]$ no habrá solape. En la figura 4.20 se observa el área solapada y el valor de dicha área se obtiene en la ecuación (4.72).

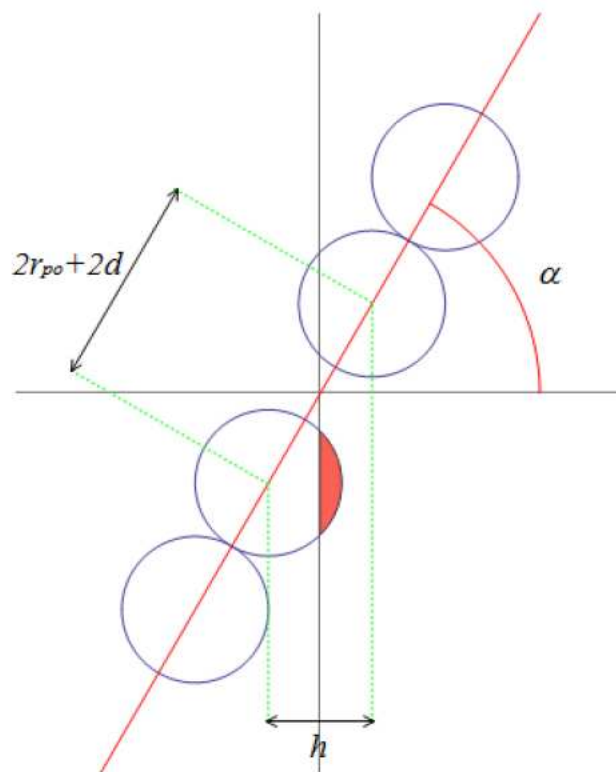


Figura 4.20. Solape entre dos partículas no tangentes de una misma cadena.

A partir de la figura anterior, se puede obtener la distancia entre centros, h :

$$\cos \alpha = \frac{h}{2r_{po} + 2d} = \frac{h}{2\sqrt{2}r_{po}} \quad (4.68)$$

$$h = 2\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha \quad (4.69)$$

Conocida la distancia entre centros, se puede obtener el área solapada entre dos partículas no tangentes. Por lo que a partir de la figura 4.21 se deducen las ecuaciones (4.70) y (4.71):

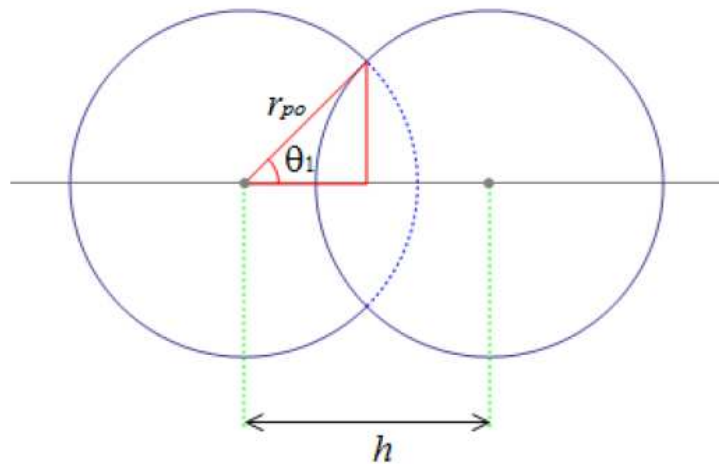


Figura 4.21. Área solapada entre dos partículas.

$$\cos \theta_1 = \frac{h}{2r_{po}} = \sqrt{2} \cos \alpha \quad \forall \alpha \in \left[\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2} \right] \quad (4.70)$$

$$\theta_1 = \arccos(\sqrt{2} \cos \alpha) \quad \forall \alpha \in \left[\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2} \right] \quad (4.71)$$

Por tanto, para el caso de dos partículas no tangentes de una misma cadena, el área solapada en función del ángulo θ_1 se obtiene a partir de la ecuación (4.8):

$$A_{h_{AA}} = r_{po}^2 [2\theta_1(\alpha) - \text{sen}(2\theta_1(\alpha))] \quad (4.72)$$

Extrapolando los resultados a la cadena B, la cual forma un ángulo de proyección $\varphi(\alpha, \beta)$, el área solapada entre la pareja de partículas primarias no tangentes de dicha cadena es:

$$A_{h_{BB}} = r_{po}^2 [2\theta_2(\varphi) - \text{sen}(2\theta_2(\varphi))] \quad (4.73)$$

Donde, del mismo modo que el caso anterior, el ángulo θ_2 es función del ángulo de proyección de la cadena B, es decir, es función del ángulo φ tal y como se muestra en la ecuación:

$$\theta_2 = \arccos(\sqrt{2} \cos(\varphi(\alpha, \beta))) \quad \forall \varphi(\alpha, \beta) \in \left[\frac{\pi}{4}, \varphi_{\text{máx}} \right] \quad (4.74)$$

Se ha utilizado φ_{max} debido a que este ángulo es función de los ángulos de giro α y β , por tanto el límite superior de su intervalo estará definido por el valor que tomen los ángulos de giro.

Además en el aglomerado en forma de cruz con dos ramas con número par de partículas primarias presenta otro tipo de áreas solapadas. La principal singularidad de este tipo de aglomerado es el hueco que se forma en el origen de ordenadas. Las cuatro partículas centrales (dos de cada cadena) tienen una estructura con compactación cúbica, esto hace que se produzcan solapes entre las partículas tangentes de cadenas diferentes como se muestra en la siguiente figura:

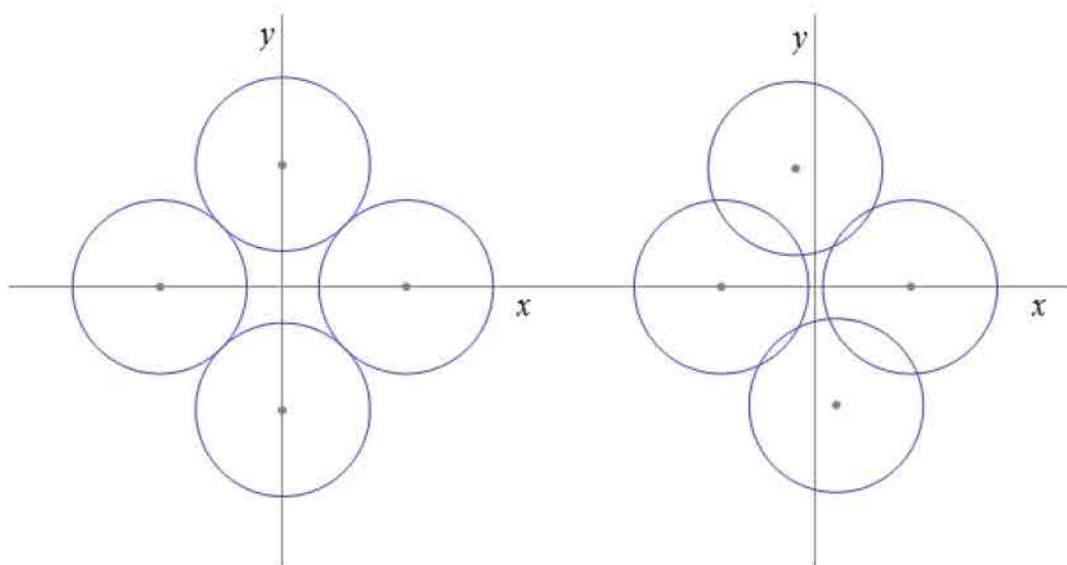


Figura 4.22. Solape entre partículas tangentes de distintas cadenas.

Para calcular los solapes producidos en la imagen anterior se trabaja con las coordenadas de los centros cuando el aglomerado forma una pareja de ángulo α y β arbitrarios. Se utilizara como referencia la figura siguiente:

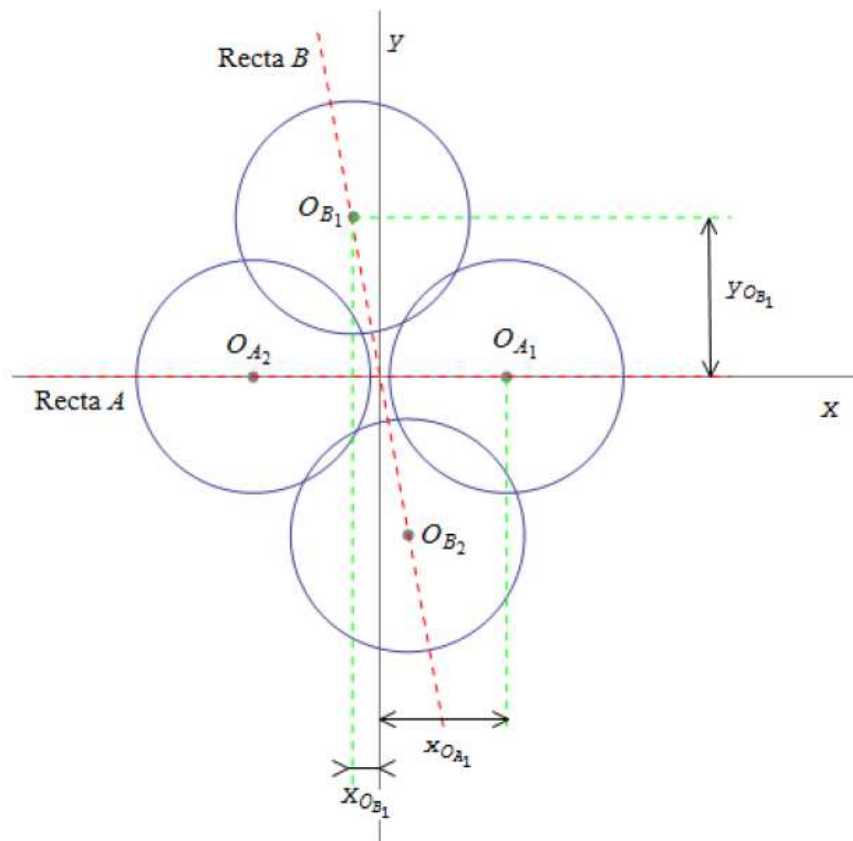


Figura 4.23. Coordenadas de las partículas centrales para unos ángulos α y β arbitrarios.

De la figura 4.23 y utilizando las ecuaciones (4.59) y (4.60) se obtiene las coordenadas de las partículas centrales. Resultan las ecuaciones siguientes:

$$O_{A_1} = \begin{cases} x = \sqrt{2}r_{po} \cos \alpha \\ y = 0 \end{cases} \quad (4.75)$$

$$O_{A_2} = \begin{cases} x = -\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha \\ y = 0 \end{cases} \quad (4.76)$$

$$O_{B_1} = \begin{cases} x = -\sqrt{2}r_{po} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta \\ y = \sqrt{2}r_{po} \cos \beta \end{cases} \quad (4.77)$$

$$O_{B_2} = \begin{cases} x = \sqrt{2}r_{po} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta \\ y = -\sqrt{2}r_{po} \cos \beta \end{cases} \quad (4.78)$$

Para calcular el área solapada entre una pareja de partículas es necesario calcular la distancia entre centros con ayuda de la figura 4.24 y las ecuaciones anteriores. La distancia entre centros es la distancia en el plano de proyección, ya que las partículas permanecen siempre tangentes, así que la distancia entre centros real es siempre dos veces el radio. El área solapada se muestra en las ecuaciones (4.84) y (4.90):

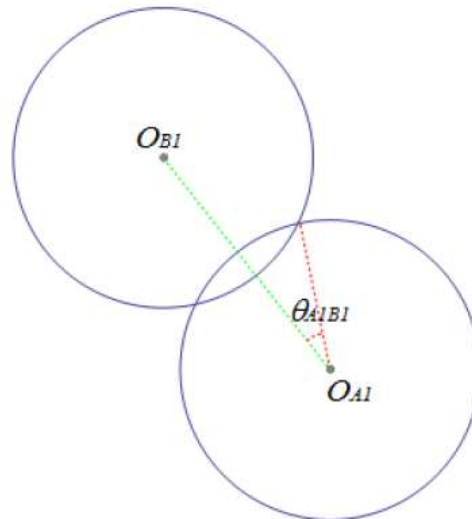


Figura 4.24. Solape entre dos partículas primarias de distintas cadenas.

$$\left| O_{A_1} O_{B_1} \right| = \sqrt{(x_{O_{A_1}} - x_{O_{B_1}})^2 + (y_{O_{A_1}} - y_{O_{B_1}})^2} \quad (4.79)$$

Sustituyendo la ecuación (4.75) y (4.77) en la ecuación (4.79) se obtiene:

$$\left| O_{A_1} O_{B_1} \right| = \left((\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha + \sqrt{2}r_{po} \sin \alpha \sin \beta)^2 + (\sqrt{2}r_{po} \cos \beta)^2 \right)^{0.5} \quad (4.80)$$

$$\left| O_{A_1} O_{B_1} \right| = r_{po} \left(2 \cos^2 \alpha + 4 \cos \alpha \sin \alpha \sin \beta + 2 \sin^2 \alpha \sin^2 \beta + 2 \cos^2 \beta \right)^{0.5} \quad (4.81)$$

El cálculo del área de proyección de esta pareja de partículas en función de los ángulos libres α y β se realizó a partir de la figura 4.24.

$$\cos(\theta_{A_1 B_1}) = \frac{\left| O_{A_1} O_{B_1} \right|}{2r_{po}} \quad (4.82)$$

$$\theta_{A_1B_1} = \arccos \left(\frac{\frac{1}{2} \cos^2 \alpha + \cos \alpha \sin \alpha \sin \beta + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha \sin^2 \beta + \frac{1}{2} \cos^2 \beta}{2} \right)^{0.5} \quad (4.83)$$

Una vez obtenido el valor del ángulo de proyección ya es posible calcular el área solapada tal y como se ha hecho en los casos anteriores:

$$A_{h_{A_1B_1}} = r_{po}^2 (2\theta_{A_1B_1} - \sin(2\theta_{A_1B_1})) \quad (4.84)$$

La siguiente área solapada se calcula de la misma manera.

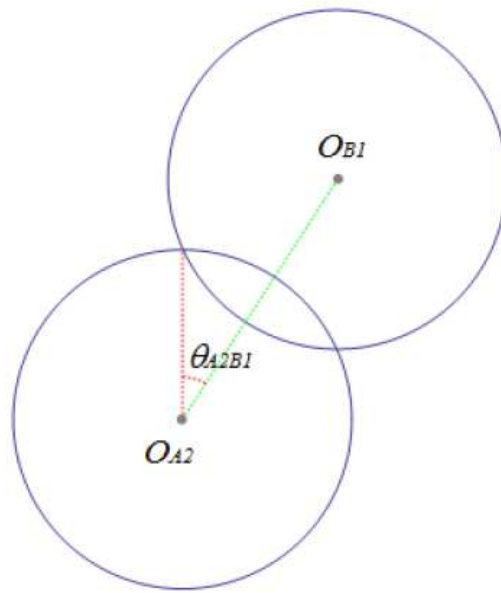


Figura 4.25. Solape entre dos partículas primarias de distintas cadenas.

$$\left| \overline{O_{A_2} O_{B_1}} \right| = \sqrt{(x_{O_{A_2}} - x_{O_{B_1}})^2 + (y_{O_{A_2}} - y_{O_{B_1}})^2} \quad (4.85)$$

Sustituyendo la ecuación (4.76) y (4.77) en la ecuación (4.85) se obtiene:

$$\left| \overline{O_{A_2} O_{B_1}} \right| = \left((\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha - \sqrt{2}r_{po} \sin \alpha \sin \beta)^2 + (\sqrt{2}r_{po} \cos \beta)^2 \right)^{0.5} \quad (4.86)$$

$$\left| \overline{O_{A_2} O_{B_1}} \right| = r_{po} \left(\frac{2 \cos^2 \alpha - 4 \cos \alpha \sin \alpha \sin \beta + 2 \sin^2 \alpha \sin^2 \beta + 2 \cos^2 \beta}{2} \right)^{0.5} \quad (4.87)$$

El cálculo del área de proyección de esta pareja de partículas en función de los ángulos libres α y β se hace a partir de la figura 4.25.

$$\cos(\theta_{A_2B_1}) = \frac{|O_{A_2} O_{B_1}|}{2r_{po}} \quad (4.88)$$

$$\theta_{A_2B_1} = \arccos \left(\frac{1}{2} \cos^2 \alpha - \cos \alpha \sin \alpha \sin \beta + \frac{1}{2} \sin^2 \alpha \sin^2 \beta + \frac{1}{2} \cos^2 \beta \right)^{0.5} \quad (4.89)$$

Una vez obtenido el valor del ángulo de proyección ya es posible calcular el área solapada.

$$A_{h_{A_2B_1}} = r_{po}^2 (2\theta_{A_2B_1} - \sin(2\theta_{A_2B_1})) \quad (4.90)$$

En la figura 4.23 aparecen cuatro áreas solapadas de las que se han determinado dos, sin embargo debido a las coordenadas de las partículas aparece cierta simetría:

$$\begin{cases} |O_{A_1} O_{B_1}| = |O_{A_2} O_{B_2}| \\ |O_{A_2} O_{B_1}| = |O_{A_1} O_{B_2}| \end{cases} \quad (4.91)$$

Por lo tanto se cumplen las siguientes igualdades de áreas solapadas:

$$\begin{cases} A_{h_{A_1B_1}} = A_{h_{A_2B_2}} \\ A_{h_{A_2B_1}} = A_{h_{A_1B_2}} \end{cases} \quad (4.92)$$

Una vez conocido el número de partículas primarias de cada cadena, según la ecuación (4.57) y calculadas todas las áreas solapadas, es posible calcular el área proyectada por este tipo de aglomerado. Se establecen cinco áreas solapadas:

- Área solapada 1 entre partículas tangentes de la cadena A: ecuación (4.62)
- Área solapada 2 entre partículas tangentes de la cadena B: ecuación (4.63)
- Área solapada 3 entre partículas no tangentes de la cadena A: ecuación (4.72)
- Área solapada 4 entre partículas no tangentes de la cadena B: ecuación (4.73)
- Áreas solapadas 5 entre partículas tangentes de cadenas diferentes: ecuaciones (4.84) y (4.90)

Teniendo en cuenta que cada cadena, de acuerdo a la ecuación (4.57), tiene n_2 partículas primarias, el área solapada 1 le afectará a las siguientes partículas:

$$A_1 = (n_2 - 2)A_{h_A} \quad (4.93)$$

En el caso de un aglomerado completamente lineal formado por una sola cadena el área solapada afectaba al número de partículas que componen la cadena menos uno, sin embargo en este caso hay que tener en cuenta que la partícula central inferior de la cadena A no tiene una partícula de la misma cadena tangente por ambos lados, por lo que el área solapada A_{h_A} le afecta a toda la cadena menos a dos de sus partículas.

Del mismo modo el área solapada 2 le afecta a las siguientes partículas:

$$A_1 = (n_2 - 2)A_{h_B} \quad (4.94)$$

Las áreas solapadas debido a dos partículas primarias no tangentes de una misma cadena solo se producen en la cadena central inferior y solo para determinados ángulos, de modo que dicha área aparece únicamente una vez por cadena, es decir:

$$A_3 = A_{h_{AA}} \quad \forall \alpha \in \left[\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2} \right] \quad (4.95)$$

$$A_4 = A_{h_{BB}} \quad \forall \varphi(\alpha, \beta) \in \left[\frac{\pi}{4}, \varphi_{m\acute{a}x} \right] \quad (4.96)$$

Las áreas solapadas entre partículas tangentes de cadenas diferentes, de acuerdo a la figura 4.23, se producen dos tipos de áreas calculadas en las ecuaciones (4.84) y (4.90) dos veces cada una. De modo que el área total solapada 5 es:

$$A_5 = 2A_{h_{A_1B_1}} + 2A_{h_{A_2B_1}} \quad (4.97)$$

Las áreas solapadas al haber sido calculadas por separado, existe el caso de que una porción de la proyección de una partícula sea solapada dos veces. Dicha área doblemente solapada no puede aparecer dos veces pues independiente de las veces que se solape. La proyección solo debe contener una sola vez las áreas solapadas.

Por tanto a las áreas ocultas o solapadas hay que restarles las áreas que se solapan dos veces de modo que la diferencia entre las áreas de solape calculadas anteriormente y las áreas de solape redundantes da como resultado el área solapada real del aglomerado.

Estas áreas doblemente solapadas solo afectan a las partículas centrales. El área solapa dos veces aparece sombreada en la figura 4.26:

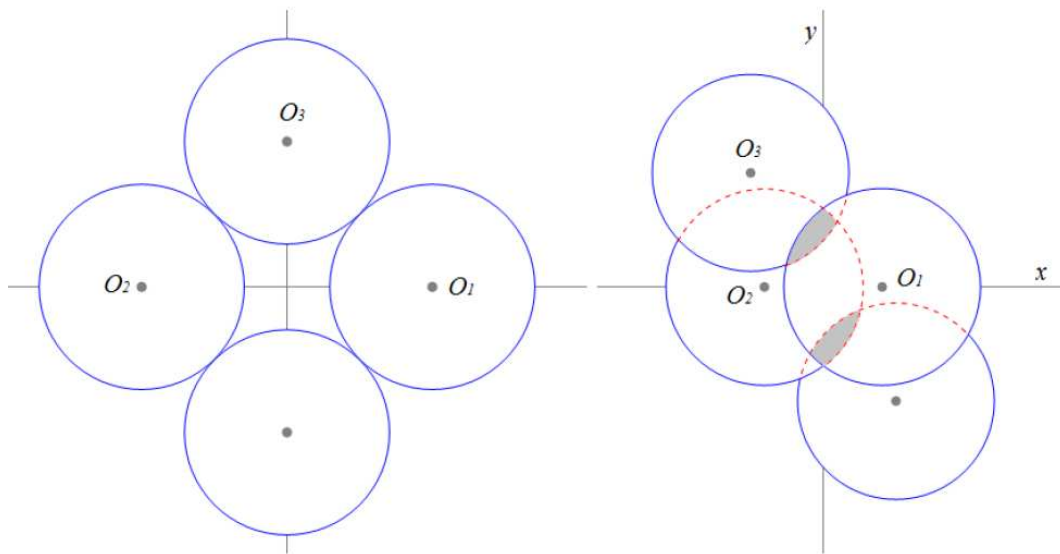


Figura 4.26. Área solapada por duplicado en las partículas centrales.

En la imagen anterior se observan las partículas centrales cuando el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección (figura 4.26 izquierda) y cuando el aglomerado está girado unos determinados ángulos α y β de manera que se produzca un área la cual es solapada dos veces (figura 4.26 derecha).

El procedimiento para hallar el área sombreada de la figura 4.26 derecha, área solapada duplicada, teniendo en cuenta la forma triangular que tiene, es el siguiente:

- Se calculan las coordenadas de los vértices que definen el área sombreada en función de las coordenadas de los centros de las partículas.
- Definidos los vértices, se calcula el área del triángulo definido por estos, A_{ht} .
- Se calcula el área de los arcos de circunferencia definidos por una pareja de vértices y el centro de la partícula correspondiente, $A_{h\delta i}$.

En primer lugar es necesario definir los centros de las partículas de la figura 4.26 cuando el factor de solape es igual a la unidad, es decir, cuando el aglomerado se encuentra apoyado sobre el plano de proyección:

$$\begin{cases} O_1 \equiv (\sqrt{2}r_{po}, 0) \\ O_2 \equiv (-\sqrt{2}r_{po}, 0) \\ O_3 \equiv (0, \sqrt{2}r_{po}) \end{cases} \quad (4.98)$$

Las coordenadas de los centros cuando el aglomerado forma una pareja de ángulos de giro α y β cualesquiera, teniendo en cuenta la ecuación (4.22), se transforman en:

$$\begin{cases} O_1 \equiv (\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha, 0) \\ O_2 \equiv (-\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha, 0) \\ O_3 \equiv (\sqrt{2}r_{po} \sin \alpha \sin \beta, \sqrt{2}r_{po} \cos \beta) \end{cases} \quad (4.99)$$

La posición de los centros tras el giro junto con el área de solape duplicada aparece reflejados en la figura 4.27. La nomenclatura de los vértices del triángulo viene determinada por los subíndices de las partículas cuya intersección forma dicho vértice. Para el caso del punto de intersección perteneciente al triángulo que forman las partículas de centros O_1 y O_2 es el vértice V_{12} .

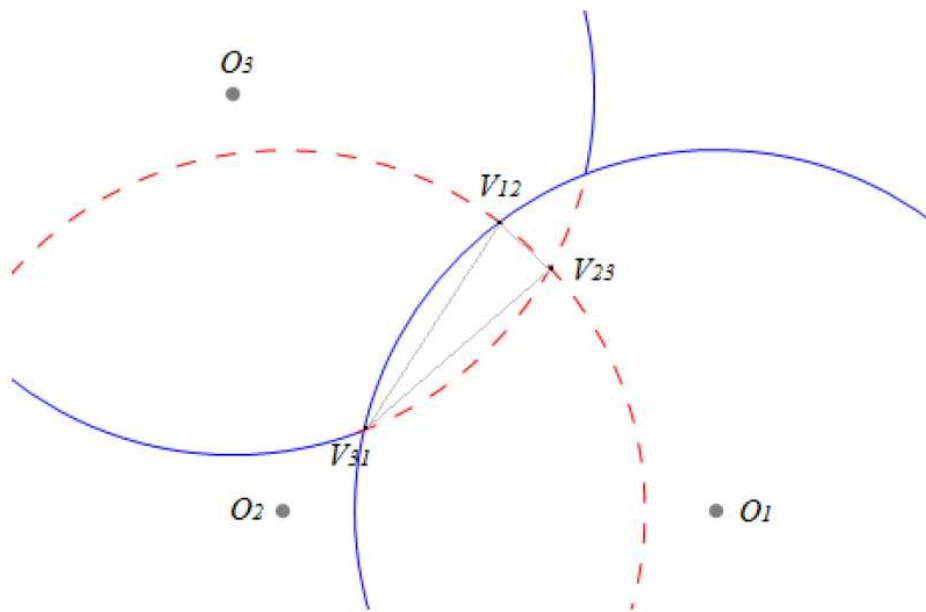


Figura 4.27. Vértices del área de solape duplicada.

Para el cálculo de la posición de dichos vértices, es necesario definir los siguientes parámetros:

- γ_{ij} : ángulo que forma la recta que une los centros de las partículas i y j con el eje x
- P_{mij} : punto medio de la recta que une los centros de las partículas i y j
- h_{ij} : distancia entre el punto medio P_{mij} y el vértice ij

El primer paso es definir los ángulos γ_{ij} y para ello es necesario conocer las coordenadas de las partículas en función de los ángulos de giro α y β , y la posición de dichos ángulos. Para definir el sentido de dichos ángulos se utiliza como referencia la figura 4.28:

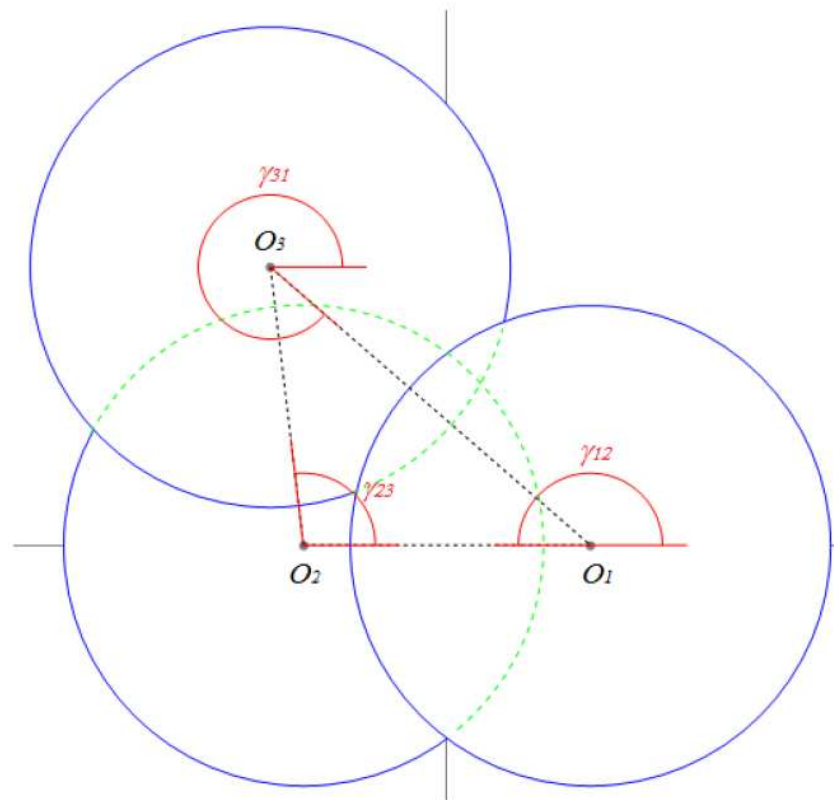


Figura 4.28. Ángulos para el cálculo del área de solape duplicada.

El ángulo que forma cada recta que une los centros de las partículas se determina de la siguiente forma:

$$\gamma_{12} = \arctan\left(\frac{y_{O_1} - y_{O_2}}{x_{O_1} - x_{O_2}}\right) = \arctan\left(\frac{0}{2\sqrt{2}r_{po}\cos\alpha}\right) \quad (4.100)$$

$$\gamma_{23} = \arctan\left(\frac{\cos\beta}{\cos\alpha + \text{sen}\alpha\text{sen}\beta}\right) \quad (4.101)$$

$$\gamma_{31} = \arctan\left(\frac{\cos\beta}{\text{sen}\alpha\text{sen}\beta - \cos\alpha}\right) \quad (4.102)$$

Una vez definidos estos ángulos, el siguiente paso es definir los puntos medios de la recta que une una pareja de centros, así como las distancias de un punto medio a su vértice del triángulo correspondiente. Para ello será necesario hacer uso de las coordenadas de los centros y de los ángulos calculados anteriormente. Siguiendo como referencia la figura 4.29:

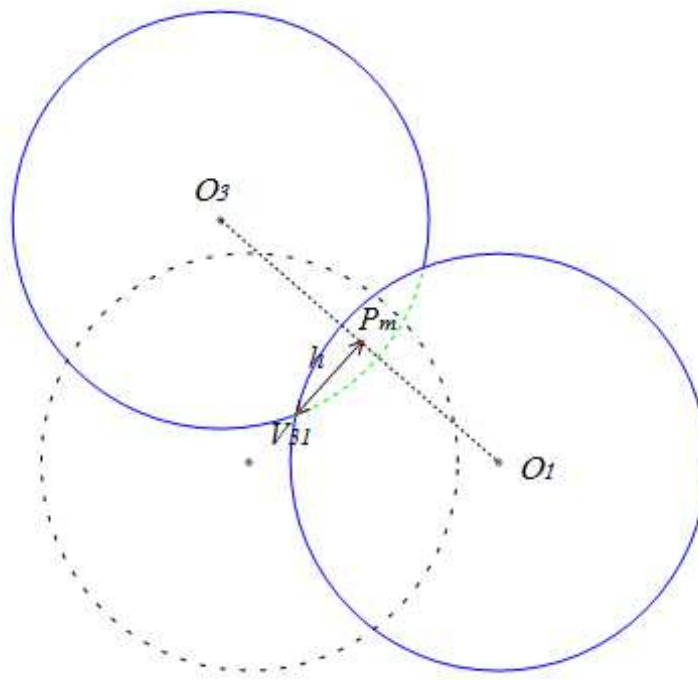


Figura 4.29. Punto medio y distancia al vértice.

Las coordenadas de los puntos medios son los siguientes:

$$\begin{cases} x_{pm_{12}} = x_{O_1} + \frac{|O_1O_2|}{2} \cos \gamma_{12} \\ y_{pm_{12}} = y_{O_1} + \frac{|O_1O_2|}{2} \operatorname{sen} \gamma_{12} \end{cases} \quad (4.103)$$

$$\begin{cases} x_{pm_{23}} = x_{O_2} + \frac{|O_2O_3|}{2} \cos \gamma_{23} \\ y_{pm_{23}} = y_{O_2} + \frac{|O_2O_3|}{2} \operatorname{sen} \gamma_{23} \end{cases} \quad (4.104)$$

$$\begin{cases} x_{pm_{31}} = x_{O_3} + \frac{|O_3O_1|}{2} \cos \gamma_{31} \\ y_{pm_{31}} = y_{O_3} + \frac{|O_3O_1|}{2} \operatorname{sen} \gamma_{31} \end{cases} \quad (4.105)$$

Es necesario calcular el módulo de la distancia que separa cada pareja de centros de partícula.

$$|\overline{O_1O_2}| = 2\sqrt{2}r_{po} \cos \alpha \quad (4.106)$$

$$|\overline{O_2O_3}| = \sqrt{2}r_{po} \left((\sin \alpha \sin \beta + \cos \alpha)^2 + (\cos \beta)^2 \right)^{0.5} \quad (4.107)$$

$$|\overline{O_3O_1}| = \sqrt{2}r_{po} \left((\sin \alpha \sin \beta - \cos \alpha)^2 + (\cos \beta)^2 \right)^{0.5} \quad (4.108)$$

Las distancias de los puntos medios de los vértices se determinan aplicando el teorema de Pitágoras.

$$|h_{12}| = \left(r_{po}^2 - \left(\frac{|\overline{O_1O_2}|}{2} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (4.109)$$

$$|h_{23}| = \left(r_{po}^2 - \left(\frac{|\overline{O_2O_3}|}{2} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (4.110)$$

$$|h_{31}| = \left(r_{po}^2 - \left(\frac{|\overline{O_3O_1}|}{2} \right)^2 \right)^{0.5} \quad (4.111)$$

Una vez conocidos los ángulos, las coordenadas de los puntos medios entre cada pareja de partículas y la distancia de dichos puntos medios al vértice correspondiente, se pueden calcular las coordenadas de los vértices.

$$\begin{cases} x_{12} = x_{o_1} + \frac{|\overline{O_1O_2}|}{2} \cos \gamma_{12} - |h_{12}| \sin \gamma_{12} \\ y_{12} = y_{o_1} + \frac{|\overline{O_1O_2}|}{2} \sin \gamma_{12} + |h_{12}| \cos \gamma_{12} \end{cases} \quad (4.112)$$

$$\begin{cases} x_{23} = x_{o_2} + \frac{|\overline{O_2O_3}|}{2} \cos \gamma_{23} - |h_{23}| \sin \gamma_{23} \\ y_{23} = y_{o_2} + \frac{|\overline{O_2O_3}|}{2} \sin \gamma_{23} + |h_{23}| \cos \gamma_{23} \end{cases} \quad (4.113)$$

$$\begin{cases} x_{31} = x_{O_3} + \frac{|O_3O_1|}{2} \cos \gamma_{31} - |h_{31}| \operatorname{sen} \gamma_{31} \\ y_{31} = y_{O_3} + \frac{|O_3O_1|}{2} \operatorname{sen} \gamma_{31} + |h_{31}| \cos \gamma_{31} \end{cases} \quad (4.114)$$

Definidos los vértices del triángulo se procede al cálculo del área sombreada de la figura 4.26 derecha. Como se comentó anteriormente, dicha área será calculada mediante el sumatorio del área del triángulo formado por los vértices calculados; y los arcos de circunferencia definidos por dos vértices y la partícula correspondiente. Aunque en la figura 4.26 aparezcan dos áreas sombreadas, el cálculo solo corresponde a una de dichas áreas, ya que por simetría ambas áreas son iguales.

Se empieza calculando el área definida por los tres arcos de circunferencia, en la figura 4.30 se muestra el arco de circunferencia definido por la partícula de centro O_1 . Se calcula el área sombreada y se procede de igual modo para hallar el área de los dos arcos de circunferencia restantes.

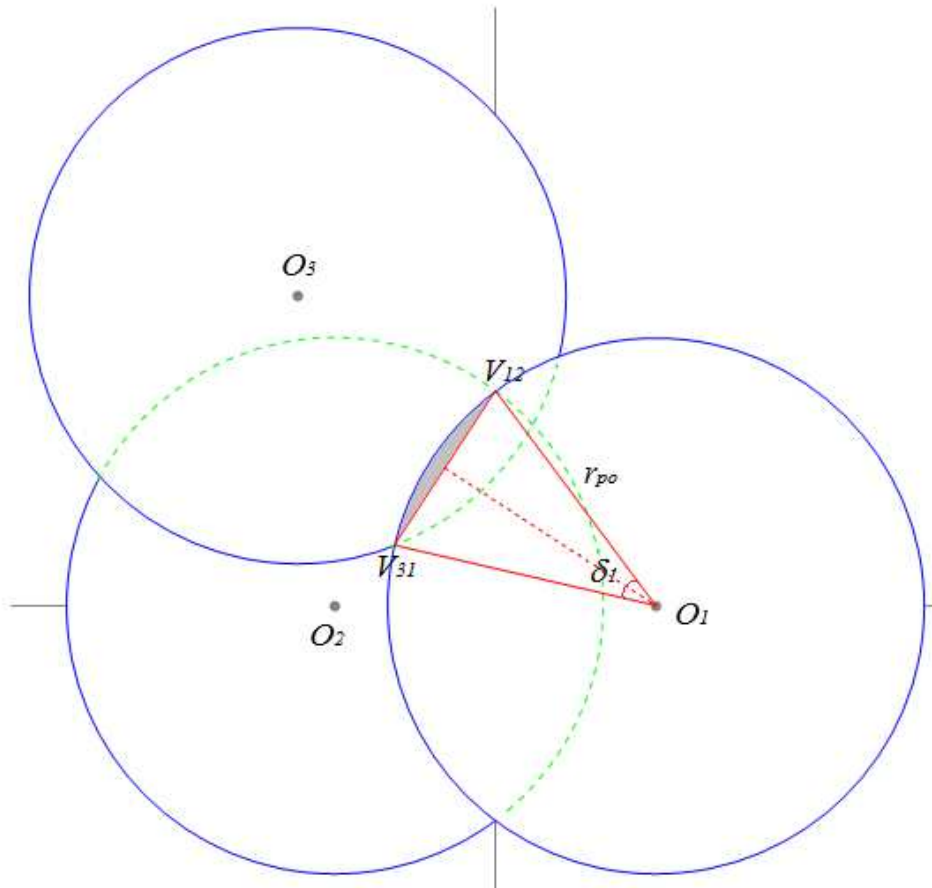


Figura 4.30. Arco de circunferencia definido por dos vértices.

Se calcula el área solapada como el área de un arco de circunferencia. Dicha área queda representada en la ecuación (4.116).

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_1}{2}\right) = \frac{\sqrt{V_{12}V_{31}}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_1 = 2\arcsen\left(\frac{\left(\left(x_{V_{12}} - x_{V_{31}}\right)^2 + \left(y_{V_{12}} - y_{V_{31}}\right)^2\right)^{0.5}}{2r_{po}}\right) \quad (4.115)$$

$$A_{h_{\delta_1}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\delta_1 - \operatorname{sen}\delta_1) \quad (4.116)$$

Procediendo del mismo modo, los dos arcos de circunferencia restantes, se obtienen el área de dichos arcos en las ecuaciones (4.118) y (4.120).

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_2}{2}\right) = \frac{\sqrt{V_{12}V_{23}}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_2 = 2\arcsen\left(\frac{\left(\left(x_{V_{12}} - x_{V_{23}}\right)^2 + \left(y_{V_{12}} - y_{V_{23}}\right)^2\right)^{0.5}}{2r_{po}}\right) \quad (4.117)$$

$$A_{h_{\delta_2}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\delta_2 - \operatorname{sen}\delta_2) \quad (4.118)$$

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_3}{2}\right) = \frac{\sqrt{V_{31}V_{23}}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_3 = 2\arcsen\left(\frac{\left(\left(x_{V_{31}} - x_{V_{23}}\right)^2 + \left(y_{V_{31}} - y_{V_{23}}\right)^2\right)^{0.5}}{2r_{po}}\right) \quad (4.119)$$

$$A_{h_{\delta_3}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\delta_3 - \operatorname{sen}\delta_3) \quad (4.120)$$

Calculadas las áreas de los arcos de circunferencias, se procede al cálculo del triángulo, pues se conocen los vértices de éste. Puesto que no se conocen ni la base ni la altura del triángulo, el área se calcula mediante el producto vectorial, dicha área queda reflejada en la ecuación (4.121).

$$A_{h_t} = \frac{1}{2} \left| \vec{n}_{V_{12}V_{23}} \cdot \sqrt{V_{12}V_{31}} \right| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} y_{V_{12}} - y_{V_{23}} & -x_{V_{12}} + x_{V_{23}} \\ x_{V_{12}} - x_{V_{13}} & y_{V_{12}} - y_{V_{13}} \end{vmatrix} \quad (4.121)$$

De modo que una vez determinadas el área del triángulo y las áreas de los arcos de circunferencia, se conoce la totalidad del área sombreada de la figura 4.26. Por tanto el área doblemente solapada, cuando el aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas primarias tiene unos ángulos de giro α y β , es A_{ds} .

$$A_{ds}(\alpha, \beta) = A_{h_t} + A_{h_{\delta_1}} + A_{h_{\delta_2}} + A_{h_{\delta_3}} \quad (4.122)$$

Calculadas todas las áreas ya es posible calcular el área proyectada por el aglomerado siendo ésta la diferencia entre la suma de área de cada partícula que compone el aglomerado medida individualmente y la suma de todas las áreas solapadas. Teniendo en cuenta aquellas áreas que han sido solapadas dos veces las cuales aparecen en la diferencia con signo positivo para equilibrar la ecuación. El área proyectada es la que se muestra en la ecuación (4.123):

$$A_p = n_{po} A_{po} - (A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5) + 2A_{ds} \quad (4.123)$$

Conocida el área proyectada y haciendo uso de la ecuación (4.11) el factor de solape lineal, para el caso de un aglomerado con dos ramas y número par de partículas primarias es:

$$z = \frac{A_p}{n_{po} A_{po}} = \frac{n_{po} A_{po} - (A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5) + 2A_{ds}}{n_{po} A_{po}} \quad (4.124)$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores en la ecuación (4.124) se obtiene el factor de solape lineal en función de los ángulos de proyección:

$$z = 1 - \frac{\left((n_2 - 2)(A_{h_A} + A_{h_B}) + A_{h_{AA}} + A_{h_{BB}} + \right. \\ \left. + 2A_{h_{A_1B_1}} + 2A_{h_{A_2B_1}} - 2A_{ds} \right)}{n_{po} A_{po}} \quad (4.125)$$

$$z = 1 - \left(\frac{1}{2\pi} - \frac{2}{\pi n_{po}} \right) (2\alpha - \sin(2\alpha) + 2\varphi(\alpha, \beta) - \sin(2\varphi(\alpha, \beta))) - \\ - \frac{1}{\pi n_{po}} (2\theta_1(\alpha) - \sin(2\theta_1(\alpha)) + 2\theta_2(\varphi) - \sin(2\theta_2(\varphi))) - \\ - \frac{2}{\pi n_{po}} \left(\begin{aligned} &2\theta_{A_1B_1}(\alpha, \beta) - \sin(2\theta_{A_1B_1}(\alpha, \beta)) + 2\theta_{A_2B_1}(\alpha, \beta) - \\ &-\sin(2\theta_{A_2B_1}(\alpha, \beta)) \end{aligned} \right) + \\ + \frac{2}{\pi n_{po}} \frac{A_{ds}(\alpha, \beta)}{r_{po}^2} \quad (4.126)$$

Las relaciones entre los ángulos de la ecuación (4.126) y los ángulos libres del aglomerado α y β se muestran en las ecuaciones (4.61), (4.71), (4.74), (4.83) y (4.89).

Para este aglomerado, la variación del factor de solape lineal en función de los ángulos α y β para un número determinado de partículas se representa en las figuras 4.31 y 4.32.

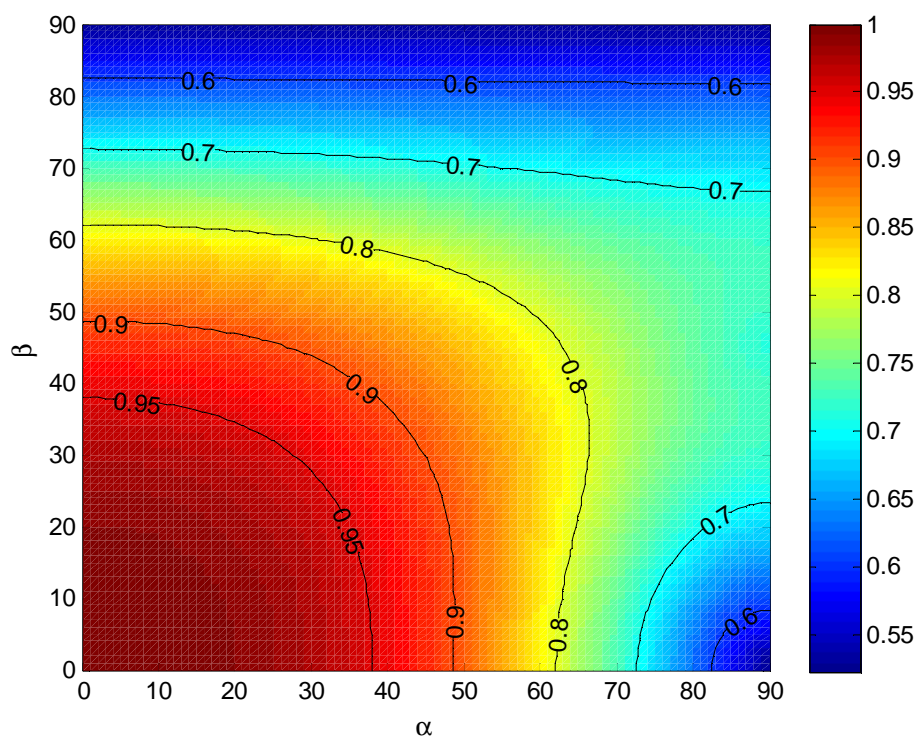


Figura 4.31. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{\rho}=12$.

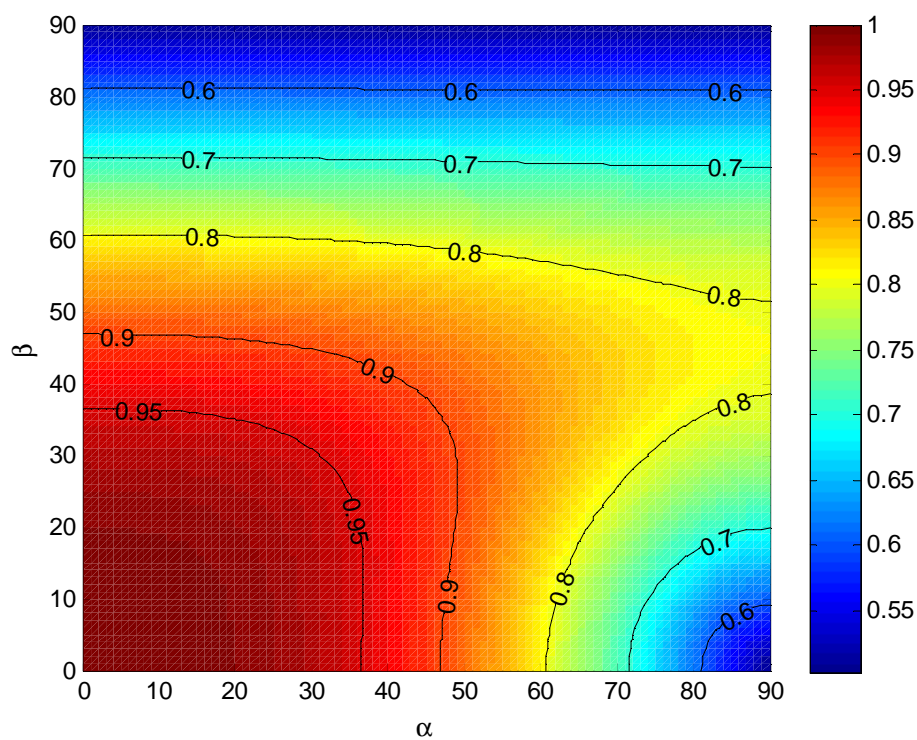


Figura 4.32. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{\rho}=100$.

Para tener un modelo más práctico, el factor de solape no debe depender de los ángulos de proyección por lo que es necesario obtener una relación directa entre el factor de solape lineal y el número de partículas primarias que componen el aglomerado. Para hallar esta relación se va a obtener la media hemisférica entre todos los factores de solape lineal posibles para cada pareja de α y β . El método consiste en obtener la media hemisférica, mediante la integración extendida en la semiesfera visible utilizando coordenadas esféricas como se muestra en la figura siguiente:

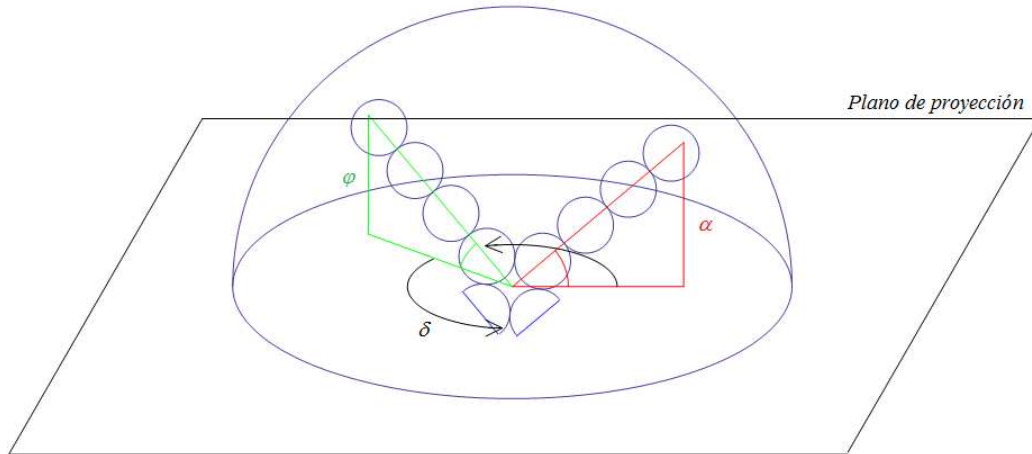


Figura 4.33. Semiesfera visible que abarca las posibles orientaciones del aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas primarias.

Para hacer la media hemisférica se toma α como ángulo de referencia y para cada valor de α se estudian todos los valores que puede tomar el ángulo φ . La media del factor de solape lineal es:

$$\bar{z} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{\max}} z(\alpha, \beta, \varphi, \theta_1, \theta_2, \theta_{A_1B_1}, \theta_{A_2B_1}, A_{ds}) \cos(\varphi) d\varphi d\alpha d\delta}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{\max}} \cos(\varphi) d\varphi d\alpha d\delta} \quad (4.127)$$

Sin embargo los límites del ángulo de proyección φ son desconocidos, es necesario poner la integral de la ecuación (4.127) como función sólo de α , β y δ . Para ello se sustituye la ecuación (4.49) en la (4.127).

$$\bar{z} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} z(\alpha, \beta, \theta_1, \theta_2, \theta_{A_1B_1}, \theta_{A_2B_1}, A_{ds}) \cos(\beta) \cos(\alpha) d\beta d\alpha d\delta}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(\beta) \cos(\alpha) d\beta d\alpha d\delta} \quad (4.128)$$

La ecuación (4.128) se resuelve sustituyendo en ella la ecuación (4.126) y ordenando los distintos términos.

$$\bar{z} = 1 - \left(\frac{1}{2\pi} - \frac{2}{n_{po}\pi} \right) (I_1 + I_2) - \frac{1}{n_{po}\pi} (I_3 + I_4) - \frac{2}{n_{po}\pi} (I_5 + I_6) + \frac{2}{n_{po}\pi} I_7 \quad (4.129)$$

Estas siete integrales se pueden resolver de manera numérica, siendo los valores los siguientes: $I_1=0.4747$, $I_2=0.2556$, $I_3=0.2110$, $I_4=0.0719$, $I_5=0.0766$, $I_6=0.6004$ y $I_7=0.2366$. La ecuación (4.129), una vez sustituidos los valores obtenidos, queda:

$$\bar{z} = 1 - 0.7303 \left(\frac{1}{2\pi} - \frac{2}{n_{po}\pi} \right) - 0.2829 \frac{1}{n_{po}\pi} - 0.4404 \frac{2}{n_{po}\pi} \quad (4.130)$$

Al reordenar la ecuación (4.130) resulta la ecuación del solape lineal en función del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

$$\bar{z} = 0.8837 + \frac{0.0945}{n_{po}} \quad (4.131)$$

La evolución del factor lineal de solape medio para un aglomerado en forma de cruz con dos ramas y número par de partículas primarias se muestra en la figura 4.34:

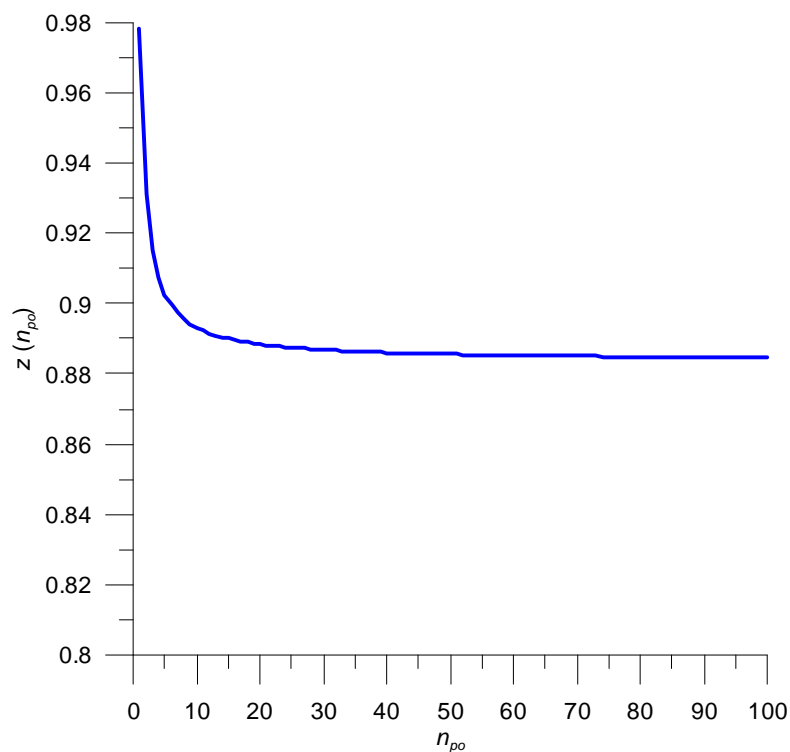


Figura 4.34. Evolución del factor lineal de solape medio para un aglomerado con $D_f=1$, con dos ramas y número par de partículas primarias.

Como se observa en la figura 4.34, cuando el número de partículas tiende a infinito el factor de solape lineal tiende a un valor. Dicho valor se puede calcular mediante el límite de la ecuación (4.131).

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} \bar{z} = 0.8837 \quad (4.132)$$

4.2.2.5. Resumen.

Para los dos casos de aglomerado de dos ramas, ecuaciones (4.132) y (4.56), el límite cuando el número de partículas primarias tiende a infinito es el mismo tanto para el aglomerado en forma de cruz con número par de partículas como con número impar. Esto se debe a que la única diferencia entre la configuración de partículas de estos aglomerados reside en las partículas centrales, una partícula central en el caso de número impar de partículas y cuatro partículas centrales en el caso de número par. Las partículas centrales representan un porcentaje del número total de partículas que componen el aglomerado, este porcentaje disminuye conforme aumenta el número de partículas, tendiendo a cero cuando el aglomerado está formado por infinitas partículas.

En la figura 4.35 se representa los tres factores lineales de solape, para las tres configuraciones con dimensión fractal igual a la unidad.

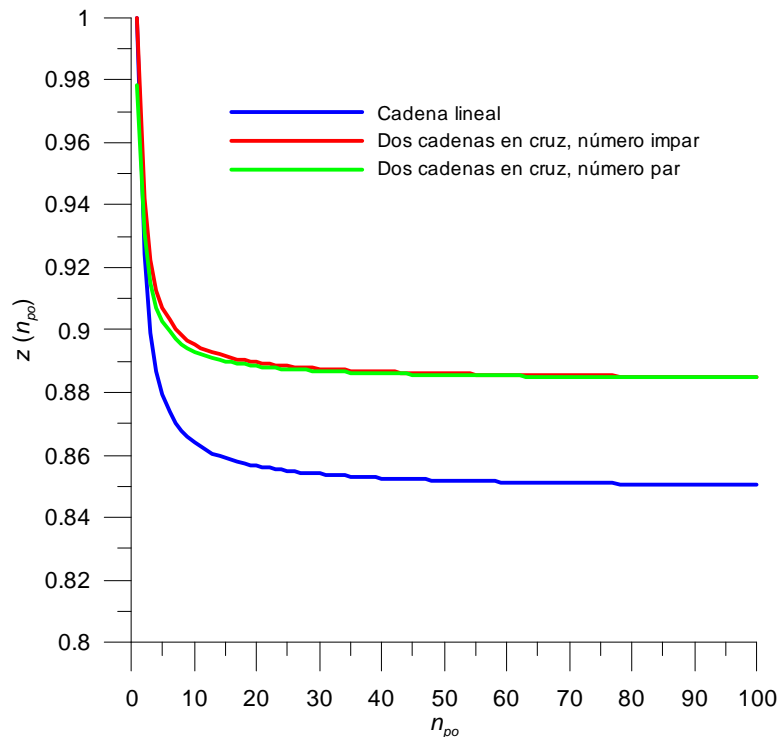


Figura 4.35. Comparación de los tres factores de solape lineal medio para aglomerados con $D_f=1$.

Se observa que los aglomerados con dos ramas, independientemente de la configuración de las partículas centrales, tienen comportamientos similares. La cadena lineal toma unos valores inferiores del factor lineal de solape, esto se debe que al ser una única cadena existe más probabilidad de que sea solapada por ella misma, es decir, que se encuentre cercana a la perpendicularidad con el plano de proyección. Por el contrario los aglomerados formados por dos cadenas tienen valores más altos debido a las que las dos cadenas permanecen siempre formando ángulos rectos de modo que si una cadena se encuentra cercana a la perpendicularidad con el plano de proyección, la otra cadena se encontrará paralela a este y su solape será mínimo.

4.2.3. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 2.

4.2.3.1. Introducción.

Igual que en el caso del estudio del prefactor de la ley de potencias, se pueden analizar varios tipos de aglomerados cuya dimensión fractal es 2. Pero en el caso del prefactor el estudio se utilizaba para demostrar la relación existente entre el prefactor de la ley de potencias y la lagunaridad del aglomerado, es decir el carácter y significado físico que tiene el prefactor de la ley de potencias. En este caso, el factor de solape tiene un significado físico que no afecta directamente a la morfología fractal del aglomerado. Su determinación se realiza para poder cuantificar el número de partículas primarias que compone el aglomerado y que es un paso previo para poder determinar la dimensión fractal de un aglomerado y por tanto caracterizarlo morfológicamente.

Así que solo se van a estudiar aglomerados con compactación hexagonal compacta puesto que presenta la estructura de mayor compactación posible y por tanto más estable. El método para obtener el área proyectada es el mismo que se ha seguido en los apartados anteriores. Se plantean dos giros independientes y en función de éstos se calculan las áreas solapadas, seguidamente se calcula el área proyectada y finalmente se obtiene el factor lineal de solape.

4.2.3.2. Ángulos de giro.

Un ejemplo del aglomerado considerado es el que se muestra en la figura 4.36:

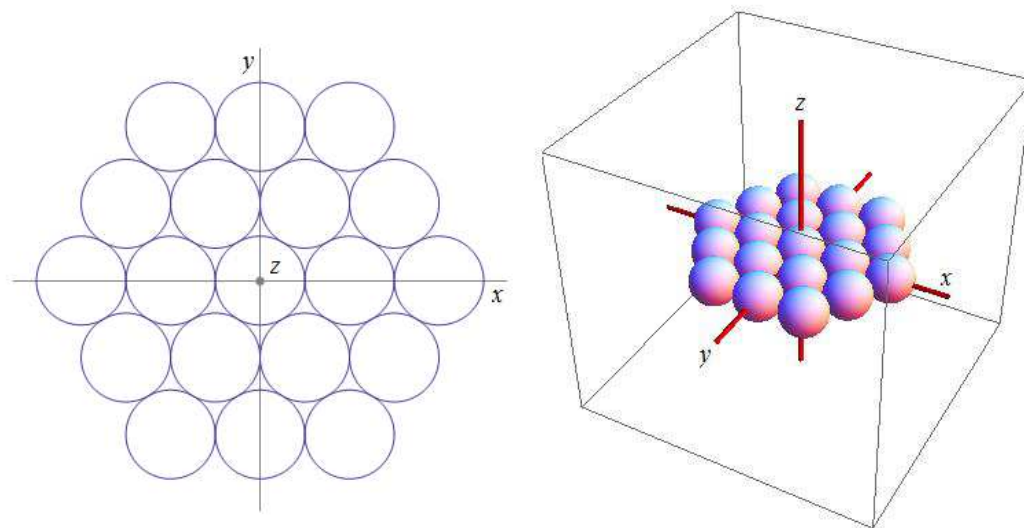


Figura 4.36. Aglomerado plano con compactación hexagonal.

El número total de partículas primarias que componen el aglomerado es n_{po} . Para el aglomerado de la figura 4.36 se define n con el número de partículas primarias que componen un lado del hexágono, siendo la relación entre n_{po} y n la que se muestra en la ecuación (4.133):

$$n_{po} = n^3 - (n-1)^3 = 3n^2 - 3n + 1 \quad (4.133)$$

Una vez definido el número de partículas, se definen los ángulos de giro del aglomerado. Al igual que en los casos anteriores todos los giros posibles serán función de dos ángulos libres, los ángulos α y β . Inicialmente, cuando el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección, el factor de solape lineal es igual a la unidad y la ecuación de la cada la partícula i es la que se muestra en la ecuación (4.134):

$$E_i \equiv (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 + z^2 = r_{po}^2 \quad i \in [1, n_{po}] \quad (4.134)$$

El ángulo α es el ángulo que forma el aglomerado con el eje x de modo que las coordenadas de la partícula i cuando el aglomerado gira un ángulo α son las que se exponen en la ecuación (4.135), correspondiente a la figura 4.37, izquierda.

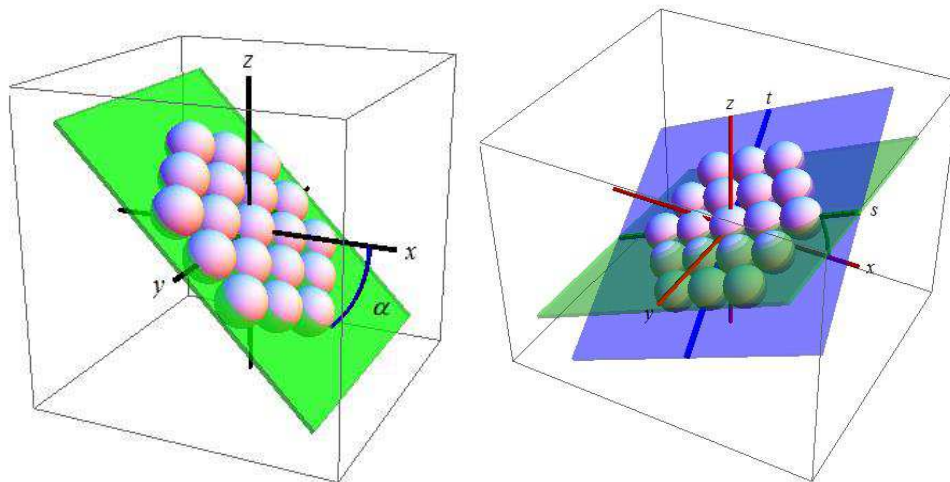


Figura 4.37. Izquierda, aglomerado formando un ángulo α con el plano horizontal. Derecha, Aglomerado formando una pareja de ángulos α y β .

$$O_i = \begin{cases} x = x_i \cos \alpha \\ y = y_i \\ z = z_i \operatorname{sen} \alpha \end{cases} \quad (4.135)$$

Ahora el aglomerado se encuentra sobre el plano $z = x \tan \alpha$.

El ángulo β es el ángulo que forma el aglomerado con el plano que contiene el aglomerado (figura 4.37, plano verde). Utilizando como referencia la figura 4.37 derecha, el ángulo α es el que forma el plano verde con el plano de proyección XY ; y el ángulo β es el ángulo que forma el plano azul con el plano verde. Es por eso que es necesario calcular el ángulo que forma el aglomerado con el plano de proyección cuando dicho aglomerado ha girado una pareja de ángulos α y β cualesquiera. Para cada pareja de ángulos α y β , las coordenadas de cada partícula se determinan con la ecuación (4.60).

El aglomerado queda definido por dos ejes móviles, s y t , tal y como se muestra en la figura 4.38. Dichos ejes no permanecen alineados con los ejes x e y definidos en la figura 4.36. Definidos los posibles ángulos de giro que puede tomar el aglomerado, es necesario calcular los ángulos que forman los ejes s y t con el plano de proyección para así poder calcular el área proyectada.

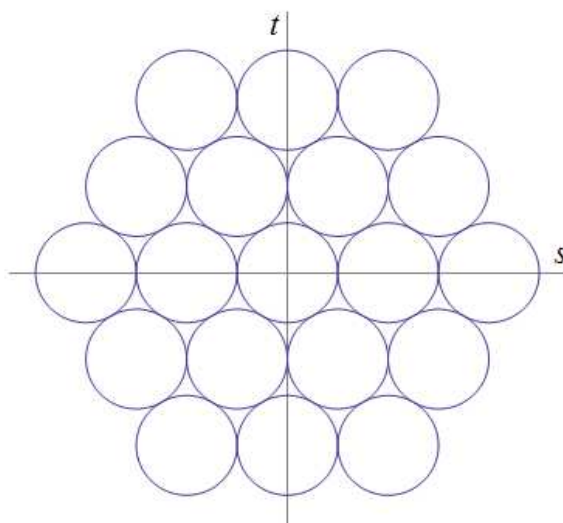


Figura 4.38. Ejes móviles del aglomerado plano.

Las partículas que se encuentran en el eje s están alineadas siempre con el eje x de modo que para cualquier combinación de ángulos α y β dichas partículas tendrán coordenada y nula, por tanto el ángulo que forma el eje s con el plano de proyección será el ángulo α . Para calcular el ángulo entre el eje t y el plano de proyección será necesario tener en cuenta los ángulos α y β y la coordenada z de las partículas que están sobre este eje. Estas partículas se muestran en verde en la figura 4.39:

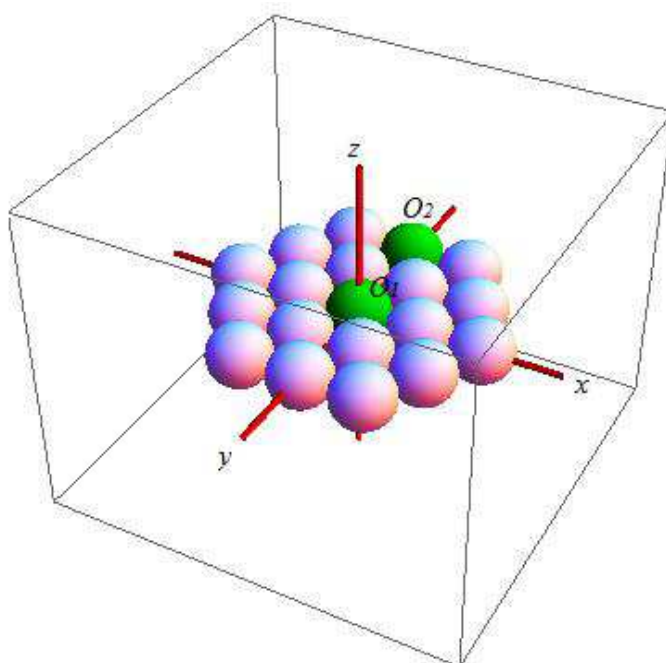


Figura 4.39. Pareja de partículas del eje t .

Las coordenadas de las partículas O_1 y O_2 cuando el aglomerado está apoyado sobre el plano de proyección se muestran en la figura 4.39, y son:

$$\begin{aligned} O_1 &\equiv (0,0,0) \\ O_2 &\equiv \left(0, 4r_{po} \sin \frac{\pi}{3}, 0\right) = (0, 2\sqrt{3}r_{po}, 0) \end{aligned} \quad (4.136)$$

Pero cuando el aglomerado ha girado un ángulo genérico α y β , las nuevas coordenadas de estas dos partículas son:

$$\begin{aligned} O_1 &\equiv (0,0,0) \\ O_2 &\equiv \left(-2\sqrt{3}r_{po} \sin \alpha \sin \beta, 2\sqrt{3}r_{po} \cos \beta, 2\sqrt{3}r_{po} \cos \alpha \sin \beta\right) \end{aligned} \quad (4.137)$$

El módulo de la distancia entre centros es conocida e igual a $2\sqrt{3}r_{po}$. Es posible calcular el ángulo que forma el eje t con el plano de proyección que resulta el ángulo φ , descrito en la ecuación (4.30). Conocidos los ángulos que forman las partículas se procede a determinar las áreas solapadas de la siguiente manera:

- Las áreas solapadas debido únicamente a un ángulo α , es decir giro sobre el eje t .
- Las áreas solapadas debido a un ángulo φ , es decir, giro sobre el eje s .
- Las áreas solapadas dos veces para no incluir términos redundantes en el cálculo del área proyectada.
- Área proyectada como combinación de las anteriores.

4.2.3.3. Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo α .

En este apartado se estudiarán los distintos solapes que se producen cuando el aglomerado gira únicamente un ángulo α , de manera que las cadenas alineadas con el eje x forman un ángulo α con el plano XY .

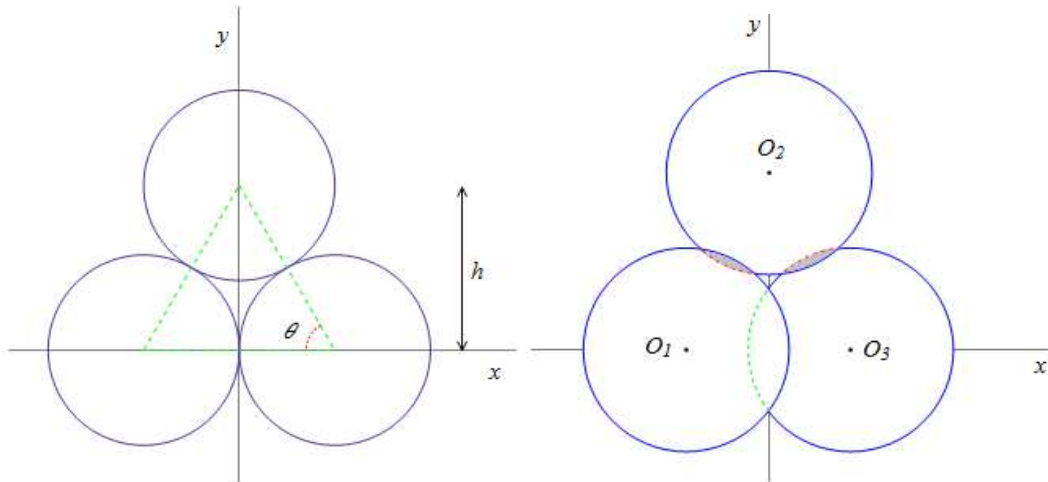


Figura 4.40. Áreas solapadas debido a un ángulo α con el plano XY . Vista en planta.

Tomando como referencia la figura 4.36, las cadenas horizontales son aquellas cuya coordenada y no cambia cuando existe una variación en el ángulo de giro α . Como se puede comprobar en la figura 4.40 derecha, se producen dos tipos de áreas solapadas, las marcadas con una línea a trazos verdes y las marcadas con una línea a trazos rojas. Las áreas marcadas con una línea a trazos verde se determinan mediante la ecuación (4.32).

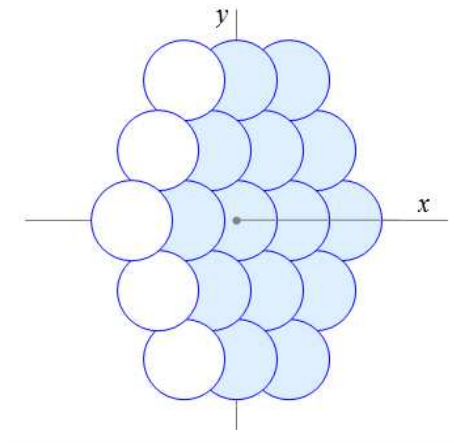


Figura 4.41. Partículas afectadas por el área de solape $A_{h\alpha}$.

El número de partículas a las que afecta esta área solapa se muestra en la figura 4.41 con las partículas sombreadas.

$$n_{po} - n - (n - 1) = n_{po} - 2n + 1 \quad (4.138)$$

Conocido el número de partículas a las que afecta esta área solapada, es posible calcular el área total que se solapa formado por n_{po} partículas primarias.

$$A_{h_\alpha} = (n_{po} - 2n + 1)r_{po}^2 (2\alpha - \text{sen}(2\alpha)) \quad (4.139)$$

Por otro lado debido a la compactación hexagonal del aglomerado, se produce un solape entre aquellas partículas tangentes de cadenas horizontales contiguas, dicha área se muestra en la figura 4.40 derecha por el área sombreada contenida en la línea de trazos roja.

Para determinar esta área es necesario aplicar reglas trigonométricas a la figura 4.40. Se empieza calculando el parámetro h , es decir, la diferencia en coordenada y de los centros O_1 y O_2 :

$$\cos \theta = \frac{r_{po}}{2r_{po}} \rightarrow \theta = \frac{\pi}{3} \rightarrow h = 2r_{po} \text{sen} \frac{\pi}{3} = \sqrt{3}r_{po}$$

$$E_{C_1} \equiv (x + r_{po})^2 + y^2 + z^2 = r_{po}^2 \quad (4.140)$$

$$E_{C_2} \equiv x^2 + (y - \sqrt{3}r_{po})^2 + z^2 = r_{po}^2$$

Estas ecuaciones se ven afectas de la siguiente manera cuando se produce un giro α .

$$E_{C_1} \equiv (x + r_{po} \cos \alpha)^2 + y^2 + (z - r_{po} \text{sen} \alpha)^2 = r_{po}^2$$

$$E_{C_2} \equiv x^2 + (y - \sqrt{3}r_{po})^2 + z^2 = r_{po}^2 \quad (4.141)$$

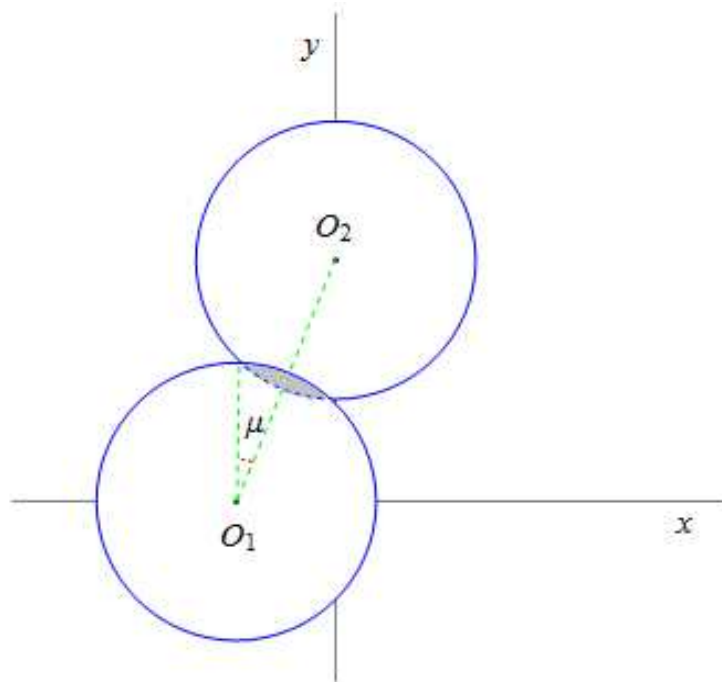


Figura 4.42. Solape entre dos partículas de cadenas horizontales contiguas debido a un ángulo α .

Para conocer el área solapada entre dos partículas hay que conocer la distancia entre centros, figura 4.42. La distancia entre los centros se determina de la siguiente manera:

$$\overline{O_1O_2} = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} = \sqrt{(r_{po} \cos \alpha)^2 + (\sqrt{3}r_{po})^2} = r_{po} \sqrt{3 + \cos^2 \alpha} \quad (4.142)$$

Es posible obtener el área sombreada de la figura 4.42.

$$\cos \mu = \frac{\overline{O_1O_2}}{2r_{po}} \rightarrow \mu = \arccos\left(\frac{1}{2}\sqrt{3 + \cos^2 \alpha}\right) \quad (4.143)$$

$$A_{h\mu} = r_{po}^2 (2\mu(\alpha) - \text{sen}(2\mu(\alpha))) \quad (4.144)$$

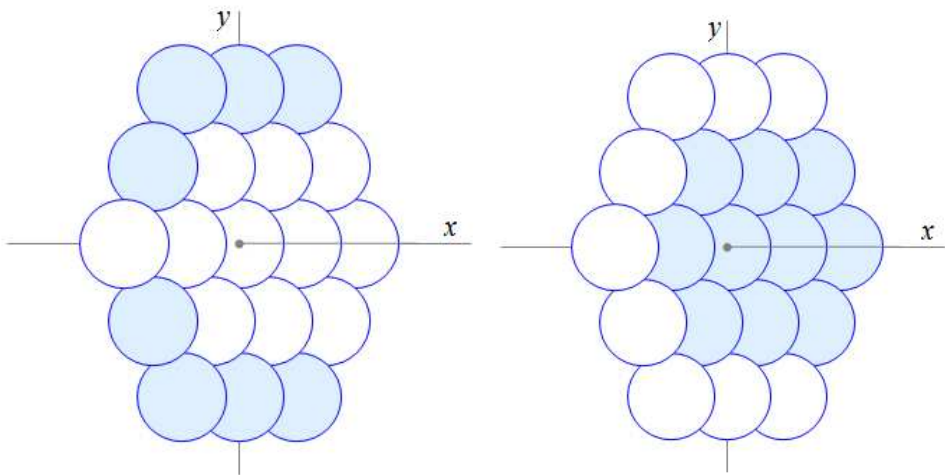


Figura 4.43. Partículas afectadas una vez (izquierda) o dos veces (derecha) por el área de solape $A_{h\mu}$.

En el cálculo de área total solapada es necesario hacer una distinción:

- Aquellas partículas que tengan una cadena horizontal contigua únicamente por uno de sus lados o bien no les afecte el área solapada $A_{h\alpha}$. En este caso el área de solape $A_{h\mu}$ les afecta una vez. $n_1 = 4(n-1)$
- Aquellas partículas que tengan una cadena horizontal contigua en ambos laterales y además les afecte el área solapada $A_{h\alpha}$. En este caso el área de solape $A_{h\mu}$ les afectara dos veces. $n_2 = 3n^2 - 7n + 4$

Conocida el área y las partículas a las que afecta, es posible calcular el área solapada total debido a este tipo de solape.

$$\begin{aligned}
 A_{h_\mu}^{Total} &= (4(n-1) + 2(3n^2 - 7n + 4))A_{h_\mu} \\
 A_{h_\mu}^{Total} &= (6n^2 - 10n + 4)A_{h_\mu} = 2(n_{po} - 2n + 1)A_{h_\mu}
 \end{aligned}
 \tag{4.145}$$

4.2.3.4. Áreas solapadas debidas únicamente al ángulo φ .

En sentido perpendicular al giro anterior, α , las partículas primarias que componen el aglomerado forman un ángulo φ con el plano de proyección. Se procede del mismo modo que en el apartado anterior.

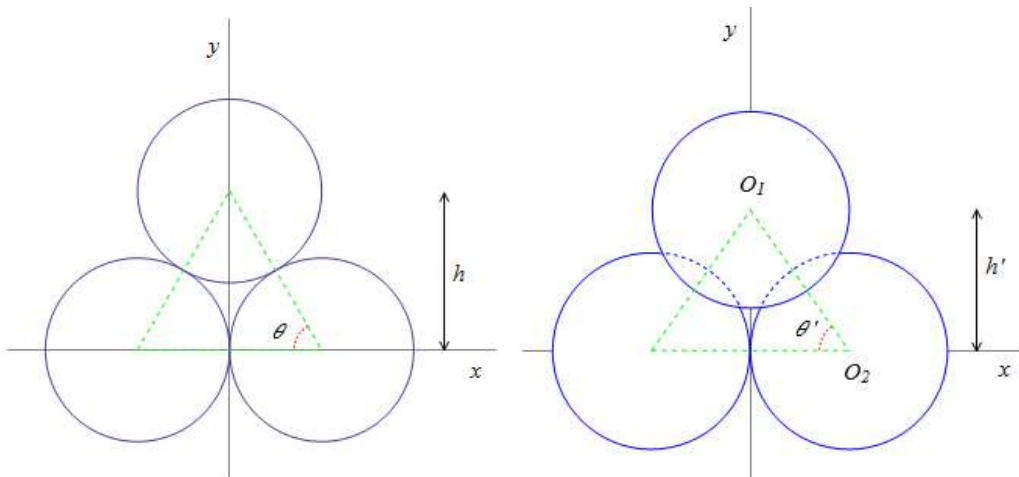


Figura 4.44. Áreas solapadas debido a un ángulo φ con el plano XY . Vista en planta.

Las ecuaciones de las partículas de centros O_1 y O_2 cuando el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección, figura 4.44 izquierda, son:

$$\begin{aligned}
 \cos \theta &= \frac{r_{po}}{2r_{po}} \rightarrow \theta = \frac{\pi}{3} \rightarrow h = 2r_{po} \sin \frac{\pi}{3} = \sqrt{3}r_{po} \\
 E_{C_1} &\equiv x^2 + (y - \sqrt{3}r_{po})^2 + z^2 = r_{po}^2 \\
 E_{C_2} &\equiv (x - r_{po})^2 + y^2 + z^2 = r_{po}^2
 \end{aligned}
 \tag{4.146}$$

Estas ecuaciones se ven afectas de la siguiente manera cuando se produce un giro φ .

$$\begin{aligned}
 E_{C_1} &\equiv x^2 + (y - \sqrt{3}r_{po} \cos \varphi(\alpha, \beta))^2 + z^2 = r_{po}^2 \\
 E_{C_2} &\equiv (x - r_{po})^2 + y^2 + z^2 = r_{po}^2
 \end{aligned}
 \tag{4.147}$$

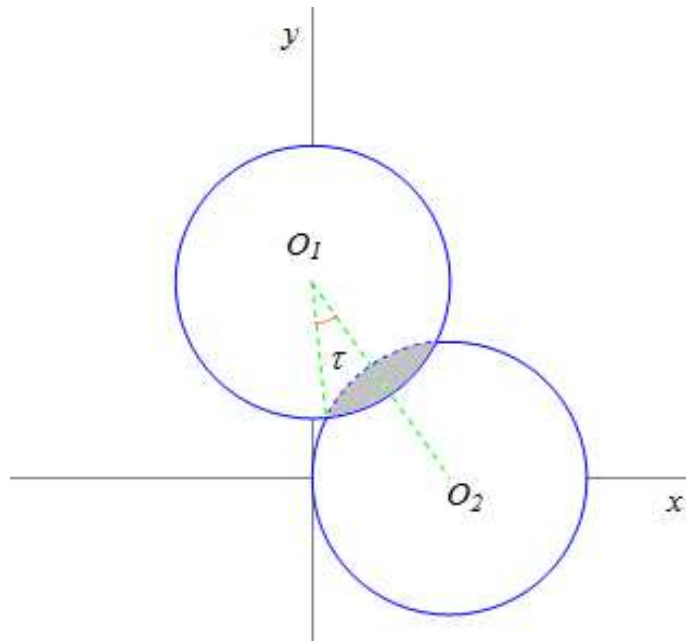


Figura 4.45. Solape entre dos partículas de cadenas horizontales contiguas debido a un ángulo φ .

Para conocer el área solapada entre dos partículas hay que conocer la distancia entre centros, figura 4.45. La distancia entre los centros se determina de la siguiente manera:

$$\overline{O_1O_2} = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} = \sqrt{r_{po}^2 + (\sqrt{3}r_{po} \cos \varphi)^2} = r_{po} \sqrt{1 + 3 \cos^2 \varphi} \quad (4.148)$$

Es posible obtener el área sombreada de la figura 4.45.

$$\cos \tau = \frac{\overline{O_1O_2}}{2r_{po}} \rightarrow \tau = \arccos\left(\frac{1}{2}\sqrt{1 + 3 \cos^2 \varphi}\right) \quad (4.149)$$

$$A_{h_\varphi} = r_{po}^2 (2\tau(\alpha, \beta) - \text{sen}(2\tau(\alpha, \beta))) \quad (4.150)$$

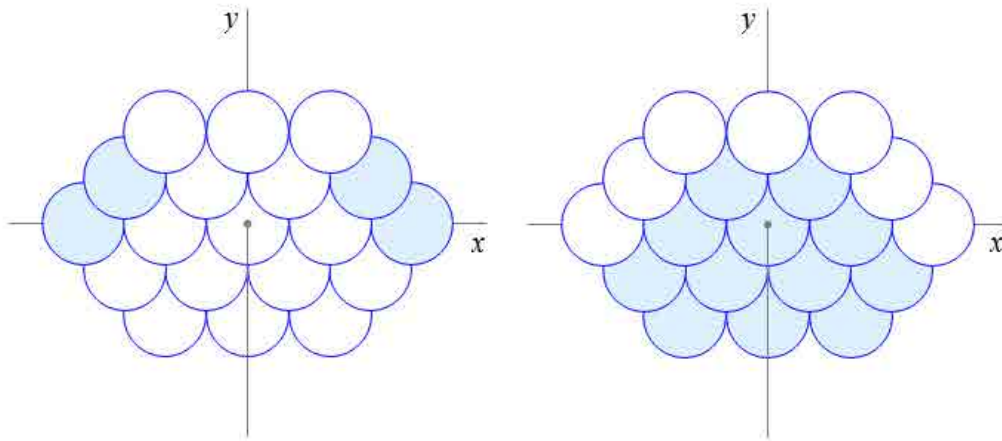


Figura 4.46. Partículas afectadas una vez (izqda.) o dos veces (dcha.) por el área de solape $A_{h\varphi}$.

En el cálculo de área total solapada es necesario hacer una distinción:

- Aquellas partículas que tengan una única partícula tangente con coordenadas z superior. En este caso el área de solape $A_{h\mu}$ les afecta una vez. $n_1 = 2(n-1)$
- Aquellas partículas que tengan una pareja de partículas tangentes con coordenada z superior. En este caso el área de solape $A_{h\mu}$ les afectara dos veces. $n_2 = n_{po} - n - 2(n-1) = n_{po} - 3n + 2$

Conocida el área y las partículas a las que afecta, es posible calcular el área solapada total debido a este tipo de solape.

$$A_{h\varphi}^{Total} = (2(n-1) + 2(n_{po} - 3n + 2))A_{h\varphi} \quad (4.151)$$

$$A_{h\varphi}^{Total} = 2(n_{po} - 2n + 1)A_{h\varphi}$$

Hasta ahora, tanto en este apartado como en el anterior se han calculado el solape entre partículas primarias tangentes. En el primer apartado, área de solape debida a un ángulo α , sólo se producían solape entre partículas tangentes. Sin embargo, en el área de solape debida a un ángulo φ , debido a la morfología del aglomerado y al sentido de giro se producen áreas solapadas tanto entre partículas tangentes como entre partículas no tangentes.

Como se ha visto hasta ahora las áreas de solape se producen para cualquier valor del ángulo de proyección φ distinto de 0; sin embargo el área de solape entre partículas no contiguas presenta una singularidad y es que dicha área tiene un valor distinto de cero a partir de un cierto valor del ángulo de proyección φ .

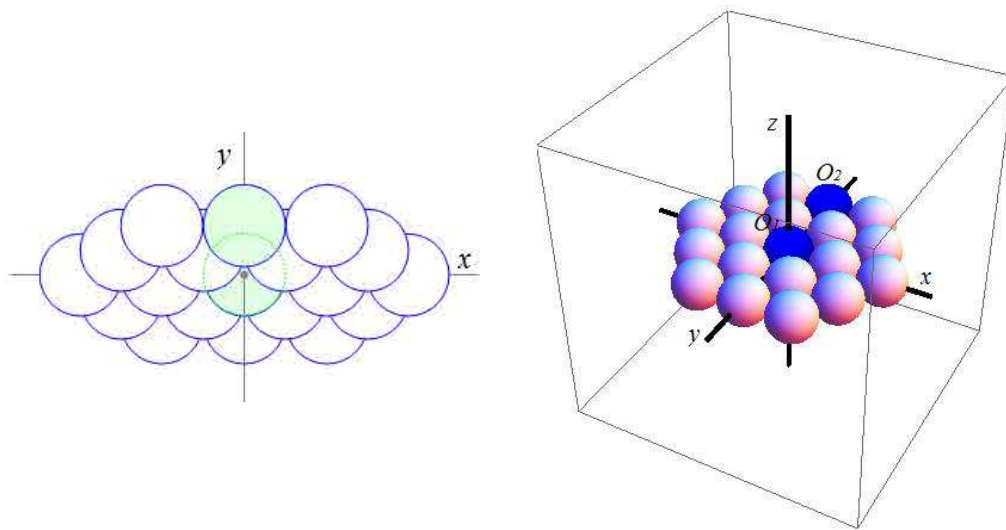


Figura 4.47. Solape entre partículas no tangentes.

El procedimiento para calcular el área de solape de la figura anterior es similar a apartados anteriores. Es necesario calcular la distancia entre centros.

$$\begin{aligned} O_1 &\equiv (0,0,0) \\ O_2 &\equiv (-2\sqrt{3}r_{po}\text{sen}\alpha\text{sen}\beta, 2\sqrt{3}r_{po}\cos\beta, 2\sqrt{3}r_{po}\cos\alpha\text{sen}\beta) \end{aligned} \quad (4.152)$$

Para que exista solape entre partículas no tangentes, la distancia medida en planta entre los centros debe ser inferior a dos veces el radio de la partícula.

$$\begin{aligned} \overline{O_1O_2} &= \sqrt{(x_{o_2} - x_{o_1})^2 + (y_{o_2} - y_{o_1})^2} < 2r_{po} \rightarrow \\ &\sqrt{3\text{sen}^2\alpha\text{sen}^2\beta + 3\cos^2\alpha} < 1 \end{aligned} \quad (4.153)$$

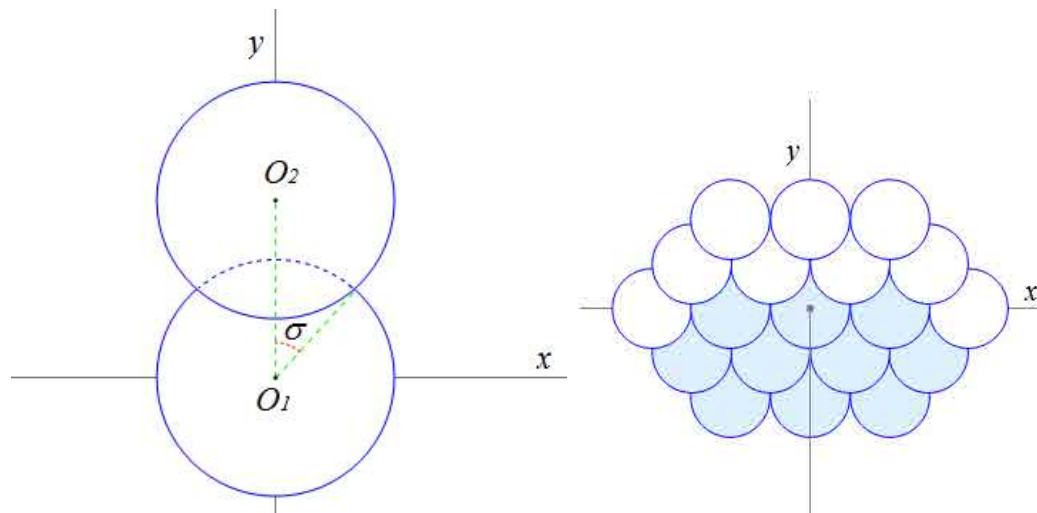


Figura 4.48. Solape entre dos partículas no tangentes.

Es posible obtener el área sombreada de la figura 4.48 izquierda.

$$\cos \sigma = \frac{\overline{O_1 O_2}}{2r_{po}} \rightarrow \sigma = \arccos\left(\sqrt{3\sin^2 \alpha \sin^2 \beta + 3\cos^2 \alpha}\right) \quad (4.154)$$

Por tanto el área solapada entre partículas no tangentes debida a un ángulo φ siempre y cuando se cumpla la condición de la ecuación (4.153), será la que se muestra en la ecuación (4.155):

$$A_{h_\sigma} = r_{po}^2 (2\sigma(\alpha, \beta) - \sin(2\sigma(\alpha, \beta))) \quad (4.155)$$

Es necesario conocer el número de partículas al que afecta. Dicha área al ser producida por un ángulo de proyección φ y entre partículas no tangentes afectará a aquellas partículas que tengan una partícula no tangente con una misma coordenada y y una coordenada z superior. En la figura 4.48 derecha aparecen sombreadas aquellas partículas que pueden verse afectadas. El número de partículas es: $n_1 = n_{po} - 3(n-1) - n = n_{po} - 4n + 3$

Por tanto el área total solapada debido al solape A_{h_σ} en un aglomerado formado por n_{po} partículas primarias es:

$$A_{h_\sigma}^{Total} = (n_{po} - 4n + 3)A_{h_\sigma} \quad (4.156)$$

Se han determinado todas las áreas de solape que se producen para unos ángulos de giro α y β cualesquiera. Sin embargo estas áreas han sido calculadas por separado de modo que es posible que existan áreas que se solapen dos veces. Esta duplicidad tiene que ser tenida en cuenta para el cálculo del área proyectada por el aglomerado en su conjunto. Aparecen dos

casos según la colocación de las partículas, en ambos casos participan tres partículas: la partícula solapada y las otras dos son las causantes del doble solape. Según la colocación de dichas partículas se definen los siguientes casos:

- Área de solape duplicada entre partículas tangentes dos a dos.
- Área de solape duplicada entre partículas tangentes entre sí.

4.2.3.5. Área solapada duplicada en partículas tangentes dos a dos

En este caso una pareja de partículas de entre las tres no son tangentes. La figura 4.49 muestra la colocación de las partículas cuando el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección (arriba izquierda) y la colocación cuando se produce el doble solape (arriba derecha o abajo):

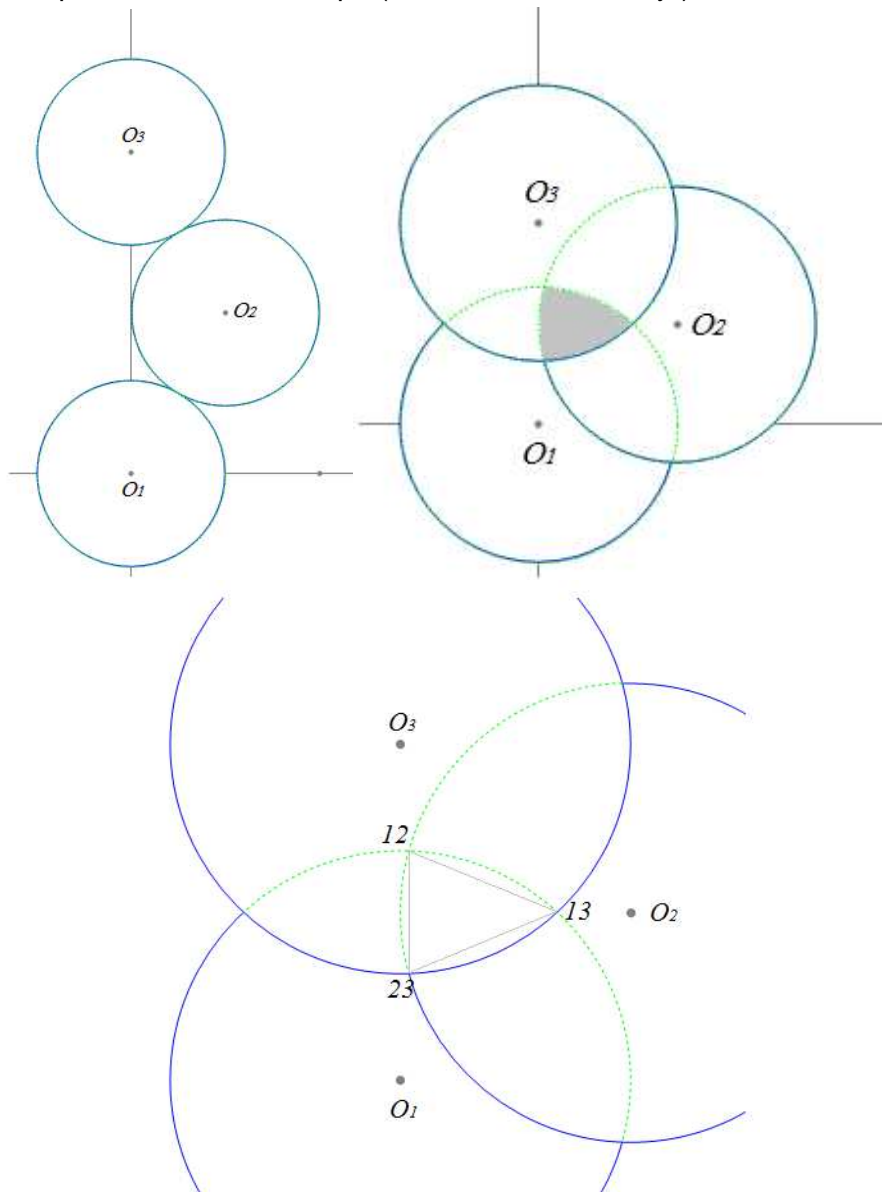


Figura 4.49. Doble solape entre partículas tangentes dos a dos.

El procedimiento para hallar el área sombreada de la figura anterior, área solapada duplicada, teniendo en cuenta la forma triangular que tiene, es el siguiente:

- Se calculan las coordenadas de los vértices que definen el área sombreada en función de las coordenadas de los centros de las partículas.
- Definidos los vértices, se calcula el área del triángulo, A_{ht} .
- Se calcula el área de los arcos de circunferencia definidos por cada pareja de vértices y el centro de la partícula correspondiente, $A_{h\delta i}$.

Las coordenadas de los centros en el plano de proyección cuando el aglomerado ha girado una pareja de ángulos de giro α y β cualesquiera es:

$$\begin{aligned} O_1 &\equiv (0,0) \\ O_2 &\equiv (r_{po} \cos \alpha - \sqrt{3} r_{po} \sin \alpha \sin \beta, \sqrt{3} r_{po} \cos \beta) \\ O_3 &\equiv (-2\sqrt{3} r_{po} \sin \alpha \sin \beta, 2\sqrt{3} r_{po} \cos \beta) \end{aligned} \quad (4.157)$$

En la figura 4.49 abajo se muestra la posición de los centros tras el giro y la nomenclatura de los vértices del triángulo que viene determinada por los subíndices de las partículas cuya intersección forma dicho vértice.

Para el cálculo de la posición de dichos vértices, es necesario definir los siguientes parámetros:

- γ_{ij} : ángulo que forma la recta que une los centros de las partículas i y j con el eje x
- P_{mij} : punto medio de la recta que une los centros de las partículas i y j
- h_{ij} : distancia entre el punto medio P_{mij} y el vértice ij

El primer paso es definir los ángulos γ_{ij} y para ello es necesario conocer las coordenadas de las partículas en función de los ángulos de giro α y β , y la posición de dichos ángulos. Para definir el sentido de dichos ángulos se utiliza como referencia la figura 4.50 arriba izquierda.

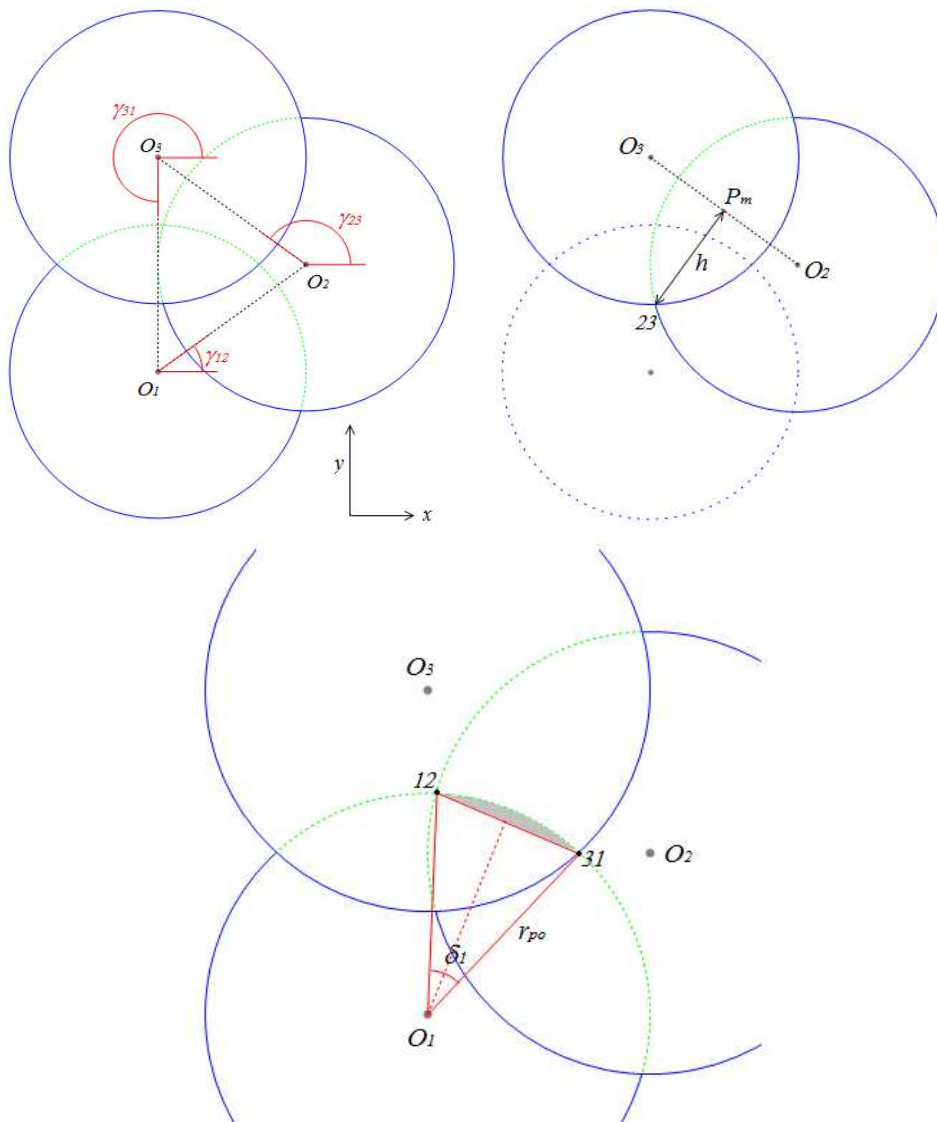


Figura 4.50. Definiciones del área de solape duplicada para partículas tangentes dos a dos.

Es necesario calcular el módulo de la distancia que separa cada pareja de centros de partícula.

$$\begin{cases} |O_1O_2| = r_{po} \sqrt{(\cos \alpha - \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta} \\ |O_2O_3| = r_{po} \sqrt{(\cos \alpha + \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta} \\ |O_1O_3| = 2\sqrt{3} r_{po} \sqrt{\operatorname{sen}^2 \alpha \operatorname{sen}^2 \beta + \cos^2 \beta} \end{cases} \quad (4.158)$$

El ángulo que forma cada recta que une los centros de las partículas se determina de la siguiente forma:

$$\gamma_{12} = \arcsen\left(\frac{y_{o_1} - y_{o_2}}{|O_1O_2|}\right) = \arcsen\left(\frac{\sqrt{3} \cos \beta}{\sqrt{(\cos \alpha - \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta}}\right) \quad (4.159)$$

$$\gamma_{23} = \arcsen\left(\frac{\sqrt{3} \cos \beta}{\sqrt{(\cos \alpha + \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta}}\right) \quad (4.160)$$

$$\gamma_{31} = \arcsen\left(\frac{2\sqrt{3} \cos \beta}{\sqrt{\operatorname{sen}^2 \alpha \operatorname{sen}^2 \beta + \cos^2 \beta}}\right) \quad (4.161)$$

Una vez definidos estos ángulos, el siguiente paso es definir los puntos medios de la recta que une una pareja de centros, así como las distancias de un punto medio a su vértice del triángulo correspondiente. Para ello será necesario hacer uso de las coordenadas de los centros y de los ángulos calculados anteriormente. Siguiendo como referencia la figura 4.50 arriba derecha, las coordenadas de los puntos medios se determinan con las ecuaciones (4.103), (4.104) y (4.105). Por otro lado las distancias de los puntos medios de los vértices se determinan con las ecuaciones (4.109), (4.110) y (4.111).

Conocidos los ángulos, las coordenadas de los puntos medios entre cada pareja de partículas y la distancia de dichos puntos medios al vértice correspondiente, se pueden calcular las coordenadas de los vértices con las ecuaciones (4.112), (4.113) y (4.114). Una vez definidos los vértices del triángulo se procede al cálculo del área sombreada de la figura 4.49 arriba derecha.

Primero se determina el área definida por los tres arcos de circunferencia. En la figura 4.50 abajo se muestra el arco de circunferencia definido por la partícula de centro O_1 . Se calcula el área sombreada y se procede de igual modo para hallar el área de los dos arcos de circunferencia restantes. El área del arco se determina de la siguiente manera:

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_1}{2}\right) = \frac{\overline{12-31}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_1 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{12} - x_{31})^2 + (y_{12} - y_{31})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.162)$$

$$A_{h_{\delta_1}} = \frac{r_{po}^2}{2} (\delta_1 - \operatorname{sen} \delta_1) \quad (4.163)$$

Procediendo del mismo modo para el cálculo de los dos arcos de circunferencia restantes, se obtienen el área de dichos arcos en las ecuaciones (4.165) y (4.167):

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_2}{2}\right) = \frac{\overline{12-23}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_2 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{12}-x_{23})^2 + (y_{12}-y_{23})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.164)$$

$$A_{h_{\delta_2}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\delta_2 - \operatorname{sen}\delta_2) \quad (4.165)$$

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\delta_3}{2}\right) = \frac{\overline{31-23}}{2r_{po}} \rightarrow \delta_3 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{31}-x_{23})^2 + (y_{31}-y_{23})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.166)$$

$$A_{h_{\delta_3}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\delta_3 - \operatorname{sen}\delta_3) \quad (4.167)$$

Calculadas las áreas de los arcos de circunferencias, se procede al cálculo del triángulo pues se conocen los vértices de éste. Puesto que no se conocen ni la base ni la altura del triángulo, el área se calcula mediante el siguiente producto vectorial, dicha área queda reflejada en la ecuación (4.168):

$$A_{h_{\delta_1}} = \frac{1}{2} \left| \vec{n}_{12-23} \cdot \overline{12-31} \right| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} y_{12} - y_{23} & -x_{12} + x_{23} \\ x_{12} - x_{31} & y_{12} - y_{31} \end{vmatrix} \quad (4.168)$$

De modo que conociendo el área del triángulo y el área de los arcos de circunferencia, ya se conoce la totalidad del área sombreada de la figura 4.49 arriba derecha. Por tanto el área doblemente solapada es A_{ds1} :

$$A_{ds1}(\alpha, \beta) = A_{h_{\delta_1}} + A_{h_{\delta_2}} + A_{h_{\delta_3}} \quad (4.169)$$

El área de solape duplicada en partículas tangentes dos a dos afecta a las partículas sombreadas de la figura 4.51:

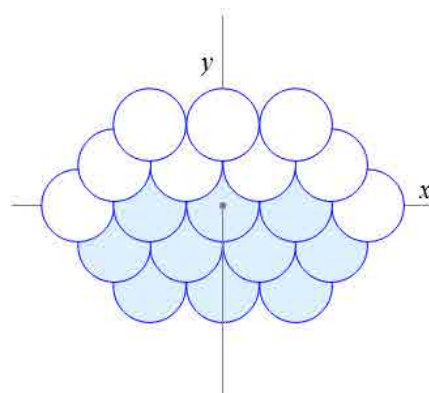


Figura 4.51. Partículas a las que afecta el área de solape duplicada A_{ds1} .

$$A_{ds1}^{TOTAL} = 2(n_{po} - n - 3(n-1))A_{ds1} = 2(n_{po} - 4n + 3)A_{ds1} \quad (4.170)$$

Se ha determinado una de las áreas que se solapa dos veces, en este caso las partículas eran tangentes dos a dos, sin embargo se produce otra área solapada por duplicado en partículas tangentes entre sí.

4.2.3.6. Área solapada duplicada en partículas tangentes entre sí

En este caso las tres partículas son tangentes entre sí. La figura 4.52 muestra la colocación de las partículas cuando el aglomerado se encuentra apoyado en el plano de proyección (arriba izquierda) y la colocación cuando se produce el doble solape (arriba derecha):

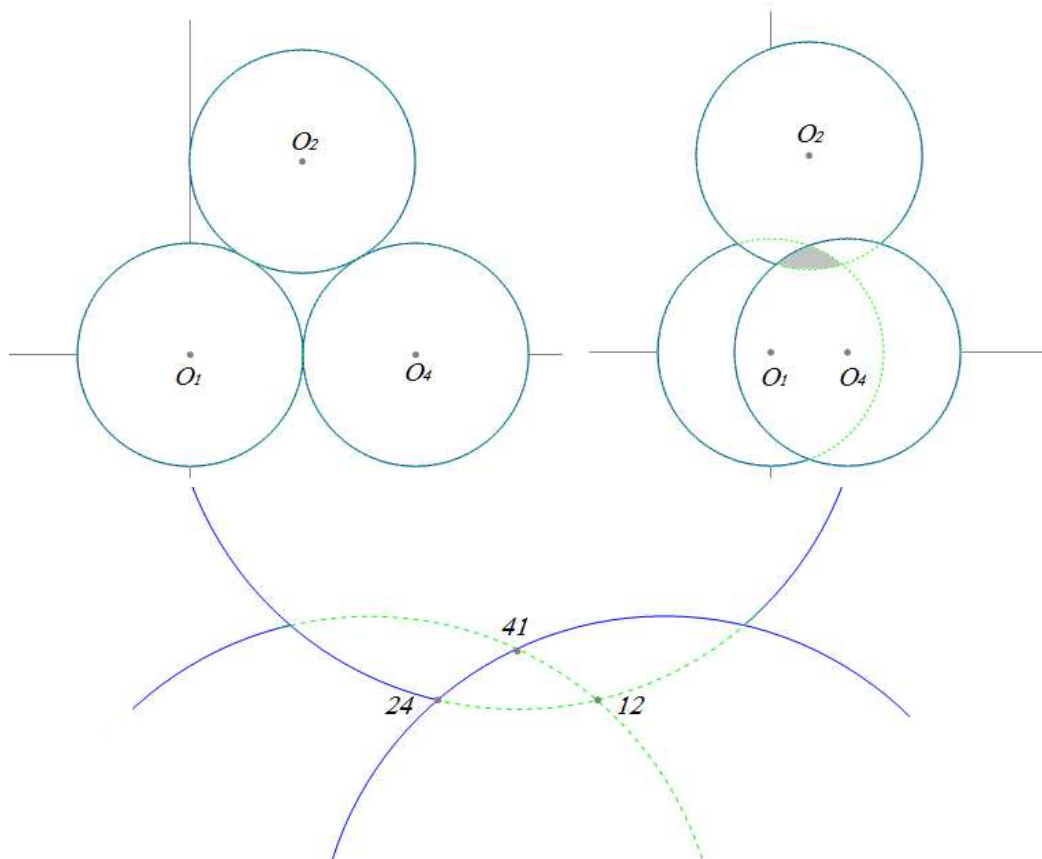


Figura 4.52. Doble solape entre partículas tangentes entre sí.

El procedimiento para hallar el área sombreada de la figura anterior, área solapada duplicada, teniendo en cuenta la forma triangular que tiene, es similar al caso anterior.

- Se calculan las coordenadas de los vértices que definen el área sombreada en función de las coordenadas de los centros de las partículas.
- Definidos los vértices, se calcula el área del triángulo, A_{ht} .

Se calcula el área de los arcos de circunferencia definidos por cada pareja de vértices y el centro de la partícula correspondiente, $A_{h\xi i}$.

Las coordenadas de los centros en el plano de proyección cuando el aglomerado ha girado una pareja de ángulos de giro α y β cualesquiera es:

$$\begin{aligned} O_1 &\equiv (0,0) \\ O_2 &\equiv (r_{po} \cos \alpha - \sqrt{3} r_{po} \sin \alpha \sin \beta, \sqrt{3} r_{po} \cos \beta) \\ O_4 &\equiv (2 r_{po} \cos \beta, 0) \end{aligned} \quad (4.171)$$

En la figura 4.52 arriba derecha se muestra la posición de los centros tras el giro y en la figura 4.52 abajo la nomenclatura de los vértices del triángulo que viene determinada por los subíndices de las partículas cuya intersección forma dicho vértice.

Para el cálculo de la posición de dichos vértices, es necesario definir los siguientes parámetros:

- ξ_{ij} : ángulo que forma la recta que une los centros de las partículas i y j con el eje x
- P_{mij} : punto medio de la recta que une los centros de las partículas i y j
- h_{ij} : distancia entre el punto medio P_{mij} y el vértice ij

El primer paso es definir los ángulos ξ_{ij} y para ello es necesario conocer las coordenadas de las partículas en función de los ángulos de giro α y β , y la posición de dichos ángulos. Para definir el sentido de dichos ángulos se utiliza como referencia la figura 4.53 arriba izquierda:

Es necesario calcular el módulo de la distancia que separa cada pareja de centros de partícula.

$$\begin{cases} |O_1 O_2| = r_{po} \sqrt{(\cos \alpha - \sqrt{3} \sin \alpha \sin \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta} \\ |O_2 O_4| = r_{po} \sqrt{(\cos \alpha + \sqrt{3} \sin \alpha \sin \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta} \\ |O_1 O_4| = 2 r_{po} \cos \alpha \end{cases} \quad (4.172)$$

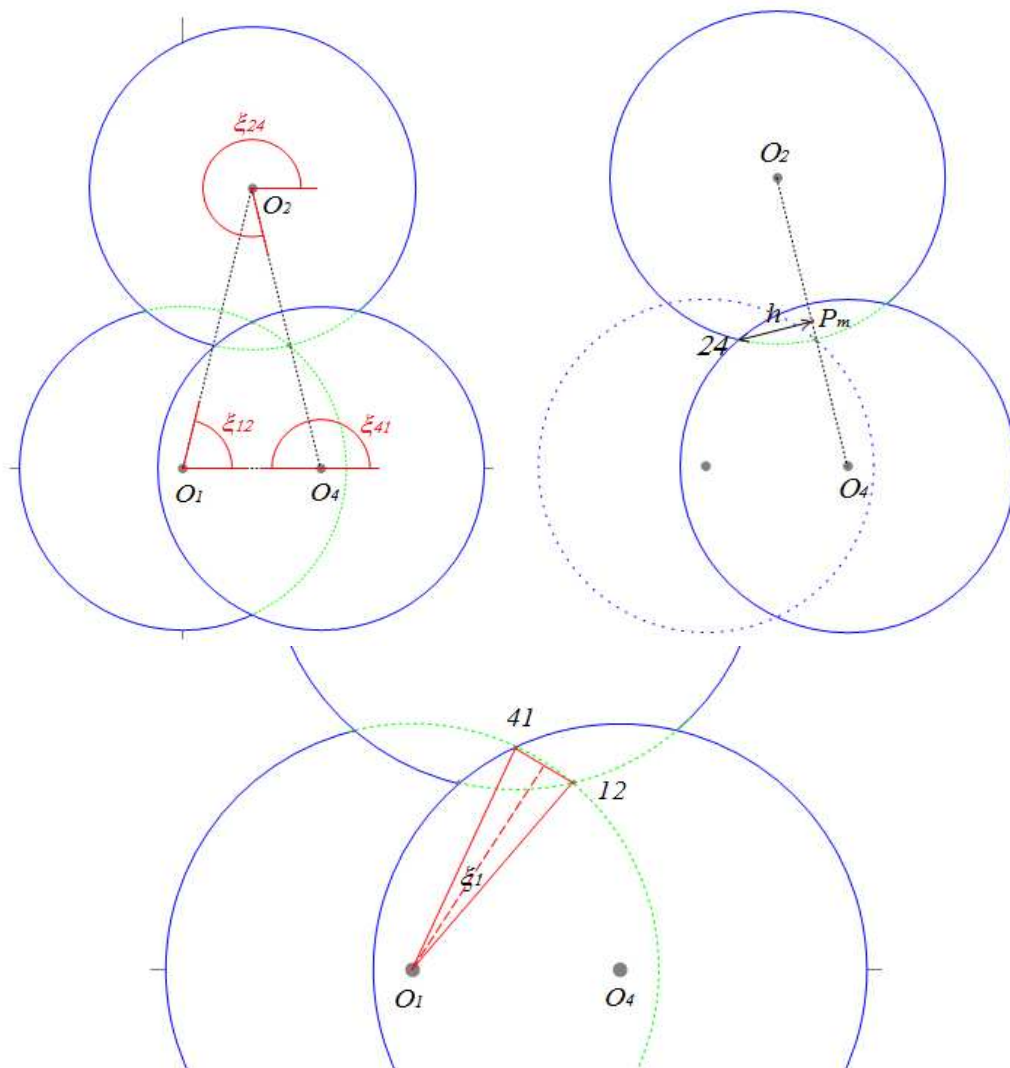


Figura 4.53. Definiciones del área de solape duplicada para partículas tangentes entre sí.

El ángulo que forma cada recta que une los centros de las partículas se determina de la siguiente forma:

$$\xi_{12} = \arcsen \left(\frac{y_{O_1} - y_{O_2}}{|O_1 O_2|} \right) = \arcsen \left(\frac{\sqrt{3} \cos \beta}{\sqrt{(\cos \alpha - \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta}} \right) \quad (4.173)$$

$$\xi_{24} = \arcsen \left(\frac{\sqrt{3} \cos \beta}{\sqrt{(\cos \alpha + \sqrt{3} \operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta)^2 + 3 \cos^2 \beta}} \right) \quad (4.174)$$

$$\xi_{41} = 0 \quad (4.175)$$

Una vez definidos estos ángulos, el siguiente paso es definir los puntos medios de la recta que une una pareja de centros, así como las distancias de un punto medio a su vértice del triángulo correspondiente. Para ello será necesario hacer uso de las coordenadas de los centros y de los ángulos calculados anteriormente. Siguiendo como referencia la figura 4.53 arriba derecha, las coordenadas de los puntos medios se determinan con las ecuaciones (4.103), (4.104) y (4.105). Por otro lado las distancias de los puntos medios de los vértices se determinan con las ecuaciones (4.109), (4.110) y (4.111).

Conocidos los ángulos, las coordenadas de los puntos medios entre cada pareja de partículas y la distancia de dichos puntos medios al vértice correspondiente, se pueden calcular las coordenadas de los vértices con las ecuaciones (4.112), (4.113) y (4.114). Una vez definidos los vértices del triángulo se procede al cálculo del área sombreada de la figura 4.52 arriba derecha.

Primero se determina el área definida por los tres arcos de circunferencia. En la figura 4.53 abajo se muestra el arco de circunferencia definido por la partícula de centro O_1 . Se calcula el área sombreada y se procede de igual modo para hallar el área de los dos arcos de circunferencia restantes. El área del arco se determina de la siguiente manera:

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\xi_1}{2}\right) = \frac{\overline{12-41}}{2r_{po}} \rightarrow \xi_1 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{12}-x_{41})^2+(y_{12}-y_{41})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.176)$$

$$A_{h_{\xi_1}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\xi_1 - \operatorname{sen}\xi_1) \quad (4.177)$$

Procediendo del mismo modo para el cálculo de los dos arcos de circunferencia restantes, se obtienen el área de dichos arcos en las ecuaciones (4.179) y (4.181):

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\xi_2}{2}\right) = \frac{\overline{12-24}}{2r_{po}} \rightarrow \xi_2 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{12}-x_{24})^2+(y_{12}-y_{24})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.178)$$

$$A_{h_{\xi_2}} = \frac{r_{po}^2}{2}(\xi_2 - \operatorname{sen}\xi_2) \quad (4.179)$$

$$\operatorname{sen}\left(\frac{\xi_3}{2}\right) = \frac{\overline{41-24}}{2r_{po}} \rightarrow \xi_3 = 2\arcsen\left(\frac{\sqrt{(x_{41}-x_{24})^2+(y_{41}-y_{24})^2}}{2r_{po}}\right) \quad (4.180)$$

$$A_{h_{\xi_3}} = \frac{r_{po}^2}{2} (\xi_3 - \text{sen} \xi_3) \quad (4.181)$$

Calculadas las áreas de los arcos de circunferencias, se procede al cálculo del triángulo pues se conocen los vértices de éste. El área se calcula mediante el siguiente producto vectorial, dicha área queda reflejada en la ecuación (4.182):

$$A_{h_{t_2}} = \frac{1}{2} \left| \vec{n}_{12-24} \cdot \overline{12-41} \right| = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} y_{12} - y_{24} & -x_{12} + x_{24} \\ x_{12} - x_{41} & y_{12} - y_{41} \end{vmatrix} \quad (4.182)$$

De modo que conociendo el área del triángulo y el área de los arcos de circunferencia, ya se conoce la totalidad del área sombreada de la figura 4.52 arriba derecha. Por tanto el área doblemente solapada es A_{ds2} :

$$A_{ds2}(\alpha, \beta) = A_{h_{t_2}} + A_{h_{\xi_1}} + A_{h_{\xi_2}} + A_{h_{\xi_3}} \quad (4.183)$$

Al igual que en casos anteriores, debido a la geometría de este solape, hay partículas a las que afecta dos veces y partículas a las que afecta una única vez. Aparecen los siguientes casos:

- Aquellas partículas que tengan dos partículas tangentes con coordenada x inferior, el área de solape les afectará una sola vez. Figura 4.54 izquierda.
 $n_1 = 2(n-1)$
- Las partículas que tengan tres partículas tangentes con coordenada x inferior, el área de solape les afectará dos veces. Figura 4.54 derecha.
 $n_2 = n_{po} - n - 3(n-1) = n_{po} - 4n + 3$

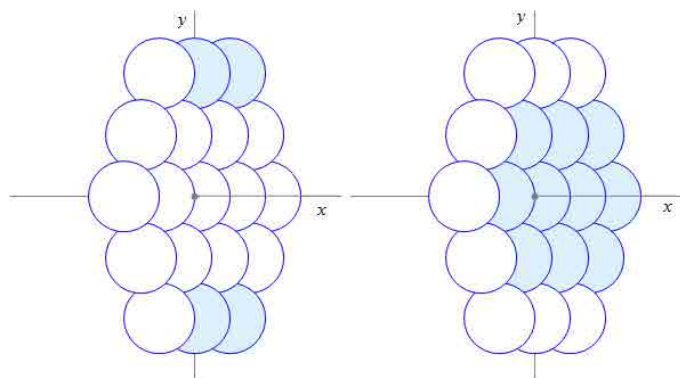


Figura 4.54. Partículas a las que afecta el área de solape duplicada A_{ds2} .

El área solapada total que se ha duplicado en el solape de partículas tangentes entre sí es:

$$A_{ds2}^{TOTAL} = (2(n-1) + 2(n_{po} - 4n + 3))A_{ds2} = 2(n_{po} - 3n + 2)A_{ds2} \quad (4.184)$$

4.2.3.7. Área proyectada por el aglomerado

Una vez calculadas todas las áreas que se solapan en función de los ángulos de giro del aglomerado, conociendo el número de partículas primarias que lo componen, es posible hallar el área proyectada por este tipo de aglomerado. El área proyectada se define como el sumatorio de la proyección de cada partícula independiente, sustrayendo la totalidad de las áreas solapadas y por último sumándole aquellas áreas que se solapan por duplicado. El área proyectada es:

$$A_{proyectada} = \sum A_{po} - \sum A_{solape} + \sum A_{doble\ solape} \quad (4.185)$$

Sustituyendo en la expresión anterior todas las variables calculadas en este apartado se obtiene el valor del área proyectada en función de los ángulos de giro α y β y del número de partículas primarias que componen el aglomerado:

$$\sum A_{solape} = A_{h_\alpha}^{TOTAL} + A_{h_\mu}^{TOTAL} + A_{h_\phi}^{TOTAL} + A_{h_\sigma}^{TOTAL} \quad (4.186)$$

$$\sum A_{solape} = (n_{po} - 2n + 1)A_{h_\alpha} + 2(n_{po} - 2n + 1)A_{h_\mu} + 2(n_{po} - 2n + 1)A_{h_\phi} + (n_{po} - 4n + 3)A_{h_\sigma} \quad (4.187)$$

$$\sum A_{solape} = (n_{po} - 2n + 1)(A_{h_\alpha} + 2A_{h_\mu} + 2A_{h_\phi}) + (n_{po} - 4n + 3)A_{h_\sigma} \quad (4.188)$$

Del mismo modo, sustituyendo las variables en las áreas solapadas por duplicado:

$$\sum A_{doble\ solape} = A_{ds1}^{TOTAL} + A_{ds2}^{TOTAL} \quad (4.189)$$

$$\sum A_{doble\ solape} = 2(n_{po} - 4n + 3)A_{ds1} + 2(n_{po} - 3n + 2)A_{ds2} \quad (4.190)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.188) y (4.190) en la ecuación (4.185) se obtiene el área proyectada por el aglomerado:

$$A_p = n_{po}A_{po} - (n_{po} - 2n + 1)(A_{h_\alpha} + 2A_{h_\mu} + 2A_{h_\phi}) - (n_{po} - 4n + 3)A_{h_\sigma} + 2(n_{po} - 4n + 3)A_{ds1} + 2(n_{po} - 3n + 2)A_{ds2} \quad (4.191)$$

4.2.3.8. Factor de solape lineal

Conocida el área proyectada y haciendo uso de la ecuación (4.11) el factor de solape lineal, para el caso de un aglomerado en forma de plano con compactación hexagonal compacta es:

$$z = \frac{A_p}{n_{po} A_{po}} = \frac{\left(n_{po} A_{po} - (n_{po} - 2n + 1)(A_{h_\alpha} + 2A_{h_\mu} + 2A_{h_\varphi}) - \right.}{n_{po} A_{po}} \left. - (n_{po} - 4n + 3)(A_{h_\sigma} - 2A_{ds1}) + 2(n_{po} - 3n + 2)A_{ds2} \right) \quad (4.192)$$

La ecuación (4.192) está en función de n cuya relación con n_{po} es la ecuación (4.133). Es necesario despejar de la ecuación (4.133) n y sustituirla en la ecuación (4.192) para que ésta esté en función de n_{po} solamente.

$$n = \frac{3 + \sqrt{12n_{po} - 3}}{6} \quad (4.193)$$

Sustituyendo la ecuación (4.193) en la ecuación (4.192) se obtiene el factor de solape lineal en función de los ángulos de proyección:

$$z = \frac{A_p}{n_{po} A_{po}} = 1 - \frac{3n_{po} - \sqrt{12n_{po} - 3}}{3n_{po} A_{po}} (A_{h_\alpha} + 2A_{h_\mu} + 2A_{h_\varphi}) - \frac{3n_{po} - 2\sqrt{12n_{po} - 3} + 3}{3n_{po} A_{po}} (A_{h_\sigma} - 2A_{ds1}) + \frac{2n_{po} - \sqrt{12n_{po} - 3} - 1}{n_{po} A_{po}} A_{ds2} \quad (4.194)$$

La relación las áreas solapadas de la ecuación (4.194) en función de los ángulos libres del aglomerado α y β se muestran en las ecuaciones (4.32), (4.144), (4.150), (4.155), (4.169) y (4.183).

Para este aglomerado, la variación del factor de solape lineal en función de los ángulos α y β para un número determinado de partículas se representa en las figuras 4.55 ($n=3$, $n_{po}=19$) y 4.56 ($n=10$, $n_{po}=271$).

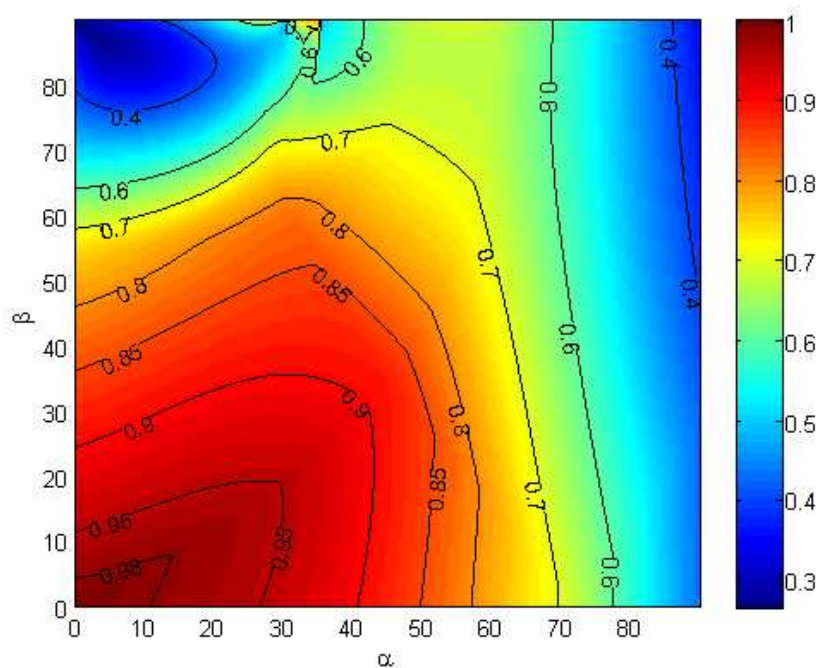


Figura 4.55. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=19$, ($n=3$).

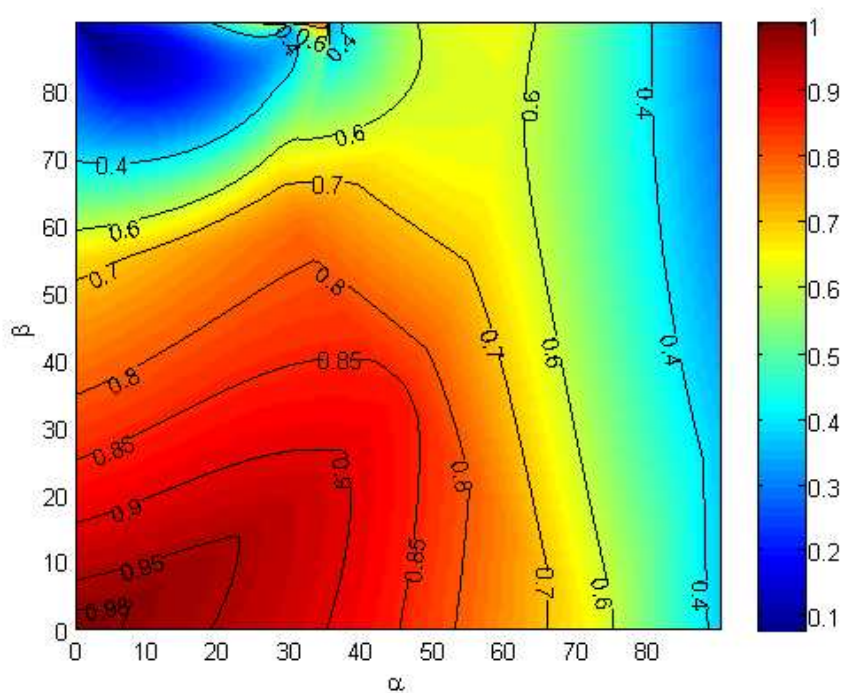


Figura 4.56. Variación del factor de solape lineal en función del α y β para $n_{po}=271$, ($n=10$).

Como se ha hecho en los casos anteriores, el factor de solape no debe depender de los ángulos de proyección. Para hallar esta relación se va a obtener la media hemisférica entre todos los factores de solape lineal posibles para cada pareja de α y β . El método para obtener la media hemisférica es mediante la integración extendida en la semiesfera visible utilizando coordenadas esféricas:

$$\bar{z} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{m\acute{a}x}} z(A_{h_\alpha}, A_{h_\mu}, A_{h_\varphi}, A_{h_\sigma}, A_{ds1}, A_{ds2}) \cos(\varphi) d\varphi d\alpha d\delta}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\varphi_{m\acute{a}x}} \cos(\varphi) d\varphi d\alpha d\delta} \quad (4.195)$$

Sin embargo los límites del ángulo de proyección φ son desconocidos, es necesario poner la integral de la ecuación (4.195) como función sólo de α , β y δ . Para ello se sustituye la ecuación (4.49) en la (4.195) y queda:

$$\bar{z} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} z(\alpha, \mu, \varphi, \sigma, ds_1, ds_2) \cos(\beta) \cos(\alpha) d\beta d\alpha d\delta}{\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(\beta) \cos(\alpha) d\beta d\alpha d\delta} \quad (4.196)$$

La ecuación (4.196) se resuelve sustituyendo en ella la ecuación (4.194) y ordenando los distintos términos.

$$z = 1 - \frac{3n_{po} - \sqrt{12n_{po} - 3}}{3n_{po}\pi} (I_\alpha + 2I_\mu + 2I_\varphi) - \frac{3n_{po} - 2\sqrt{12n_{po} - 3} + 3}{3n_{po}\pi} (I_\sigma - 2I_{ds1}) + \frac{2n_{po} - \sqrt{12n_{po} - 3} - 1}{n_{po}\pi} I_{ds2} \quad (4.197)$$

Estas siete integrales se pueden resolver de manera numérica, siendo los valores los siguientes: $I_\alpha=0.4747$, $I_\mu=0.0440$, $I_\varphi=0.1503$, $I_\sigma=0.0375$, $I_{ds1}=0.0189$ y $I_{ds2}=0.0239$. La ecuación (4.197), una vez sustituidos los valores obtenidos, y reordenando los términos, queda:

$$\bar{z} = 0.7405 + 0.2518 \frac{\sqrt{12n_{po} - 3}}{3n_{po}} + \frac{0.0077}{n_{po}} \quad (4.198)$$

La evolución del factor lineal de solape medio para un aglomerado en forma de plano con compactación hexagonal compacta se muestra en la figura 4.57:

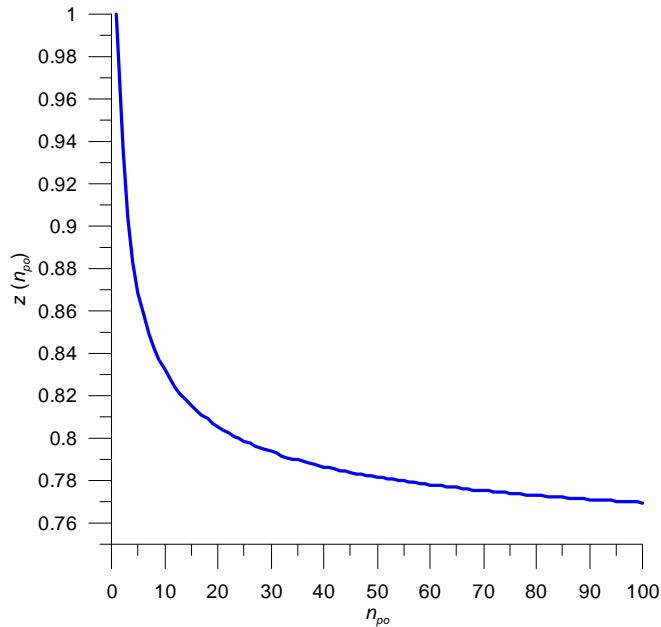


Figura 4.57. Evolución del factor lineal de solape medio para un plano.

La ecuación (4.198) se ha representado en la figura 4.57. Para n_{po} igual a 1 el factor de solape es la unidad, y cuando el número de partículas primaria tiende a infinito el factor de solape tiende a 0.7405, inferior a los valores límites de los casos de aglomerados lineales.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0.7405 \quad (4.199)$$

4.2.4. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 3.

4.2.4.1. Introducción.

Si el aglomerado está compuesto por un alto número de partículas primarias formando una esfera con un factor de compactación p , el factor de solape se puede obtener, sustituyendo el factor de compactación en la ecuación (4.5), como la relación entre los diámetros de las partículas primarias y del aglomerado, afectado por el índice de compactación.

$$p = \frac{V_h}{V_p} = \frac{V_h}{\frac{\pi}{6} d_p^3} = \left\{ A_p = \frac{\pi}{4} d_p^2 \right\} = \frac{V_h}{\frac{2}{3} A_p d_p} = \frac{3}{2} \frac{1}{d_p} \frac{V_h}{A_p} \quad (4.200)$$

$$z = \frac{2d_{po}}{3} \frac{A_p}{V_h} = \frac{2d_{po}}{3} \frac{3}{2d_p} \frac{1}{p} = \frac{1}{p} \frac{d_{po}}{d_p} \quad (4.201)$$

Cuanto mayor es el tamaño del aglomerado frente al tamaño de la partícula primaria mayor es el solape y menor es el factor de solape. Se puede sustituir la ecuación (4.3) en la ecuación (4.201), de manera que el factor de solape queda en función del número de partículas primarias y del índice de compactación:

$$\frac{d_{po}}{d_p} = \left(\frac{V_{po}}{V_p} \right)^{\frac{1}{3}} = \{V_h = pV_p\} = \left(\frac{V_{po} p}{V_h} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.202)$$

$$z = \frac{1}{p} \frac{d_{po}}{d_p} = \frac{1}{p} \left(\frac{V_{po} p}{V_h} \right)^{\frac{1}{3}} = \{V_h = n_{po} V_{po}\} = \frac{1}{p^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} \quad (4.203)$$

4.2.4.2. Aglomerado con compactación cúbica simple.

Para una configuración de compactación cúbica simple (identificado por el subíndice *sc*), el factor de compactación resulta en la siguiente ecuación, (Γ es la función Gamma), [7]:

$$p_{sc}(D_f) = \frac{\pi^{\frac{D_f}{2}}}{2^{D_f} \Gamma\left(1 + \frac{D_f}{2}\right)} = \{D_f = 3\} = \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{2^3 \Gamma\left(\frac{5}{2}\right)} = \frac{\pi}{6} = 0.5236 \quad (4.204)$$

En este caso de la ecuación (4.203) el factor de solape lineal en función del número de partículas primarias queda:

$$z = \frac{1}{p^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1}{\left(\frac{\pi}{6}\right)^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1.5393}{n_{po}^{\frac{1}{3}}} \quad (4.205)$$

Como se deduce de la ecuación (4.205), representada en la figura 4.58, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape tiende a cero, es decir el solape se hace máximo.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0 \quad (4.206)$$

4.2.4.3. Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.

En este caso para una configuración de compactación cúbica centrada en las caras (identificado por el subíndice *bcc*), el factor de compactación resulta en la siguiente ecuación, (Γ es la función Gamma), [7]:

$$p_{sc}(D_f) = \frac{2 \left(\frac{D_f \pi}{16} \right)^{\frac{D_f}{2}}}{\Gamma \left(1 + \frac{D_f}{2} \right)} = \{D_f = 3\} = \frac{\left(\frac{3\pi}{16} \right)^{\frac{3}{2}} 2}{\Gamma \left(\frac{5}{2} \right)} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.6802 \quad (4.207)$$

En este caso de la ecuación (4.207) el factor de solape lineal en función del número de partículas primarias queda:

$$z = \frac{1}{p^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1}{\left(\frac{\sqrt{3}\pi}{8} \right)^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1.2930}{n_{po}^{\frac{1}{3}}} \quad (4.208)$$

Como se deduce de la ecuación (4.208), representada en la figura 4.58, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape tiende a cero, es decir el solape se hace máximo.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0 \quad (4.209)$$

4.2.4.4. Aglomerado con compactación hexagonal compacta.

Con un procedimiento parecido al de los casos anteriores, para una configuración de compactación hexagonal compacta (identificado por el subíndice *hc*), el factor de compactación es:

$$p_{hc} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} = 0.7405 \quad (4.210)$$

En este caso de la ecuación (4.210) el factor de solape lineal en función del número de partículas primarias queda:

$$z = \frac{1}{p^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1}{\left(\frac{\pi}{\sqrt{18}} \right)^{\frac{2}{3}} n_{po}^{\frac{1}{3}}} = \frac{1.2218}{n_{po}^{\frac{1}{3}}} \quad (4.211)$$

Como en los casos anteriores de la ecuación (4.211), representada en la figura 4.58, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape tiende a cero, es decir el solape se hace máximo.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0 \quad (4.212)$$

4.2.4.5. Aglomerado con compactación aleatoria.

Para una compactación aleatoria del aglomerado (identificado con r) y en el caso de partículas esféricas monodispersas en tamaño se han encontrado en la bibliografía distintos valores para el factor de compactación, aunque en este trabajo se ha escogido el propuesto por el modelo propuesto por Shi y Zhang, [8] debido a la coincidencia con otros autores y a lo riguroso del trabajo. El valor del factor de empaquetamiento o compactación para una compactación aleatoria es $p_r=0.578$ para $D_f=3$.

En este caso el factor de solape lineal en función del número de partículas primarias queda:

$$z = \frac{1}{p^{2/3} n_{po}^{1/3}} = \frac{1}{(0.578)^{2/3} n_{po}^{1/3}} = \frac{1.4412}{n_{po}^{1/3}} \quad (4.213)$$

Como en los casos anteriores de la ecuación (4.213), representada en la figura 4.58, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape tiende a cero, es decir el solape se hace máximo.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z = 0 \quad (4.214)$$

4.2.4.6. Resumen.

Los cuatro casos anteriores se muestran en la figura 4.58. En los que, como era de esperar, en todos los casos el solape máximo se alcanza con una compactación hexagonal compacta y por el contrario el solape mínimo se obtiene con una compactación simple cúbica. Esta secuencia es independiente del número de partículas primarias que compone el aglomerado. La tendencia de los cuatro casos expuestos es la misma, cuanto mayor es el número de partículas primarias mayor es el solape entre las partículas y menor es el factor de solape lineal, independientemente del tipo de configuración de compactación que tenga el aglomerado.

En la figura 4.58 se ha representado el factor de solape lineal para aglomerados cuyo número de partículas primarias sea superior a cinco, ya que el modelo propuesto con un número menor de partículas primarias en aglomerados con dimensión fractal tendiendo a tres no tendría validez, puesto que estos aglomerados tendrían una dimensión fractal inferior a tres.

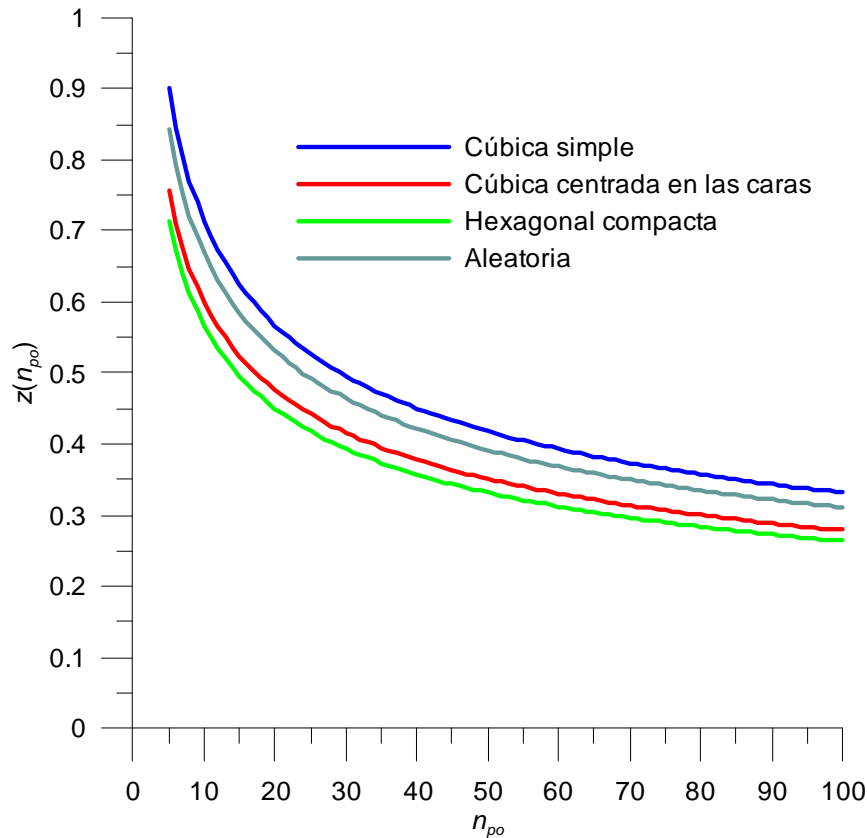


Figura 4.58. Efecto del número de partículas primarias sobre el factor de solape, para $D_f = 3$ en función de la compactación del aglomerado.

4.2.5. COMPARACIÓN DE LOS DISTINTOS CASOS. MODELO PROPUESTO.

Para concluir el epígrafe del factor de solape lineal se muestra en la figura 4.59 los solapes lineales de los aglomerados estudiados en función del número de partículas primarias que los componen.

En la figura 4.59 se muestra como los aglomerados con menor factor de solape lineal son aquellos con una dimensión fractal mayor. Existe una pequeña tendencia a disminuir el factor de solape lineal cuando la dimensión fractal varía entre uno y dos, mientras que el aumento en el solape es muy significativo cuando la dimensión fractal aumenta entre dos y tres.

Puesto que el factor de solape lineal depende de la dimensión fractal, se puede proponer un modelo de ajuste cuadrático del factor de solape en función de la dimensión fractal.

$$z = aD_f^2 + bD_f + c \quad (4.215)$$

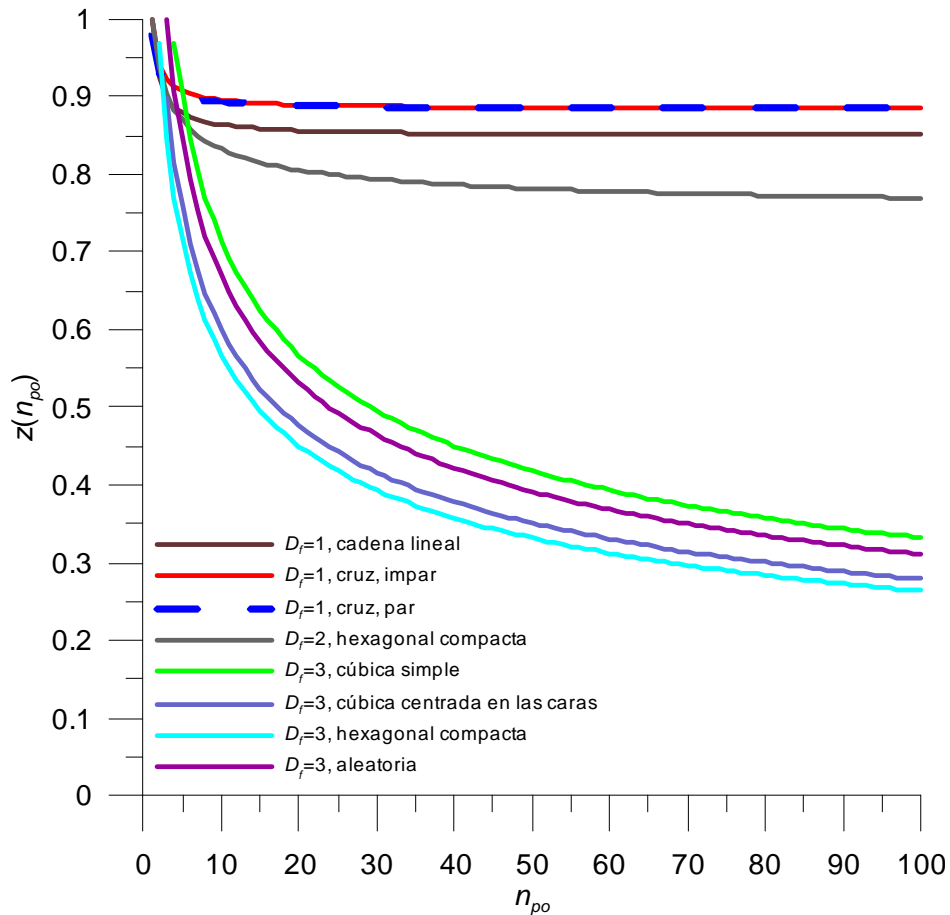


Figura 4.59. Factor de solape lineal frente al número de partículas primarias para todos los casos estudiados.

Se va tomar como caso de estudio los modelos de solape de los aglomerados con compactación hexagonal compacta, por ser éstos los casos más extremos. Por tanto, el modelo mostrado en la ecuación (4.215) tiene que satisfacer la ecuación (4.15) para $D_f=1$, la ecuación (4.198) para $D_f=2$ y la ecuación (4.211) para $D_f=3$. De manera que se puede definir las funciones expuestas en las ecuaciones (4.15), (4.198) y (4.211) como A , B , C :

$$\begin{cases} A(n_{po}) \equiv 0.8488 + \frac{0.1512}{n_{po}} \\ B(n_{po}) \equiv 0.7405 + 0.2518 \frac{\sqrt{12n_{po} - 3}}{3n_{po}} + \frac{0.0077}{n_{po}} \\ C(n_{po}) \equiv \frac{1.2218}{n_{po}^{1/3}} \end{cases} \quad (4.216)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.216) en (4.215) se obtiene un modelo del factor de solape lineal en función de la dimensión fractal del aglomerado y del

número de partículas primarias que lo compone. Los coeficientes de la ecuación (4.215) se determinan de la siguiente manera.

$$\begin{cases} a = \frac{A(n_{po})}{2} - B(n_{po}) + \frac{C(n_{po})}{2} \\ b = -\frac{5}{2}A(n_{po}) + 4B(n_{po}) - \frac{3}{2}C(n_{po}) \\ c = 3A(n_{po}) - 3B(n_{po}) + C(n_{po}) \end{cases} \quad (4.217)$$

El factor de solape obtenido con la ecuación (4.215) se ha representado en la figura 4.60.

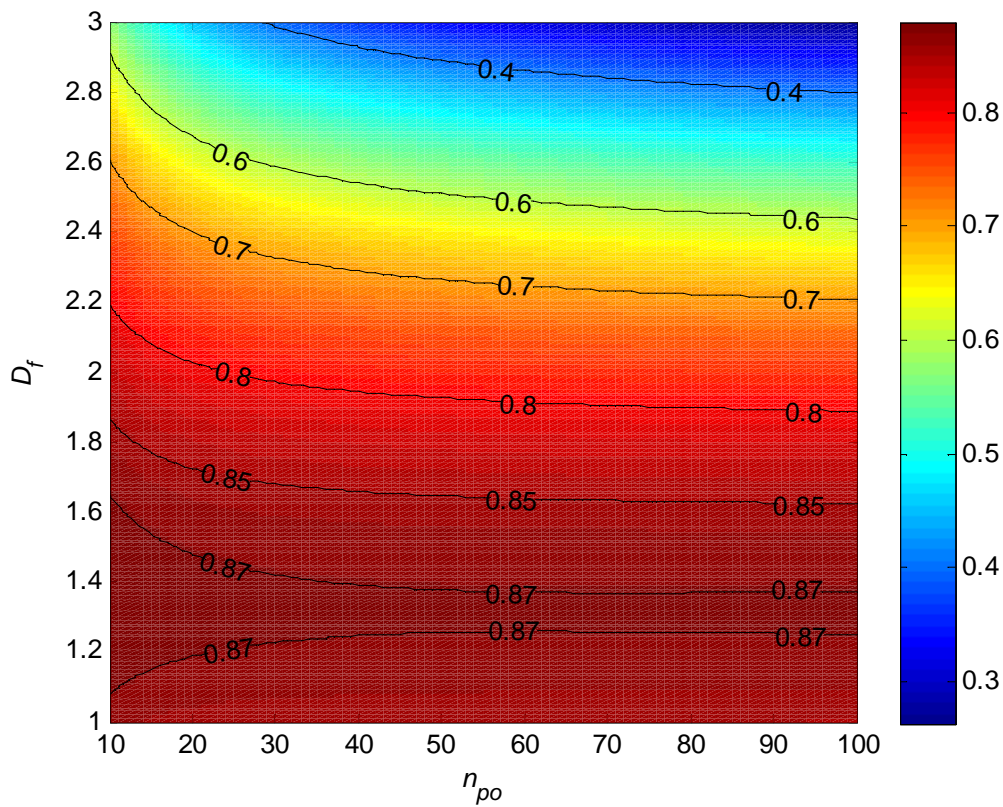


Figura 4.60. Factor de solape lineal en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

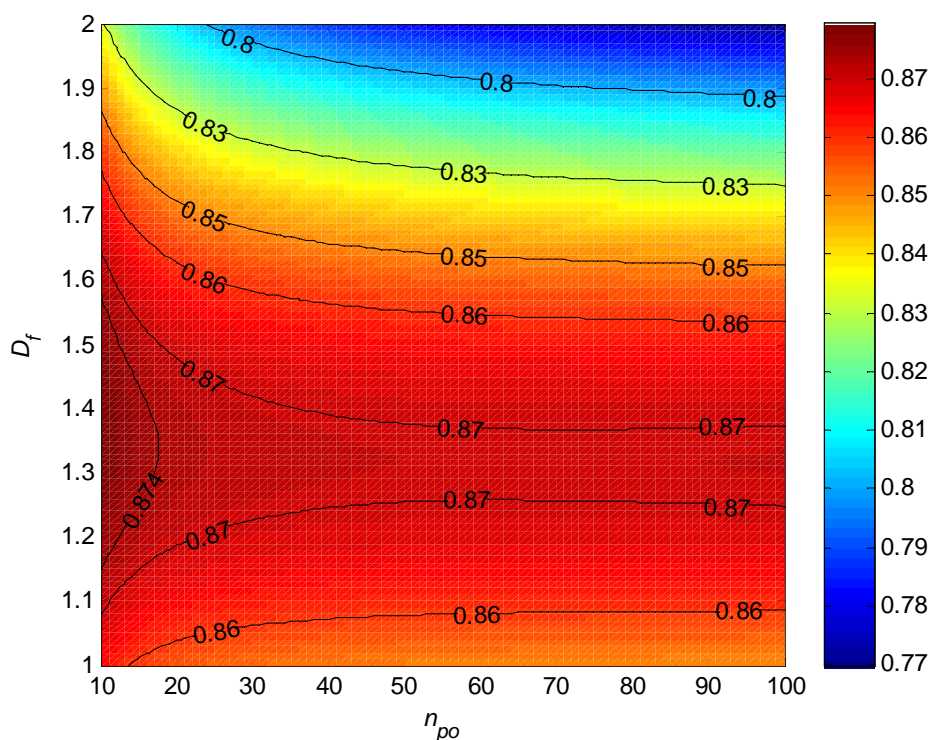


Figura 4.61. Zoom en la figura 4.60 para D_f entre 1 y 2. Factor de solape lineal frente a la dimensión fractal y número de partículas primarias.

En las figuras 4.60 y 4.61 se observa como el factor de solape lineal es muy estable con la variación del número de partículas primarias cuando el número de partículas primarias es superior a 50. Y también le sucede lo mismo con la variación de la dimensión fractal, cuando esta variación está entre uno y dos. Las variaciones del factor de solape es más acusada con la dimensión fractal cuando ésta es superior a 2.0 como se muestra en la figura 4.62. En la figura 4.62 se ha representado cuatro secciones de la figura 4.60.

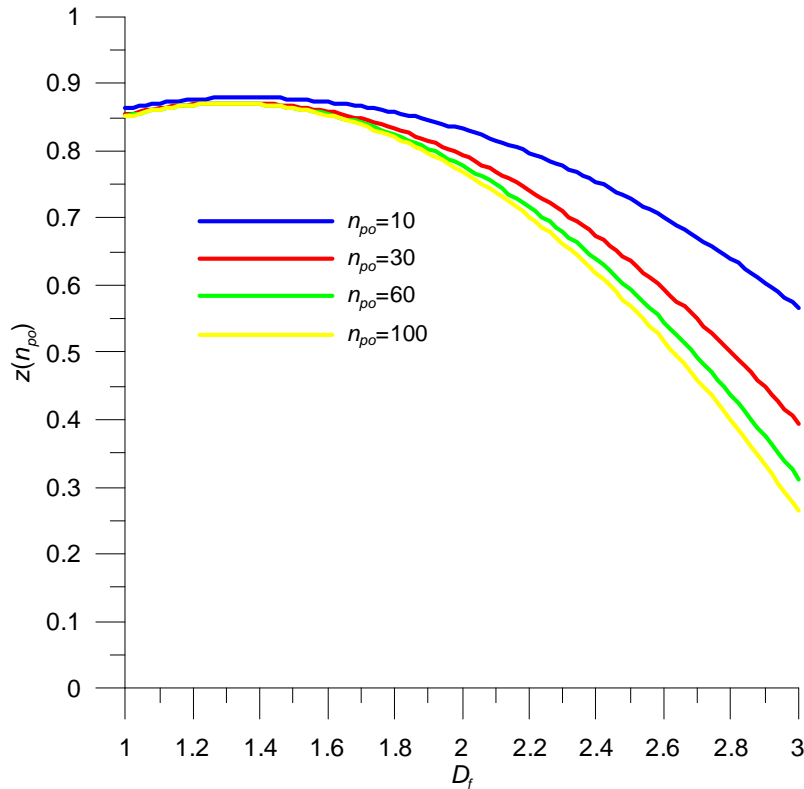


Figura 4.62. Factor de solape lineal frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$.

4.3. EXPONENTE DE SOLAPE

4.3.1. CONSIDERACIONES GENERALES

La forma lineal de definir el factor de solape es poco usada en la bibliografía, pero su análisis es interesante porque sienta las bases para poder definir el solape de manera potencial. Autores como C.M. Megaridis *et al* [9] y K.O. Lee *et al* [10] han considerado el factor de solape como una función de tipo potencial. El primero que introdujo esta manera de definir el solape entre las partículas primarias fue A.I. Medalia *et al* [11]. La ecuación que modela el factor de solape de tipo potencial es:

$$n_{po} = \left(\frac{A_p}{A_{po}} \right)^{z'} \quad (4.218)$$

Esta ecuación expresa, en realidad, lo mismo que la ecuación (4.2), es decir, que si se trata de estimar el número de partículas primarias a partir del cociente de áreas proyectadas aglomerado/partículas primarias, probablemente se subestime dicho número como consecuencia del solape entre partículas

primarias. Para contrarrestar tal subestimación es necesario afectar el cociente con un exponente siempre mayor que la unidad. Por esta razón, a este exponente, z' , se le denominará en adelante exponente de solape.

Tabla 4.1. Revisión bibliográfica de z' .

Referencia	z'
[6]	1.08-1.14
[12]	1.09
[2]	1.09
[13]	1.09
[14]	1.10
[15]	1.09
[1]	1.09
[3]	1.09
[10]	1.09
[11]	1.15
[9]	1.09
[5]	1.07
[16]	1.08-1.19
[17]	1.09

En la bibliografía se han propuesto diversos valores para el exponente de solape, como se muestra en la tabla 4.1, a partir de diferentes técnicas experimentales. Sin embargo, ninguno de estos valores constantes del exponente de solape es consistente con la dependencia que existe entre el solape y la irregularidad del aglomerado. Otros autores, como P. Meakin *et al* [18], proponen ajustes diferentes del exponente de solape a los resultados de sus modelos para diferentes regímenes de aglomeración en función de la irregularidad de los aglomerados, concretamente en función de la dimensión fractal del aglomerado. P. Meakin *et al* [18] observaron que, en general, para dimensiones fractales mayores a 2, el exponente de solape debería depender de la dimensión fractal dividido por 2, $z' = D_f/2$. En el mismo que rango que P. Meakin *et al* [18] ($D_f > 2$), C. Oh *et al* [5] propusieron una relación del tipo $z' = D_f / D_f^*$, donde D_f^* es la dimensión fractal del área proyectada.

Basado en el solape lineal se puede determinar analíticamente el exponente de solape en los casos en los que la dimensión fractal es igual números enteros 1, 2 y 3, y posteriormente se propone un modelo de obtención del exponente de solape para todas las dimensiones fractales posibles que pueda tener un aglomerado.

El factor de solape exponencial se puede obtener despejándolo de la ecuación (4.218).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln\left(\frac{A_p}{A_{po}}\right)} \quad (4.219)$$

De la ecuación (4.2) se puede despejar la relación entre el área proyectada y el área de una partícula primaria en función del solape lineal del aglomerado.

$$\frac{A_p}{A_{po}} = n_{po} z \quad (4.220)$$

Si se sustituye la ecuación (4.220) en la ecuación (4.219) se obtiene el factor de solape exponencial en función del número de partículas primarias y del factor de solape lineal.

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po}) + \ln(z)} \quad (4.221)$$

4.3.2. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 1

4.3.2.1. Aglomerado en forma de cadena lineal.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.15) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.8488 n_{po} + 0.1512)} \quad (4.222)$$

Cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de una cadena lineal de partículas primarias tiende a la unidad.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = 1 \quad (4.223)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.222) se muestra en la figura 4.63.

4.3.2.2. Aglomerado en forma de cruz con número impar de partículas.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.55) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po}z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.8837 n_{po} + 0.1163)} \quad (4.224)$$

Cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de una cadena lineal de partículas primarias tiende a la unidad.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = 1 \quad (4.225)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.224) se muestra en la figura 4.63.

4.3.2.3. Aglomerado en forma de cruz con número par de partículas.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.131) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po}z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.8837 n_{po} + 0.0945)} \quad (4.226)$$

Cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de una cadena lineal de partículas primarias tiende a la unidad.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = 1 \quad (4.227)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.226) se muestra en la figura 4.63.

4.3.3. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 2.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.198) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po}z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.7405 n_{po} + 0.0839 \sqrt{12n_{po} - 3} + 0.0077)} \quad (4.228)$$

Como en los casos anteriores cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de un aglomerado plano con compactación hexagonal compacto tiende a la unidad.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = 1 \quad (4.229)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.228) se muestra en la figura 4.63.

4.3.4. DIMENSIÓN FRACTAL IGUAL A 3.

4.3.4.1. Aglomerado con compactación cúbica simple.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.205) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z')} = \frac{\ln n_{po}}{\ln\left(1.5393 n_{po}^{2/3}\right)} \quad (4.230)$$

En este caso cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de un aglomerado esférico con compactación simple cúbica tiende a 1.5.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} \frac{\ln n_{po}}{\ln 1.5393 + \frac{2}{3} \ln n_{po}} = \frac{3}{2} = 1.5 \quad (4.231)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.230) se muestra en la figura 4.63.

4.3.4.2. Aglomerado con compactación cúbica centrada en las caras.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.208) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z')} = \frac{\ln n_{po}}{\ln\left(1.2930 n_{po}^{2/3}\right)} \quad (4.232)$$

Como en el caso anterior cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de un aglomerado esférico con compactación cúbica centrada en las caras tiende a 1.5.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} \frac{\ln n_{po}}{\ln 1.2930 + \frac{2}{3} \ln n_{po}} = \frac{3}{2} = 1.5 \quad (4.233)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.232) se muestra en la figura 4.63.

4.3.4.3. Aglomerado con compactación hexagonal compacta.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.211) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln\left(1.2218 n_{po}^{2/3}\right)} \quad (4.234)$$

Como en los dos casos anteriores cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de un aglomerado esférico con compactación hexagonal compacta tiende a 1.5.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} \frac{\ln n_{po}}{\ln 1.2218 + \frac{2}{3} \ln n_{po}} = \frac{3}{2} = 1.5 \quad (4.235)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.234) se muestra en la figura 4.63.

4.3.4.4. Aglomerado con compactación aleatoria.

En este caso el factor de solape exponencial se puede obtener sustituyendo la ecuación (4.213) en la ecuación (4.221).

$$z' = \frac{\ln n_{po}}{\ln(n_{po} z)} = \frac{\ln n_{po}}{\ln\left(1.4412 n_{po}^{2/3}\right)} \quad (4.236)$$

Como en los tres casos anteriores cuando el número de partículas primarias tiende a infinito el factor de solape exponencial de un aglomerado esférico con compactación aleatoria tiende a 1.5.

$$\lim_{n_{po} \rightarrow \infty} z' = \lim_{n_{po} \rightarrow \infty} \frac{\ln n_{po}}{\ln 1.4412 + \frac{2}{3} \ln n_{po}} = \frac{3}{2} = 1.5 \quad (4.237)$$

La representación del factor de solape exponencial obtenido según la ecuación (4.236) se muestra en la figura 4.63.

4.3.5. MODELO PROPUESTO.

Los ocho casos anteriores se muestran en la figura 4.63. En todos los casos el solape exponencial máximo se alcanza con una compactación hexagonal compacta y por el contrario el solape exponencial mínimo se obtiene con una compactación simple cúbica, esta secuencia es independiente del número de partículas primarias que compone el aglomerado. La tendencia de los ocho casos expuestos difiere bastante dependiendo de la dimensión fractal del aglomerado.

Para el caso en que la dimensión fractal es superior a dos, cuanto mayor es el número de partículas primarias mayor es el solape entre las partículas y mayor es el solape exponencial, independientemente del tipo de configuración de compactación que tenga el aglomerado. Por el contrario cuando la dimensión fractal es dos o menor, cuanto mayor es el número de partículas primarias, menor es el solape y por consiguiente menor es el solape exponencial.

En la figura 4.63 se ha representado el solape exponencial para aglomerados cuyo número de partículas primarias sea superior a cuatro, ya que el modelo propuesto en el epígrafe 4.3.4 con un número menor de partículas primarias en aglomerados con dimensión fractal tendiendo a tres no tendría validez, ya que estos aglomerados tendrían una dimensión fractal inferior a tres.

Puesto que el solape exponencial depende de la dimensión fractal, se puede proponer un modelo polinómico de ajuste con tres parámetros del solape exponencial en función de la dimensión fractal.

$$z' = a D_f^3 + b D_f^2 + c \quad (4.238)$$

Se va a tomar como caso de estudio los modelos de solape de los aglomerados con compactación hexagonal compacta, por ser éstos los casos más extremos. Por tanto, el modelo mostrado en la ecuación (4.238) tiene que satisfacer la ecuación (4.222) para $D_f=1$, la ecuación (4.228) para $D_f=2$ y la ecuación (4.234) para $D_f=3$. De manera que se puede definir las funciones expuestas en las ecuaciones (4.222), (4.228) y (4.234) como A , B , C .

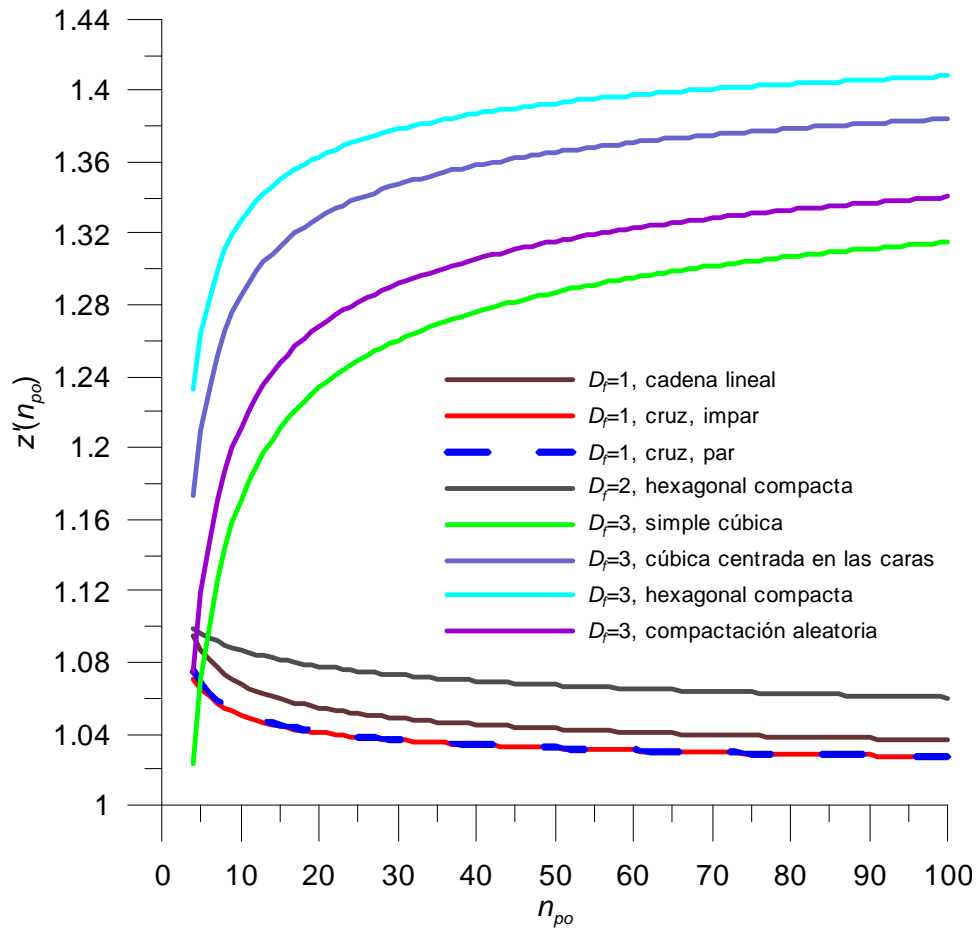


Figura 4.63. Efecto del número de partículas primarias sobre el solape exponencial, en función del tipo de compactación del aglomerado.

$$\begin{cases}
 A(n_{po}) \equiv \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.8488n_{po} + 0.1512)} \\
 B(n_{po}) \equiv \frac{\ln n_{po}}{\ln(0.7405n_{po} + 0.0839\sqrt{12n_{po} - 3} + 0.0077)} \\
 C(n_{po}) \equiv \frac{\ln n_{po}}{\ln(1.2218n_{po}^{2/3})}
 \end{cases} \quad (4.239)$$

Sustituyendo las ecuaciones (4.239) en (4.238) se obtiene un modelo del solape exponencial en función de la dimensión fractal del aglomerado y del número de partículas primarias que lo compone. Los coeficientes de la ecuación (4.238) se determinan de la siguiente manera.

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A(n_{po}) - \frac{4}{11}B(n_{po}) + \frac{3}{22}C(n_{po}) \\ b = -\frac{19}{22}A(n_{po}) + \frac{13}{11}B(n_{po}) - \frac{7}{22}C(n_{po}) \\ c = \frac{18}{11}A(n_{po}) - \frac{9}{11}B(n_{po}) + \frac{2}{11}C(n_{po}) \end{cases} \quad (4.240)$$

El solape obtenido con la ecuación (4.238) se ha representado en las figuras 4.64 y 4.65.

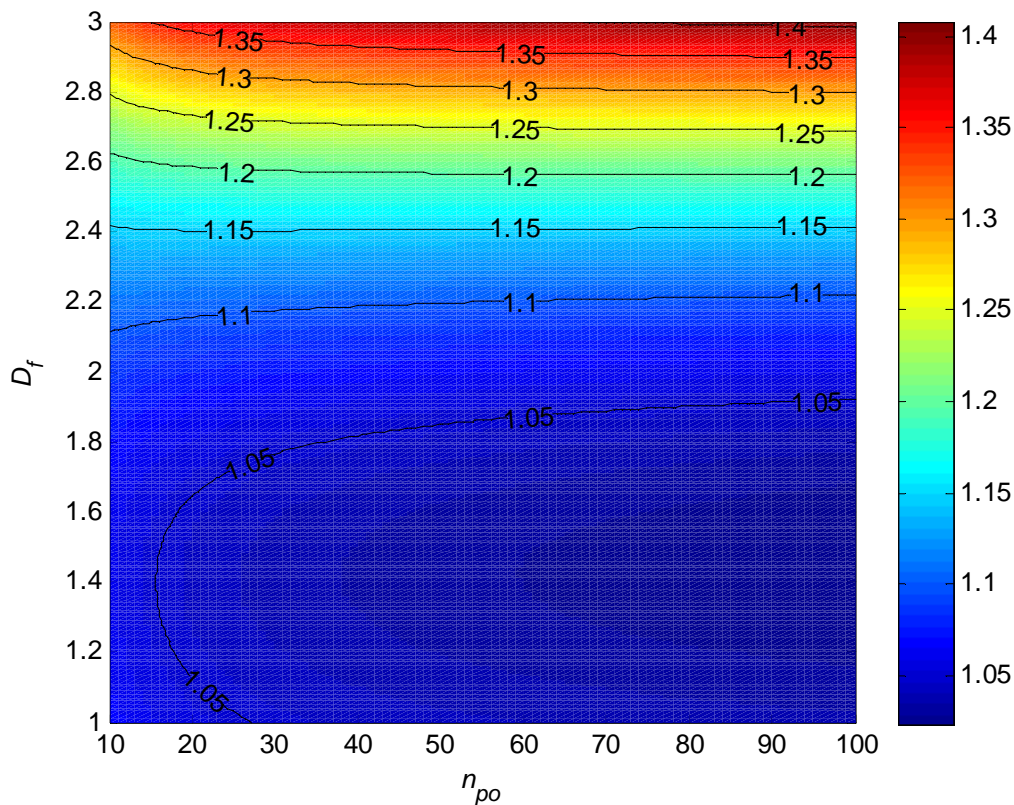


Figura 4.64. Solape exponencial en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado.

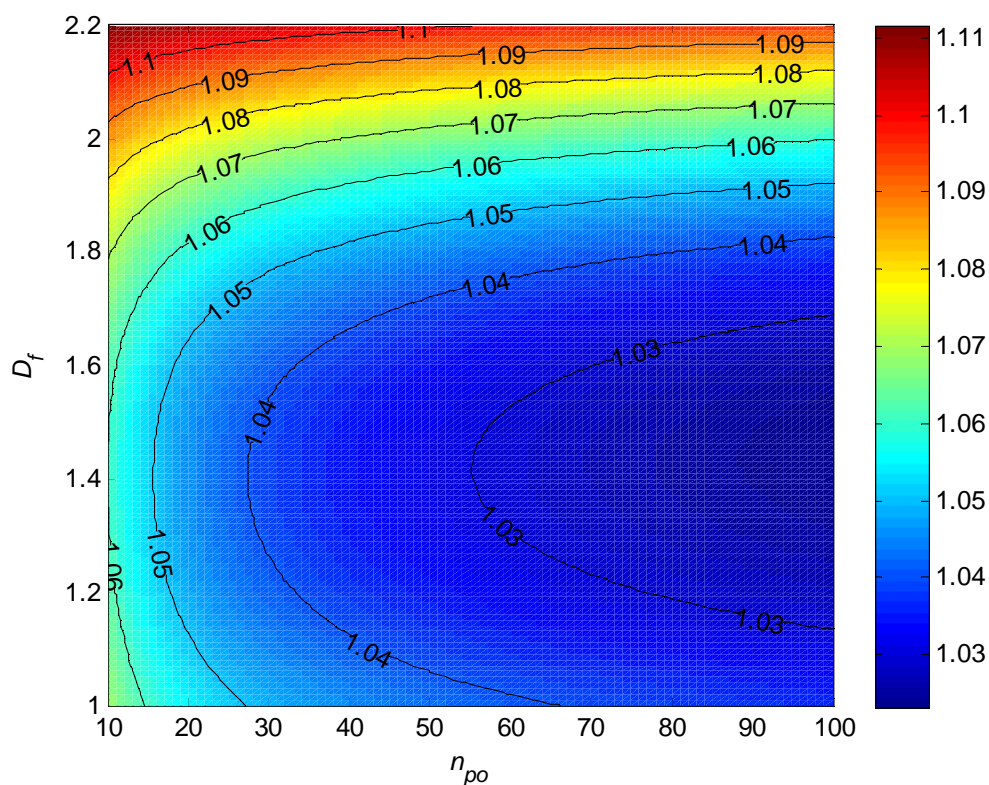


Figura 4.65. Zoom de la figura 4.64. Solape exponencial en función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado cuando la dimensión fractal está entre 1 y 2.2.

En las figuras 4.64 y 4.65 se observa como el solape exponencial es muy estable con la variación del número de partículas primarias cuando el número de partículas primarias es superior a 20. Y también le sucede lo mismo con la variación de la dimensión fractal, cuando esta variación está entre uno y dos. Las variaciones del solape exponencial es más acusada con la dimensión fractal cuando ésta es superior a 2.2 como se muestra en la figura 4.66. En la figura 4.66 se ha representado cuatro secciones de la figura 4.64.

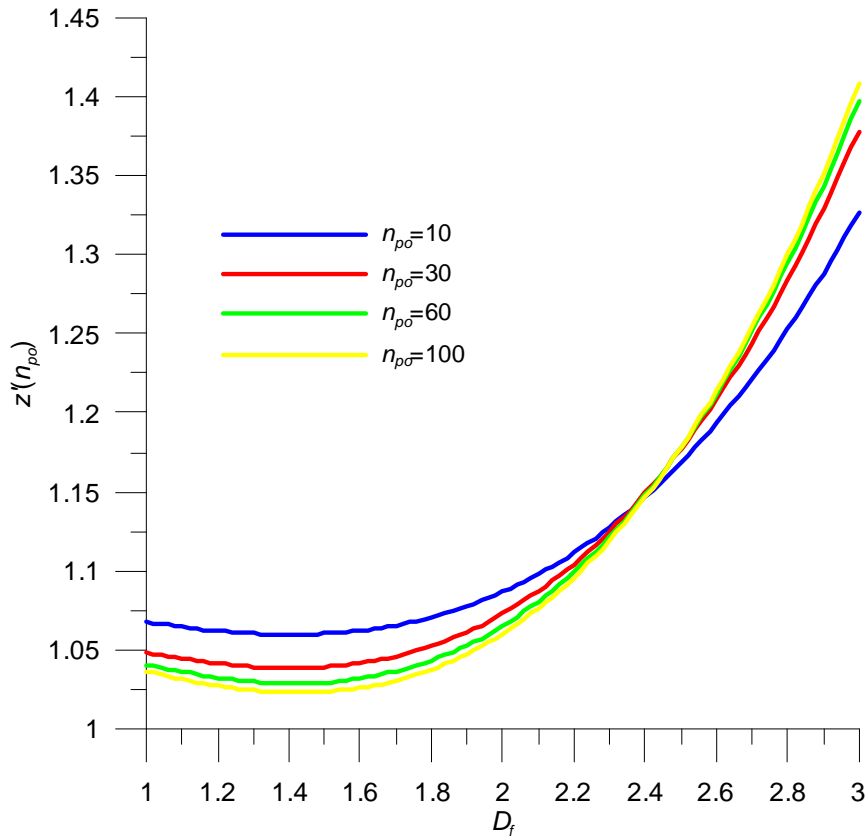


Figura 4.66. Solape exponencial frente a la dimensión fractal para aglomerados con $n_{po}=10$, $n_{po}=30$, $n_{po}=60$ o $n_{po}=100$.

4.4. CONCLUSIONES

En el modelo propuesto en el epígrafe anterior, ecuación (4.238), se muestra como el solape exponencial depende de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado. Por tanto la ecuación (4.218) queda de la siguiente forma:

$$n_{po} = \left(\frac{A_p}{A_{po}} \right)^{z'(D_f, n_{po})} \quad (4.241)$$

Aplicando logaritmos a la ecuación (4.241) se obtiene la siguiente expresión:

$$\ln(n_{po}) = z'(D_f, n_{po}) \ln \left(\frac{A_p}{A_{po}} \right) \quad (4.242)$$

Conocido el área proyectada de un aglomerado real se puede saber la relación existente entre el número de partículas primarias que lo compone y la dimensión fractal de éste.

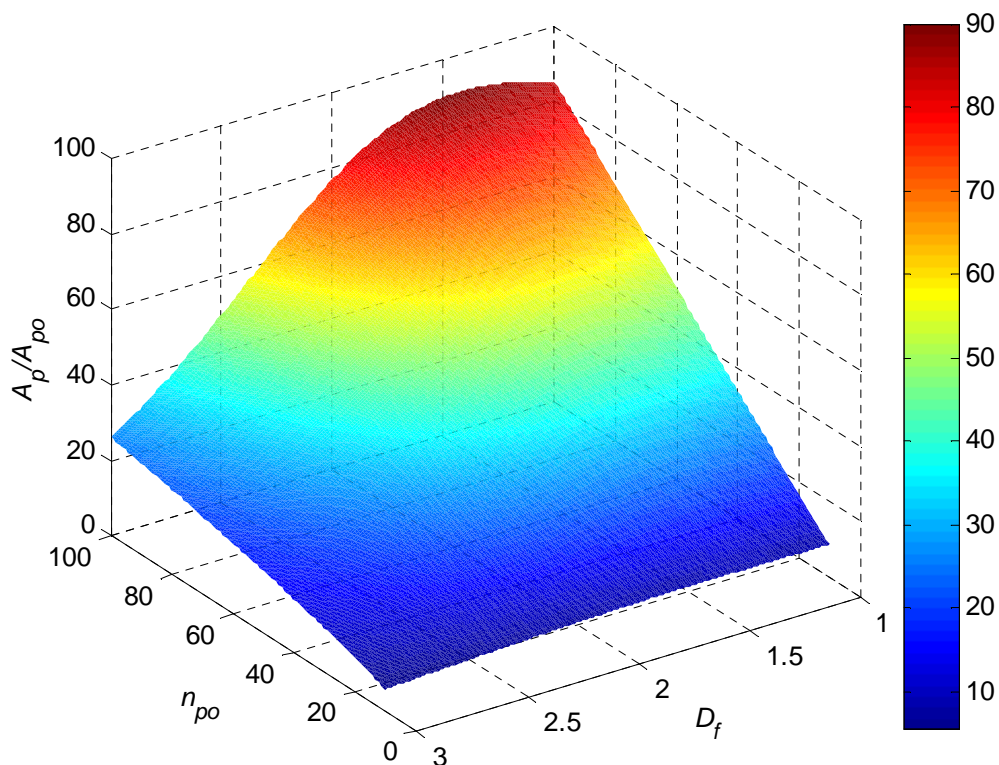


Figura 4.67. Área proyectada adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal.

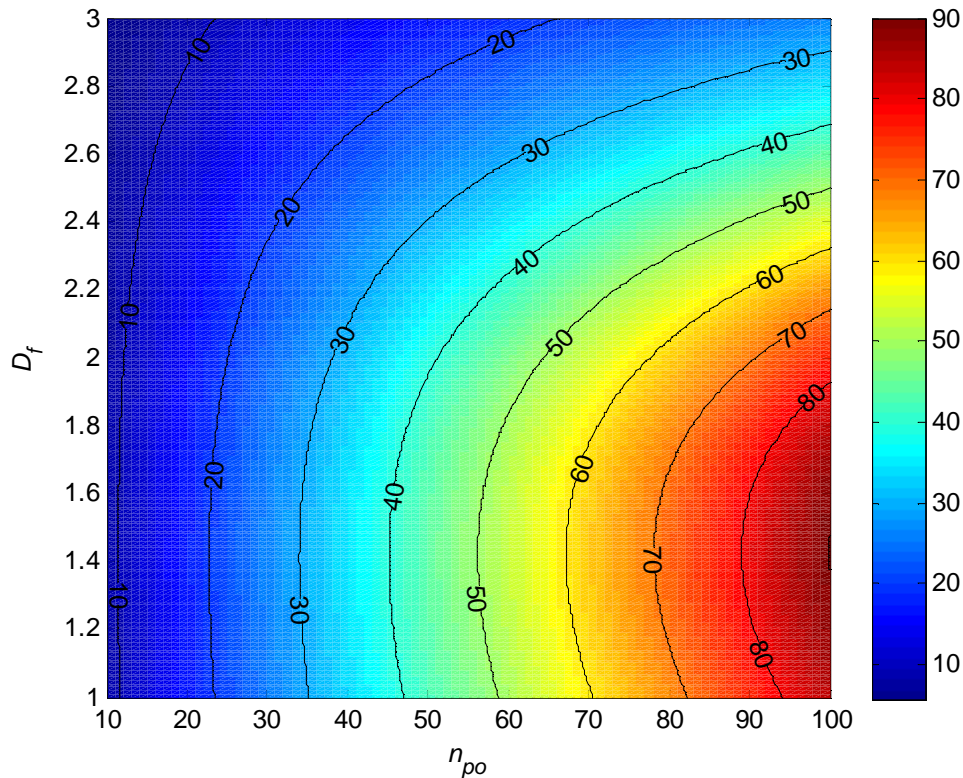


Figura 4.68. Área proyectada adimensional frente al número de partículas primarias y a la dimensión fractal representada como curvas de nivel.

De las figuras 4.67 y 4.68 se deduce que cuanto mayor es la dimensión fractal, manteniendo constante el número de partículas primarias, menor es el área proyectada adimensionalizada con el área de una partícula primaria. Aparentemente cuando la dimensión fractal es menor a dos, un aglomerado con un número de partículas primarias y con un área proyectada adimensionalizada puede tener dos dimensiones fractales. Este resultado físicamente no es realizable. En verdad falta información física que fijará la solución única del aglomerado. El parámetro que contiene esta información es el diámetro de giro, que cuantifica lo alargado del aglomerado, de manera que con el diámetro de giro se puede determinar la dimensión fractal real que tiene el aglomerado.

4.5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Zhu, J.; Kang, J.; Bae, C. (2001). Detailed characterization of morphology and dimensions of Diesel particulates via thermophoretic sampling. *SAE paper*, 2001-01-3572.
- [2] Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1995). Analysis of fractal cluster morphology parameters: structural coefficient and density autocorrelation function Cutoff. *Journal of Colloid and Interface Science* **171**, 470-473.

- [3] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Kang, J.; Bae, C.; Shin, H. (2002). Morphological investigation of the microstructure, dimensions, and fractal geometry of Diesel particulates. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 647-653.
- [4] Rogak, S.N.; Flagan, R.C. (1992). Characterization of the structure of agglomerate particles. *Particle and Particle System Characterization* **9**, 19-27.
- [5] Oh, C.; Sorensen, C.M. (1997). The effect of overlap between monomers on the determination of fractal cluster morphology. *Journal of Colloid and Interface Science* **193**, 17-25.
- [6] Brasil, A.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1999). A recipe for image characterization of fractal-like aggregates. *Journal of Aerosol Science* **30**, 1379-1389.
- [7] Sorensen, C.M.; Roberts, G.C. (1997). The prefactor of fractal aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science* **186**, 447-452.
- [8] Shi, Y.; Zhang Y. (2008). Simulation of random packing of spherical particles with different size distributions. *Applied Physics A: Materials Science & Processing* **92**, 621-626.
- [9] Megaridis, C.M.; Dobbins, R.A. (1990). Morphological description of flame-generated materials. *Combustion Science and Technology* **71**, 95-109.
- [10] Lee, K.O.; Zhu, J.; Ciatti, S.; Yozgatligil, A.; Choi, M. Y. (2003). Sizes, graphitic structures and fractal geometry of light-duty Diesel engine particulates. *SAE paper* 2003-01-3169.
- [11] Medalia, A.I.; Heckman, F.A. (1969). Morphology of aggregates-II. Size and shape factors of carbon black aggregates from electron microscopy. *Carbon* **7**, 567-568.
- [12] Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1993). Comparison of size and morphology of soot aggregates as determined by light scattering and electron microscope analysis. *Langmuir* **9**, 2861-2867.
- [13] Hu, B.; Koylu, U.O. (2004). Size and morphology of soot particulates sampled from a turbulent nonpremixed acetylene flame. *Aerosol science and Technology* **38**, 1009-1018.

- [14] Köylü, Ü.Ö.; Faeth, G.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1995). Fractal and projected structure properties of soot aggregates. *Combustion and Flame* **100**, 621-633.
- [15] Köylü, Ü.Ö.; McEnally, C.S.; Rosner, D.E.; Pfefferle, L.D. (1997). Simultaneous measurements of soot volume fraction and particle size/microstructure in flames using a thermophoretic sampling technique. *Combustion and Flame* **110**, 494-507.
- [16] Park, K.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2004). Structural properties of Diesel exhaust particles measured by Transmission Electron Microscopy (TEM): Relationships to particle mass and mobility. *Aerosol Science and Technology* **38**, 881-889.
- [17] Zhu, J.; Lee, K.O.; Sekar, R.; Choi, M.Y. (2003). Morphological study of the particulate matter from a light-duty Diesel engine. *Proceedings of the third joint meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute*. University of Illinois. Chicago.
- [18] Meakin, P.; Donn, B.; Mulholland, G.W. (1989). Collisions between point masses and fractal aggregates. *Langmuir* **5**, 510-518.

Capítulo 5. Método Propuesto. Aplicación Real.

5.1. INTRODUCCIÓN.....	185
5.2. HIPÓTESIS DEL MÉTODO. UN CASO REAL.....	185
5.3. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO.....	187
5.4. DENSIDAD APARENTE DEL AGLOMERADO.....	193
5.5. DOMINIO DE SOLUCIONES.....	193
5.6. VALIDACIÓN DEL MÉTODO PROPUESTO. APLICACIÓN REAL.....	195
5.6.1. Introducción.....	195
5.6.2. Consistencia del método	196
5.6.3. Comparación con resultados obtenidos por regresión directa.....	199
5.7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	201

5.1. INTRODUCCIÓN

Para la determinación de los parámetros morfológicos, dimensión fractal y número de partículas primarias de un aglomerado, existen dos maneras muy distintas de proceder. La primera se basa en datos experimentales, como por ejemplo [1]. Estos modelos están basados en hipótesis, que a veces son extremas y además necesitan de una población de aglomerados bastante extensa. La segunda manera de obtener los parámetros morfológicos de los aglomerados es mediante modelado de mecanismos fenomenológicos, como por ejemplo [2] y [3]. Estos mecanismos fenomenológicos a veces se sustentan en hipótesis no demasiado robustas.

Frente a estas dos opciones se propone en este trabajo de investigación, y se desarrolla en el apartado siguiente de este capítulo, un método original para el cálculo de la dimensión fractal de los aglomerados individuales, que puede clasificarse como semiexperimental. Por un lado, el método tiene una parte experimental, puesto que requiere la caracterización de las imágenes de las partículas, y por otro lado tiene una parte teórica, ya que la parte no visible de las imágenes se reconstruyen por medio de un modelo basado en la naturaleza cuasi fractal de los aglomerados. Este método, por una parte, evita tener que asumir las hipótesis propias de los modelos de aglomeración, y en cambio, al ser puramente geométrico, no requiere de controvertidas hipótesis, y por otra parte, permite la descripción de cada partícula individualmente, por lo que la necesidad de acumular gran número de ensayos solo depende de la eventual dispersión de los propios resultados experimentales, pero no del método empleado.

5.2. HIPÓTESIS DEL MÉTODO. UN CASO REAL.

Las hipótesis del método son las siguientes:

- Partículas primarias esféricas. Las partículas primarias que componen un aglomerado tienen formas aproximadamente esféricas, [4]. Véase el caso concreto de aglomerados carbonosos producidos por un motor diésel típico de automoción. Esta afirmación es fácilmente comprobable a partir de microfotografías obtenidas mediante TEM, tal y como se muestra en la figura 5.1.

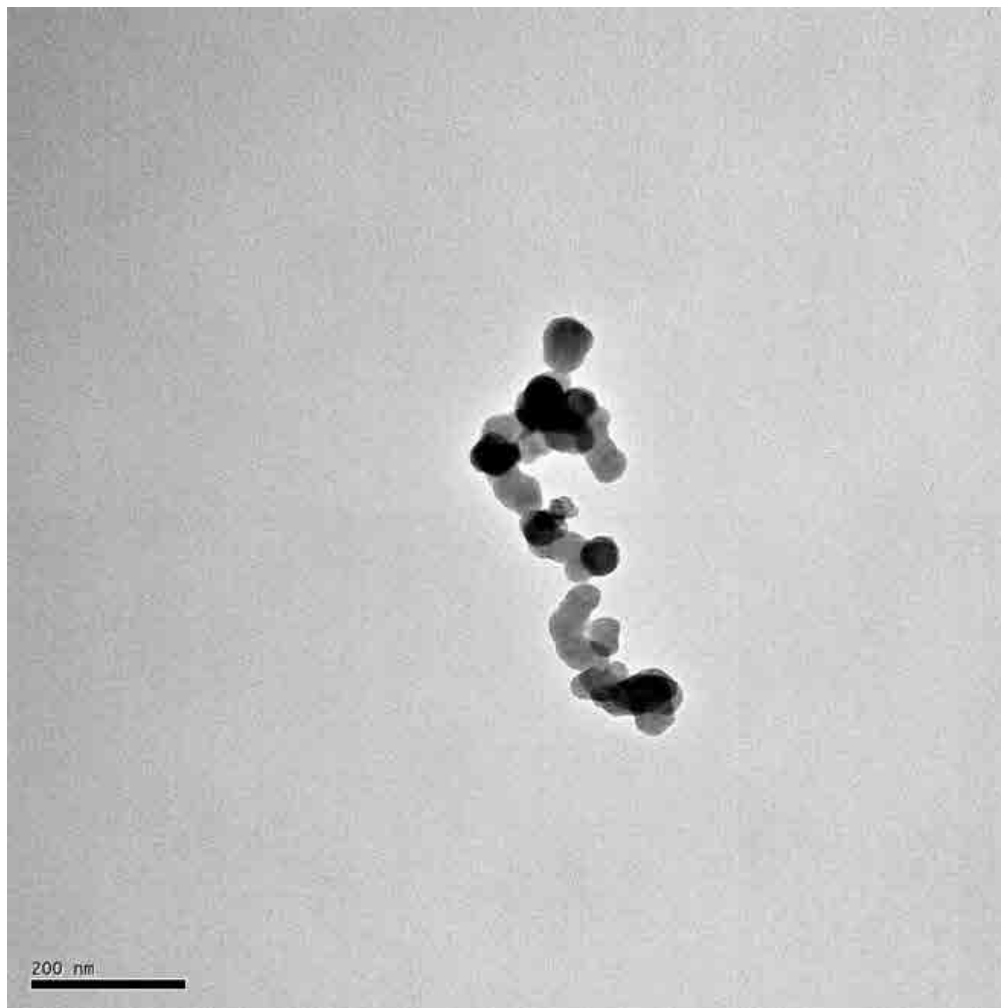


Figura 5.1. Fotografía obtenida con un TEM de un aglomerado cuasi-fractal producido por un motor diésel y compuesto por partículas primarias esféricas.

- Partículas primarias uniformes en tamaño. Los tamaños de partículas primarias suelen ser uniformes en un mismo aglomerado y suelen variar muy poco al variar las condiciones que hacen que se generen este tipo de aglomerados (tal y como demuestran K.O. Lee *et al* [5]). Además, G. Bushell *et al* [6] demostraron que la estructura fractal de los aglomerados no está significativamente afectada por la distribución de las partículas primarias.
- Partículas primarias homogéneas en densidad. Esta hipótesis se basa en las microfotografías realizadas a las estructuras internas de las partículas primarias, donde se observa que las capas carbonosas que componen las partículas primarias distan entre sí mucho menos que el tamaño de dicha partícula, de hecho la distancia media entre las capas carbonosas es de 0.34 nm.

- Ausencia de sinterización o aplastamiento. Se supone que las colisiones entre partículas primarias no modifican la geometría original de éstas. Esta hipótesis se apoya en la observación de los aglomerados, si bien la probable presencia de un cierto grado de aplastamiento podría modificar levemente los resultados de este método.
- Ausencia de dirección preferente en las proyecciones. Se asume que los procesos de recogida de las partículas y de análisis microscópico no tienen tendencia a orientar los aglomerados en ninguna dirección preferente. Esta hipótesis permite un tratamiento probabilístico no sesgado a los aglomerados no simétricos, tales como el que corresponde al caso extremo de dimensión fractal igual a la unidad.
- Radio de giro de la proyección igual al de la partícula tridimensional. Algunos estudios han demostrado, [7], que al analizar imágenes proyectadas de los aglomerados, los radios de giro obtenidos son ligeramente distintos a los radios de giro reales de las partículas tridimensionales. La consideración del radio de giro obtenido a partir de la imagen proyectada puede proporcionar algún pequeño error en la estimación de la dimensión fractal, [8].

5.3. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

A partir de la ley de potencias (3.1) y de la ecuación que modela el solape exponencial, ecuación (4.218), se puede obtener un modelo que relaciona el número de partículas primarias y la dimensión fractal de un aglomerado en función de dos variables geométricas, que son el diámetro de giro y el área proyectada.

$$\begin{cases} n_{po} = k_f(n_{po}, D_f) \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f} \\ n_{po} = \left(\frac{A_p}{A_{po}} \right)^{z(n_{po}, D_f)} \end{cases} \quad (5.1)$$

De las ecuaciones mostradas en (5.1), con un método iterativo que se desarrolla a continuación, se puede obtener la dimensión fractal del aglomerado. Conocida la dimensión fractal del aglomerado se puede determinar el número de partículas primarias que compone el aglomerado aplicando cualquiera de las dos ecuaciones de (5.1).

La obtención del diámetro de giro y del área proyectada del aglomerado se hace de la siguiente manera:

1. Se obtiene la fotografía del aglomerado, que para el caso de aglomerados carbonosos producidos por un motor diésel se utiliza un Microscopio de Transmisión de Electrones.
2. Se mide la escala de la fotografía y el número de píxeles de ésta.
3. Con la escala anterior se pueden medir longitudes reales sobre la fotografía.
4. Se limpia todo el fondo de la imagen para que éste no interaccione en el tratamiento digital. Una vez preparada la fotografía, el programa de tratamiento de imágenes desarrollado calcula el diámetro de giro del aglomerado y el área proyectada de la partícula. Por otro lado, el diámetro medio de la partícula primaria se mide directamente en la imagen.

Después se determina con la ecuación (5.1), la dimensión fractal suponiendo, para la primera vez, que el número de partículas primarias tiende a infinito, y por tanto ni el prefactor de la ley de potencias ni el exponente de solape dependen del número de partículas primarias. Con esta dimensión fractal se puede calcular mediante la ley de potencias el número de partículas primarias que contiene el aglomerado en primera instancia. A continuación se repite el paso anterior, recalculando la dimensión fractal con el número de partículas primarias recién calculado. Se repite este proceso hasta que con el resultado de n_{po} , la dimensión fractal de la iteración actual sea igual a la dimensión fractal de la iteración anterior con un error inferior a 10^{-4} . Es, en este caso, cuando se ha encontrado la solución deseada. No obstante, no siempre la iteración es convergente.

Cuando el número de partículas primarias tiende a infinito, la ecuación (3.86) queda reducida a:

$$\begin{cases} A = \sqrt{3} \\ B = \frac{9}{5} = 1.8 \\ C = 1.5933 \end{cases} \quad (5.2)$$

Teniendo en cuenta los términos expuestos en la ecuación (5.2), los términos de la ecuación (3.87) quedan de la siguiente manera:

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A - \frac{4}{11}B + \frac{3}{22}C = -0.04363 \\ b = -\frac{19}{22}A + \frac{13}{11}B - \frac{7}{22}C = 0.12446 \\ c = \frac{18}{11}A - \frac{9}{11}B + \frac{2}{11}C = 1.65123 \end{cases} \quad (5.3)$$

De la ecuación (3.85) el prefactor de la ley de potencias en función de la dimensión fractal, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito se puede determina con la siguiente ecuación y se muestra en la figura 5.2:

$$k_f = -0.04363 D_f^3 + 0.12445 D_f^2 + 1.65123 \quad (5.4)$$

Además para el exponente de solape cuando el número de partículas primarias tiende a infinito, la ecuación (4.239) queda reducida a:

$$\begin{cases} A = 1 \\ B = 1 \\ C = 1.5 \end{cases} \quad (5.5)$$

Teniendo en cuenta los términos expuestos en la ecuación (5.5), los términos de la ecuación (4.240) quedan de la siguiente manera:

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A - \frac{4}{11}B + \frac{3}{22}C = \frac{3}{44} \\ b = -\frac{19}{22}A + \frac{13}{11}B - \frac{7}{22}C = -\frac{7}{44} \\ c = \frac{18}{11}A - \frac{9}{11}B + \frac{2}{11}C = \frac{12}{11} \end{cases} \quad (5.6)$$

De la ecuación (4.238) el exponente de solape en función de la dimensión fractal, cuando el número de partículas primarias tiende a infinito se puede determina con la siguiente ecuación y se muestra en la figura 5.2:

$$z' = \frac{3}{44} D_f^3 - \frac{7}{44} D_f^2 + \frac{12}{11} \geq 1 \quad (5.7)$$

Téngase en cuenta que puesto que es un modelo polinómico, el ajuste entre dimensión fractal uno y dos puede resultar valores de exponente de solape ligeramente inferiores a uno, en ese caso el valor del exponente de solape sería uno, ya que el concepto de exponente de solape carece de sentido físico, cuando éste es menor a la unidad. En la figura 5.3 se muestra el diagrama del proceso iterativo de cálculo de la dimensión fractal de un aglomerado real.

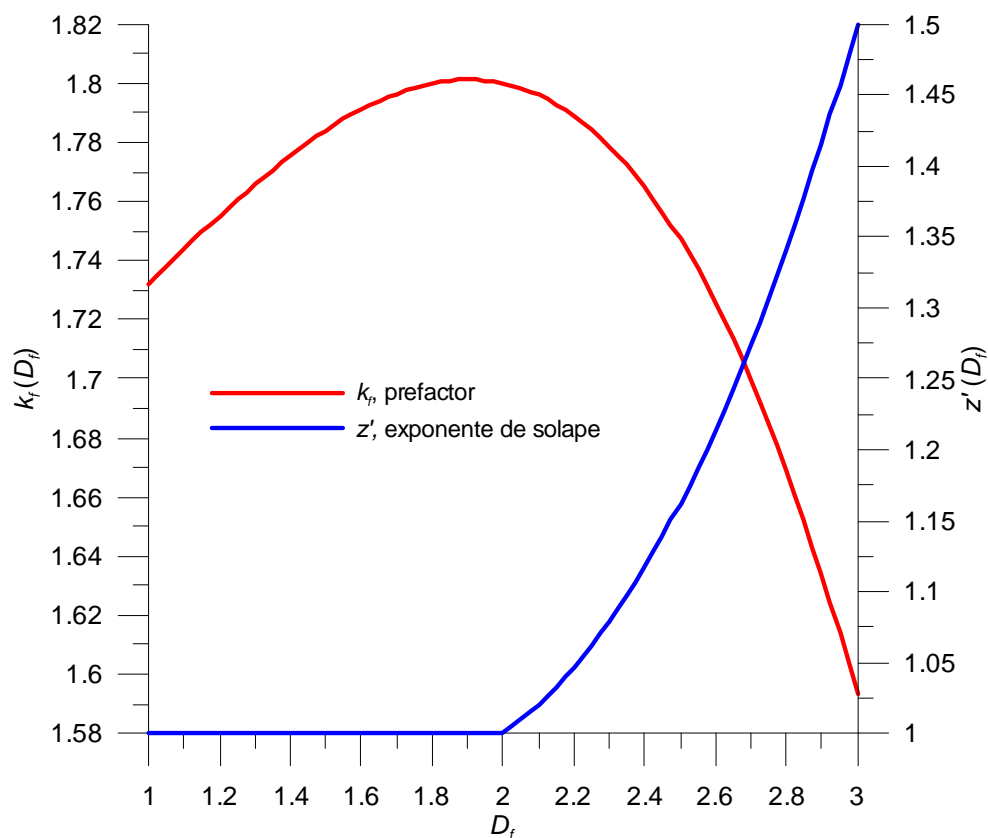


Figura 5.2. Prefactor de la ley de potencias y exponente de solape frente a la dimensión fractal cuando el número de partículas primarias tiende a infinito.

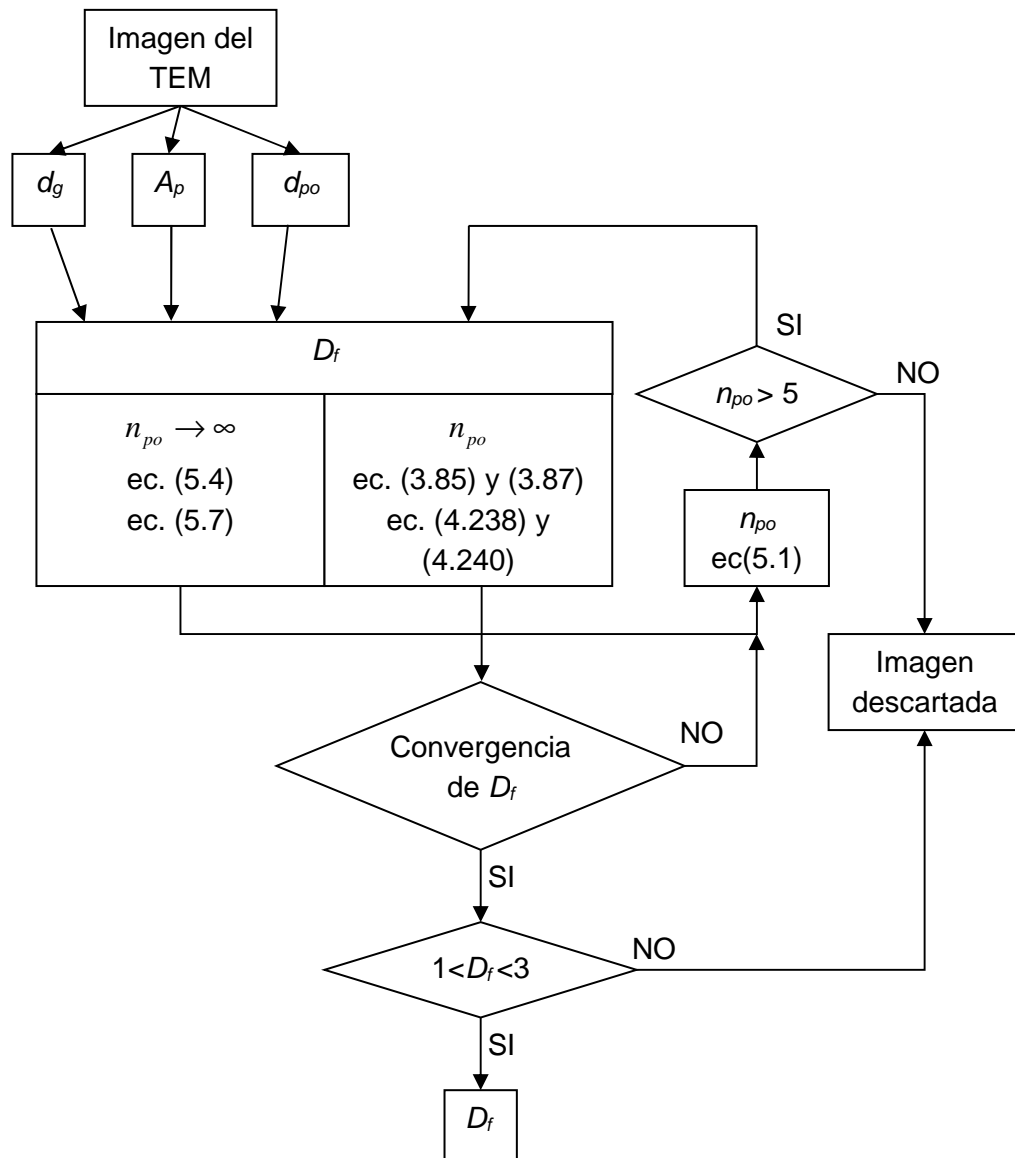


Figura 5.3. Diagrama de bloques para el cálculo iterativo.

Como resultado del modelo propuesto se ha determinado las posibles soluciones de aglomerados reales con diámetro de giro entre 30 y 400 nm y con áreas proyectadas entre 1000 y 50000 nm². Tanto la dimensión fractal como el número de partículas primarias se han representado en las figuras 5.4 y 5.5 respectivamente. Se ha tomado para realizar esta simulación un tamaño medio de partícula primaria de 25 nm.

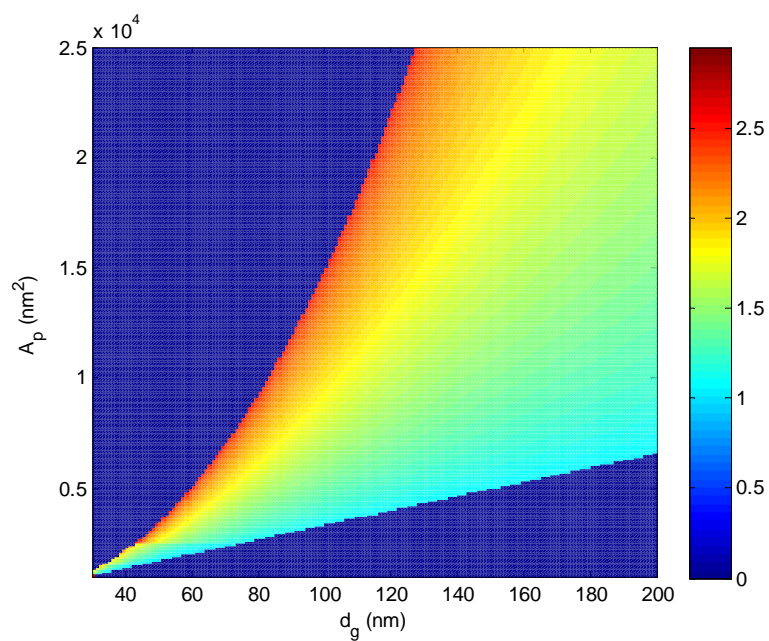


Figura 5.4. Dimensión fractal frente a área proyectada y diámetro de giro de aglomerados.

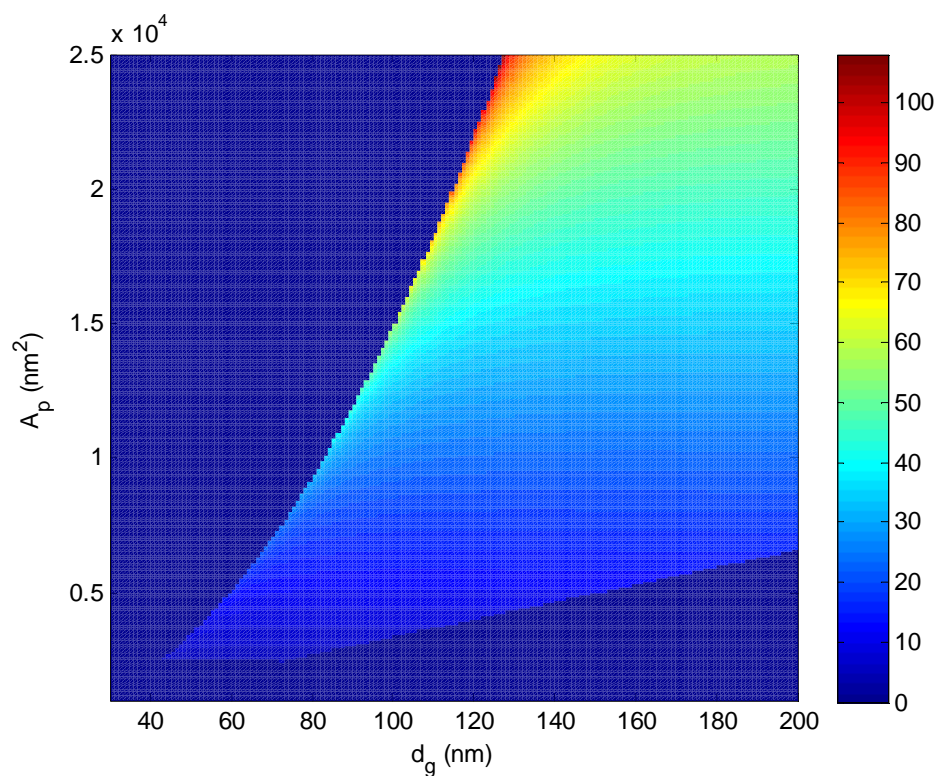


Figura 5.5. Número de partículas primarias con tamaño medio de 25 nm frente a área proyectada y diámetro de giro de aglomerados.

5.4. DENSIDAD APARENTE DEL AGLOMERADO

Como efecto colateral del modelo presentado se puede determinar la densidad aparente del aglomerado, definida en función del diámetro de giro del aglomerado. De acuerdo con M.K. Wu *et al* [9] y M.M. Maricq *et al* [10], la densidad aparente se define como la masa de partículas contenida en el volumen de giro, y por tanto puede obtenerse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \rho_p &= \frac{m_p}{V_g} = \frac{n_{po} m_{po}}{V_g} = n_{po} \frac{\frac{\pi}{6} d_{po}^3 \rho_h}{\frac{\pi}{6} d_g^3} = n_{po} \left(\frac{d_{po}}{d_g} \right)^3 \rho_h = \\ &= k_f \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f-3} \rho_h \end{aligned} \quad (5.8)$$

donde ρ_h es la densidad de la partícula como sólido no poroso o compacto, para el caso particular de aglomerados de hollín se puede tomar constante e igual a $1850 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

En este caso particular la importancia de la densidad aparente del hollín radica en que relaciona las funciones de distribución de tamaños con las funciones de distribución másicas de las partículas, y por tanto con las emisiones másicas de éstas. Sin embargo es necesario tener en cuenta que esta densidad está asociada al diámetro de giro, mientras que las distribuciones de tamaños están asociadas a otras definiciones del diámetro de la partícula. En concreto, las distribuciones obtenidas en el SMPS (Scanning Mobility Particle Size) se refieren a diámetros de movilidad eléctrica, que no tienen por qué corresponder con el diámetro de giro.

5.5. DOMINIO DE SOLUCIONES

En la figura 5.6 se han representado las curvas de nivel de la dimensión fractal constante, del número de partículas primarias constante y de la densidad aparente de aglomerados constante (soluciones del método) frente al radio de giro y al área proyectada (datos experimentales de entrada).

Las soluciones posibles de la ecuación (5.1) se sitúan en el área encerrada entre la líneas de dimensiones fractales 1 y 3, según ilustra la figura 5.6. La línea de dimensión fractal igual a 3 corresponde al caso de partículas esféricas, aunque por claridad en la figura, se ha representado como la isolínea de mayor dimensión fractal la de D_f igual a 2.4, puesto que las isolíneas con

dimensiones fractales superiores aparecen solapadas unas a otras. Por encima de la isólinea de dimensión fractal igual a 3, no puede existir ninguna solución, porque un aglomerado nunca puede proyectar más área que la esfera que tiene su mismo radio de giro, ni un aglomerado puede tener menos radio de giro que la esfera que proyecta su misma área. En el otro extremo el dominio de soluciones está limitado por la línea de dimensión fractal igual a la unidad. Corresponde a un conjunto de partículas primarias alineadas y cuyo solape es la media hemisférica de los de todas las posibles orientaciones. Esto quiere decir que un aglomerado con igual radio de giro que la partícula tipo cadena y con menor área proyectada es muy poco probable, y concretamente, al aplicar este método, la imagen sería descartada por caer fuera del rango posible de D_f . Tampoco un aglomerado puede tener más radio de giro que el aglomerado lineal que proyecta su misma área.

En la figura 5.6 se aprecia que si el área proyectada es constante, las partículas con mayor radio de giro tienen menor dimensión fractal, es decir son más irregulares, y cuanto menor es el radio de giro de una partícula, más compacta es, es decir, mayor es su dimensión fractal. Por el contrario, entre dos partículas con igual radio de giro, es más compacta aquella con mayor área proyectada y por tanto su dimensión fractal es mayor, y viceversa.

También se ha representado el número de partículas primarias de los aglomerados físicamente posibles o probables en la figura 5.6. Para aglomerados con igual área proyectada un aumento en el radio de giro implica, además de una disminución de la dimensión fractal, una disminución del número de partículas primarias que contienen. Pero como se observa en la figura 5.6, cuanto mayor es el radio de giro, el efecto de éste sobre el número de partículas es menor, ya que el aglomerado en esa zona de la gráfica es muy enracimado, variando poco el solape que existe entre las partículas primarias. Por el contrario para un radio de giro determinado un aumento del área proyectada implica en cualquier caso un significativo aumento del número de partículas primarias que lo componen.

El ábaco representado es útil para visualizar las posibles soluciones del método a partir de las variables medidas desde las imágenes microscópicas. Además su utilización gráfica directa podría sustituir al método numérico planteado, si bien la pérdida de precisión y de sistematicidad no lo hace aconsejable.

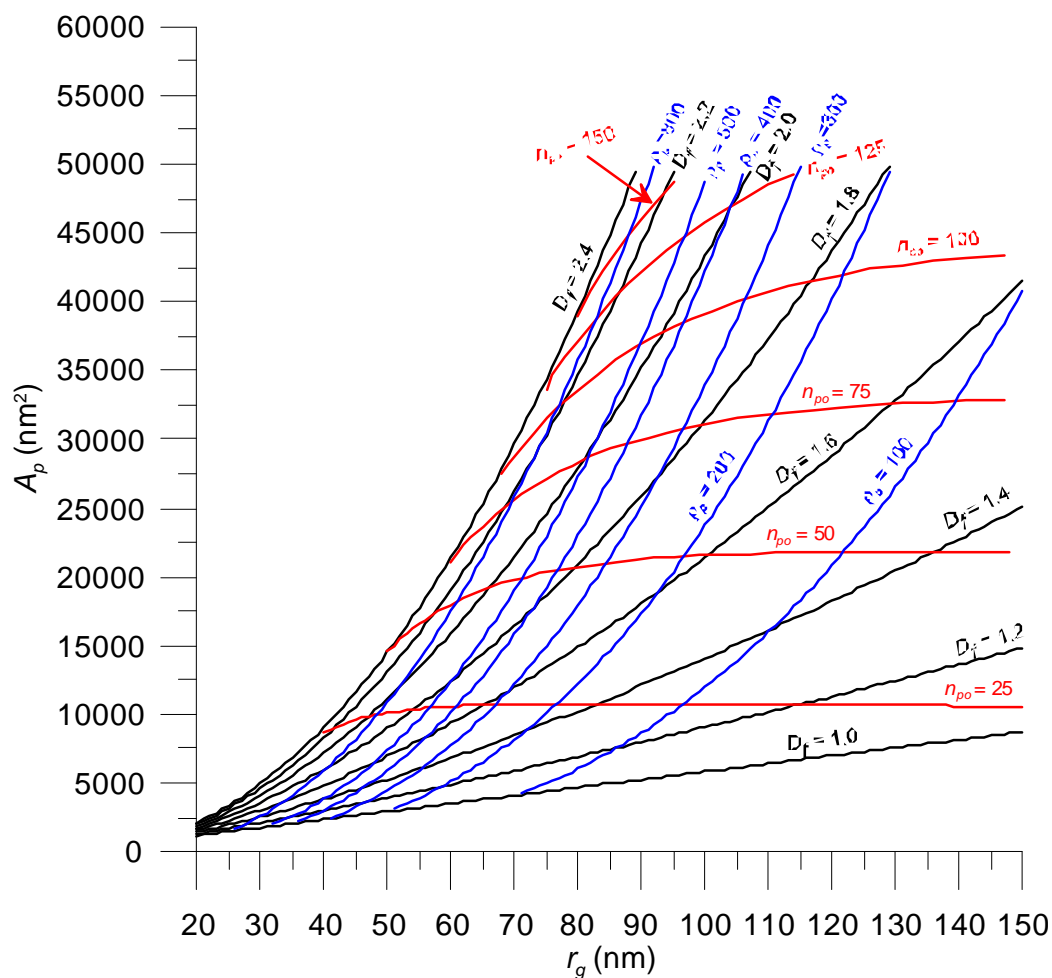


Figura 5.6. Ábaco de soluciones posibles que caracterizan los aglomerados. Isolíneas de dimensión fractal, de número de partículas primarias y de densidad aparente ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$).

5.6. VALIDACIÓN DEL MÉTODO PROPUESTO. APLICACIÓN REAL.

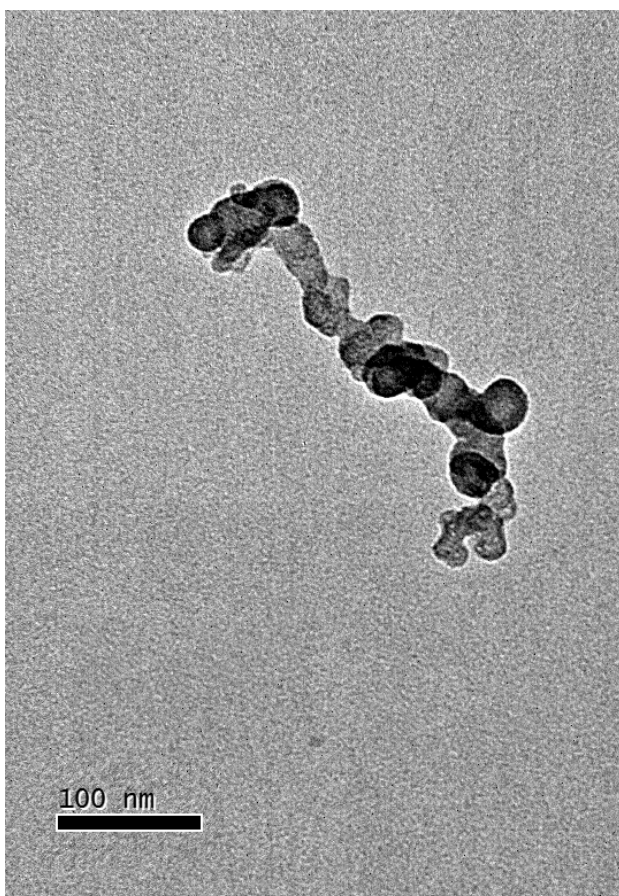
5.6.1. INTRODUCCIÓN

La validación del método desarrollado no puede realizarse por comparación directa de sus resultados con datos conocidos porque no es posible medir con certeza la geometría real de las partículas muestreadas. Algunos autores han intentado validar sus modelos utilizando diversas fotografías de un mismo aglomerado obtenido desde distintos ángulos, [3]. En cualquier caso, siempre es necesaria una labor de reconstrucción de la geometría a partir de los datos disponibles. En este caso se ha optado por realizar una validación cualitativa, basada en los siguientes criterios:

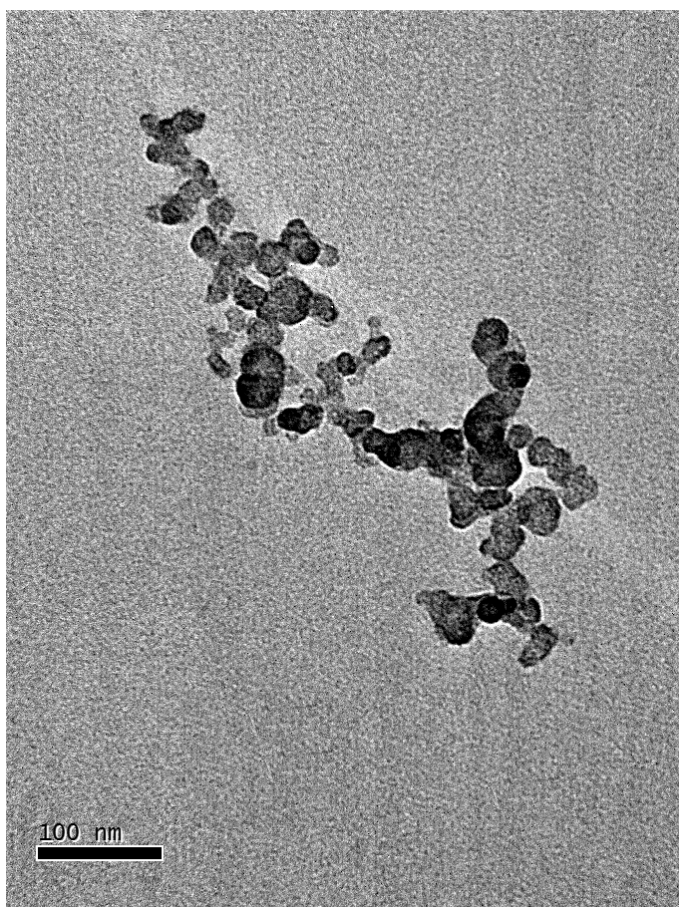
- Consistencia del método, de forma que exista una garantía de que los resultados de dimensión fractal obtenidos son en todos los casos una medida inequívoca de la irregularidad de los aglomerados.
- Comparación con resultados de otros métodos propuestos en la bibliografía, generalmente basados en regresiones estadísticas entre las variables directamente medidas (área proyectada y radio de giro) y en la comparación de dichas regresiones con la ley de potencias característica de la fractalidad de los aglomerados.

5.6.2. CONSISTENCIA DEL MÉTODO

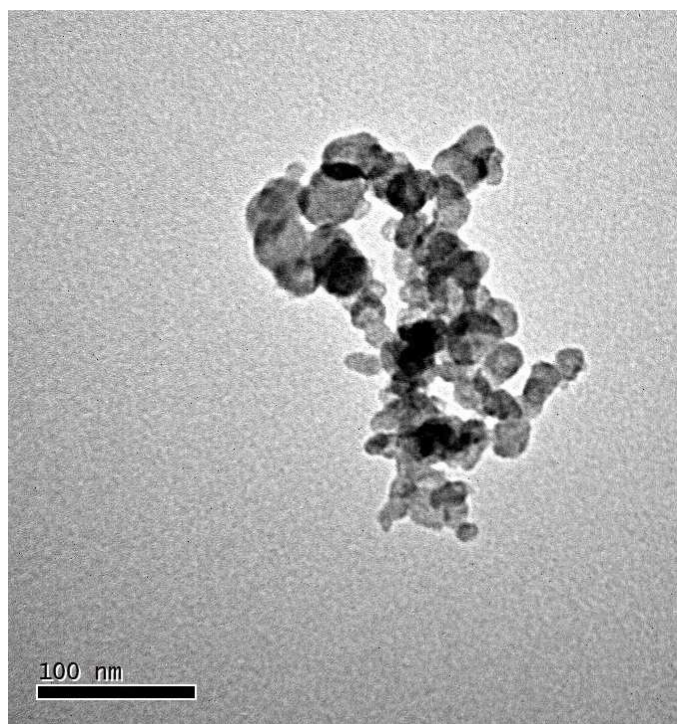
En la figura 5.7 se muestran cuatro ejemplos de aplicación del método propuesto. Las cuatro fotografías se han seleccionado porque proporcionan dimensiones fractales distintas entre sí. Además del área proyectada y del diámetro de giro, ambos determinados a partir del tratamiento digital de cada imagen, se incluyen los valores resultantes de la dimensión fractal, número de partículas primarias y densidad aparente.



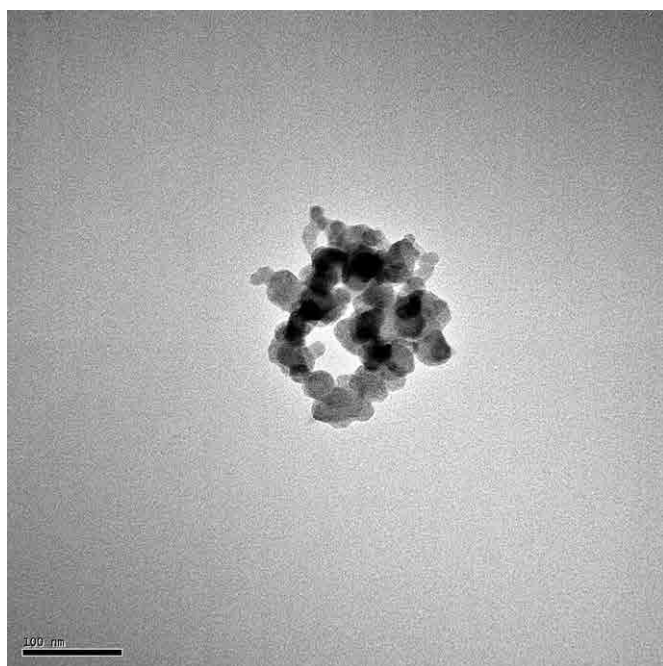
d_g (nm)	199.36
A_p (nm ²)	11890.30
D_f	1.3247
n_{po}	28
ρ_p (kg/m ³)	100.51



d_g (nm)	291.13
A_p (nm ²)	29300.20
D_f	1.4779
n_{po}	67
ρ_p (kg/m ³)	78.38



d_g (nm)	161.87
A_p (nm ²)	23384.40
D_f	1.8573
n_{po}	58
ρ_p (kg/m ³)	392.41



d_g (nm)	139.18
A_p (nm ²)	22518.60
D_f	2.0512
n_{po}	61
ρ_p (kg/m ³)	649.49

Figura 5.7. Fotografías de partículas diésel con D_f diferentes.

En las figuras anteriores puede observarse que el método propuesto proporciona un valor de la dimensión fractal muy diferente en función de la irregularidad de las partículas. Consecuentemente, la dimensión fractal así calculada es una medida consistente de la irregularidad de los aglomerados.

Los casos anteriores son solo un ejemplo de las 1734 fotografías de aglomerados a las que se ha aplicado el modelo. Se han obtenido 1616 fotografías válidas, que suponen el 93 % de los casos, y se han rechazado 118 fotografías, que corresponden al 7 % de los casos, por estar fuera del rango, es decir, $n_{po} < 5$, puesto que el modelo es válido para geometría fractal y se necesita de un mínimo de partículas primarias, y también se descartan aquellas fotos en las que $1 < D_f < 3$, que son el menor número de ellas. Al aplicar el método se han obtenido los valores de dimensión fractal y de número de partículas primarias mostrados sobre el ábaco anteriormente descrito, figura 5.8. La dimensión fractal media obtenida es de 1.8035 y el número de partículas primarias medio es de 53, valores que, por lo general, están próximos a los publicados en la bibliografía que trata el hollín procedente de los motores diésel.

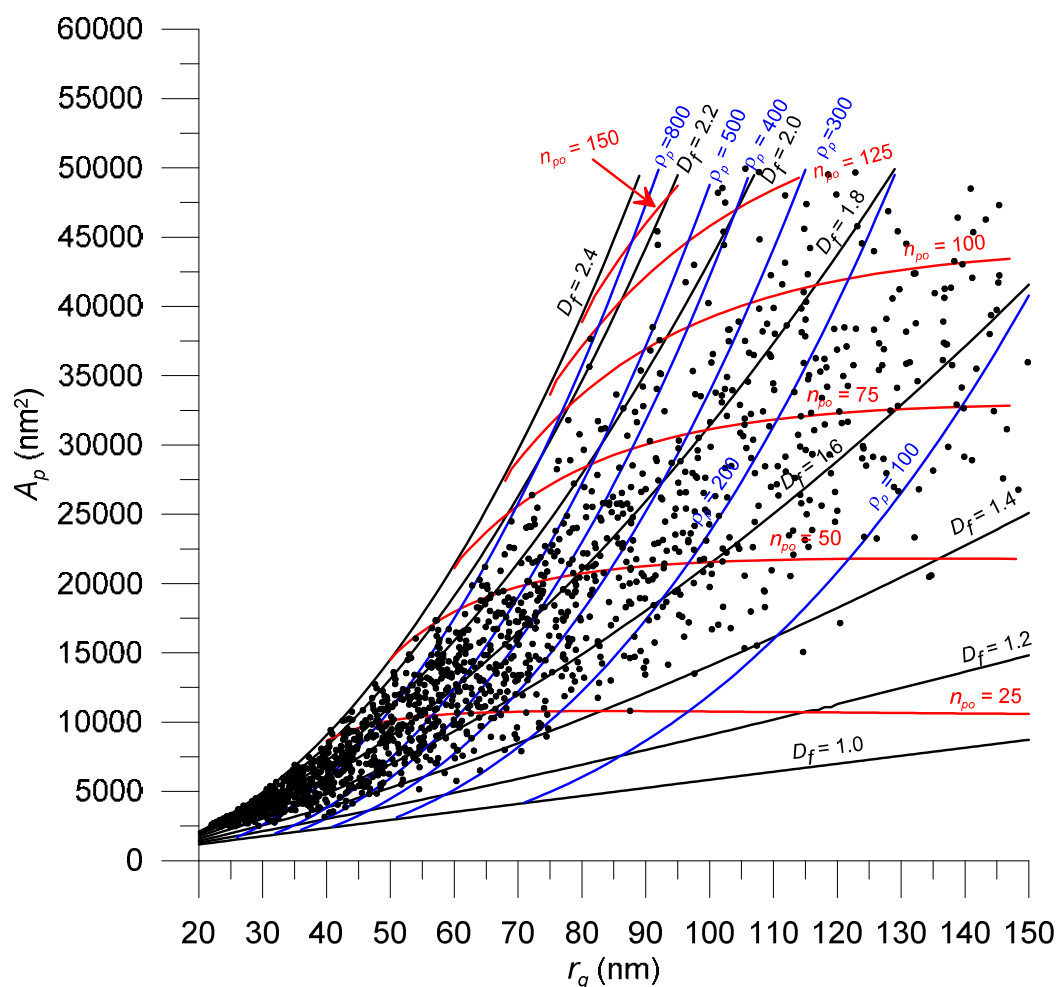


Figura 5.8. Ábaco de posibles soluciones incluyendo la localización de las 1616 fotografías válidas.

5.6.3. COMPARACIÓN CON RESULTADOS OBTENIDOS POR REGRESIÓN DIRECTA

Se pretende en este apartado comparar la potencialidad del método presentado con la de los métodos habituales de la bibliografía, basados en regresiones directas entre el área proyectada y el radio de giro adimensionalizado de toda la población de partículas muestreadas. Para ello se han tomado las 1734 fotografías utilizadas en esta tesis y se ha representado la relación entre el área proyectada de cada partícula y el área proyectada de una partícula primaria frente a la relación entre el diámetro de giro de cada aglomerado respecto al diámetro de la partícula primaria, figura 5.9.

Aplicando logaritmos a la ecuación (5.1), se obtiene:

$$\ln \frac{A_p}{A_{po}} = \frac{D_f}{z'} \ln \frac{d_g}{d_{po}} + \frac{1}{z'} \ln k_f \quad (5.9)$$

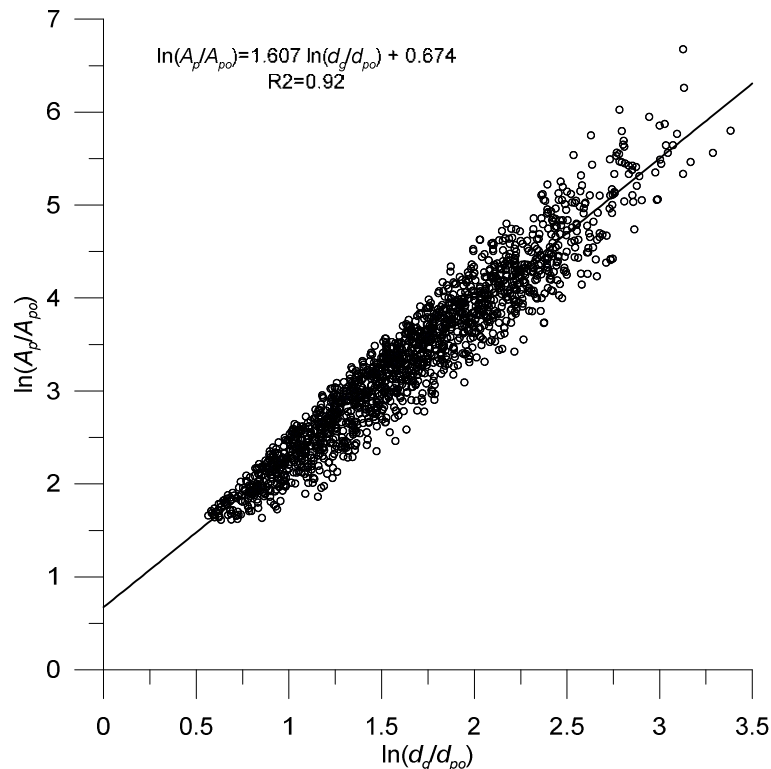


Figura 5.9. Obtención de la dimensión fractal media, del exponente de solape medio y del prefactor de la ley de potencias medio.

Los valores de la pendiente y término independiente de la recta de regresión obtenida pueden identificarse con el cociente entre la dimensión fractal media de toda la población de aglomerados y el exponente de solape medio, y con el cociente entre el logaritmo neperiano del prefactor de la ley de potencias medio y el exponente de solape medio, respectivamente. Esta manera de obtener información a partir del ajuste lineal, que como se ha dicho es muy común en la bibliografía, no permite la determinación de \bar{D}_f y \bar{k}_f medios a menos que se asuma un valor de z' . Además no es apta para describir la irregularidad de partículas concretas o grupos reducidos de éstas. Por último, este procedimiento es poco preciso, como lo demuestra el hecho de que modificaciones sustanciales de los parámetros $\bar{D}_f, \bar{k}_f, \bar{z}'$ no empeoran significativamente los coeficientes de correlación de los ajustes. Estas tres razones dificultan la posibilidad de estudiar los efectos que afectan sobre la irregularidad de las partículas de manera pormenorizada utilizando este método de ajuste lineal.

No obstante, se ha aplicado dicho método al conjunto de imágenes de aglomerados disponible, con el único objeto de comparar los valores medios obtenidos con los valores medios de la aplicación del modelo propuesto. Utilizando las 1616 fotografías válidas se ha obtenido la media de las relaciones entre la dimensión fractal y el exponente de solape de cada aglomerado y el

prefactor de la ley de potencias y el exponente de solape. Estos resultados se muestran en la tabla 5.1.

Como se comprueba, el valor medio obtenido a partir del modelo es próximo al que se ha obtenido utilizando el método experimental más referenciado en la bibliografía. Se observa que el método basado en regresiones directas subestima ligeramente las dimensiones fractales respecto las que se obtendría mediante un análisis geométrico de cada partícula, y sobreestima de forma importante (nótese que las diferencias obtenidas son logarítmicas) el número de partículas primarias (que se calcula a partir del prefactor) que componen los aglomerados. La mencionada subestimación de la dimensión fractal obtenida por regresiones directas a partir de imágenes planas, confirma las observaciones de S.N. Rogak *et al* [11]. Por tanto, cabe inferir que el método propuesto, al estar basado en el análisis geométrico por separado de cada partícula, es más fiable que los métodos de regresión directa, y que mejora respecto a éstos la estimación de la dimensión fractal, y especialmente la del número de partículas primarias.

Tabla 5.1. Comparación de los resultados obtenidos por los dos métodos.

	Resultados medios del método propuesto		Resultados por regresión directa
$\overline{D_f / z'}$	1.703	$\overline{D_f} / z'$	1.607
$\overline{\ln(k_f) / z'}$	0.544	$\overline{\ln(k_f)} / z'$	0.674

5.7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Kang, J.; Bae, C.; Shin, H. (2002). Morphological investigation of the microstructure, dimensions, and fractal geometry of Diesel particulates. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 647-653.
- [2] Zurita-Gotor, M.; Rosner, D.E. (2002). Effective diameters for collisions of fractal-like aggregates: recommendations for improved aerosol coagulation frequency predictions. *Journal of Colloid and Interface Science* **255**, 10-26.
- [3] Hayashi, S.; Hisaeda, Y.; Asakuma, Y.; Aoki, H.; Yano, H.; Sawa, Y. (1999). Simulation of soot aggregates formed by benzene pyrolysis. *Combustion and Flame* **117**, 851-860.
- [4] Lehtinen, K.E.J.; Zachariah, M.R. (2002). Energy accumulation in nanoparticles collision and coalescence processes. *Journal of Aerosol Science* **33**, 357-368.

- [5] Lee, K.O.; Zhu, J. (2004). Evolution in size and morphology of Diesel particulates along the exhaust system. *SAE paper*, 2004-01-1981.
- [6] Bushell, G.; Amal, R. (1998). Fractal aggregates of polydisperse particles. *Journal of Colloid and Interface Science* **205**, 459-469.
- [7] Oh, C.; Sorensen, C.M. (1997). The effect of overlap between monomers on the determination of fractal cluster morphology. *Journal of Colloid and Interface Science* **193**, 17-25.
- [8] Nelson, J.A.; Crookes, R.J.; Simons, S. (1990). On obtaining the fractal dimension of a 3D cluster from its projection on a plane-application to smoke agglomerates. *Journal of Physics D: Applied Physics* **23**, 465-468.
- [9] Wu, M.K.; Friedlander, S.K. (1993). Note on the power law equation for fractal-like aerosol agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **159**, 246-248.
- [10] Maricq, M.M.; Xu, N. (2004). The effective density and fractal dimension of soot particles from premixed flames and motor vehicle exhaust. *Journal of Aerosol Science* **35**, 1251-1274.
- [11] Rogak, S.N.; Flagan, R.C. (1992). Characterization of the structure of agglomerate particles. *Particle and Particle System Characterization* **9**, 19-27.

Capítulo 6. Conclusiones y Trabajos Futuros

6.1. CONCLUSIONES.....	205
6.1.1. Introducción.....	205
6.1.2. Relativas al prefactor de la ley de potencias.....	205
6.1.3. Relativas al exponente de solape	206
6.1.4. Relativas al método de caracterización de la irregularidad de las partículas	207
6.2. SUGERENCIAS PARA DESARROLLOS FUTUROS	207

6.1. CONCLUSIONES

6.1.1. INTRODUCCIÓN

Como novedad, se puede decir que con este trabajo se ha conseguido, a partir de unas sencillas hipótesis descritas en el capítulo 5, caracterizar la morfología de aglomerados granulados cuasi-fractales individuales. Hasta ahora sólo podían caracterizarse una población de aglomerados y no aglomerados individuales, o para caracterizar un aglomerado individual se necesitaba de unas complejas y no siempre reales hipótesis con las cuales se desvirtuaban los resultados obtenidos.

El método de resolución de la ecuación (5.1), propuesto en esta tesis, se ha validado mediante el uso de un conjunto de rejillas impregnadas de aglomerados de hollín, que se habían obtenido de trabajos anteriores, mediante la introducción de una sonda termofórica (A.2.1 del Apéndice) en el tubo de escape de un motor diésel, instalado en un banco de ensayo. Tras ser analizadas estas rejillas en el microscopio de transmisión de electrones, TEM, se han seleccionado de manera aleatoria una serie de aglomerados, los cuales han sido fotografiados. En total se han estudiado 1734 fotografías de aglomerados (se observa una selección de ellas en A.3 del Apéndice). De cada una de ellas se obtiene el área proyectada, A_p y el diámetro de giro, d_g . Con estos datos de un aglomerado concreto, introduciéndolos en el modelo propuesto, se obtienen tanto el número de partículas primarias del aglomerado, n_{po} , como la dimensión fractal del mismo, D_f , quedando completamente caracterizado el aglomerado.

Para poder resolver la ecuación (5.1), se han tenido que estudiar previamente el prefactor de la ley de potencias, k_f , y el exponente de solape, z' , en los capítulos 3 y 4 respectivamente. En ambos estudios, se han obtenido sendos modelos polinómicos reflejados en las ecuaciones (3.85) y (4.238).

6.1.2. RELATIVAS AL PREFACTOR DE LA LEY DE POTENCIAS

Como se ha visto, aglomerados con tamaño y dimensión fractal similar pueden tener formas muy diferentes. El prefactor de la ley de potencias es el que nos caracteriza esta diferencia. Es en el capítulo 3 donde se ha estudiado el comportamiento del prefactor de la ley de potencias y sus implicaciones físicas en el aglomerado.

- Se ha analizado el prefactor para distintos casos de subestructuras con dimensión fractal conocida y entera, $D_f=1$, $D_f=2$, $D_f=3$, y se han obtenido las ecuaciones de k_f correspondientes para esas condiciones. Teniendo en cuenta esto, se ha establecido un modelo polinómico de ajuste con

tres parámetros, en el que el prefactor de la ley de potencias es función de la dimensión fractal del aglomerado, ecuación (3.85).

- Los límites a los que tiende el prefactor cuando el número de partículas primarias que componen el aglomerado es muy elevado, son proporcional al número de estructuras elementales N , y a la compactación del aglomerado, incluso si la dimensión fractal se mantiene sin cambios. Esto justifica que el prefactor tiene sentido físico y puede ser expresado como lagunaridad.
- Finalmente se ha observado que el prefactor es muy estable con la variación de la dimensión fractal cuando el número de partículas primarias es superior a 20, y sucede igual cuando dicha variación de D_f está entre 1 y 2.6.
- Conocido el diámetro de giro de un aglomerado real, se puede saber la relación existente entre el número de partículas primarias que lo compone y la dimensión fractal de éste. Y se deduce que cuanto mayor es la dimensión fractal, manteniendo constante el número de partículas primarias, menor es el diámetro de giro adimensionalizado con el diámetro de una partícula primaria.
- Por tanto, queda demostrado que el prefactor de la ley de potencias junto a la dimensión fractal, caracterizan morfológicamente el aglomerado.

6.1.3. RELATIVAS AL EXPONENTE DE SOLAPE

En el capítulo 4 se ha modelado el exponente de solape siguiendo el mismo procedimiento que para el prefactor de la ley de potencia.

- Se ha analizado el exponente de solape, z' , para distintos casos de subestructuras con dimensión fractal conocida y entera, $D_f=1$, $D_f=2$, $D_f=3$, y se han obtenido las ecuaciones de z' correspondientes para esas condiciones. Teniendo en cuenta esto, se ha establecido un modelo polinómico de ajuste con tres parámetros, en el que el solape exponencial es función de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que componen el aglomerado, ecuación (4.238).
- Se observa que el solape exponencial es muy estable con la variación del número de partículas primarias cuando el número de partículas primarias es superior a 20. Igualmente z' es muy estable con la variación de la dimensión fractal, cuando D_f está entre uno y dos. Sin embargo, las variaciones del solape exponencial es más acusada con la dimensión fractal, cuando ésta supera el valor de 2.2.

- Se puede decir que conociendo el área proyectada de un aglomerado real se puede saber la relación existente entre el número de partículas primarias que lo compone y la dimensión fractal de éste.
- Por tanto, se ha determinado cómo se relaciona el exponente de solape con el número de partículas primarias y la dimensión fractal para aglomerados reales con estructuras completamente irregulares.

6.1.4. RELATIVAS AL MÉTODO DE CARACTERIZACIÓN DE LA IRREGULARIDAD DE LAS PARTÍCULAS

A continuación se destacan las conclusiones y resultados más importantes que se han obtenido referentes al método propuesto de caracterización de la irregularidad de las partículas.

- Se ha planteado un método geométrico para la determinación de la dimensión fractal y del número de partículas primarias que compone el aglomerado. Con este método se determinan algunas características morfológicas para cada partícula, tales como la dimensión fractal, el número de partículas primarias y la densidad aparente del aglomerado. El método es de tipo potencial, y además de expresar el solape entre partículas primarias de la forma más habitual en bibliografía, proporciona un rango de soluciones más amplio, y por tanto, una mayor sensibilidad.
- El método propuesto tiene solución exacta en las condiciones de contorno de ajuste y predice el comportamiento irregular de los aglomerados en las zonas intermedias.
- Además, el método propuesto, que está basado en el análisis geométrico directo de cada partícula por separado, es más fiable que los métodos que se proponen en la bibliografía, basados en regresión directa sobre un conjunto de resultados, ya que dichos métodos son un tanto imprecisos y además suelen utilizar un exponente de solape constante para todas las partículas ($z=1.09$), lo cual puede conllevar a errores en los resultados.

6.2. SUGERENCIAS PARA DESARROLLOS FUTUROS

En la misma línea de lo estudiado en esta Tesis Doctoral,

- Se propone revisar algunas de las hipótesis planteadas en el método de caracterización morfológica. En concreto, se pretende estimar el efecto que tendría sobre la dimensión fractal de los aglomerados la consideración del aplastamiento sufrido por las partículas primarias como

consecuencia de sus colisiones, y el efecto de distinguir el radio de giro de la imagen proyectada del radio de giro del aglomerado real.

- Observando otra de las hipótesis del método, se propone estudiar el efecto de la no esfericidad de las partículas primarias sobre los resultados de aplicación del método de caracterización morfológica de los aglomerados.
- Se podría desarrollar modelos fenomenológicos que reproduzcan las colisiones entre partículas primarias y aglomerados.
- Se podría aplicar el método propuesto a otros aglomerados que no provengan de la combustión de un motor diésel.

Referencias Bibliográficas

1. Ackerman, A.S.; Toon, O.B.; Stevens, D.E.; Heymsfield, A.J.; Ramanathan, V.; Welton, E.J. (2000). Reduction of tropical cloudiness by soot. *Science* **288**, 1042-1047.....Cap2 [23]
2. APHEIS (Air Pollution and Health: A European Information System) (2004) Third year report, 2002-2003. *Institut de Veille Sanitaire*, Saint-Maurice. European Commission.....Cap2 [4]
3. Artelt, C.; Schmid, H.J.; Peukert, W. (2003). On the relevance of accounting for the evolution of the fractal dimension in aerosol process simulations. *Journal of Aerosol Science* **34**, 511-534.Cap3 [6]
4. Ballesteros, R. (2002). Análisis experimental de las emisiones de partículas de un motor diesel con combustibles convencionales y alternativos. *Tesis Doctoral*, Universidad de Castilla-La Mancha.....Cap2 [1]
5. Benner, B.A.; Bryner, N.P.; Wise, S.A.; Mulholland, G.W.; Lao, R.C.; Fingas, M.F. (1990). Polycyclic aromatic hydrocarbons emissions from the combustion of crude oil on water. *Environmental Science and Technology* **24**, 1418-1427.Cap2 [18]
6. Besicovitch, A.S. (1934). On rational approximation to real numbers. *Journal of the London Mathematical Society*, **9**, 126-131.....Cap2 [44]
7. Bonczyk, P.A.; Hall, R.J. (1991). Fractal properties of soot agglomerates. *Langmuir* **7**, 1274-1280.Cap2 [49], Cap3 [3]
8. Botet, R.; Jullien, R. (1988). A theory of aggregating systems of particles: The clustering of clusters process. *Annales de Physique* **13**, 153-221.....Cap2 [57]
9. Brasil, A.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1999). A recipe for image characterization of fractal-like aggregates. *Journal of Aerosol Science* **30**, 1379-1389.Cap2 [51], Cap4 [6]
10. Brasil, A.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (2000). Evaluation of the fractal properties of cluster-cluster aggregates. *Aerosol Science and Technology* **33**, 440-454.Cap3 [23]
11. Brouwer, L.E.J. (1975). Collected works. *Ed. A. Heyting and H. Freudenthal*. New York. Elsevier North Holland.Cap2 [39]
12. Bushell, G.; Amal, R. (1998). Fractal aggregates of polydisperse particles. *Journal of Colloid and Interface Science* **205**, 459-469.Cap5 [6]

13. Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1993). Comparison of size and morphology of soot aggregates as determined by light scattering and electron microscope analysis. *Langmuir* **9**, 2861-2867.....Cap4 [12]
14. Cai, J.; Lu, N.; Sorensen, C.M. (1995). Analysis of fractal cluster morphology parameters: structural coefficient and density autocorrelation function Cutoff. *Journal of Colloid and Interface Science* **171**, 470-473..... Cap2 [50], Cap3 [5], Cap4 [2]
15. Chameides, W.L.; Bergin, M. (2002). Soot takes center stage. *Science* **297**, 2214-2215.....Cap2 [21]
16. Cheremisin, A.A.; Vassilyev, Y.V.; Horvath, H. (2005). Gravito-phosphoresis and aerosol stratification in the atmosphere. *Journal of Aerosol Science* **36**, 1277-1299.....Cap2 [26]
17. Desantes, J.M.; Bermúdez, V.; García, J.M.; Fuentes, E. (2005). Effects of current engine strategies on the exhaust aerosol particle size distribution from a heavy-duty diesel engine. *Journal of Aerosol Science* **36**, 1251-1276.....Cap2 [14]
18. Dobbins, R.A.; Megaridis, C.M. (1987). Morphology of flame-generated soot as determined by thermophoretic sampling. *Langmuir* **3**, 254-259.Cap3 [10]
19. Donalson, K.; Li, X.Y.; MacNee, W. (1998). Ultrafine (Nanometre) particle mediated lung injury. *Journal of Aerosol Science* **29**, 553-560.Cap2 [12]
20. Eastwood, P. (2008). Particulate emissions from vehicles. *John Wiley & Sons*. Chichester. England.Cap1 [2]
21. Faxvog, F.R.; Roessler, D.M. (1978). Carbon aerosol visibility vs particle size distribution. *Applied Optics* **17**, 2612-2616.Cap2 [27]
22. Filippov, A.V.; Zurita, M.; Rosner, D.E. (2000). Fractal-like aggregates: Relation between morphology and physical properties. *Journal of Colloid and Interface Science* **229**, 261-273.Cap2 [10]
23. Friedlander, S.K. (2000). Smoke, Dust and Haze. Fundamentals of aerosol dynamics. *Oxford University Press, Inc.*, New York.Cap2 [29]
24. Fry, D.; Mohammad, A.; Chakrabarti, A.; Sorensen, C.M. (2004). Cluster shape anisotropy in irreversibly aggregating particulate systems. *Langmuir* **20**, 7871-7879.....Cap3 [30]

25. Fuchs, N.A. (1989). *The Mechanics of Aerosol. Dover Publications, Inc., New York.*Cap2 [30]
26. García-Ybarra, P.L.; Castillo, J.L.; Rosner, D.E. (2006). Drag on a large spherical aggregate with self-similar structure: An asymptotic analysis. *Journal of Aerosol Science* **37**, 413-428.....Cap2 [64]
27. Gmachowski, L. (2002). Calculation of the fractal dimensions of aggregates. *Colloids and Surfaces, A: Physicochem. Eng. Aspects* **211**, 197-203.Cap3 [16]
28. Gorbunov, B.; Clarke, A.G.; Hamilton, R.S. (1999). Coagulation of soot particles and fractal dimension. *Journal of Aerosol Science* **30**, S445-S446.Cap2 [59]
29. Hack, J.T. (1957). Studies of longitudinal streams in Virginia and Maryland. *U.S. Geological Survey Professional Papers*, **294B**Cap2 [45]
30. Harrison, H.; Nettleton, T., (1997). *Advanced Engineering Dynamics.* Oxford, Butterworth Heinemann.....Cap3 [28]
31. Hausdorff, F. (1919). Dimension and äusseres Mass. *Mathematische Annalen*, **79**, 157-179.Cap2 [43]
32. Hayashi, S.; Hisaeda, Y.; Asakuma, Y.; Aoki, H.; Yano, H.; Sawa, Y. (1999). Simulation of soot aggregates formed by benzene pyrolysis. *Combustion and Flame* **117**, 851-860.....Cap5 [3]
33. Heywood, J.B. (1988). *Internal combustion engine fundamentals.* McGrawHills Book Company. New York. USA.Cap1 [1]
34. Hinds, W. (1982). *Aerosol Technology – Properties, behaviour and measurement of airborne particles.* Wiley, Interscience, New York.....Cap2 [32]
35. Hu, B.; Koylu, U.O. (2004). Size and morphology of soot particulates sampled from a turbulent nonpremixed acetylene flame. *Aerosol Science and Technology* **38**, 1009-1018.....Cap3 [14], Cap4 [13]
36. Kausch, H.H.; Fesko, D.G.; Tschoegl, N.W. (1971). The random packing of circles in a plane. *Journal of Colloid and Interface Science* **37**, 603-611.Cap3 [31]
37. Kazakov, A.; Frenklach, M. (1998). Dynamic modelling of soot particle coagulation and aggregation: Implementation with the method of

- moments and application to high-pressure laminar premixed flames. *Combustion and Flame* **114**, 484-501.....Cap2 [38]
38. Kim, D-H.; Gautam, M.; Gera, D. (2001). On the prediction of concentration variations in a dispersing heavy-duty truck exhaust plume using $k-\varepsilon$ turbulent closure. *Atmospheric Environment* **35**, 5267-5275.Cap2 [2]
39. Kittelson, D.B. (1998). Engines and nanoparticles: a review. *Journal of Aerosol Science* **9**, 575-588. Cap1 [3], Cap2 [5]
40. Kittelson, D.B.; Watts, W.F.; Arnold, M. (1998). Review of diesel particulate matter sampling methods. Aerosol dynamics, laboratory and on-road studies. *University of Minnesota*.Cap2 [37]
41. Köylü, Ü.Ö.; Faeth, G.M.; Farias, T.L.; Carvalho, M.G. (1995). Fractal and projected structure properties of soot aggregates. *Combustion and Flame* **100**, 621-633..... Cap3 [22], Cap4 [14]
42. Köylü, Ü.Ö.; McEnally, C.S.; Rosner, D.E.; Pfefferle, L.D. (1997). Simultaneous measurements of soot volume fraction and particle size/microstructure in flames using a thermophoretic sampling technique. *Combustion and Flame* **110**, 494-507.....Cap4 [15]
43. Lapuerta, M.; Ballesteros, R.; Martos, F.J. (2006). A method to determine the fractal dimension of diesel soot agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **303**, 149-158.....Cap3 [9]
44. Lattuada, M.; Wu, H.; Morbidelli, M. (2003). A simple model for the structure of fractal aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science* **268**, 106-120.....Cap3 [8]
45. Lebesgue, H. (1972). Oeuvres scientifiques. Genève: Enseignement Mathématique.....Cap2 [40]
46. Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Kang, J.; Bae, C.; Shin, H. (2002). Morphological investigation of the microstructure, dimensions, and fractal geometry of diesel particulates. *Proceedings of the Combustion Institute* **29**, 647-653. .Cap2 [60], Cap3 [24], Cap4 [3], Cap5 [1]
47. Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Zhu, J.; Kang, J.; Bae, C. (2001). Detailed characterization of morphology and dimensions of Diesel particulates via thermophoretic sampling. *SAE paper*, 2001-01-3572. Cap3 [4], Cap4 [1]

48. Lee, K.O.; Zhu, J. (2004). Evolution in size and morphology of Diesel particulates along the exhaust system. *SAE paper*, 2004-01-1981..Cap5 [5]
49. Lee, K.O.; Zhu, J.; Ciatti, S.; Yozgatligil, A.; Choi, M. Y. (2003). Sizes, graphitic structures and fractal geometry of light-duty diesel engine particulates. *SAE paper* 2003-01-3169.Cap2 [11], Cap4 [10]
50. Lehtinen, K.E.J.; Zachariah, M.R. (2002). Energy accumulation in nanoparticles collision and coalescence processes. *Journal of Aerosol Science* **33**, 357-368.....Cap5 [4]
51. Mandelbrot, B.B. (1983). The fractal geometry of nature. *W.H. Freeman & Co*, New York..... Cap2 [7], Cap3 [2]
52. Manickavasagam, S.; Mengüç, M.P. (1997). Scattering matrix elements of fractal-like soot agglomerates. *Applied Optics* **36**, 1337-1351.Cap2 [52]
53. Maricq, M.M.; Xu, N. (2004). The effective density and fractal dimension of soot particles from premixed flames and motor vehicle exhaust. *Journal of Aerosol Science* **35**, 1251-1274.Cap5 [10]
54. Meakin, P. (1984). Diffusion-limited aggregation in three dimensions: results from a new cluster-cluster model. *Journal of Colloid Interface Science* **102**, 491-504.....Cap3 [17]
55. Meakin, P.; Donn, B.; Mulholland, G.W. (1989). Collisions between point masses and fractal aggregates. *Langmuir* **5**, 510-518 Cap2 [6], Cap4 [18]
56. Medalia, A.I.; Heckman, F.A. (1969). Morphology of aggregates-II. Size and shape factors of carbon black aggregates from electron microscopy. *Carbon* **7**, 567-568.....Cap2 [47], Cap4 [11]
57. Megaridis, C.M.; Dobbins, R.A. (1990). Morphological description of flame-generated materials. *Combustion Science and Technology* **71**, 95-109..... Cap2 [58], Cap3 [20], Cap4 [9]
58. Menguer, K. (1943). What is dimension?. *American Mathematical Monthly*, **50**, 2-7.....Cap2 [41]
59. Menon, S.; Hansen, J.; Nazarenko, L.; Luo, Y. (2002). Climate effects of black carbon aerosols in China and India. *Science* **297**, 2250-2253.Cap2 [24]

60. Merola, S.S.; Gambi, G.; Allouis, C.; Beretta, F.; Borghese, A.; D'Alessio, A. (2001). Analysis of exhausts emitted by I.C. engines and stationary burners, by means of u.v. extinction and fluorescence spectroscopy. *Chemosphere* **42**, 827-834.....Cap2 [28]
61. Morawska, L.; Bofinger, N.D.; Kocis, L.; Nwankwoala, A. (1998). Submicrometer and supermicrometer particles from diesel vehicle emissions. *Environmental Science & Technology* **32**, 2033-2042. .Cap2 [13]
62. Morawska, L.; Hofmann, W.; Hitchins-Loveday, J.; Swanson, C.; Mengersen, K. (2005). Experimental study of the deposition of combustion aerosols in the human respiratory tract. *Journal of Aerosol Science* **36**, 939-957.....Cap2 [15]
63. Mountain, R.D.; Mulholland, G.W. (1988). Light scattering from simulated smoke agglomerates. *Langmuir* **4**, 1321-1326.Cap3 [19]
64. Naumann, K.H. (2003). COSIMA-a computer program simulating the dynamics of fractal aerosols. *Journal of Aerosol Science* **34**, 1371-1397.Cap2 [33]
65. Neer, A.; Koylu, U.O. (2006). Effect of operating conditions on the size, morphology, and concentration of submicrometer particulates emitted from a diesel engine. *Combustion and Flame* **146**, 142-154.Cap3 [26]
66. Nelson, J.A.; Crookes, R.J.; Simons, S. (1990). On obtaining the fractal dimension of a 3D cluster from its projection on a plane-application to smoke agglomerates. *Journal of Physics D: Applied Physics* **23**, 465-468.Cap5 [8]
67. Oberdörster, G. (2001). Pulmonary effects of inhaled ultrafine particles. *International Archives of Occupational and Environmental Health* **74**, 1-8.Cap2 [16]
68. Oh, C.; Sorensen, C.M. (1997). Light scattering study of fractal cluster aggregation near the free molecular regime. *Journal of Aerosol Science* **28**, 937-957.....Cap3 [12]
69. Oh, C.; Sorensen, C.M. (1997). The effect of overlap between monomers on the determination of fractal cluster morphology. *Journal of Colloid and Interface Science* **193**, 17-25..... Cap4 [5], Cap5 [7]
70. Ouf, F-X.; Vendel, J.; Coppalle, A.; Weill, M.; Yon, J. (2008). Characterization of soot particles in the plumes of over-ventilated

- diffusion flames. *Combustion Science and Technology* **180**, 674-698.Cap3 [27]
71. Park, K.; Cao, F.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2003). Relationship between particle mass and mobility for diesel exhaust particles. *Environment Science and Technology* **37**, 577-583.Cap2 [34]
72. Park, K.; Kittelson, D.B.; McMurry, P.H. (2004). Structural properties of diesel exhaust particles measured by Transmission Electron Microscopy (TEM): Relationships to particle mass and mobility. *Aerosol Science and Technology* **38**, 881-889. Cap2 [63], Cap3 [25], Cap4 [16]
73. Pettersson, A.; Lovejoy, E.R.; Brock, C.A.; Brown, S.S.; Ravishankara, A.R. (2004). Measurement of aerosol optical extinction at 532 nm with pulsed cavity ring down spectroscopy. *Journal of Aerosol Science* **35**, 995-1011.Cap2 [20]
74. Przybilla, K.R. (2002). Investigation of particles from combustion with special consideration of elemental carbon. *Ph.D. Thesis*, Swiss Federal Institute of Technology Zurich.Cap2 [19]
75. Puri, R.; Richardson, T.F.; Santoro, R.J.; Dobbins, R.A. (1993). Aerosol dynamic processes of soot aggregates in a laminar ethene diffusion flame. *Combustion and Flame* **92**, 320-333.Cap3 [21]
76. Ramanathan, V.; Crutzen, P.J.; Kiehl, J.T.; Rosenfeld, D. (2001). Aerosols, climate, and hydrological cycle. *Science* **294**, 2119-2124.Cap2 [25]
77. Rogak, S.N.; Flagan, R.C. (1992). Characterization of the structure of agglomerate particles. *Particle and Particle System Characterization* **9**, 19-27. Cap4 [4], Cap5 [11]
78. Rogak, S.N.; Flagan, R.C.; Nguyen, H.V. (1993). The mobility and structure of aerosol agglomerates. *Aerosol Science and Technology* **47**, 25-47.Cap2 [35]
79. Rosner, D.E.; Mackowski, D.W.; García-Ybarra, P.L. (1991). Size- and structure-insensitivity of the thermophoretic transport of aggregated soot particles in gases. *Combustion Science and Technology* **80**, 87-101.Cap3 [11]
80. Samson, R.J.; Mulholland, G.W.; Gentry, J.W. (1987). Structural analysis of soot agglomerates. *Langmuir* **3**, 272-281. Cap2 [8], Cap3 [18]

81. Seaton, A.; MacNee, W.; Donalson, K.; Godden, D. (1995). Particulate air pollution and acute health effects. *The Lancet* **345**, 176-178.Cap2 [17]
82. Shi, Y.; Zhang Y. (2008). Simulation of random packing of spherical particles with different size distributions. *Applied Physics A: Materials Science & Processing* **92**, 621-626. Cap3 [33], Cap4 [8]
83. Siegmann. K.; Scherrer, L.; Siegmann, H.C. (1999). Physical and chemical properties of airborne nanoscale particles and how to measure the impact on human health. *Journal of Molecular Structure (Techoem)* **458**, 191-201.Cap2 [3]
84. Skillas, G.; Burtscher, H.; Siegmann, K.; Baltensperger, U. (1999). Density and fractal-like dimension of particles from a laminar diffusion flame. *Journal of Colloid and Interface Science* **217**, 269-274.....Cap2 [54]
85. Skillas, G.; Künzel, S.; Burtscher, H.; Baltensperger, U.; Siegmann, K. (1998). High fractal-like dimension of diesel soot agglomerates. *Journal of Aerosol Science* **29**, 411-419. Cap2 [53], Cap3 [1]
86. Smekens, A.; Pauwels, J.; Berghmans, P.; Grieken, R.V. (1997). Correlation study between the aerodynamic diameter and the number of primary particles of soot aggregates by STEM. *Journal of Aerosol Science* **28**, S761-S762.Cap2 [31]
87. Sorensen, C.M.; Roberts, G.C. (1997). The prefactor of fractal aggregates. *Journal of Colloid and Interface Science* **186**, 447-452. Cap3 [15], Cap4 [7]
88. Sutherland, D.N. (1977). Random packing of circles in a plane. *Journal of Colloid and Interface Science* **60**, 96-102.Cap3 [32]
89. Tian, K.; Liu, F.; Thomson, K.A.; Snelling D.R.; Smallwood, G.J.; Wang, D. (2004). Distribution of the number of primary particles of soot aggregates in a nonpremixed laminar flame. *Combustion and Flame* **138**, 195-198.....Cap2 [48]
90. Tipler, P.A. (1989). Física. *Editorial Reverté S.A.*, Barcelona.....Cap3 [29]
91. Urysohn, P. (1927). Mémoire sur les multiplicités cantorienes. II: les lignes cantorienes. *Verhandelingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen te Amsterdam*.....Cap2 [42]
92. Van Gulijk, C.; Marijnissen, J.C.M.; Makkee, M.; Moulijn, J.A.; Schmidt-Ott, A. (2004). Measuring diesel soot with a scanning

- mobility particle sizer and an electrical low-pressure impactor: performance assessment with a model for fractal-like agglomerates. *Journal of Aerosol Science* **35**, 633-655.Cap2 [9]
93. Wagensberg, J. (2004). La rebelión de las formas, o cómo perseverar cuando la incertidumbre aprieta. *Ed. Tusquets*, Colección Metatemas, 84. Barcelona.....Cap2 [46]
94. Whitby, K.T. (1978). The physical characteristics of sulfur aerosols. *Atmospheric Environment* **12**, 135-159.....Cap2 [36]
95. Wu, M.K.; Friedlander, S.K. (1993). Note on the power law equation for fractal-like aerosol agglomerates. *Journal of Colloid and Interface Science* **159**, 246-248..... Cap2 [55], Cap3 [13], Cap5 [9]
96. Yang, G.; Biswas, P. (1999). Computer simulation of the aggregation and sintering restructuring of fractal-like clusters containing limited numbers of primary particles. *Journal of Colloid and Interface Science* **211**, 142-150. Cap2 [56], Cap3 [7]
97. Zhang, L.; Michelangeli, D.V.; Taylor, P.A. (2006). Influence of aerosol concentration on precipitation formation in low-level, warm stratiform clouds. *Journal of Aerosol Science* **37**, 203-217.....Cap2 [22]
98. Zhu, J.; Lee, K.O.; Sekar, R.; Choi, M.Y. (2003). Morphological study of the particulate matter from a light-duty diesel engine. *Proceedings of the third joint meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute*. University of Illinois. Chicago.....Cap2 [62], Cap4 [17]
99. Zurita-Gotor, M.; Rosner, D.E. (2002). Effective diameters for collisions of fractal-like aggregates: recommendations for improved aerosol coagulation frequency predictions. *Journal of Colloid and Interface Science* **255**, 10-26..... Cap2 [61], Cap5 [2]

Apéndice

A.1. INTRODUCCIÓN.....	223
A.2. INSTRUMENTACIÓN UTILIZADA Y TÉCNICAS DE MEDIDA ASOCIADAS A LAS EMISIONES DE PARTÍCULAS	223
A.2.1. Sonda de termofóresis	223
A.2.2. Obtención y tratamiento de las imágenes digitales.....	224
A.2.2.1. Microscopio de transmisión de electrones.....	224
A.2.2.2. Clasificación de las imágenes	226
A.2.2.3. Tratamiento de las imágenes	227
A.3. EJEMPLOS DE FOTOGRAFÍAS	227
A.4. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	232

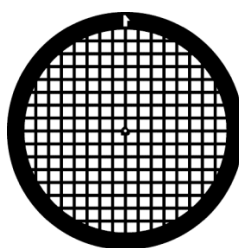
A.1. INTRODUCCIÓN

En este apéndice se describe el equipo experimental que se ha utilizado para la medida y caracterización de las partículas y se describe la técnica de procesado digital. Posteriormente se muestra una selección de fotos de las 1734 que se ha realizado con el microscopio de transmisión de electrones (TEM), las cuáles se han tratado digitalmente para la obtención de la morfología de las partículas.

A.2. INSTRUMENTACIÓN UTILIZADA Y TÉCNICAS DE MEDIDA ASOCIADAS A LAS EMISIONES DE PARTÍCULAS

A.2.1. SONDA DE TERMOFÓRESIS

Para recoger los aglomerados y poder fotografiarlos en el microscopio de transmisión de electrones, TEM, para su caracterización morfológica, se utiliza una rejilla, que tiene la forma que se muestra en la figura A.1.a. Estas rejillas van alojadas en un portarejillas, figura A.2.b y el procedimiento de recogida de aglomerados se explica a continuación. La técnica de muestreo basada en la termofóresis fue propuesta por primera vez por Dobbins R.A. *et al*, [1], para caracterizar el hollín generado en llamas provocadas por quemadores. Posteriormente, Rosner, D.E. *et al*, [2], justificaron la adecuación del fenómeno termoforético para la captura no sesgada de una población de partículas en gases. Posteriormente otros autores, [3], han extendido el uso de esta técnica a las partículas generadas en motores diésel.



a)



b)

2

Las partículas se extraen del tubo de escape utilizando el flujo termoforético a que se ven sometidas cuando éstas se encuentran entre dos temperaturas muy distintas. El flujo del gas de escape en el que viajan las partículas tiene localmente una temperatura prácticamente constante. La manera de captar las partículas consiste en introducir en el centro del flujo una lámina de un material que actúa como una red a temperatura ambiente. Esta diferencia de

temperaturas provoca un flujo termoforético de partículas desde el fluido a la lámina fría. Para que esta lámina no se caliente, el tiempo de residencia dentro del tubo de escape es de 0.6 segundos. La lámina, que es de un material transparente al microscopio, llamado Formvar, que se utilizará para analizar las partículas captadas, está sujeta mediante un armazón de cobre. El conjunto se denomina rejilla, y tiene un diámetro exterior de 3 mm. La rejilla junto con el portarejilla se muestra en la figura A.2.b.

En la figura A.2.a se muestra el dispositivo que se denomina sonda de termofóresis. Consta de un cilindro neumático que, controlado por un módulo programable, extiende el vástago del cilindro durante los 0.6 segundos que tiene que estar dentro del tubo de escape la rejilla de captación de partículas. En el vástago del cilindro neumático se coloca roscado el portarejilla, figura A.2.b. El principio y el final de la carrera del cilindro neumático son controlados mediante dos detectores magnéticos montados en ambos extremos del cilindro neumático.



a)

b)

Figura A.2. Fotografías de la sonda termoforética.

Para esta tesis se recibieron las rejillas almacenadas en los portarejillas como los de la figura 1.b) para el fotografiado y posterior tratamiento digital.

A.2.2. OBTENCIÓN Y TRATAMIENTO DE LAS IMÁGENES DIGITALES

A.2.2.1. Microscopio de transmisión de electrones

El microscopio de transmisión de electrones (*Transmission Electron Microscopy* TEM) es un instrumento de alta precisión capaz de obtener imágenes bidimensionales ampliadas hasta un millón de veces sobre el tamaño original de una muestra, por lo que resulta una herramienta idónea para la observación de partículas diésel a nivel microestructural.

El funcionamiento básico de un TEM es el que se describe a continuación. El elemento que contiene todo el sistema es un cilindro metálico de unos dos metros de altura, cuyo interior se encuentra en condiciones de vacío a lo largo de su funcionamiento. En su parte superior existe un filamento de tungsteno que actúa como cátodo, y emite electrones al recibir una excitación eléctrica de alto voltaje, que puede encontrarse por encima de los 100 kV dependiendo del TEM, y que pasa del cátodo al ánodo. Los electrones se aceleran por efecto de esta diferencia de potencial y atraviesan una apertura de pequeño tamaño formando una columna.

Un conjunto de lentes hace incidir la corriente de electrones sobre la muestra dispuesta en el interior del microscopio. El paso de los electrones a través de la muestra produce una dispersión en parte de los electrones, que al no superar la segunda apertura, favorecen el contraste de la imagen. Por su parte, el resto de los electrones que sí consiguen atravesar la apertura son conducidos por nuevas lentes hasta una pantalla fosforescente o a una película fotográfica, con lo que se consigue extraer la imagen de la proyección bidimensional de la muestra.

Como ya ha sido comentado, el tamaño de la apertura posterior a la muestra se emplea para conseguir variaciones en el contraste de la imagen, mientras que el nivel de aumentos que se consigue en la fotografía o la imagen tomada puede ser controlado a partir de la posición de las lentes electrónicas intermedias.

El microscopio TEM utilizado para obtener las imágenes con las que se han realizado los estudios recogidos en esta tesis es un Philips CM-200, que posee una fuente de electrones con un potencial de aceleración de 200 kV, y un máximo de resolución inferior a los 2 Å. Este microscopio es el que se muestra en la figura A.3.



Figura A.3. Vista del TEM utilizado, perteneciente a la Universidad de Málaga.

A.2.2.2. Clasificación de las imágenes

La clasificación de imágenes es una tarea previa a todo estudio e indispensable para obtener resultados válidos, puesto que no cualquier fotografía tomada con el microscopio TEM resulta adecuada para la obtención de resultados aceptables.

El proceso de clasificación puede comenzarse en el momento en que se toman las fotografías en el propio microscopio, puesto que en un mismo filtro puede encontrarse un gran número de partículas. La selección de partículas en la rejilla es aleatoria, pero resulta conveniente tratar de tomar fotografías de la calidad suficiente en cuanto a contraste. Por otro lado, a la hora de establecer comparaciones, es conveniente que las fotografías presenten una escala similar, en especial para el análisis de aquellos parámetros que dependan fuertemente del tamaño de cada uno de los píxeles que componen la imagen, como ocurre con el diámetro de las partículas primarias, el radio de giro y todas aquellas variables que dependen de los mismos. En relación al tamaño del píxel, se determina cuál es el máximo admisible para que los resultados puedan considerarse correctos.

Una segunda selección puede llevarse a cabo una vez se tienen imágenes de TEM disponibles. En concreto, es recomendable seleccionar aquellas imágenes que sean nítidas, y que preferiblemente presenten un buen contraste, entendiéndose esto como que la distinción entre el fondo de la fotografía y la propia partícula sea, a simple vista, posible. En caso de disponer de imágenes que no posean estas características básicas, es previsible que las

tareas de binarización y aislamiento de la partícula con respecto al fondo resulten más complicadas de realizar con precisión.

A.2.2.3. Tratamiento de las imágenes

El tratamiento de imágenes de partículas ayuda a determinar todos los parámetros de interés en el estudio de la morfología de dichas partículas.

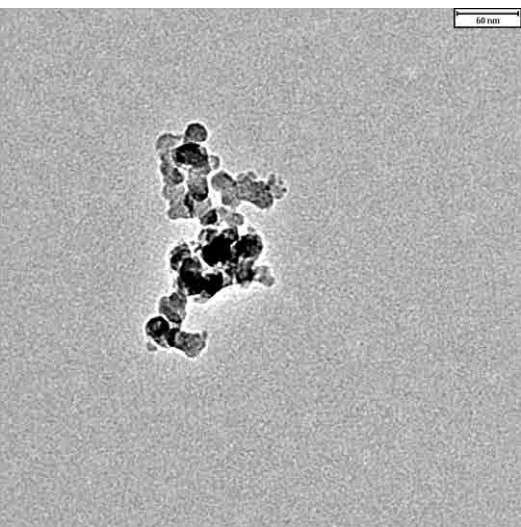
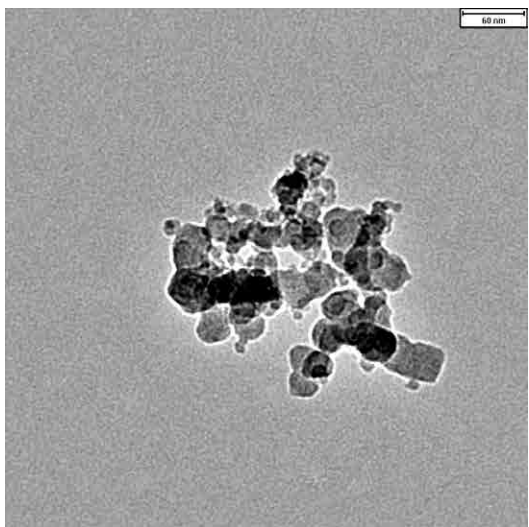
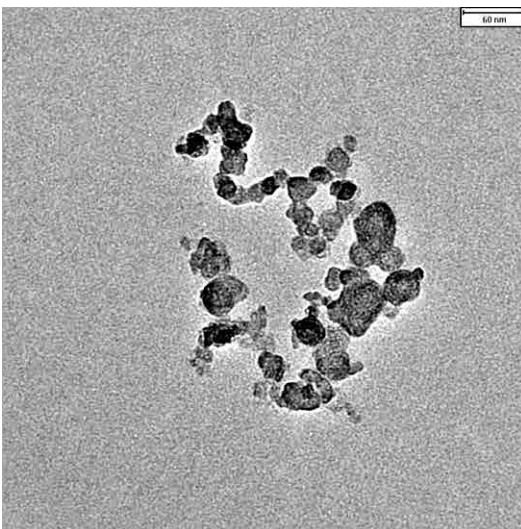
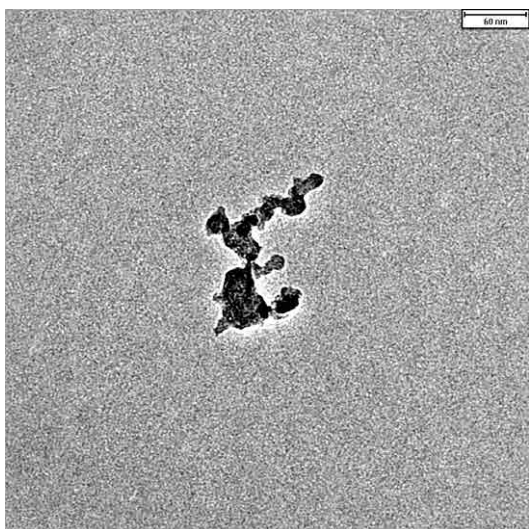
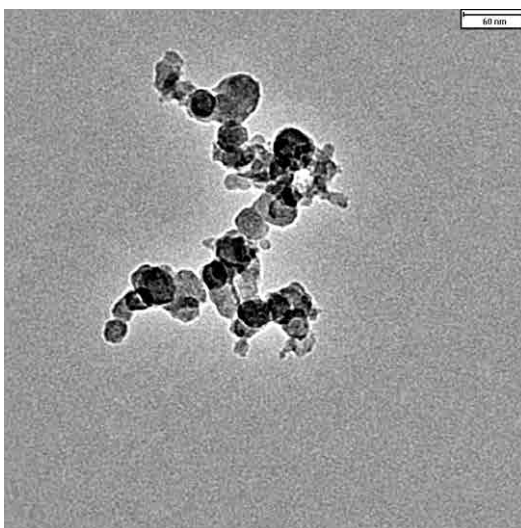
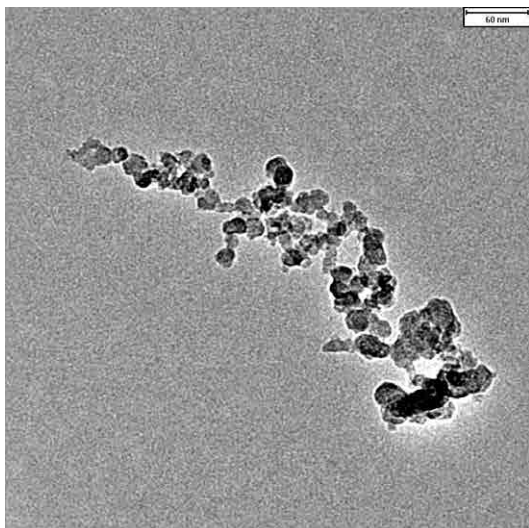
El proceso de trabajo se detalla a continuación:

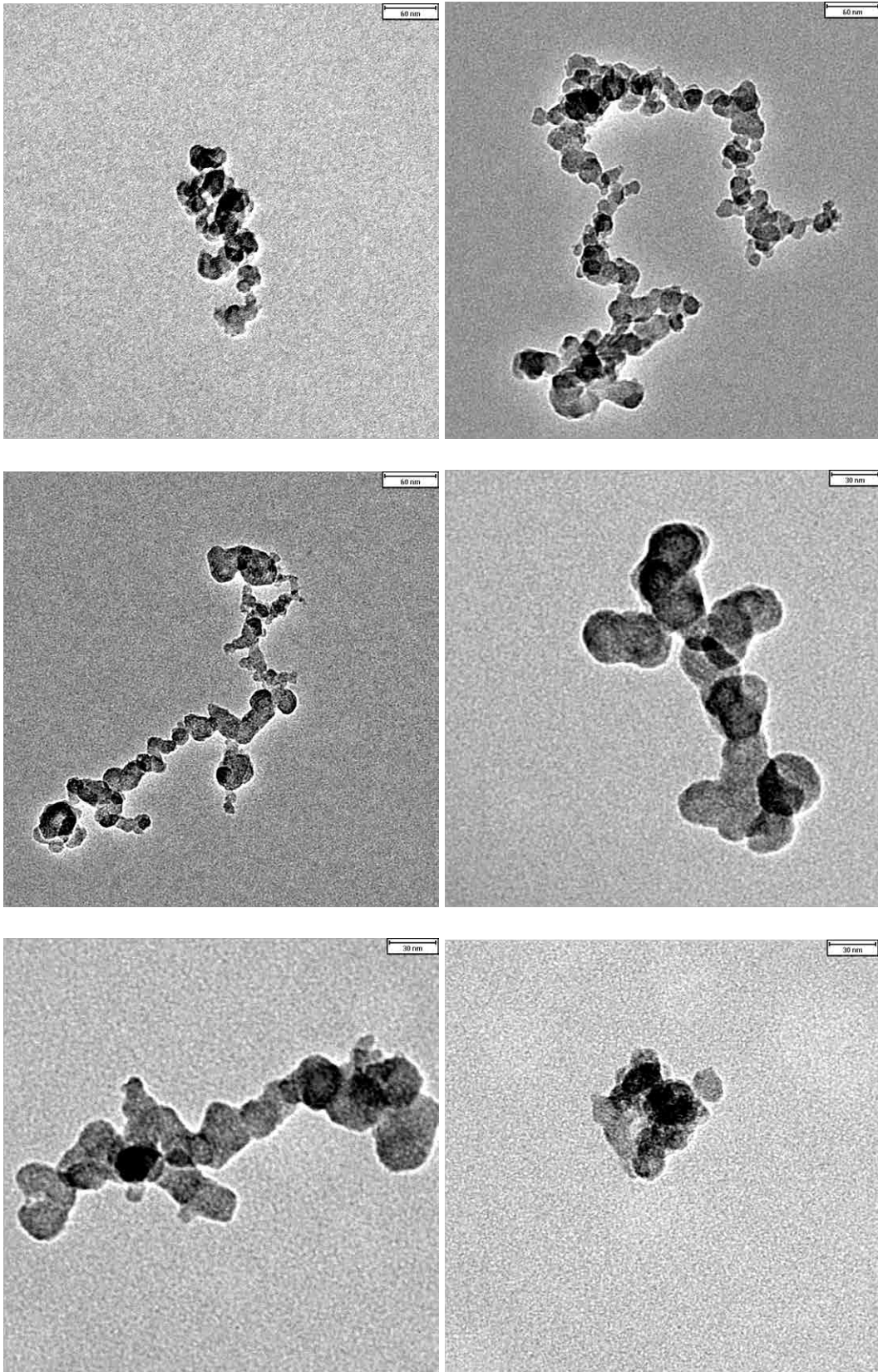
- En primer lugar, se mide la escala de la fotografía para poder medir las dimensiones de las partículas.
- Después se elimina el fondo de la fotografía, dejando únicamente la proyección bidimensional de la partícula.
- Después se puede medir el área proyectada de la partícula y determinar en función de la posición de los píxeles que componen la partícula, el centro de gravedad de la partícula. Posteriormente, a partir del centro de gravedad se obtiene el radio de giro.
- Con los datos anteriores y el modelo que se ha propuesto en el Capítulo 5 se obtienen todas las características morfológicas necesarias para caracterizar la partícula.

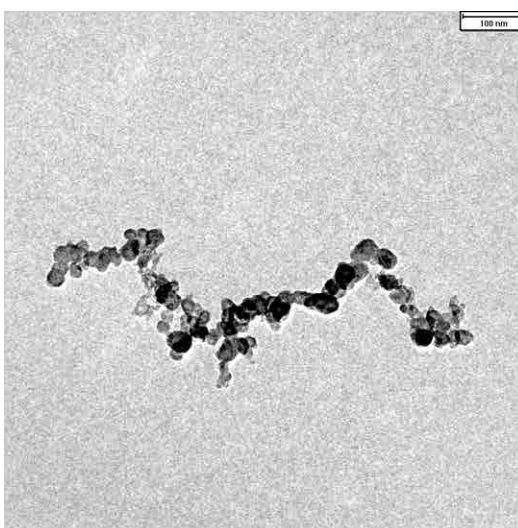
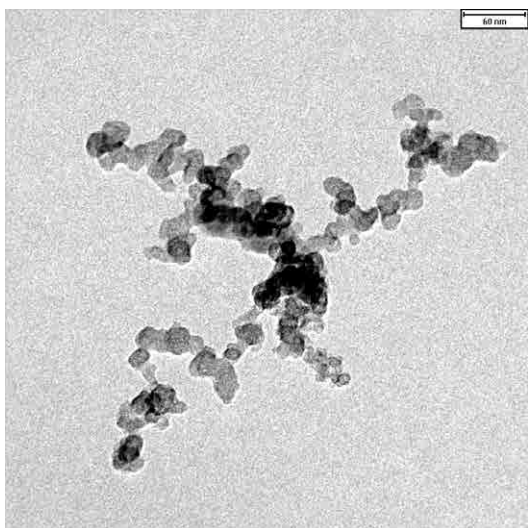
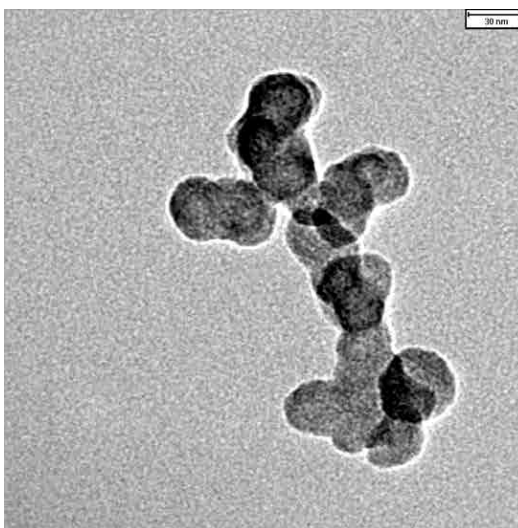
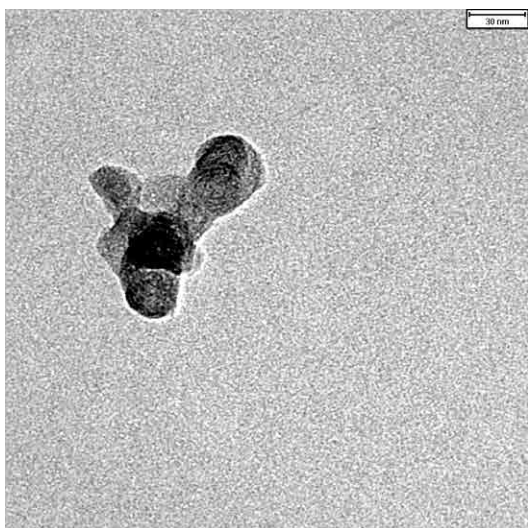
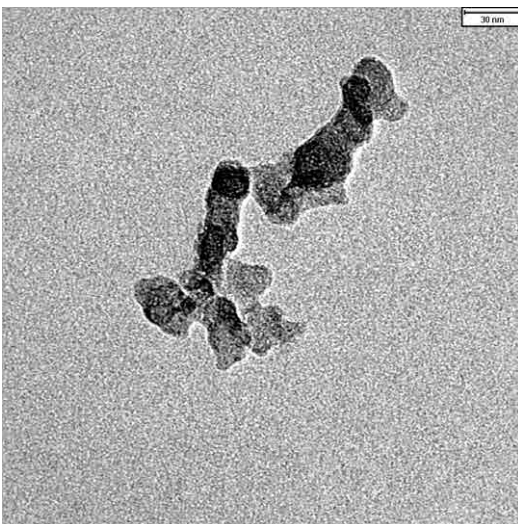
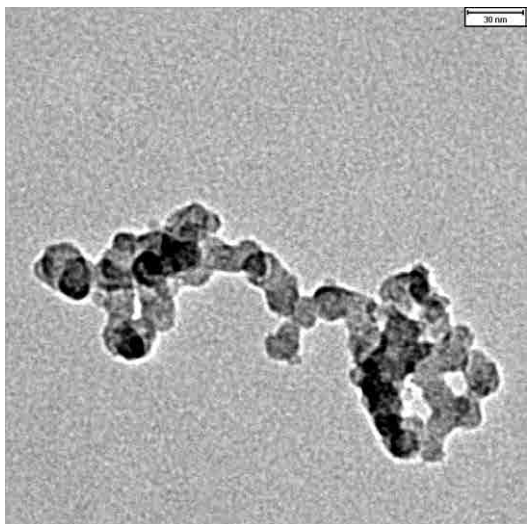
El estudio presentado en esta tesis requirió 1734 fotografías. Se muestran una selección de ellas en el epígrafe A.3.

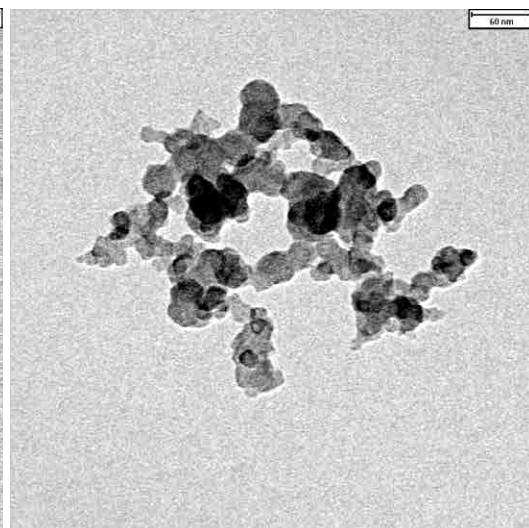
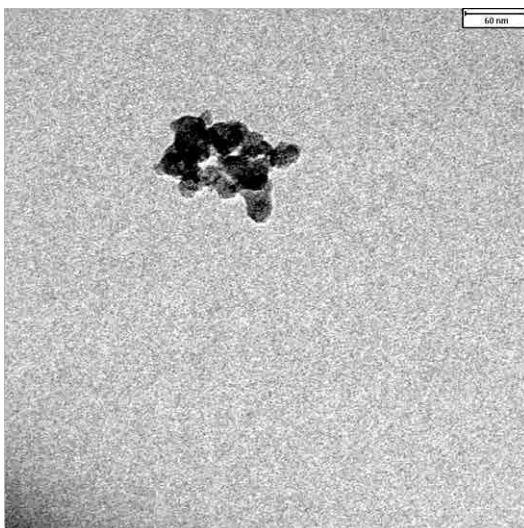
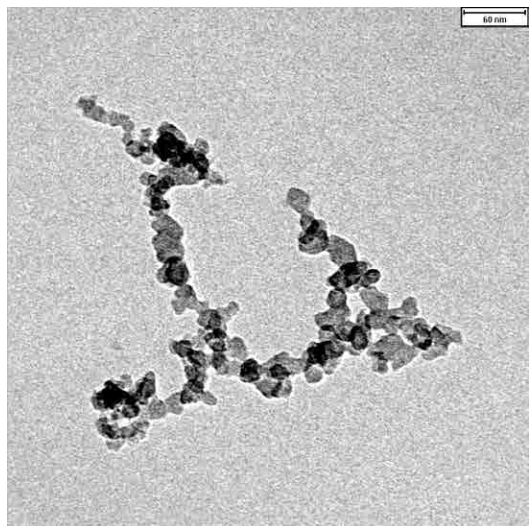
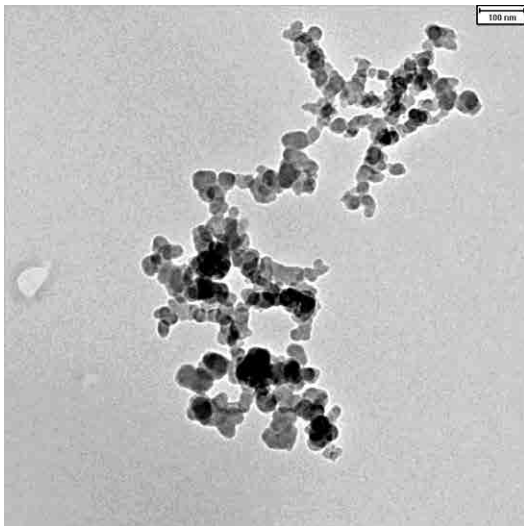
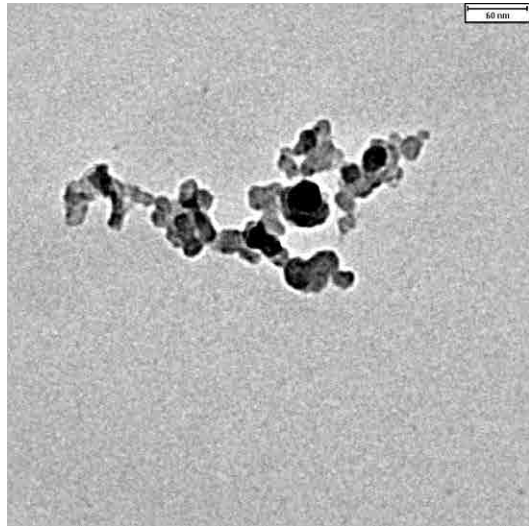
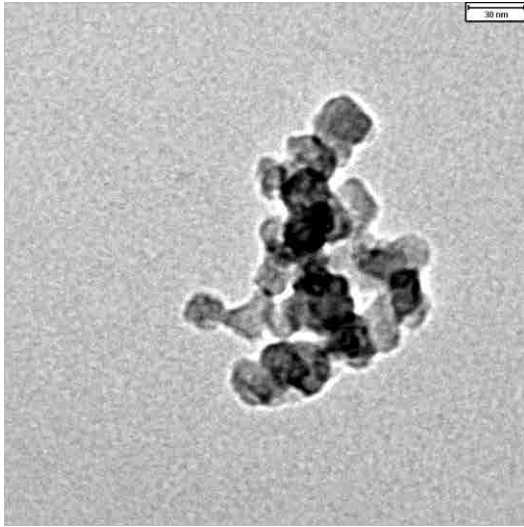
A.3. EJEMPLOS DE FOTOGRAFÍAS

Se muestran a continuación una selección de las 1734 fotografías de aglomerados de hollín realizadas con el Microscopio de Transmisión de electrones (TEM).









A.4. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Dobbins, R.A.; Megaridis, C.M. (1987). Morphology of flame-generated soot as determined by thermophoretic sampling. *Langmuir* **3**, 254-259.
- [2] Rosner, D.E.; Mackowski, D.W.; García-Ybarra, P.L. (1991). Size- and structure-insensitivity of the thermophoretic transport of aggregated soot particles in gases. *Combustion Science and Technology* **80**, 87-101.
- [3] Lee, K.O.; Cole, R.; Sekar, R.; Choi, M.Y.; Zhu, J.; Kang, J.; Bae, C. (2001). Detailed characterization of morphology and dimensions of Diesel particulates via thermophoretic sampling. *SAE paper*, 2001-01-3572.

Summary

1.	MOTIVATION.....	235
2.	OBJECTIVES.....	236
3.	METHODOLOGY.....	236
4.	DEVELOPMENT OF THE DOCUMENT.....	237
5.	INTRODUCTION TO THE METHOD PROPOSED	237
6.	HYPOTHESIS OF THE METHOD. REAL CASE.....	238
7.	PROPOSED METHOD	240
8.	APPARENT DENSITY OF THE AGGLOMERATE	246
9.	FIELD OF SOLUTIONS	246
10.	VALIDATION OF PROPOSED METHOD. REAL APPLICATION.....	248
	10.1. Introduction	248
	10.2. Consistency of the method.....	249
	10.3. Comparison with the results of direct regression	252

1. MOTIVATION

In recent decades there has been a marked increase in the use of diesel cars in Spain, as in Europe, and even in the world. This growth in the sale and use of diesel vehicles has been due to their reliability, low consumption and performance from its major competitor that is the gasoline engine. This increase is also due to various improvements that have taken place in this engine, in concepts that previously had major disadvantages compared to gasoline engines.

However, improvements are still pending in the field of emissions. In particular, the problem of these engines are emissions of nitrogen oxide and particulate (also called clusters). Due to the growing concern of society for the environmental aspect, the regulations limiting emissions of these two pollutants are increasingly restrictive and it is not easily reduced both simultaneously.

So far all regulations that have appeared limited mass emission of particles and, therefore, all efforts have been directed to implement measures to reduce the mass of particles emitted without special attention or the number of particles or the size or forms thereof. However it should be noted that the detrimental effects of the particles are greatly influenced by the size and shapes thereof, being most dangerous smaller. For this reason, Euro V regulations, which came into force in September 2009 and Euro VI, which entered into force in 2014, besides regulating the mass of particles the number of particles is regulated, and on a future also regulate the size.

These circumstances have led to a growing interest of the scientific community in the study of particulate emissions and their morphology.

It is precisely the important effects of morphology emitted particles on human health, on the environment and climate, justifying the realization of this research, with which it is achieved characterize a particular type of particle, granulated quasi-fractals, for example the particles emitted by a diesel engine or gasoline direct injection (GDI) engine. Such particles are emitted in processes of combustion in which oxygen molecules have very little time to react with the hydrocarbon molecules, so the particles who have failed to react with oxygen, and due to high temperatures combustion, suffer pyrolysis, resulting carbon (graphite), which is extremely carcinogenic and contaminant. Depending on the shape and size of these agglomerates, their impact will be greater or less, since the heavier particles will fall to the ground while the smallest may be inhaled or affect environmental pollution.

Therefore, as already it has indicated, because of the importance of morphological characterization of these particles, this doctoral thesis is proposed. As background to this work, there are experimental studies about morphological characteristics, but need a large population of agglomerates to determine the morphological characteristics of the population and not of individual agglomerates, and on the other hand there are models to determine the morphological characteristics of individual agglomerates, but these are based in setting parameters. However, in this doctoral thesis is proposed a complete model of morphological characterization of individual agglomerates, which is not based on any parameters set and also is fed of some experimentally measured variables.

2. OBJECTIVES.

The main objective of this thesis is to propose a model to determine the morphology of the diesel particles and in general any granular particle quasi-fractals. One of the aspects of the diesel particle morphology is the size thereof. This aspect has been studied in numerous works and measurement techniques are well developed, although these developments proceed of the field of environmental sampling, so applying this methodology to engine emissions is not unanimous. However, other morphological appearance of diesel particles as irregularity, does not have a method that quantifies without depend adjustment variables. It is for this reason that in this thesis, the theoretical-experimental method is proposed to quantify the irregularity of the individual particles and not depend in any adjustment variable.

3. METHODOLOGY

The methodological approach of this thesis is based on the combination of not too sophisticated experimental techniques with theoretical developments, also of low mathematical complexity, to achieve results that would be impossible to obtain from purely experimental or purely theoretical approaches, even in the case that these were much more complex than those raised here. In this sense, it can say that it has tried to use the synergy between experimental and theoretical techniques.

The experimental techniques used were the visualization of diesel particles by transmission electron microscopy (TEM, whose characteristics are shown in the Appendix), and further digital processing. The results of these techniques are geometrical parameters and are required for entry to the model proposed about particle morphology.

Therefore, with the geometric method proposed in this thesis, can determine all the morphological parameters of particles from the images obtained with the microscope.

All morphological study presented is based on sampling collected agglomerates in hot exhaust gas without dilution of the combustion process of a diesel engine, which is subject to a set of conditions easily controlled.

4. DEVELOPMENT OF THE DOCUMENT

The memory of this thesis consists of six chapters and this epigraph describes the development in each of them.

- Chapter 1. It is introduced and it is justified the realization of this research. Besides the followed methodology in the thesis is exposed.
- Chapter 2. The implications of the morphology and size of the diesel particles on the environment and public health are discussed. Different ways to define the size of these and typical distribution functions are discussed. And finally the fractal geometry and parameters are described to define the morphological characteristics of the particles
- Capítulo 3. It is describes and justifies the model created to determine the prefactor of power law and it is shows how it is part of the morphological characterization of the particles.
- Chapter 4. It is describes and justifies the model performed to determine the overlapping factor and the overlapping exponent
- Chapter 5. It is describes and justifies the method for determining the morphological characteristics of real particles from images obtained in transmission electron microscope.
- Chapter 6. The final conclusions of this document as well as a brief description of future work that may be performed in future research are shown.

5. INTRODUCTION TO THE METHOD PROPOSED

There are two different ways to proceed for the determination of morphological parameters, fractal dimension and number of primary particles of an agglomerate. The first is based on experimental data. These models are based on assumptions that are extremes, and sometimes also need a large population of agglomerates. The second way to obtain the morphological parameters of the agglomerates is by modeling phenomenological mechanisms.

Sometimes these phenomenological mechanisms are based on assumptions not too robust.

Apart from these two options, it is proposed in this research, an original method for calculating the fractal dimension of individual agglomerates, which can be classified as quasi-experimental. On one hand, the method has an experimental part, since it requires the characterization of the images of the particles, and on the other hand has a theoretical part because of the unseen part of the images are reconstructed using a model based on quasi fractal nature of the agglomerates. On the one hand, this method avoids having to take hypothesis own of the agglomeration models, and instead, as is purely geometric, it does not require controversial hypothesis, and on the other hand, allows the description of each particle individually, so the need to do a large number of trials only depends on the eventual dispersion of the experimental results, but not the method used.

6. HYPOTHESIS OF THE METHOD. REAL CASE.

The hypothesis of the method are as follows:

- Spherical primary particles. The primary particles making up an agglomerate approximately have spherical shapes. Can see the case of carbonaceous agglomerates produced by a typical automotive diesel engine. This statement is readily demonstrable from micrographs obtained by TEM, as shown in Figure 1.

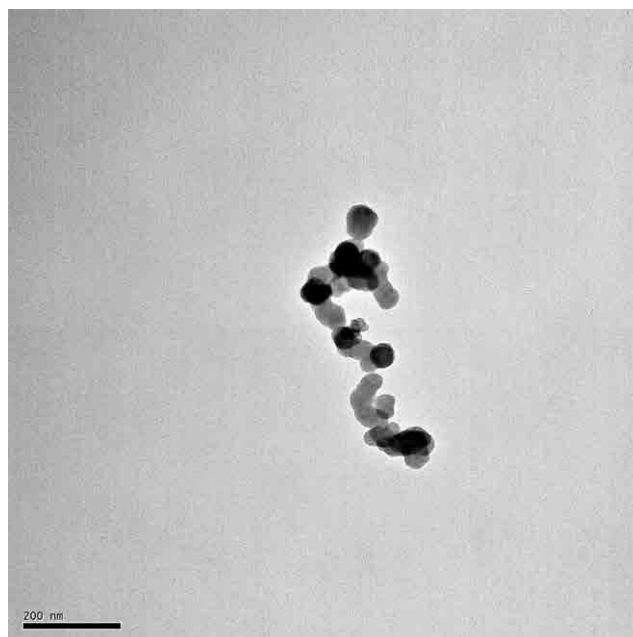


Figure 1. Photograph obtained with a TEM of a quasi-fractal agglomerate produced by a diesel engine and composed of spherical primary particles.

- Primary particles with uniform size. The primary particle sizes tend to be uniform in the same agglomerate and often change little when it is varied the conditions that generated this type of agglomerates. In addition, some authors have showed that the fractal structure of the agglomerates is not significantly affected by the distribution of the primary particles.
- Primary particles with homogeneous density. This hypothesis is based on photographs made to the internal structures of the primary particles, which show that the carbonaceous layers comprising the primary particles distant from each other are much less than the particle size, in fact the average distance between the carbonaceous layers is 0.34 nm.
- No sintering and crushing. It is assumed that collisions between primary particles do not affect the original geometry of these. This hypothesis is supported by the observation of the agglomerates, although the probable presence of a certain degree of sintering may slightly alter the results of this method.
- No preferential direction in the projections. It is assumed that the processes of collection of the particulates and microscopic analysis not tend to orient the agglomerates in any preferential direction. This hypothesis allows an unbiased probabilistic treatment to non-symmetrical agglomerates, such as the extreme case of agglomerates with fractal dimension equal to unity.

- Gyration radius of the projection equal to the three-dimensional particle. Some studies have shown that in analyzing projected images of the agglomerates, the gyration radius obtained are slightly different from the actual gyration radius of three-dimensional particles. The consideration the gyration radius obtained from the projected image may provide some small error in estimating the fractal dimension.

7. PROPOSED METHOD

From power law, equation (3.1), and the model the overlapping exponent, equation (4.218), it can develop a model to connect the number of primary particles and the fractal dimension of an agglomerate based only in two geometric variables, which they are the gyration radius and the projected area.

$$\begin{cases} n_{po} = k_f(n_{po}, D_f) \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f} \\ n_{po} = \left(\frac{A_p}{A_{po}} \right)^{z(n_{po}, D_f)} \end{cases} \quad (1)$$

In the equations shown in the equation (1), with an iterative method it is developed then, it can get the fractal dimension of the agglomerate.

Determined the fractal dimension of the agglomerate can be calculated the number of primary particles composing the agglomerate using either of the equations (1).

Obtaining the gyration radius and the projected area of the agglomerate is as follows:

1. Photograph of the agglomerate is obtained. In case of carbonaceous agglomerates produced by a diesel engine, it is utilized Microscopy Transmission Electron.
2. The scale of the photograph is measured and the number of pixels of this.
3. With the above scale can be measured actual lengths in the photography.
4. All the background image is cleaned, so that it does not affect in digital treatment. Once prepared the photographic, the image processing program developed calculates the gyration radius and

the projected area of the agglomerate. Furthermore, the average primary particle diameter is measured directly in the image.

Then, it is determined with the equation (1), the fractal dimension assuming, for the first time, that the number of primary particles tends to infinity, and therefore neither the prefactor of power law and nor the overlapping exponent depend on the number of primary particles. With this fractal dimension can be calculated by the power law the number of primary particles containing the agglomerate. Then, it is repeated the previous step, recalculating the fractal dimension with the number of primary particles newly calculated. This process is repeated until the result the fractal dimension of the current iteration is equal to the fractal dimension of the previous iteration with an error lower than 10^{-4} . In this case, it is when has found the desired solution. However, not always the iteration is converging.

When the number of primary particles tends to infinity, equation (3.86) simplifies to:

$$\begin{cases} A = \sqrt{3} \\ B = \frac{9}{5} = 1.8 \\ C = 1.5933 \end{cases} \quad (2)$$

Considering the terms stated in equation (2), the equations (3.87) are as follows:

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A - \frac{4}{11}B + \frac{3}{22}C = -0.04363 \\ b = -\frac{19}{22}A + \frac{13}{11}B - \frac{7}{22}C = 0.12446 \\ c = \frac{18}{11}A - \frac{9}{11}B + \frac{2}{11}C = 1.65123 \end{cases} \quad (3)$$

From equation (3.85) the prefactor of the power law is function of the fractal dimension, when the number of primary particles tends to infinity can be determined with the following equation and shown in Figure 2:

$$k_f = -0.04363 D_f^3 + 0.12445 D_f^2 + 1.65123 \quad (4)$$

In addition, the overlapping exponent, when the number of primary particles tends to infinity, is determined with the equation (4.239) simplified to:

$$\begin{cases} A = 1 \\ B = 1 \\ C = 1.5 \end{cases} \quad (5)$$

Considering the equations (5), the terms of equation (4.240) are as follows:

$$\begin{cases} a = \frac{5}{22}A - \frac{4}{11}B + \frac{3}{22}C = \frac{3}{44} \\ b = -\frac{19}{22}A + \frac{13}{11}B - \frac{7}{22}C = -\frac{7}{44} \\ c = \frac{18}{11}A - \frac{9}{11}B + \frac{2}{11}C = \frac{12}{11} \end{cases} \quad (6)$$

From equation (4.238), the overlapping exponent as function the fractal dimension, when the number of primary particles tends to infinity, can be determined with the following equation and shown in Figure 2:

$$z' = \frac{3}{44}D_f^3 - \frac{7}{44}D_f^2 + \frac{12}{11} \geq 1 \quad (7)$$

Note that since it is a polynomial model, the fit for fractal dimension between one and two, can result exponent values slightly below one. In this case, the value of the overlapping exponent will be one, since the concept of overlapping exponent lacks physical sense, when it is less than unity. The figure 3 show the diagram of the iterative process of calculating the fractal dimension of an actual agglomerate.

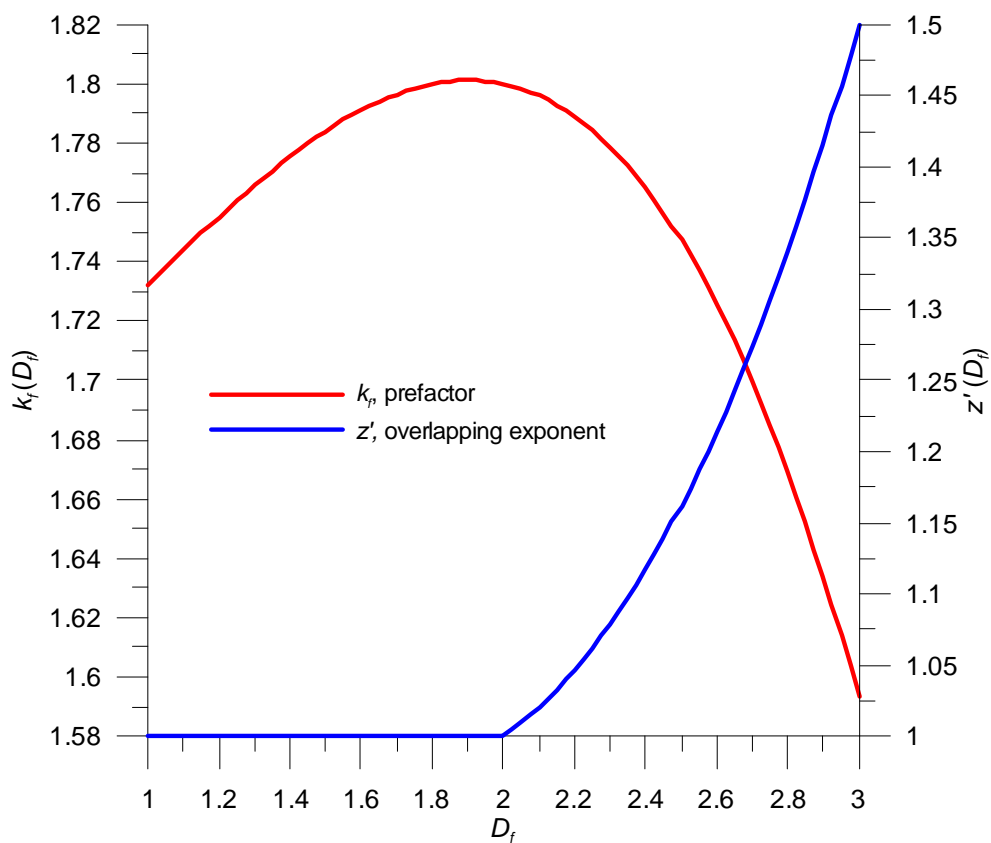


Figure 2. Prefactor of power law and overlapping exponent versus the fractal dimension, when the number of primary particles tends to infinity.

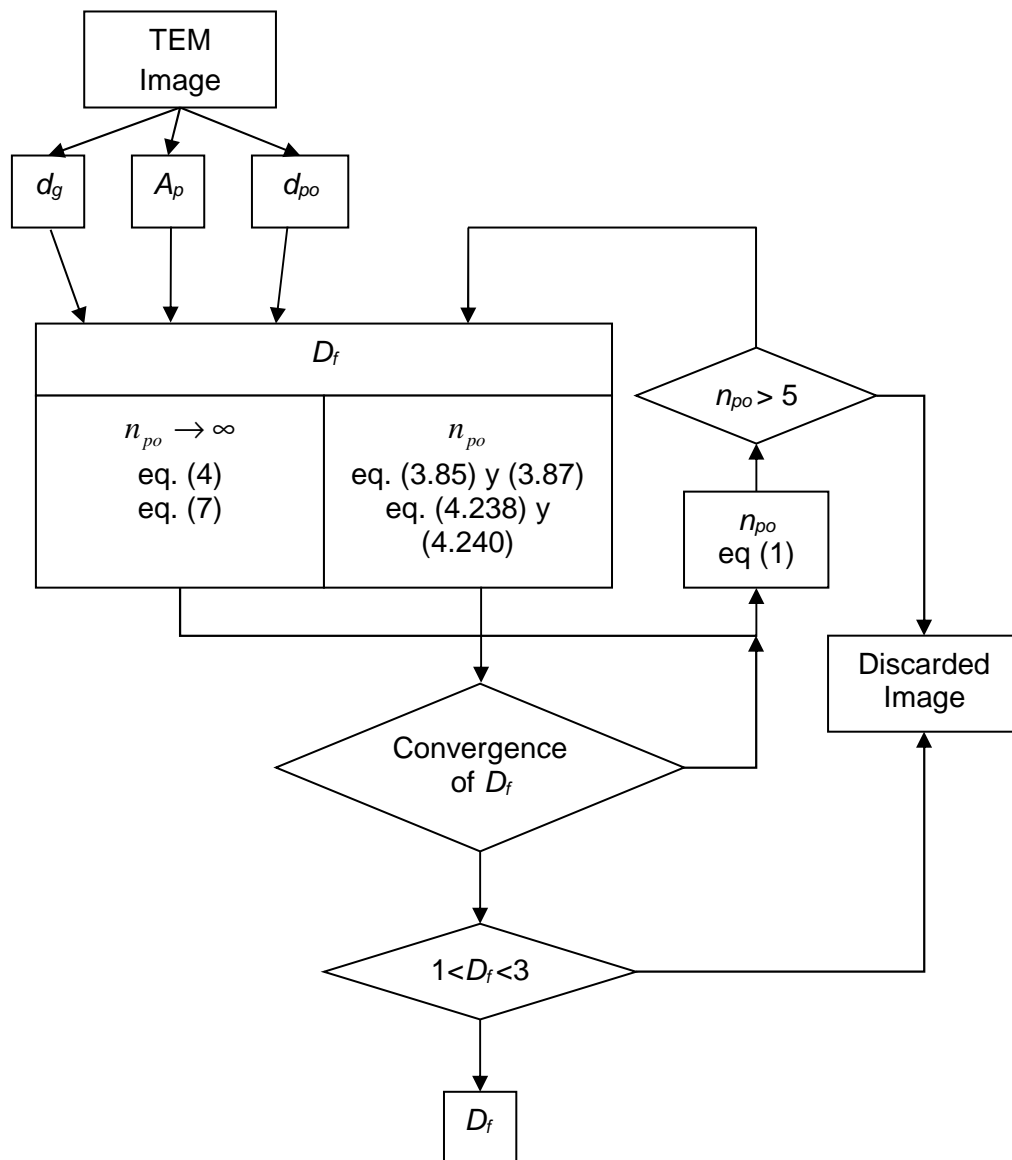


Figure 3. Block diagram for the iterative calculation.

As a result of the proposed model it has been determined the possible solutions of actual agglomerates with gyration diameter between 30 and 400 nm and projected area between 1000 and 50000 nm². Both the fractal dimension as the number of primary particles are shown in figures 4 and 5 respectively. It has been taken for this simulation an average primary particle size of 25 nm.

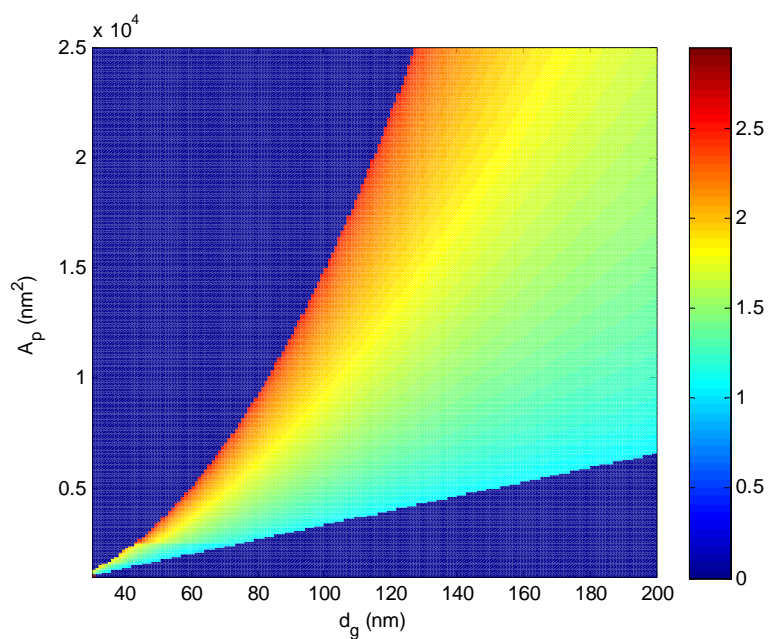


Figure 4. Fractal dimension versus projected area and gyration diameter of the agglomerates.

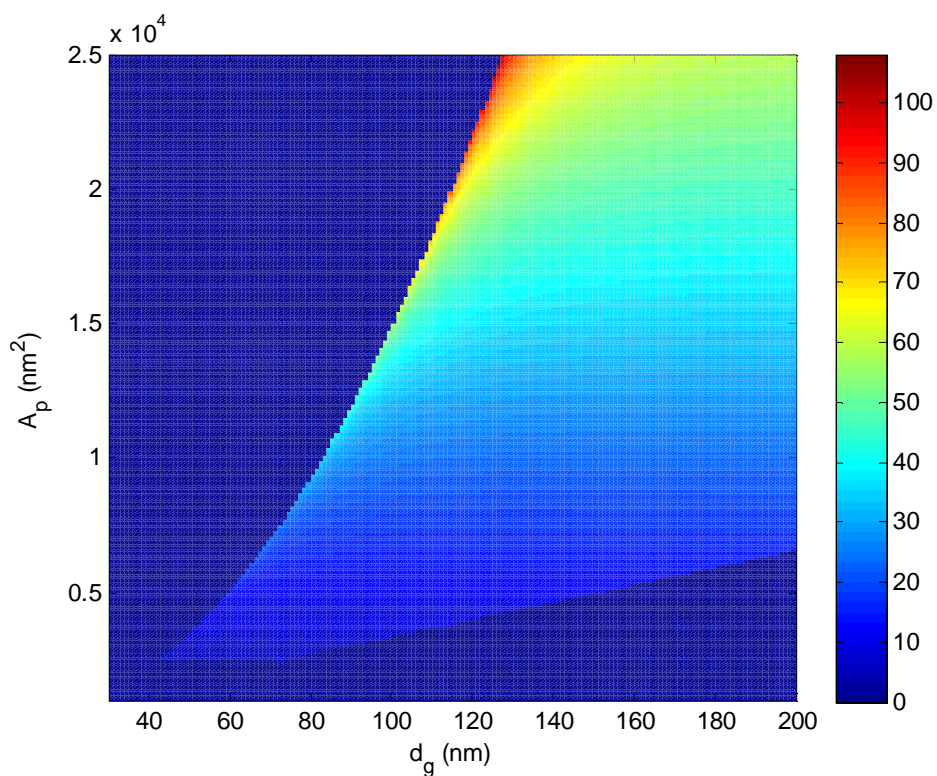


Figure 5. Number of primary particles with average size of 25 nm versus projected area and gyration diameter of the agglomerates.

8. APPARENT DENSITY OF THE AGGLOMERATE

As a secondary variable of the presented model, it can determine the apparent density of the agglomerate, defined as function of the gyration diameter of the agglomerate. The apparent density is defined as the mass of particles contained in the gyration volume, and thus can be obtained as follows:

$$\begin{aligned}\rho_p &= \frac{m_p}{V_g} = \frac{n_{po} m_{po}}{V_g} = n_{po} \frac{\frac{\pi}{6} d_{po}^3 \rho_h}{\frac{\pi}{6} d_g^3} = n_{po} \left(\frac{d_{po}}{d_g} \right)^3 \rho_h = \\ &= k_f \left(\frac{d_g}{d_{po}} \right)^{D_f - 3} \rho_h\end{aligned}\quad (8)$$

where ρ_h is the density particle as compact or not porous solid. For the case of soot agglomerates, it can be taken constant and equal to $1850 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$.

In this particular case, the importance of the apparent density of soot is that relates the size distribution functions with mass distribution functions, and therefore with the mass emissions of these. However it is necessary to note that this density is associated with the gyration diameter, while size distributions are associated with other definitions of particle diameter. Specifically, the distributions obtained in the SMPS (Scanning Mobility Particle Size) refer to electric mobility diameter, as need not correspond with the gyration diameter.

9. FIELD OF SOLUTIONS

Figure 6 shows the contours of constant fractal dimension, constant number of primary particles and constant apparent density of agglomerates (solution of the method) function of the gyration radius and of the projected area (experimental data of input).

The possible solutions of equation (1) are placed in the area enclosed between the lines of fractal dimensions 1 and 3, as shown in Figure 6. Line fractal dimension equal to 3 corresponds to the case of spherical particles, although for clarity in the figure, is shown as the isoline of higher fractal dimension D_f equal to 2.4, since the isolines with higher fractal dimensions are overlapped. Above the isoline fractal dimension equal to 3, there cannot exist any solution because an agglomerate can never project more area than a sphere projecting with the same gyration radius, or an agglomerate may not have less gyration radius than the sphere projecting the same area.

At the other end, the field of solution is limited by the line of fractal dimension equal to unity. It corresponds to a set of aligned primary particles whose overlap is hemispheric average of all possible orientations. This means that a agglomerate with the same gyration radius that chain-like particle with lower projected area is very unlikely, in particular, in applying this method, the image would be discarded by being out of the possible range of D_f . Neither an agglomerate can have more gyration radius that another with the same projected area.

In figure 6 it is seen that if the projected area is constant, the particles with larger gyration radius have less fractal dimension, so they are more irregular, and the smaller the gyration radius of a particle, more compact is, that is, higher is its the fractal dimension. Conversely, between two particles with equal radius of gyration, is more compact what has higher projected area and therefore its fractal dimension is higher, and vice versa.

Also it is shown the number of primary particles of the physically possible or probable agglomerates in figure 6. Agglomerates with the same project area, increased gyration radius implies a decrease both of the fractal dimension as of the number of primary particles. But as shown in figure 6, the larger the radius of gyration, the effect thereof on the number of particles is less, since the agglomerate in this area of the figure is very irregular, varying little overlap between the primary particles. In other hand, to gyration radius constant, an increased projected area it implies in any case a significant increase of the number of primary particles.

The represented abacus is useful for viewing possible solutions of the method from the measured variables from the microscopic images. Besides, direct use could replace the proposed numerical method, but it is not advisable, because of the loss of precision.

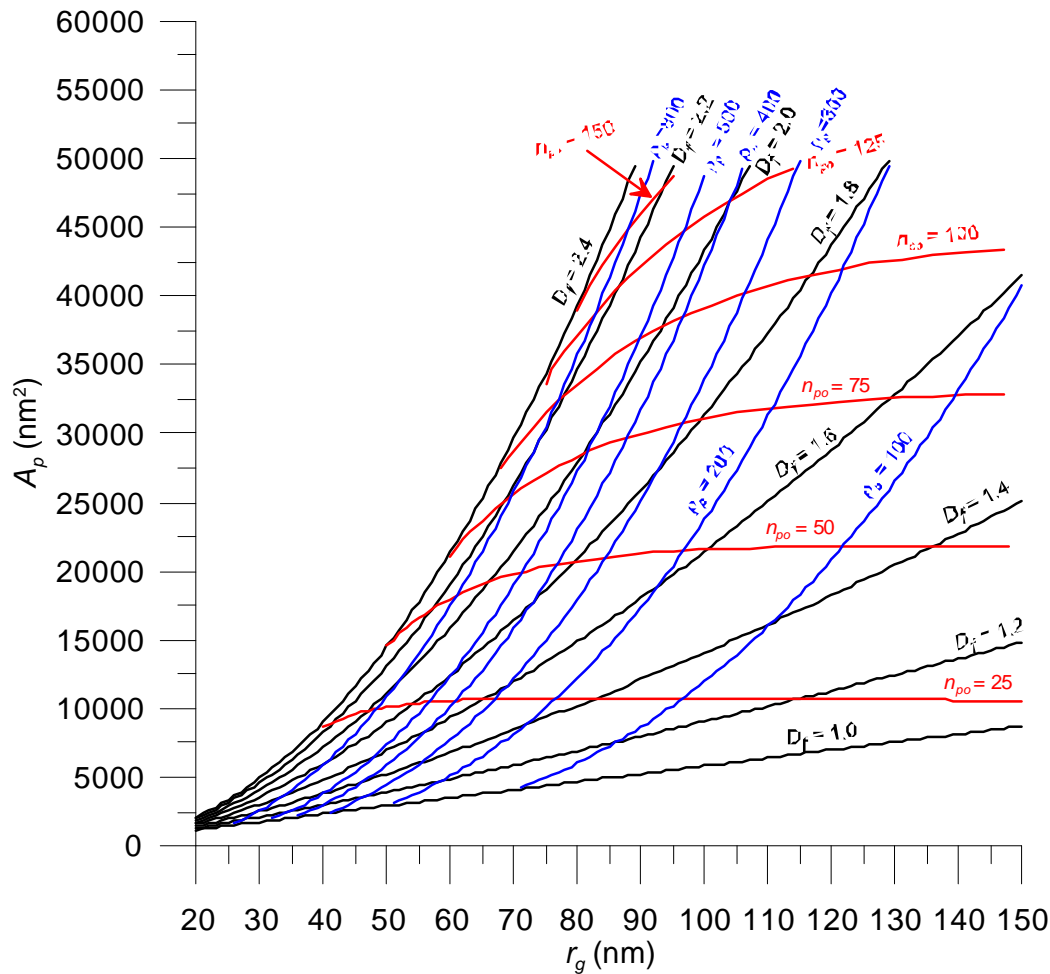


Figure 6. Abacus of possible solutions that characterize the agglomerates. Isolines of fractal dimension, number of primary particles and apparent density ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$).

10. VALIDATION OF PROPOSED METHOD. REAL APPLICATION

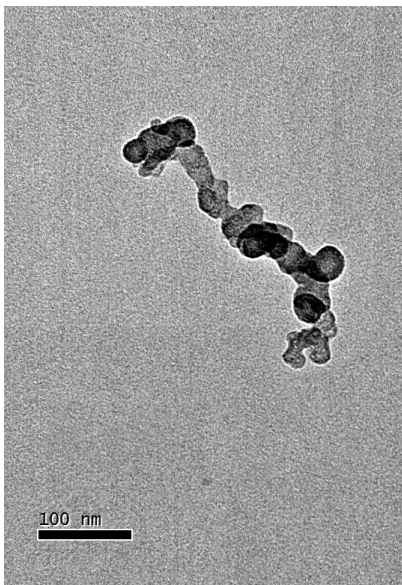
10.1. INTRODUCTION

The validation of the developed method cannot be performed by direct comparison of its results with known data because of cannot be measured with certainty the actual geometry of the particles sampled. Some authors have attempted to validate their models using different photographs of the same agglomerate obtained from different angles. In any case, it always is necessary the reconstruction of geometry from data available. In this case, it has decided to make a qualitative assessment based on the following criteria:

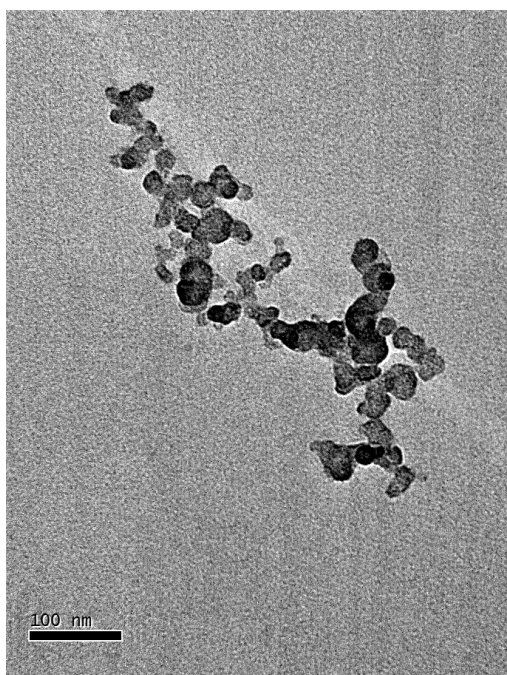
- Consistency of method, so there is a guarantee that the results of fractal dimension obtained in all cases is unambiguous measure of the irregularity of the agglomerates.
- Comparison with results from other methods proposed in the literature, usually based on statistical regressions between variables directly measured (projected area and radius of gyration) and comparing these regressions with the power law, characteristic of fractality of the agglomerates.

10.2. CONSISTENCY OF THE METHOD

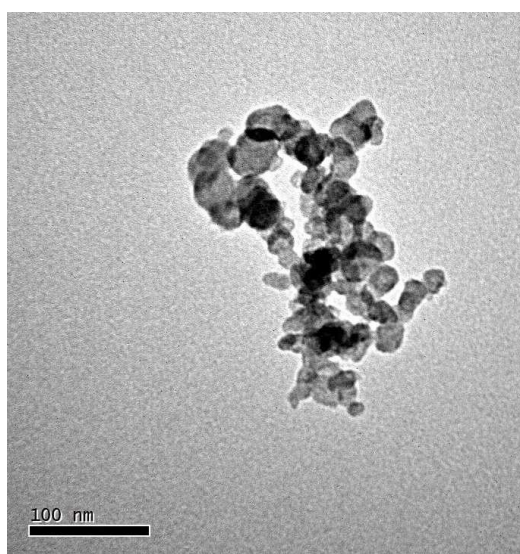
Figure 7 shows four examples of implementing the proposed method. The four photographs have been selected because of they provide different fractal dimensions between them. In addition to the gyration diameter and projected area, both determined from each digital image processing, it is included the resulting values of the fractal dimension, number of primary particles and apparent density.



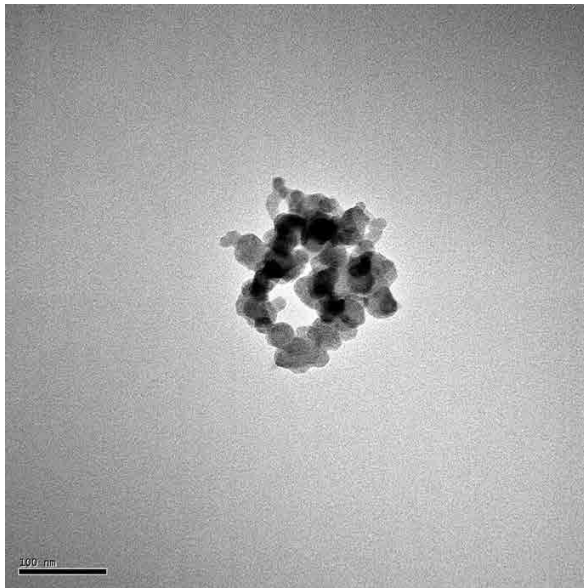
d_g (nm)	199.36
A_p (nm ²)	11890.30
D_f	1.3247
n_{po}	28
ρ_p (kg/m ³)	100.51



d_g (nm)	291.13
A_p (nm ²)	29300.20
D_f	1.4779
n_{po}	67
ρ_p (kg/m ³)	78.38



d_g (nm)	161.87
A_p (nm ²)	23384.40
D_f	1.8573
n_{po}	58
ρ_p (kg/m ³)	392.41



d_g (nm)	139.18
A_p (nm ²)	22518.60
D_f	2.0512
n_{po}	61
ρ_p (kg/m ³)	649.49

Figure 7. Diesel agglomerate photographs with different D_f .

In the previous figure it can be seen that the proposed method provides a fractal dimension value very different depending on the irregularity of the particles. Consequently, the calculated fractal dimension is a consistent measure of the irregularity of the agglomerates.

The above cases are just an example of 1734 photographs of agglomerates to which the model has been applied. Have been obtained 1616 valid photographs, comprising 93% of cases, and have been rejected 118 photographs, corresponding to 7% of cases, to being out of range, that is, $n_{po} < 5$, since the model is applied to fractal geometry and it needs a minimum of primary particles, and too they are discarded those pictures where $1 < D_f < 3$, which are few of them. By applying the method they were obtained values fractal dimension and number of primary particles shown on the abacus, figure 8. The average obtained fractal dimension is 1.8035 and the average number primary particle is 53, this values usually are close to those reported in the literature dealing with the soot from diesel engines.

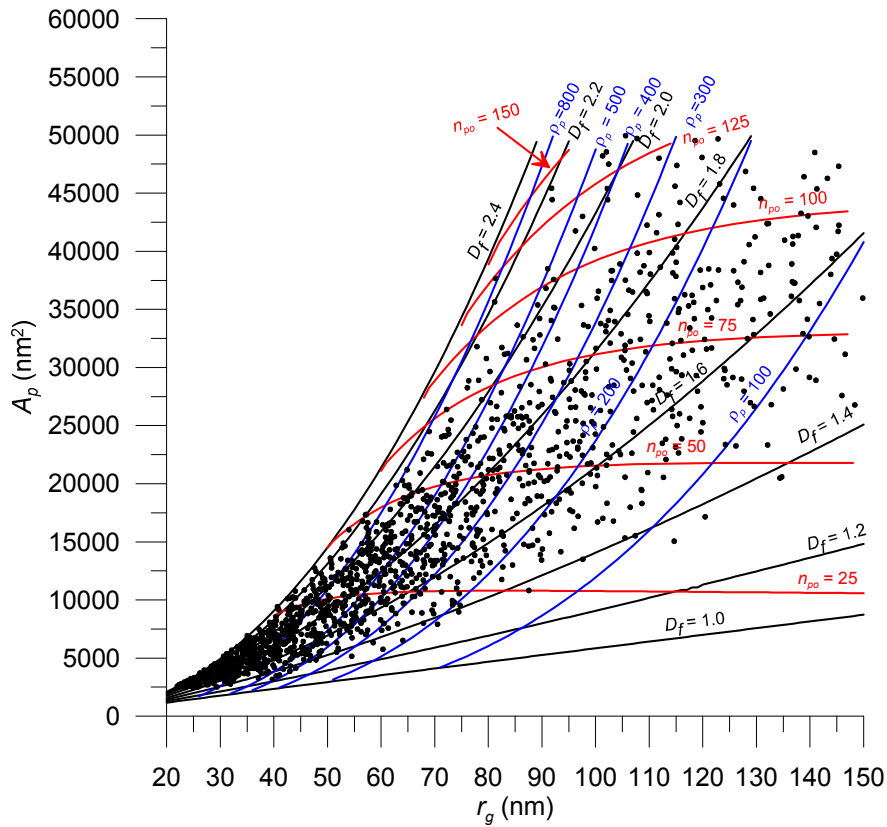


Figure 8. Abacus possible solutions including the location of 1616 valid images.

10.3. COMPARISON WITH THE RESULTS OF DIRECT REGRESSION

This section is intended to compare the potential of the method presented with the usual methods of the literature, based on direct regressions between the projected area and the dimensionless radius of gyration for the entire population of particles sampled. So it has been taken 1734 photographs used in this thesis, and it has been represented the relationship between the projected area of each agglomerate and the projected area of a primary particle versus the ratio between gyration diameter of each agglomerate with the diameter of the primary particle, figure 9.

Applying logarithms to equation (1), is obtained:

$$\ln \frac{A_p}{A_{po}} = \frac{D_f}{z'} \ln \frac{d_g}{d_{po}} + \frac{1}{z'} \ln k_f \tag{9}$$

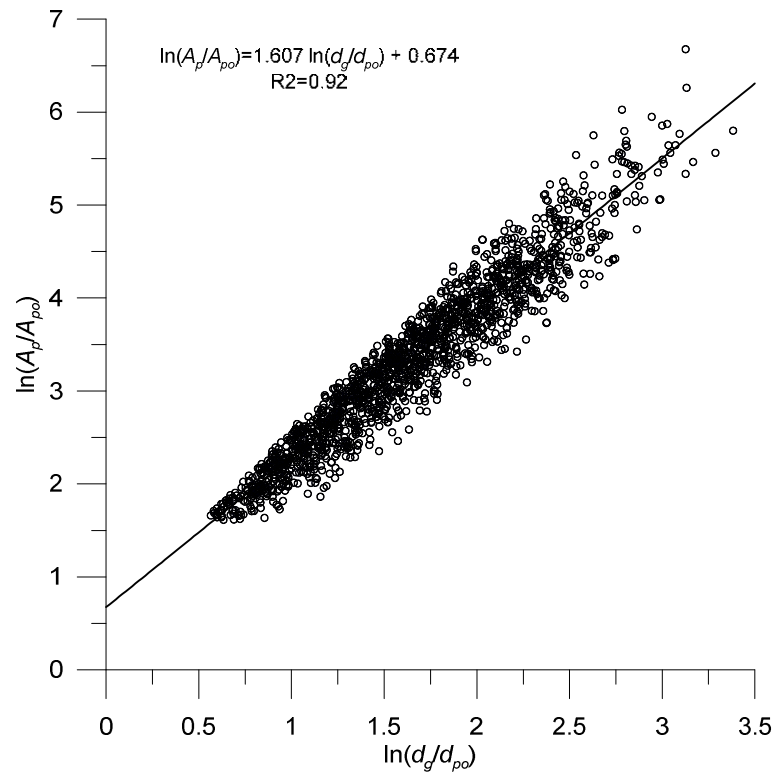


Figure 9. Obtaining the average fractal dimension, average overlapping exponent and average prefactor of power law.

The values of the slope and intercept of the line of regression can be identified with the ratio between the average fractal dimension of the entire population of agglomerates and the average overlapping exponent, and the ratio between the average natural logarithm of the prefactor of power law and average overlapping exponent, respectively. This way of getting information from the linear fit, which is very common in the literature, it does not allow the determination of average D_f and k_f , unless a value of z' is assumed. As well as, it is not suitable to describe the irregularity of specific particles or small groups of them. Finally, this method is imprecise, as evidenced by the fact that substantial changes of the parameters $\bar{D}_f, \bar{k}_f, \bar{z}'$ the fit coefficients not significantly worsen. These three reasons make it difficult the study of effects affecting on the irregularity of the agglomerates in detail, using this method of linear fit.

However, this method has been applied to all images of agglomerates, with the sole purpose of comparing the average values obtained with the average values results of the proposed model. Utilizing the 1616 valid photographs, it has been obtained the average of the relation between the fractal dimension and the overlapping exponent for each agglomerate and average of the relation between the prefactor of power law and the overlapping exponent, too for each agglomerate. These results are shown in table 1.

As seen, the average value obtained from the model is close to that obtained using the experimental method more referenced in literature. It is observed that the method based in direct regression underestimates slightly the fractal dimensions respect to obtained by a geometric analysis to each agglomerate, and significantly overestimates (note that the differences obtained are logarithmic) the number of primary particles (calculated from prefactor) constitutes the agglomerates. The aforementioned underestimation of the fractal dimension obtained by direct regression from flat images confirms the observations of some authors.

Therefore be concluded that the proposed method is more reliable than direct regression methods, and improvement estimating the fractal dimension, and especially the number of primary particles, because of being based on the geometric analysis of each particle for separate.

Table 1. Comparison of the results obtained by the two methods.

	Average results of the proposed method		Results by direct regression
$\overline{D_f / z'}$	1.703	$\overline{D_f} / z'$	1.607
$\overline{\ln(k_f) / z'}$	0.544	$\ln(\overline{k_f}) / z'$	0.674

Conclusions and Future Work

1.	CONCLUSIONS	257
1.1.	Introduction.....	257
1.2.	Conclusions concerning the prefactor of power law	257
1.3.	Conclusions concerning the overlapping exponent	258
1.4.	Conclusions about the method for characterization the irregularity of particle	259
2.	SUGGESTIONS FOR FUTURE DEVELOPMENTS.....	259

1. CONCLUSIONS

1.1. INTRODUCTION

As a novelty, it can say that with this work has achieved from some simple hypothesis described in Chapter 5, characterize the morphology of granular agglomerates individual quasi-fractals. Until now they could only be characterized a population of individual agglomerates and no single agglomerates, or to characterize individual agglomerates, it is needed complex hypothesis, so the results obtained are not reliable.

To check the effectiveness of the proposed method to solve the equation 5.1, it is used a set of grids impregnated soot agglomerates. These grids have been obtained by introducing a thermoforetic probe (A.2.1 of Appendix) in the exhaust pipe of a diesel engine installed on a test bench. After being analysed these grids in the transmission electron microscope, TEM, a number of agglomerates have been selected at random. These agglomerates have been photographed. Have been studied 1734 photographs of agglomerates (a selection of them are in A.3 of Appendix). From these photographs, it can calculate the projected area, A_p , and the gyration diameter, d_g . Introducing these data in the proposed model, equation (5.1), both the number of primary particles, as the fractal dimension, have been obtained. The agglomerate has being fully characterized.

In order to solve the equation (5.1), it have had to study the prefactor of power law, k_f , and the overlapping exponent, z' , chapters 3 and 4, respectively. In both studies, polynomial models are shown in equations (3.85) and (4.238).

1.2. CONCLUSIONS CONCERNING THE PREFACTOR OF POWER LAW

As seen, agglomerated with a similar size and fractal dimension can have very different shapes. The prefactor of power law characterizes this difference. In chapter 3 has studied the behaviour of prefactor of power law and its physical implications in the agglomerate.

- The prefactor has been analysed for different cases of substructures with known integer fractal dimension, $D_f = 1$, $D_f = 2$, $D_f = 3$. The prefactor has been analysed for different cases of substructures with known integer fractal dimension, equation (3.85).
- When the number of primary particles is very high, the limits the prefactor are proportional to the number of elementary structures, N , and to compaction of the agglomerate, even if the fractal dimension remains

unchanged. This justifies that the prefactor has physical sense and can be expressed as lacunarity.

- Finally, it has been observed that the prefactor is very stable with variation of fractal dimension when the number of primary particles exceeds 20, and happens the same when such variation D_f is between 1 and 2.6.
- Knowing the gyration diameter of a real agglomerate, it can be known the relationship between the number of primary particles and the fractal dimension of this. In addition, it is deduced that the larger the fractal dimension, keeping constant the number of primary particles, the gyration diameter is smaller.
- Therefore, it is demonstrated that the prefactor of the power law and the fractal dimension characterize morphologically the agglomerate.

1.3. CONCLUSIONS CONCERNING THE OVERLAPPING EXPONENT

In chapter 4 the overlapping exponent is modelled following the same procedure as for the prefactor of the power law.

- It has analysed the overlapping exponent, z' , for different cases of substructures for integer fractal dimension, $D_f = 1$, $D_f = 2$, $D_f = 3$, and it has obtained equations of z' , corresponding to these conditions. Considering this, it has established a polynomial fit model with three parameters, wherein the overlapping exponent is a function of the fractal dimension and the number of primary particles composing the agglomerate, equation (4.238).
- It is noted that the overlapping exponent is very stable with variations in the number of primary particles when the number of primary particles is greater than 20. Similarly, z' is very stable with variation of fractal dimension, when D_f is between one and two. However, variations of the overlapping exponent are more pronounced with the fractal dimension, when this exceeds the value of 2.2.
- It can be said that if the projected area of a real agglomerate is known, it can be known the relationship between the number of primary particles and the fractal dimension of this agglomerate.
- Therefore, it has determined how it is related to the overlapping exponent with the number of primary particles and the fractal dimension to real agglomerates with completely irregular structures.

1.4. CONCLUSIONS ABOUT THE METHOD FOR CHARACTERIZATION THE IRREGULARITY OF PARTICLE

The following highlights the findings more important that have been obtained regarding the method proposed of characterization of the irregularity of the particles

- It has raised a geometric method for determining the fractal dimension and the number of primary particles. This method determine some morphological characteristics for each particle, such as the fractal dimension, the number of primary particles and the apparent density of the agglomerate. The method is of potential type, and also to express the overlap between primary particles and provides a wider range of solutions, and therefore increased sensitivity. The proposed method has exact solution in the boundary conditions and predicts the irregular behavior of the agglomerates in the intermediate zones.
- In addition, the proposed method, which is based on direct geometric analysis of each particle separately, is more reliable than the methods proposed in the literature, based on direct regression on a set of results. Since these methods are both inaccurate, because of use a constant overlapping exponent for all particles ($z'= 1.09$), which can lead to errors in the results.

2. SUGGESTIONS FOR FUTURE DEVELOPMENTS

Along the same lines of what has been studied in this thesis,

- It is proposed to review some hypothesis used in the method of morphological characterization. In particular, it aims to estimate the effect it would have on the fractal dimension of the agglomerates, consideration of crushing suffered by the primary particles as result of their collisions, and the effect of distinguishing the gyration radius of the projected image of the real agglomerate.
- Observing another hypothesis of the method, it is proposed to study the effect of non-sphericity of the primary particles on the results of applying the method of morphological characterization of the agglomerates
- It could develop phenomenological models that reproduce the collisions between primary particles and agglomerates.
- It could apply to method proposed to agglomerates that do not come from the combustion of a diesel engine