

VERS UNE COMPARAISON DES MODELES DE DIAMETRE DE MOBILITE DES AGGREGATS FRACTALS

J. Yon^{*1}, T. Thajudeen² et A. Singh²

¹ INSA Rouen Normandie, Univ Rouen Normandie, CNRS Normandie Univ, CORIA UMR 6614, 76800, St Etienne du Rouvray, France

²School of Mechanical Sciences, Indian Institute of Technology Goa, 403401, Goa, India

*Courriel de l'orateur : yon@coria.fr

TITLE

Towards a comparison of fractal aggregate mobility diameter models.

ABSTRACT

Granulometric measurement of nanoparticles primarily relies on commercial devices that classify particles by electrical mobility, balancing hydrodynamic drag in laminar airflow with a transverse electric force. For spherical particles, mobility directly correlates with geometric diameter, but non-spherical particles—particularly fractal aggregates composed of nearly spherical primary spheres—complicate this relationship.

To address this, shape factors have been introduced to estimate the volume-equivalent spherical diameter from mobility. However, fractal aggregates, characterized by scaling laws, require relationships between mobility diameter and morphological descriptors (e.g., number and radii of primary spheres, fractal dimension, and prefactor). Despite extensive research, discrepancies among models persist, keeping this an active field of investigation.

This document reviews the latest advanced approaches, presenting them in a unified, simplified analytical framework to facilitate model comparison and deepen physical understanding. We propose a novel, unified analytical expression for the mobility diameter of fractal aggregates, valid across diverse morphologies, temperatures, and flow regimes. This model is practical and readily implementable in post-processing codes for real-world applications.

RESUME

La mesure granulométrique des nanoparticules repose principalement sur des dispositifs commerciaux qui classifient les particules selon leur mobilité électrique, en équilibrant la traînée hydrodynamique induite par un écoulement laminaire avec une force électrique transversale. Pour les particules sphériques, la mobilité est directement corrélée au diamètre géométrique. Cependant, pour les particules non sphériques — en particulier les agrégats fractals composés de sphères primaires quasi sphériques — les choses se compliquent.

Pour remédier à cela, des facteurs de forme ont été introduits. Toutefois, les agrégats fractals, caractérisés par des lois d'échelle, nécessitent des relations entre le diamètre de mobilité et des descripteurs morphologiques (par exemple, le nombre et les rayons des sphères primaires, la dimension fractale et le préfacteur). Malgré des recherches approfondies, cette problématique reste un sujet d'investigation toujours actif avec la coexistence de nombreux modèles qui sont rarement comparés.

Ce document passe en revue les approches avancées les plus récentes, en les présentant dans un cadre analytique unifié et simplifié pour faciliter leur comparaison et approfondir la compréhension physique. Nous proposons une nouvelle expression analytique unifiée pour le diamètre de mobilité des agrégats fractals, valable pour une large gamme de morphologies, de températures et de régimes d'écoulement. Ce modèle est pratique et directement intégrable dans les codes de post-traitement pour des applications réelles.

KEYWORDS: Agrégats fractals, diamètre de mobilité, SMPS / **MOTS-CLES :** Fractal aggregates, mobility diameter, SMPS.

1. INTRODUCTION

Le diamètre de mobilité (D_m) est le paramètre de taille le plus utilisé pour caractériser les nanoparticules, notamment grâce à l'utilisation généralisée des Scanning Mobility Particle Sizers (SMPS) depuis les années 1980. Ces dispositifs classifient les particules en fonction de leur mobilité électrique, qui dépend de l'équilibre entre la force de traînée hydrodynamique et une force électrique transversale.

Pour les particules sphériques, la relation entre la traînée et le diamètre géométrique, qui se trouve correspondre au diamètre géométrique, est bien établie :

$$F = \frac{f_{cont} v_r}{C_c(D_m)}$$

avec :

- $f_{cont} = 3\pi\mu D_m$ est le facteur de friction en régime continu,
- v_r est la vitesse relative de la particule,
- C_c est le facteur de Cunningham, qui corrige les effets du régime d'écoulement en fonction du nombre de Knudsen ($\text{Kn} = \frac{2\lambda_{gas}}{D_m}$).

Cependant, pour les particules non sphériques, en particulier les agrégats fractals composés de sphères primaires quasi sphériques, cette relation devient complexe.

Les agrégats fractals sont des particules dont la masse ou le volume suit une loi d'échelle :

$$N_p = k_f \left(\frac{R_g}{R_p} \right)^{D_f}$$

avec :

- N_p est le nombre de sphères primaires de rayon R_p ,
- R_g est le rayon de giration (paramètre géométrique indépendant du gaz ou du régime d'écoulement),
- R_p est le rayon des sphérules primaires,
- D_f est la dimension fractale (caractérise la compacité globale de l'agrégat),
- k_f est le pré-facteur fractal (caractérise la compacité locale).

Pour ces agrégats, le diamètre de mobilité ne correspond pas directement à un diamètre géométrique équivalent, ce qui complique l'interprétation des mesures.

Sorensen a proposé un état de l'art en 2011 (Sorensen, 2011) permettant de tirer quelques grandes tendances pour des agrégats générés par diffusion (DLCA, $D_f = 1.78$, $k_f = 1.3$, à température ambiante). Il a proposé un formalisme pour les régimes asymptotiques mais pas de formulation claire en régime intermédiaire. En 2015, Yon et al. (Yon et al., 2015) ont modélisé des mesures de densité effective aboutissant à un formalisme analytique, semi-empirique du diamètre de mobilité. Ils ont observé que le changement de régime était piloté par le nombre de Knudsen calculé sur le diamètre des sphérules primaires $K_n(D_p) = \lambda_{gas}/R_p$. Cependant, ce modèle, bien que pratique, n'est éprouvé que sur une gamme de dimension fractale restreinte (similaire à Sorensen) et à température ambiante.

Entre temps, des méthodes numériques ont fait du chemin. On dénombre deux grandes familles : Les méthodes Monte-Carlo (DSMC) et celles reposant sur la théorie de Kirkwood-Riseman (K-R), chacune évaluant la mobilité dans les régimes asymptotiques. La transition de régime est faite de différentes façon selon les auteurs. Singh et al. (Singh et al., 2024) ont utilisé la méthode DSMC initialement introduite par Zhang et al. (Zhang et al., 2012) et ont utilisé une fonction de Cunningham reposant sur un paramètre de taille permettant de converger vers la solution asymptotique en régime moléculaire. Corson et al. (Corson et al., 2017) ont utilisé la méthode K-R et ont fait appel à une fonction harmonique pour extrapoler leurs résultats dans les régimes intermédiaires.

En revanche, aucune étude n'a encore permis de comparer ces calculs, modèles ou résultats expérimentaux permettant de montrer ou d'invalider leur cohérence. La présente analyse a pour objectif de proposer une méthodologie d'interprétation commune des résultats en vue d'une inter-comparaison des différents modèles. On s'intéresse ici à appliquer cette méthodologie aux résultats numériques récemment obtenus par (Singh et al., 2024). L'inter-comparaison des résultats sera présentée lors de la conférence.

2. METHODOLOGIE

La méthodologie adoptée consiste à interpréter les résultats numériques de type DSMC générés obtenus par Singh et al. (Singh et al., 2024) à l'aide d'un formalisme permettant leur inter-comparaison avec les résultats obtenus par Corson (Corson et al., 2017) via la méthode K-R ainsi qu'avec les résultats de mesure de densité effective (Yon et al., 2015). Le présent document détaille cette méthodologie.

Singh et al ont ainsi développé une base de données permettant d'évaluer le diamètre de mobilité des agrégats fractals générés par FracVal (Morán et al., 2019), couvrant ainsi une large gamme de dimensions et de préfacteurs fractals. Afin d'en tirer une modélisation analytique, pour chaque D_f , k_f , R_p , on interprète les diamètres de mobilité d'un ensemble d'agrégats de taille variable (N_p) sous la forme de densité effectives. La

densité effective correspond à la masse de la particule divisée par le volume de la sphère ayant pour diamètre le diamètre de mobilité.

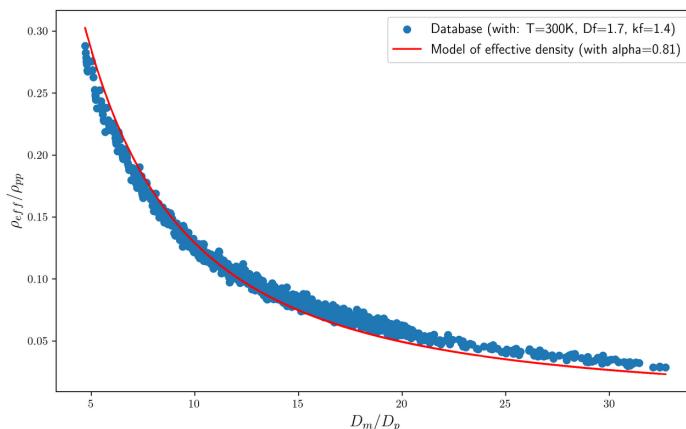


Figure 1. Exemple de courbe de densité effective et sa modélisation.

Pour chaque configuration morphologique, on ajuste un modèle de densité effective (courbe rouge dans la figure 1) en recherchant la variable α répondant à la formulation suivante :

$$F_{agg} = F_{mono} \times N_p^\alpha$$

Ce formalisme simple suppose que la force de trainée de l'agrégat est proportionnelle à celle agissant sur une sphérule isolée et proportionnelle au nombre de sphérules porté à la puissance α .

Cette opération est répétée pour de nombreuses configurations morphologiques et les tendances observées sont interprétées et ajustées de façon à proposer un modèle empirique qui permettra, à terme, de comparer les résultats avec les autres approches.

3. RESULTATS

On constate tout d'abord que α ne dépend principalement que de la dimension fractale et non pas de son préfacteur. Par la suite, pour chaque D_f , les grandeurs reportées sont donc moyennées sur l'ensemble des préfacteurs k_f . On reporte dans la figure 2, les valeurs ainsi obtenues de α en fonction de la dimension fractale pour différents diamètres de sphérules primaires (dans des conditions de température et de pression ambiante).

Il ressort clairement de cette figure que α présente une dépendance en loi de puissance par rapport à D_f de la forme $\alpha = A \times D_f^{-B}$, au moins pour la plage $1,3 \leq D_f \leq 2,5$ (domaine bleuté). Cette modélisation simple revêt une signification physique intéressante. En effet, en extrapolant le comportement observé jusqu'à $D_f = 1$, le paramètre A peut être considéré comme le paramètre α pour des agrégats en forme de chaîne ($D_f = 1$). Il semble que ce paramètre soit plus grand pour les petites valeurs de D_p (et, non montré ici, proche de 1), puis diminue lorsque D_p augmente. Cela indique que dans un régime quasi moléculaire (petite valeur de D_p par rapport à λ_{gas}), chaque sphère primaire a un effet quasi additif en termes de force de traînée (effet de masquage négligeable). Lorsque D_p augmente, la diminution observée de A indique que la circulation du flux est affectée près les contacts entre les sphères primaires adjacentes le long de la chaîne, ce qui réduit l'efficacité de la force de traînée globale. Ainsi, ce comportement semble intrinsèquement déterminé par un changement de régime d'écoulement régi par l'échelle des sphères primaires. Sur la base de ce principe, nous avons ajusté une fonction de transition régie par $K_n(D_p)$ permettant la modélisation présentée dans la figure 2.

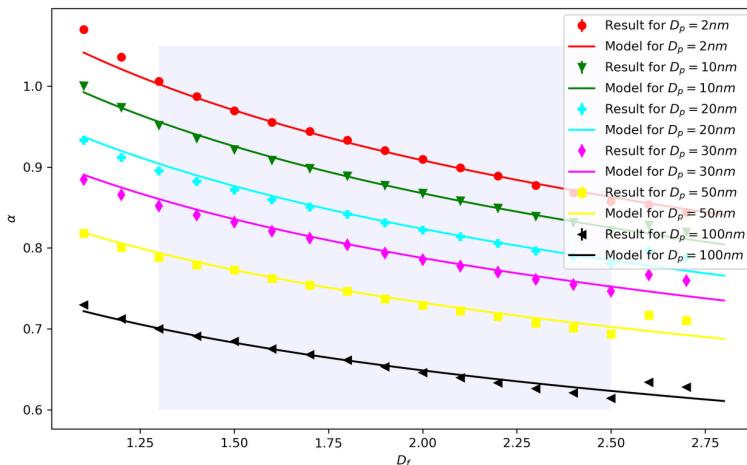


Figure 2. Dépendance de α à la dimension fractale et au diamètre des sphérules primaires à température et pression ambiante.

4. CONCLUSION

La présente étude vise à interpréter par une formalisation analytique simple les résultats de simulations numériques du diamètre de mobilité des agrégats fractals. Il s'avère que la base de données récemment établie par Singh et al. (Singh et al., 2024) peut s'interpréter dès lors que les résultats sont exprimés sous forme de masse volumique effective, cette grandeur pouvant être interprétée par un paramètre α qui permet de quantifier le rôle joué par le nombre de sphérules primaires dans la force de trainée s'exerçant sur l'agrégat. Il apparaît que ce paramètre est principalement dicté par la dimension fractale sous la forme $\alpha = A \times D_f^{-B}$ avec A et B des fonctions qui varient avec le régime d'écoulement, donc dictées par le nombre de Knudsen basé sur le rayon des sphérules primaires. Ce résultats est en accord avec les observations expérimentales menées par (Yon et al., 2015). Ce formalisme simple permet une comparaison directe entre résultats expérimentaux et issus de simulations numériques différentes.

- Corson, J., Mulholland, G.W., Zachariah, M.R., 2017. Analytical expression for the friction coefficient of DLCA aggregates based on extended Kirkwood–Riseman theory. *Aerosol Science and Technology* 51, 766–777.
- Morán, J., Fuentes, A., Liu, F., Yon, J., 2019. FracVAL: An improved tunable algorithm of cluster-cluster aggregation for generation of fractal structures formed by polydisperse primary particles. *Computer Physics Communications* 239, 225–237. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.01.015>
- Singh, A., Chaudhary, K., Thajudeen, T., 2024. Machine learning based tool for the efficient estimation of geometric features of aggregated aerosol particles. *Journal of Aerosol Science* 180, 106391.
- Sorensen, C.M., 2011. The Mobility of Fractal Aggregates: A Review. *Aerosol Sci. Tech.* 45, 765–779. <https://doi.org/10.1080/02786826.2011.560909>
- Yon, J., Bescond, A., Ouf, F.X., 2015. A simple semi-empirical model for effective density measurements of fractal aggregates. *J. aerosol Sci.* 87, 28–37. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jaerosci.2015.05.003>
- Zhang, C., Thajudeen, T., Larriba, C., Schwartzenruber, T.E., Hogan Jr, C.J., 2012. Determination of the scalar friction factor for nonspherical particles and aggregates across the entire Knudsen number range by direct simulation Monte Carlo (DSMC). *Aerosol Science and Technology* 46, 1065–1078.