



# Manual del usuario

Cálculo de las propiedades ópticas de  
partículas esféricas o aglomerados en forma  
de aerosoles o depositados sobre superficies

---

Sofía González Correa

A decorative background graphic consisting of concentric, wavy blue lines and dots, resembling a stylized wave or a series of overlapping circles, creating a sense of depth and movement.

# OptiPar

Your Website Here

## ÍNDICE DE CONTENIDO

<b>1. Introducción al programa OptiPar.....</b>	<b>2</b>
<b>2. Pantalla inicial.....</b>	<b>3</b>
<b>3. Selección de la fuente de luz y del material.....</b>	<b>3</b>
AII.3.1 Selección de la fuente de luz.....	3
AII.3.2 Selección del material.....	5
AII.3.2.1. Hielo y agua.....	7
AII.3.2.2. Hollín.....	8
AII.3.2.3. Grafito.....	9
AII.3.2.4. Diamante.....	10
<b>4. Estudio de propiedades de aerosoles y de mantos.....</b>	<b>12</b>
AII.4.1. Hollín.....	13
AII.4.2. Hielo.....	20

## 1. Introducción al programa OptiPar

El programa OptiPar, denominado “Cálculo de las propiedades ópticas de partículas esféricas o aglomerados en forma de aerosoles depositados sobre superficies”, surge con la intención de calcular de forma efectiva y rápidamente las propiedades ópticas de los aglomerados de hollín, así como de las partículas de hielo o de los mantos nevados contaminados, para evaluar los impactos de estas partículas sobre dichas superficies. Sin embargo, el programa está abierto a realizar cálculos de otros materiales.

La interfaz de usuario actualizada con la plataforma de *App Designer* de la versión de Matlab R2019b se estructura en tres pantallas diferentes: una pantalla de inicio donde se describe el programa, una segunda pantalla en la que se realiza la selección de luz y del material y una última pantalla donde se realiza el estudio que desee el usuario en función del material que haya escogido previamente. Esta estructura de la interfaz se muestra en el esquema de la Figura A.1, donde los colores sirven para identificar en la pantalla en la que se sitúa el usuario.

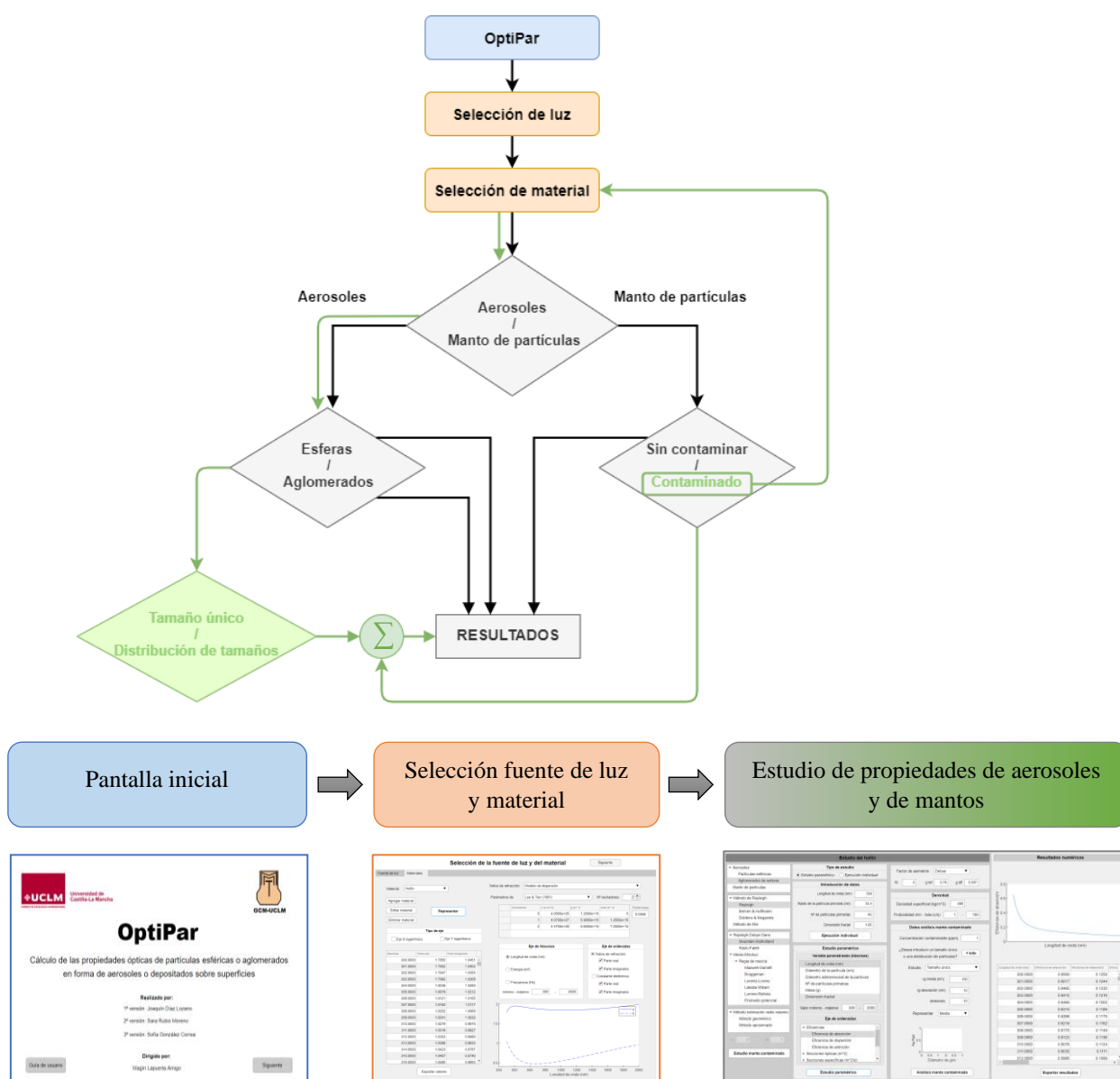


Figura A.1. Esquema de las tres pantallas en las que se estructuran la interfaz.

## 2. Pantalla inicial

En la Figura A.2 se muestra la pantalla inicial de la interfaz en la que se indica el nombre del programa, así como las versiones y modificaciones realizadas hasta el momento junto a la persona que ha realizado las versiones del programa.

Adicionalmente, se añade la posibilidad de, pulsando sobre los logos de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y del Grupo de Combustibles y Motores (GCM) redirigir directamente al usuario a los enlaces web de ambas instituciones (<https://www.uclm.es> y <https://blog.uclm.es/areamnt/>, respectivamente).

Otra opción disponible, que está en proceso de habilitar completamente, es la selección del idioma (Español o Inglés) pulsando sobre las banderas respectivas.

De la misma forma, se incorporan los botones de “Guía de usuario” que abre este manual de ayuda para el usuario al igual que el botón “Siguiente” que dirige a la siguiente pantalla, donde se facilita al usuario la elección de la fuente de luz y del material con el que se va a realizar el estudio.



Figura A.2. Pantalla de inicio de OptiPar

## 3. Selección de la fuente de luz y del material

Tal y como se ha comentado con anterioridad, la selección de la fuente de luz y del material se realizan en la misma pantalla. Para ello, se disponen de dos pestañas, de las cuales la primera permite escoger la fuente de luz deseada y la segunda el material con el que realizar el estudio ofreciendo varias opciones del cálculo del índice de refracción, ya sea por escoger los valores de una base de datos, realizar unas correlaciones o emplear un modelo matemático dado.

### AII.3.1 Selección de la fuente de luz

Si se selecciona escoger la fuente de luz se muestra la pantalla de la Figura A.3. Se facilita en el desplegable mostrar los datos del espectro solar, de una fuente halógena y de una nueva fuente de luz que puede incluir el usuario. En este último caso se habilita el botón “Agregar espectro” que abre un archivo de Microsoft Excel en el cual se deberán introducir los valores del nuevo espectro de estudio. Actualmente, en dicho archivo se encuentra por defecto el espectro solar, tal y como se observa en la Figura A.5

Al pulsar sobre el botón “Representar” se muestran los valores en la tabla y en la gráfica adjuntas. Además, también se ofrece la posibilidad de mostrar los ejes de dicha gráfica de forma lineal o logarítmica.



Figura A.3. Pantalla que permite la selección de la luz (mostrando el espectro solar)

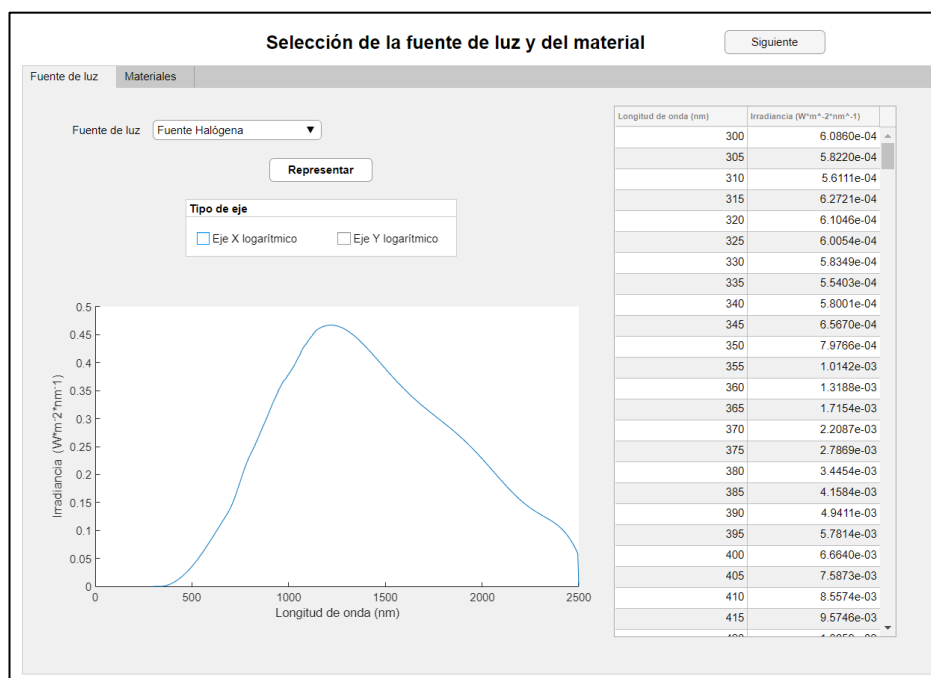


Figura A.4. Representación de la fuente halógena

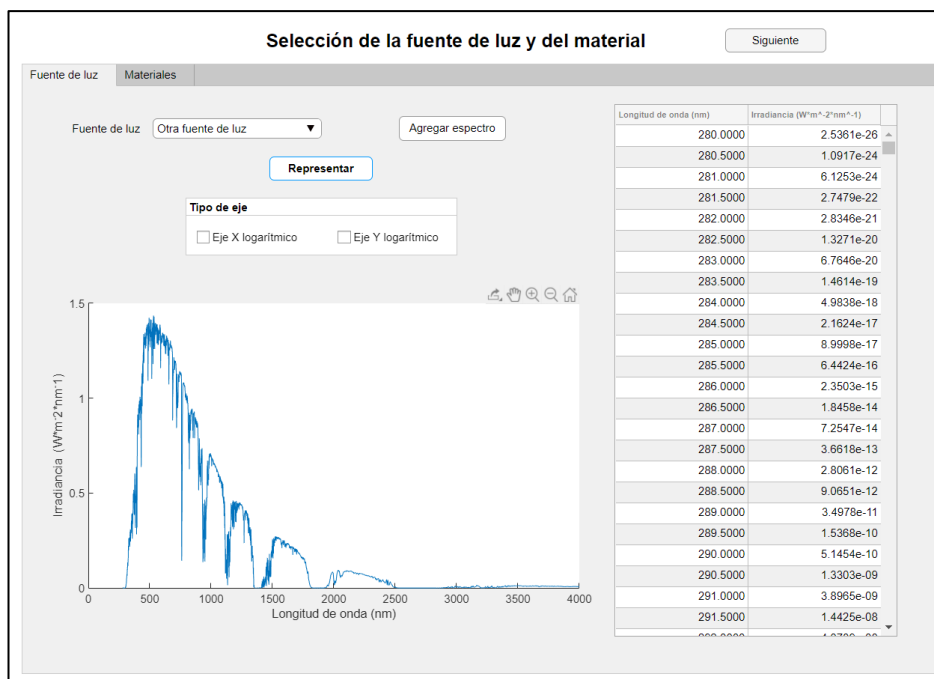
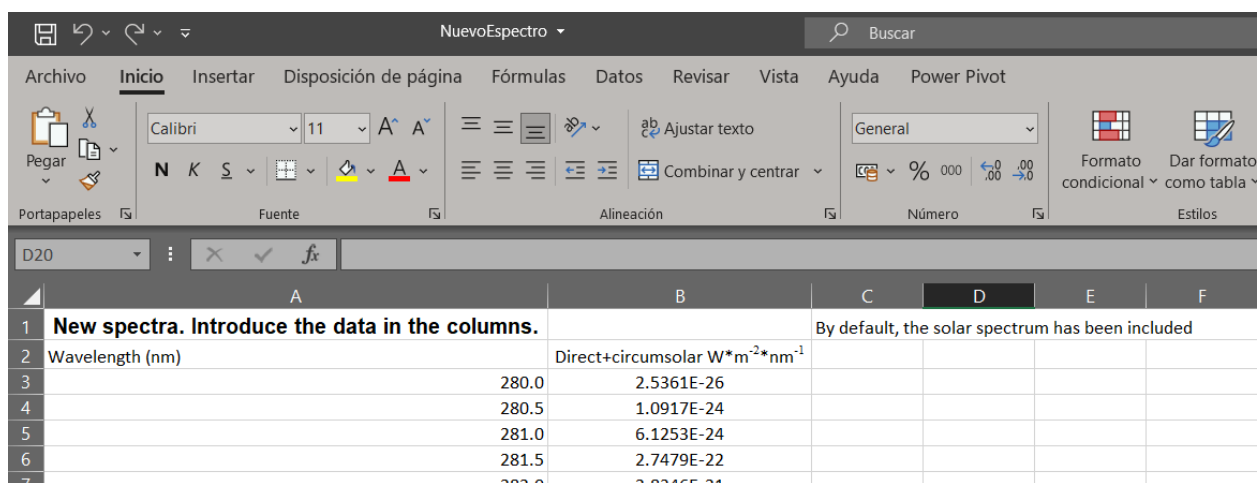


Figura A.5. Otra fuente de luz escogida (introducido el espectro solar por defecto)



Wavelength (nm)	Direct+circumsolar W·m <sup>-2</sup> ·nm <sup>-1</sup>
280.0	2.5361E-26
280.5	1.0917E-24
281.0	6.1253E-24
281.5	2.7479E-22
282.0	2.8346E-21

Figura A.6. Archivo Excel para añadir un nuevo espectro, con las unidades de longitud de onda y de irradiancia indicadas.

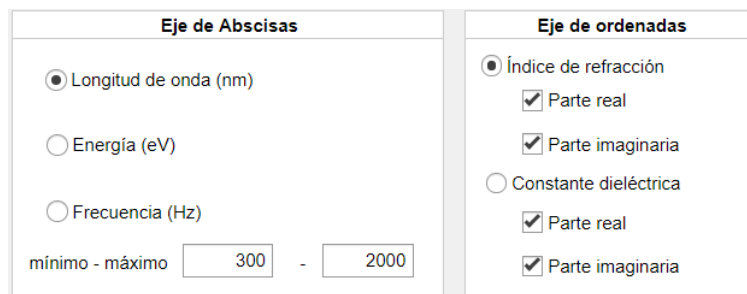
### AII.3.2 Selección del material

En la otra pestaña de la pantalla de la Figura A.3 (que se muestra más adelante) se indican en un desplegable los siete materiales disponibles para hacer el estudio: hollín, hielo, grafito, diamante, polvo, agua y nuevo material. En función del material escogido, se muestran en otro desplegable las posibilidades disponibles del índice de refracción que se puede escoger. Además, se indica la posibilidad de “Nuevo material” en el que el usuario puede introducir una nueva base de datos de un índice de refracción de un material dado en el archivo Excel que se abre al pulsar sobre el botón “Añadir material” que sólo está visible en el caso de seleccionar esa opción.

El índice de refracción elegido se muestra en la gráfica y los valores numéricos en la tabla. Para representar este parámetro en función de un rango de valores, se puede determinar el tipo del eje de abscisas en el que se quiere mostrar, ya sea en función de la longitud de onda (nm), de la energía (eV) o de la

frecuencia (Hz). Igualmente, dada la relación existente entre el índice de refracción y la constante dieléctrica, se facilita al usuario mostrar un parámetro u otro, así como mostrar el número complejo o las partes reales e imaginarias por separado.

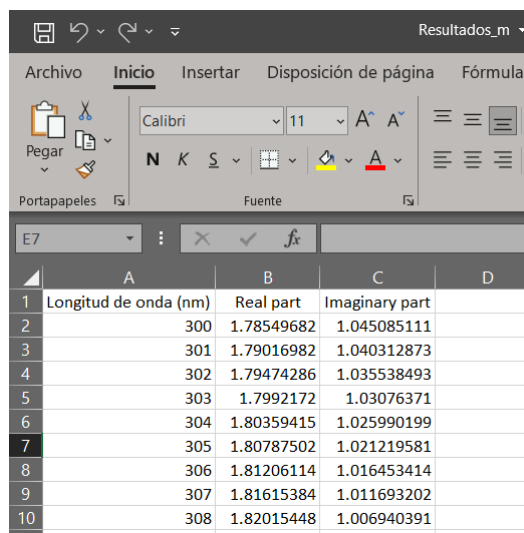
Para facilitar al usuario el rango de los valores del eje de abscisas, aparecen introducidos los valores del rango de estudio, pudiéndose modificar en cualquier momento por el usuario. En el caso del valor mínimo, se corresponde con una longitud de onda de 300 nm, que equivale a 4.13 eV y  $1e+15$  Hz, mientras que el máximo indicado son 2000 nm, que corresponde con 0.62 eV y  $1.5e+14$  Hz. Como se ha indicado anteriormente, también se facilita al usuario mostrar los ejes de forma lineal o de forma logarítmica. En la Figura A.7 se muestran las opciones de los ejes comentadas.



The screenshot shows two panels for axis selection. The left panel, titled 'Eje de Abscisas', has three radio buttons: 'Longitud de onda (nm)' (selected), 'Energía (eV)', and 'Frecuencia (Hz)'. Below these is a range selector with 'mínimo - máximo' and input fields containing '300' and '2000'. The right panel, titled 'Eje de ordenadas', has three radio buttons: 'Índice de refracción' (selected), 'Constante dieléctrica', and 'Parte real'. Under 'Índice de refracción' are two checked checkboxes: 'Parte real' and 'Parte imaginaria'. Under 'Constante dieléctrica' are also two checked checkboxes: 'Parte real' and 'Parte imaginaria'.

Figura A.7. Elección del tipo de ejes (abscisas y ordenadas) de la gráfica del índice de refracción o de la constante dieléctrica.

Otra característica destacable de la pantalla se basa en el botón de “Exportar valores” el cual permite abrir un documento de Microsoft Excel que recoja los valores mostrados en la tabla de la pantalla. Todo ello facilita al usuario el tratamiento de los datos en el caso que sea necesario realizarlo fuera de la interfaz del OptiPar y de Matlab. En la Figura A.8 se muestra una captura de la hoja de Microsoft Excel generada en uno de los casos.



	A	B	C	D
1	Longitud de onda (nm)	Real part	Imaginary part	
2	300	1.78549682	1.045085111	
3	301	1.79016982	1.040312873	
4	302	1.79474286	1.035538493	
5	303	1.7992172	1.03076371	
6	304	1.80359415	1.025990199	
7	305	1.80787502	1.021219581	
8	306	1.81206114	1.016453414	
9	307	1.81615384	1.011693202	
10	308	1.82015448	1.006940391	







Figura A.8. Captura de una parte de los resultados exportados a una hoja de Microsoft Excel.

Por otro lado, una ventaja que dispone la nueva versión de la interfaz se basa en la posible interacción con las gráficas mostradas en las pantallas. En el margen superior derecho de las gráficas se muestra una lista de iconos como los mostrados en la Figura A.9 que permiten ampliar y disminuir la gráfica sobre una zona deseada, al igual que poder guardarla con el formato deseado. La descripción de cada icono se indica en la Tabla A.1.



Figura A.9. Lista de iconos con los que poder interaccionar con la gráfica resultante.

Tabla A.1. Descripción de los iconos mostrados en la Figura A.9

Icono	Descripción	Icono	Descripción
	Volver a la vista de la gráfica original		Diferentes formas de guardar la gráfica
	Zoom out		Guardar como
	Zoom in		Copiar como imagen
	Moverse en el gráfico		Copiar como un vector gráfico

Una vez descritas las opciones disponibles para los elementos generales, se muestran las opciones particulares de cada material para la elección del índice de refracción.

#### AII.3.2.1. Hielo y agua

En el caso del hielo al igual que en el agua sólo se facilita la base de datos disponible, por lo que únicamente se debe seleccionar ese material y pulsar el botón “Representar”. En la Figura A.11 se muestran los datos de la parte real e imaginaria del índice de refracción complejo (con el eje de ordenadas en formato logarítmico) para un rango de longitud de onda de 300 a 200 nm del hielo, con los valores indicados por Warren & Brandt (2008) y en la Figura A.11 los valores del agua propuestos por Irvine & Pollack (1968).

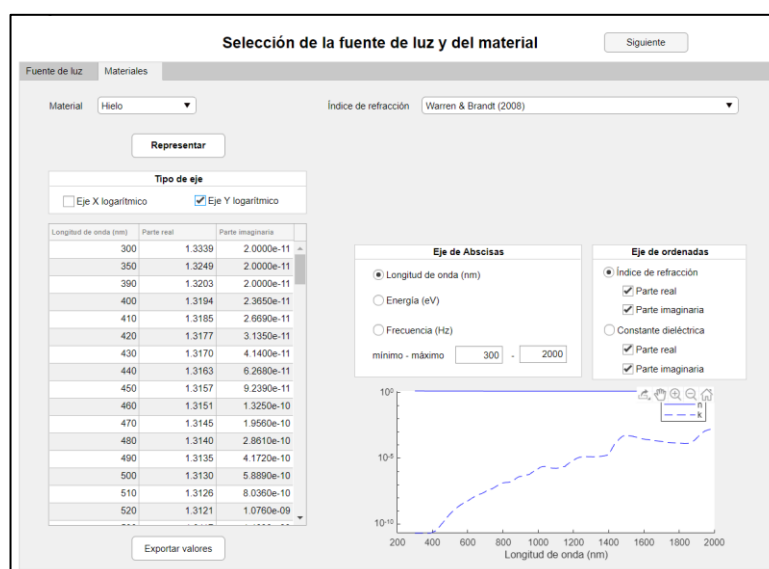


Figura A.10. Ejecución escogiendo el material hielo



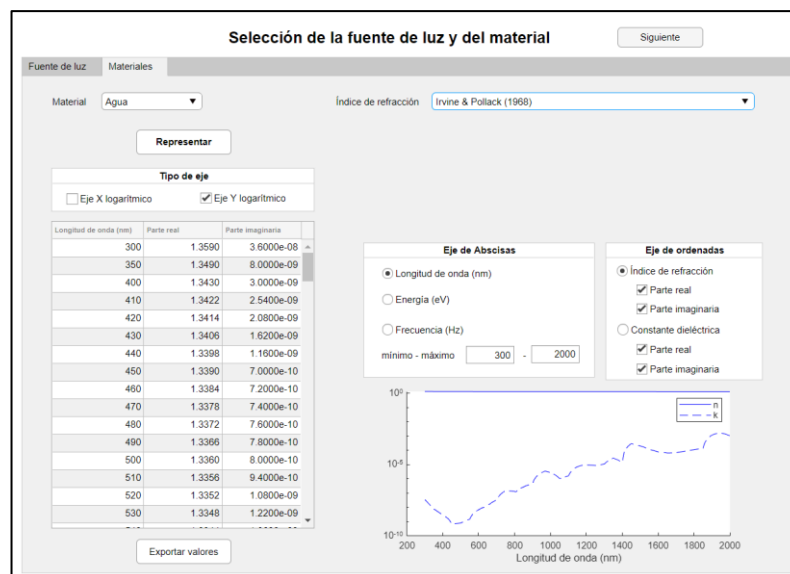


Figura A.11. Ejecución escogiendo el material agua

### AII.3.2.2. Hollín

En el caso del hollín existen varias posibilidades de elección del índice de refracción. Se puede optar por emplear la correlación basada en los valores indicados por Liu & Bescond (2015), la correlación propuesta por Chang & Charalampopolulos (1990) o el empleo del modelo de dispersión, tal y como se observa en el desplegable mostrado en la Figura A.12.

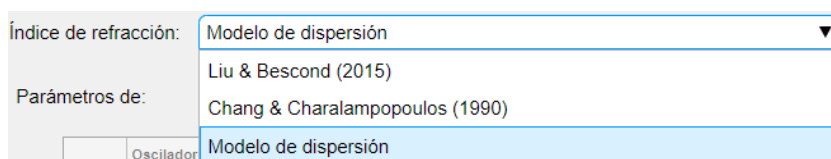


Figura A.12. Posibles elecciones de obtención del índice de refracción del hollín.

En el caso de escoger el modelo de dispersión, es necesario determinar los parámetros con los que se parte en el modelo, los cuáles se escogen en el desplegable que se indica en la Figura A.13 y que se encuentran ordenados por orden cronológico. Se trata pues, de los parámetros propuestos por Dazell & Sarofim en 1969, los de Lee & Tien en 1981, los de Harbib & Vervisch en 1988 o los de Stagg & Charalampopoulous en 1993. Además, también se habilita la posibilidad de introducir en la tabla dispuesta unos valores distintos a los propuestos por estos autores, pudiendo añadir más osciladores, a diferencia de los dos que proponen todos los autores mencionados.

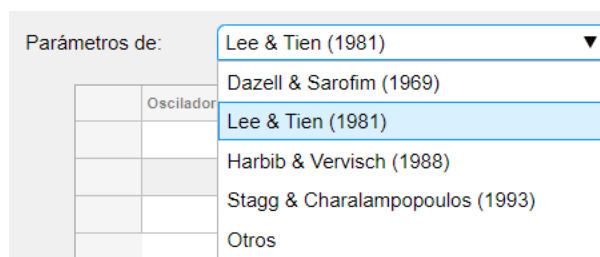


Figura A.13. Parámetros iniciales para emplear el modelo de dispersión para obtener el índice de refracción del hollín.

Igualmente, se habilita la opción de introducir por parte del usuario el factor masa para los electrones libres, ya que, a diferencia de Dazell & Sarofim, la mayoría de los autores emplean la relación de 1/18 para los electrones efectivos.

Al representar la elección realizada por el usuario se muestran los resultados y los valores de los parámetros empleados para obtener el modelo de dispersión. En la Figura A.14 se muestran los resultados del modelo de dispersión empleando los parámetros propuestos por Lee & Tien en 1981.

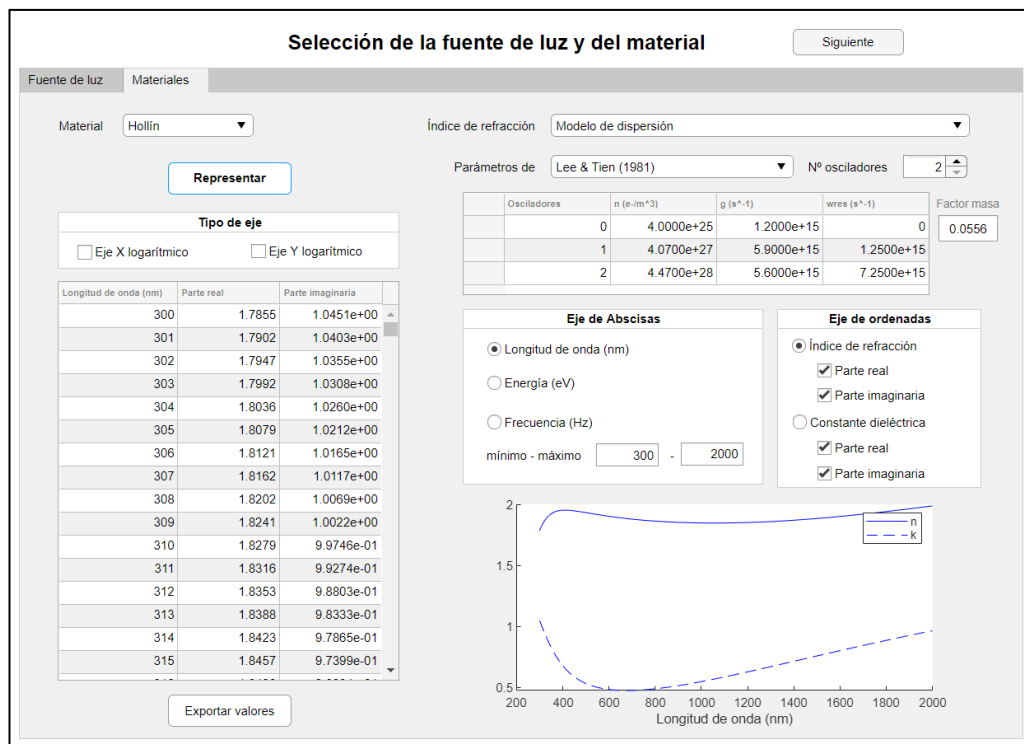


Figura A.14. Pantalla de resultados de la constante dieléctrica del hollín empleando el modelo de dispersión y los parámetros de Lee & Tien (1981).

### AII.3.2.3. Grafito

Para el caso del grafito, existe la posibilidad de optar por escoger los valores propuestos por Djurišić & Li (1999) o emplear el modelo de dispersión, tal y como se muestra en el desplegable de la Figura A.15.

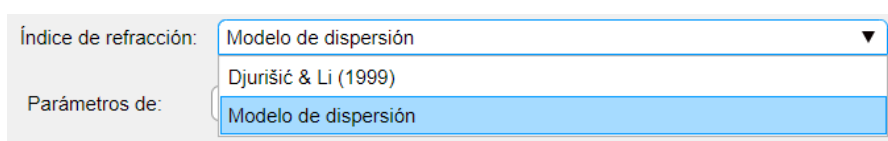


Figura A.15. Opciones del índice de refracción para el grafito.

Si se escoge emplear el modelo de dispersión, a diferencia del hollín, para el grafito se dispone únicamente de un conjunto de parámetros propuestos por Stagg & Charalampopoulos en 1993 y de la opción de introducir los parámetros que estime necesarios el usuario ("Otros"), como se observa en el desplegable de la Figura A.16.

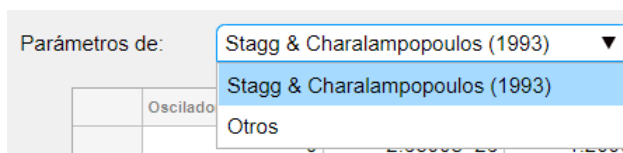


Figura A.16. Parámetros del modelo de dispersión disponibles para el grafito.

A modo de ejemplo, se muestra en la Figura A.17 una ejecución del grafito calculando el índice de refracción con el modelo de dispersión y los parámetros de Stagg & Charalampopoulos (1993).

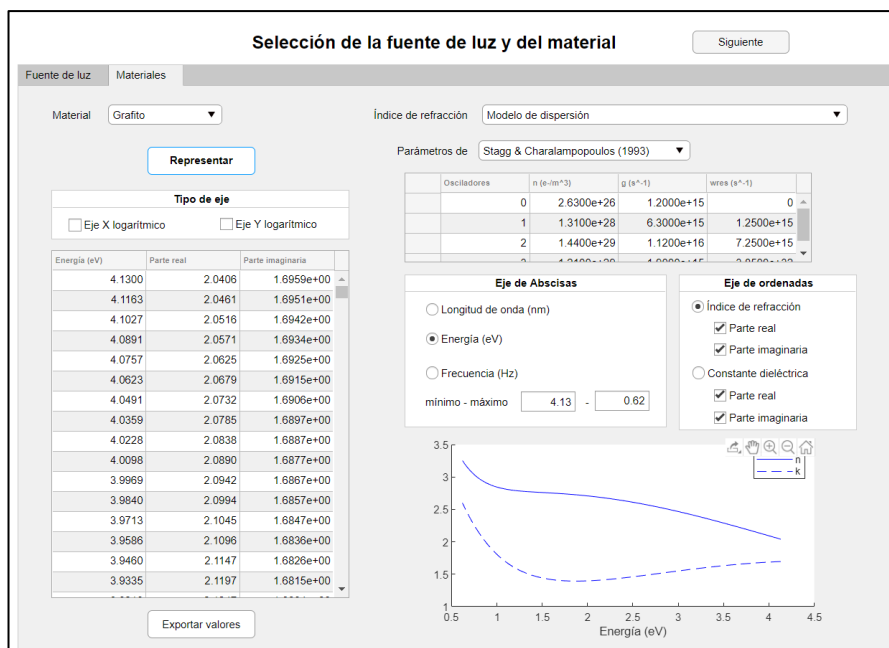


Figura A.17. Pantalla de resultados del índice de refracción del grafito empleando el modelo de dispersión y los parámetros de Stagg & Charalampopoulos (1993).

#### AII.3.2.4. Diamante

Para el diamante, al igual que el hielo y el agua, sólo se dispone de una base de datos propuesta por Philip & Taft en 1964. Los valores de este índice de refracción se muestran en la Figura A.18 en función de la frecuencia (Hz).

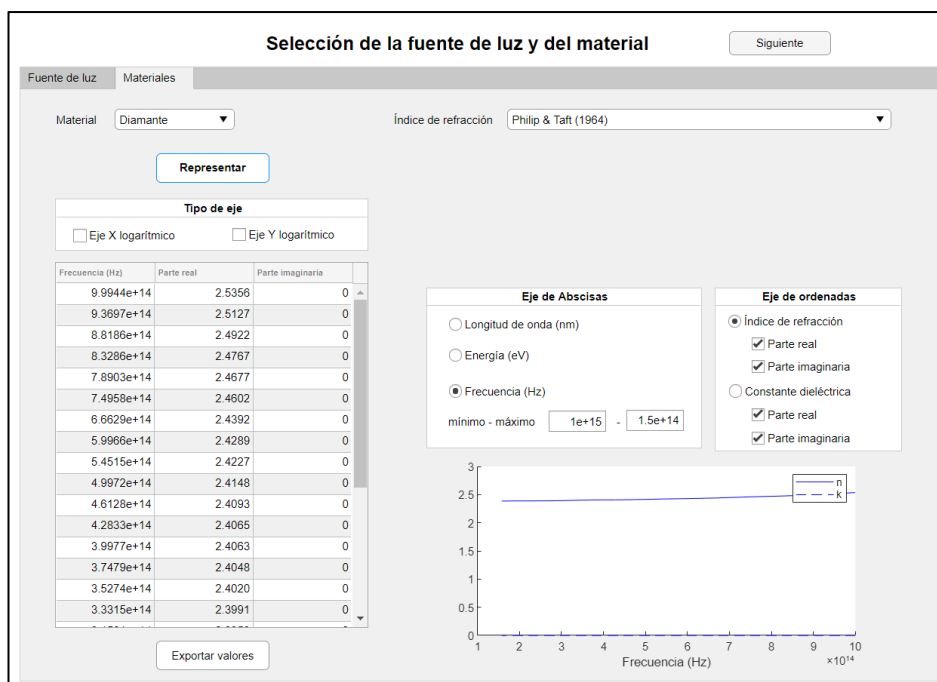


Figura A.18. Pantalla de resultados del índice de refracción del diamante empleando el fichero de datos disponible con los valores de Philip & Taft (1964).

### AII.3.2.5. Polvo

Para el polvo, sólo se dispone de una base de datos propuesta por Patterson en 1977. Los valores de este índice de refracción se muestran en la Figura A.19.

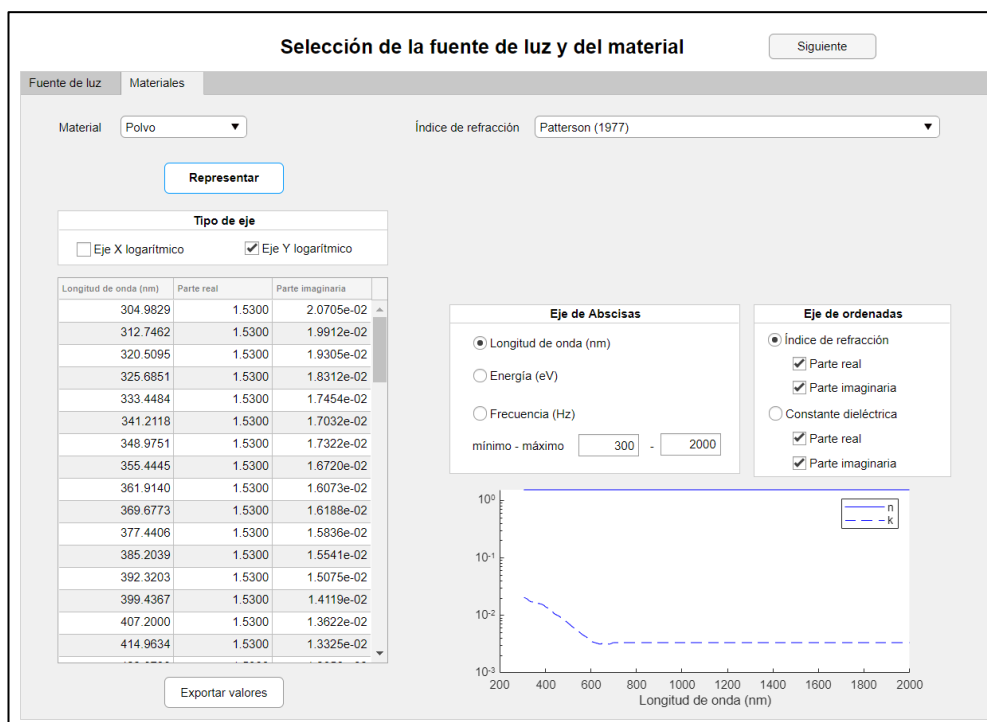
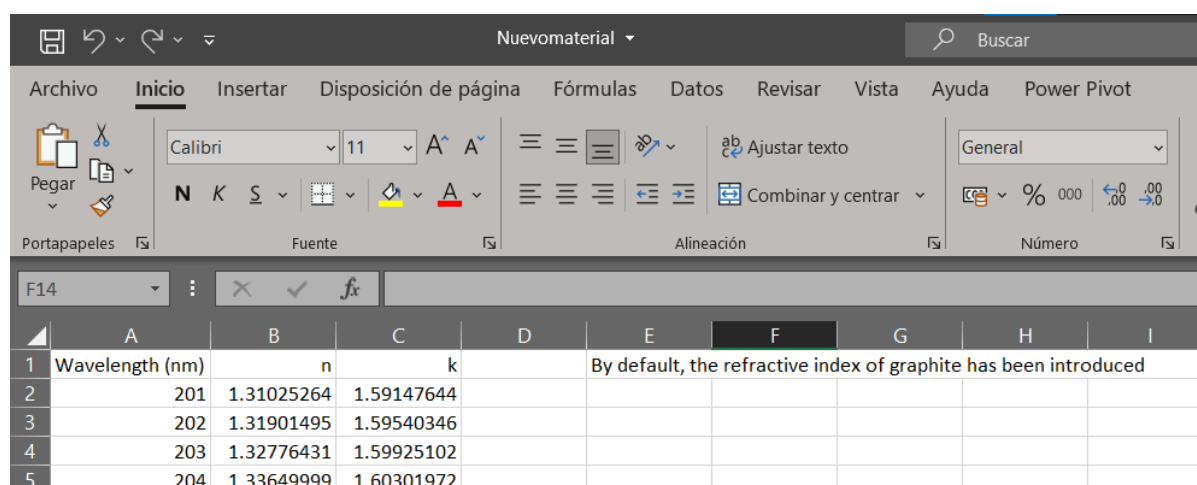


Figura A.19. Pantalla de resultados del índice de refracción del polvo empleando el fichero de datos disponible con los valores de Patterson (1977).

### AII.3.2.6. Nuevo material

En el caso de optar por introducir un material adicional, se debe escoger en el desplegable “Nuevo material” para introducir una nueva base de datos de un índice de refracción de un material dado en el archivo Excel que se abre al pulsar sobre el botón “Añadir material” que sólo está visible en el caso de seleccionar esa opción.



Nuevomaterial

Buscar

Archivo Inicio Insertar Disposición de página Fórmulas Datos Revisar Vista Ayuda Power Pivot

Calibri 11 A<sup>+</sup> A<sup>-</sup>

Pegar Fuente Alineación General

Combinar y centrar

Número

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Wavelength (nm)	n	k						
2	201	1.31025264	1.59147644						
3	202	1.31901495	1.59540346						
4	203	1.32776431	1.59925102						
5	204	1.33649999	1.60301972						

By default, the refractive index of graphite has been introduced

Figura A.20. Archivo donde introducir los valores de longitud de onda y de la parte real e imaginaria del índice de refracción del nuevo material.

## 4. Estudio de propiedades de aerosoles y de mantos

Una vez escogido el material con el que se desea realizar el estudio, se pulsa el botón “Siguiente” de la pantalla de “Selección de luz y de material” (como la de la Figura A.18) y se abre la pantalla de la Figura A.21, donde, en la parte sombreada, se indica el estudio del material escogido (“Estudio de hollín, de hielo, etc.).

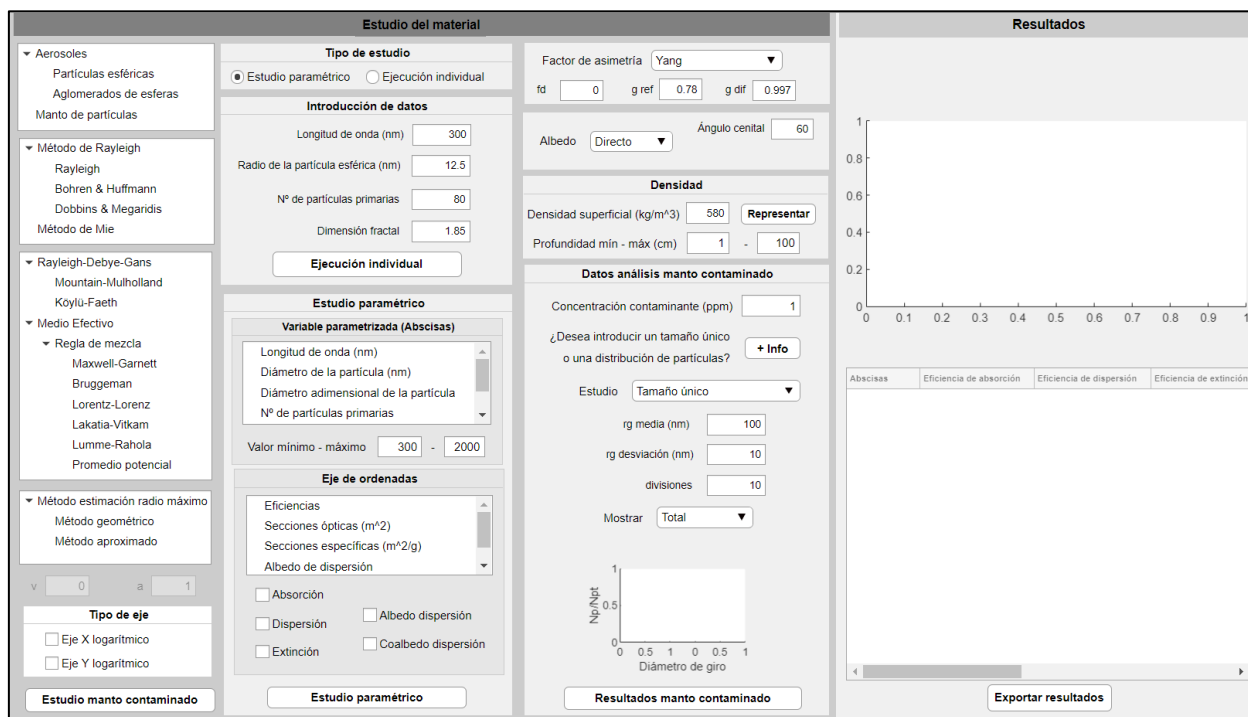


Figura A.21. Pantalla de estudio del material seleccionado previamente.

La pantalla se divide en dos partes: una de ellas en la que se escoge el estudio a realizar y la otra donde se muestran los resultados gráficos y numéricos. En la parte del estudio del material, éste se subdivide a su vez en tres columnas. La primera columna muestra las combinaciones de métodos posibles a emplear, agrupándose en árboles desplegables. La segunda indica si se desea realizar una ejecución individual o un estudio paramétrico, especificando en este último caso, la variable parametrizada y el parámetro a representar. En la tercera columna se agrupan las especificaciones necesarias para realizar el cálculo de mantos de partículas al igual que el análisis del manto contaminado con un material dado.

Dado que se muestra en una misma pantalla la posibilidad de realizar el estudio de distintos materiales, hay algunas opciones en pantalla que no están habilitadas para algunos de ellos. Para partículas cuyo tamaño es mucho menor que la longitud de onda, como es el caso de las partículas de hollín o de los materiales de referencia de éste (grafito y diamante) se puede aplicar la teoría de Rayleigh. Sin embargo, para partículas de mayor tamaño como el hielo (o el agua) el régimen de Rayleigh está restringido y se debe emplear la teoría de Mie para estas partículas esféricas.

Por ese motivo, se especifica para el caso del hielo y del hollín las posibles combinaciones existentes para realizar el estudio.

### AII.4.1. Hollín

En el caso del hollín, se pueden hacer varias combinaciones posibles de estudio como las que se indican en el esquema de la Figura A.22.

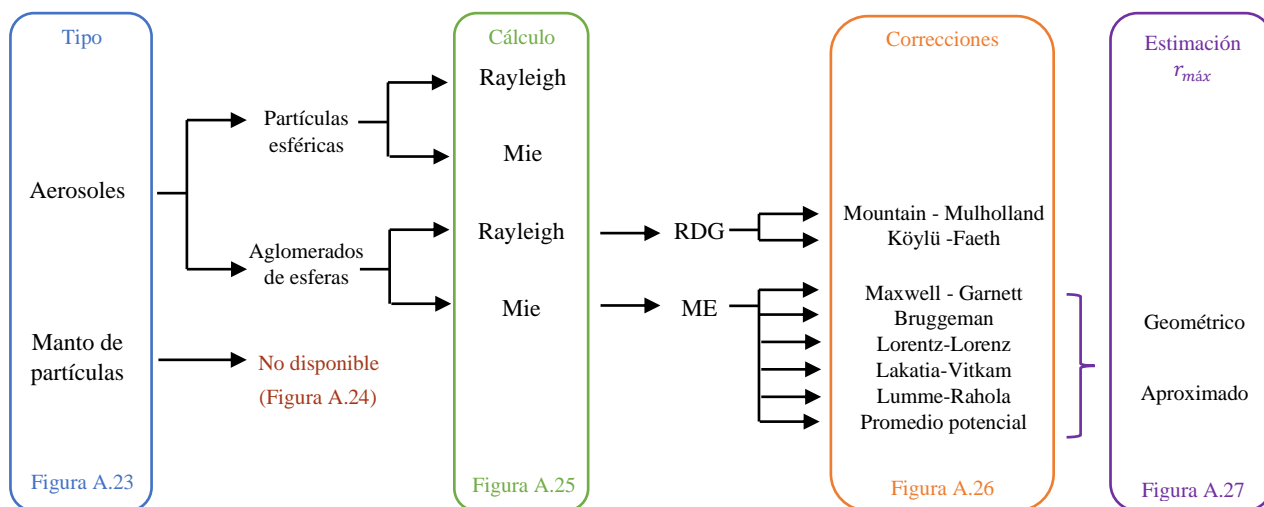


Figura A.22. Esquema de las combinaciones de cálculo posibles para el hollín.

Tal y como se muestra en la Figura A.22, se puede seleccionar en el árbol de la Figura A.23 realizar un análisis de aerosoles (ya sea de partículas esféricas o de aglomerados de esferas) o de un manto de partículas. Sin embargo, esta última opción no está actualmente habilitada y, en el caso de seleccionar el estudio, se muestra una ventana emergente (Figura A.24) indicando al usuario que no está disponible.

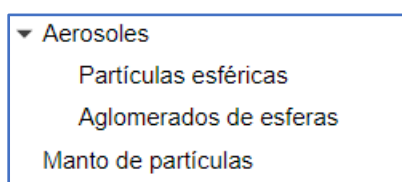


Figura A.23. Árbol de decisión de la forma de las partículas o manto a analizar.

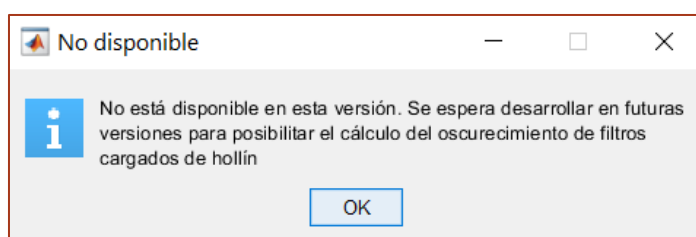


Figura A.24. Ventana emergente que indica que el cálculo seleccionado (manto de partículas de hollín) no está disponible.

Si se escoge realizar un análisis de aerosoles, ya sea de partículas esféricas o de aglomerados de hollín, se puede calcular las propiedades ópticas empleando el método de Rayleigh, ofreciendo la opción de escoger calcular la eficiencia de absorción con la expresión de Rayleigh, la de Bohren & Huffman o la de Dobbins & Megaridis, o emplear la solución de Mie, tal y como se muestra en la Figura A.22 y la Figura A.25.

- ▼ Método de Rayleigh
  - Rayleigh
  - Bohren & Huffmann
  - Dobbins & Megaridis
  - Método de Mie

Figura A.25. Opciones de cálculo disponibles de las eficiencias de absorción, dispersión y extinción.

En el caso de optar por un estudio de aglomerados de hollín, se deben realizar dos tipos de estudio: aplicar la aproximación de Rayleigh-Debye-Gans (RDG) añadiendo un factor de corrección a las eficiencias de dispersión o, por otro lado, emplear los métodos de Medio Efectivo (ME) para aproximar al aglomerado a una esfera que lo engloba y aplicar la solución de Mie para partículas esféricas. Para ello, se ofrecen diferentes reglas de mezcla para realizar el estudio: la de Maxwell-Garnett, la de Bruggeman, la de Lorentz-Lorenz, la de Lakatia-Vitkam, la de Lumme y Rahola y el promedio potencial.

- ▼ Rayleigh-Debye-Gans
  - Mountain-Mulholland
  - Köylü-Faeth
- ▼ Medio Efectivo
  - ▼ Regla de mezcla
    - Maxwell-Garnett
    - Bruggeman
    - Lorentz-Lorenz
    - Lakatia-Vitkam
    - Lumme-Rahola
    - Promedio potencial

Figura A.26. Elección, en el caso de escoger aglomerados de partículas, de la corrección de la dispersión de Rayleigh-Debye-Gans o de aplicar los métodos de Medio Efectivo para aproximar al aglomerado a una esfera que lo circunscribe y poder aplicar la solución de Mie.

En el caso de seleccionar emplear la regla de mezcla de Lumme y Rahola o el promedio potencial se habilita un cuadro editable en el que introducir el valor del parámetro  $v$  y  $a$ , respectivamente. Se ha introducido el valor de  $v$  nulo y de  $a$  la unidad, pero el usuario puede modificar dicho valor.

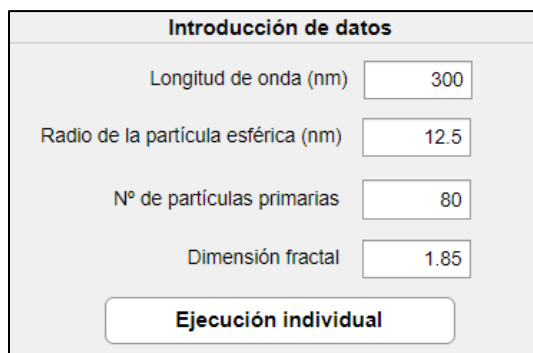
Además, si se desea realizar un estudio de los métodos de Medio Efectivo se debe escoger el método de estimar el radio máximo de la esfera considerada y la fracción volumétrica del material que lo contiene. Para ello, se facilita, tal y como se muestra en la Figura A.27, escoger entre aplicar un método geométrico, por su consistencia con el método de análisis fractal, o el método aproximado.

- ▼ Método estimación radio máximo
  - Método geométrico
  - Método aproximado

Figura A.27. Opciones de cálculo del radio máximo y de la fracción volumétrica: método geométrico o método aproximado.

Para realizar el estudio y las combinaciones antes indicadas, es necesario indicar los valores de los parámetros de los que depende. Para ello, se habilita en el panel “Introducción de datos” la posibilidad de introducir los valores de los parámetros de longitud de onda en nanómetros, el radio de la partícula esférica

también definida en nm, el número de partículas primarias y la dimensión fractal (estos dos últimos son necesarios en el caso de escoger realizar el estudio de aglomerados de partículas).

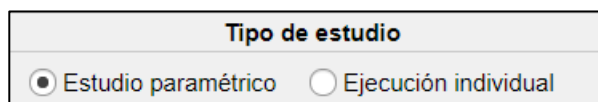


Introducción de datos

Longitud de onda (nm)	<input type="text" value="300"/>
Radio de la partícula esférica (nm)	<input type="text" value="12.5"/>
Nº de partículas primarias	<input type="text" value="80"/>
Dimensión fractal	<input type="text" value="1.85"/>

Figura A.28. Panel donde introducir los parámetros para poder realizar el cálculo.

Además, en ese mismo panel aparece un botón que permite realizar una ejecución individual con los parámetros introducidos. Sin embargo, también se incluye la posibilidad de realizar un estudio paramétrico. El tipo de estudio a realizar se puede escoger en el panel que se encuentra en la parte superior del panel de la Figura A.28 y que se muestra en la Figura A.29.



Tipo de estudio

☒ Estudio paramétrico ☐ Ejecución individual

Figura A.29. Pantalla que permite escoger el tipo de estudio a realizar: estudio paramétrico o una ejecución individual.

En el caso de optar por realizar un estudio paramétrico se habilita el panel de la Figura A.30. Este panel se subdivide en dos grupos. El primero de ellos sirve para seleccionar la variable que se desea parametrizar (longitud de onda (nm), tamaño de partícula (nm), tamaño de partícula adimensional, número de partículas primarias, energía (eV), frecuencia (Hz)) y para indicar el rango de dicha variable (valores mínimo y máximo). El segundo grupo sirve para seleccionar la variable que se desea estudiar y mostrar en la gráfica (eficiencia, sección óptica ( $\text{m}^2$ ), sección específica ( $\text{m}^2/\text{g}$ ), albedo de dispersión y factor de asimetría). Se ofrece la posibilidad al usuario de poder mostrar la absorción, la dispersión o la eficiencia de forma conjunta o de forma independiente (en el caso de escoger eficiencia, sección óptica y sección específica) o albedo o coalbedo (si se ha optado por mostrar el albedo de dispersión).



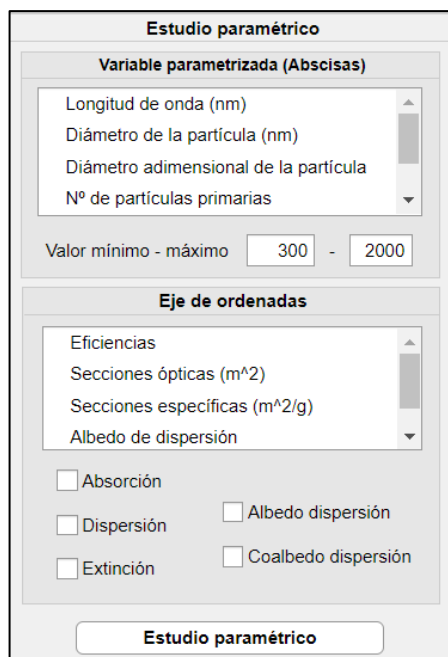
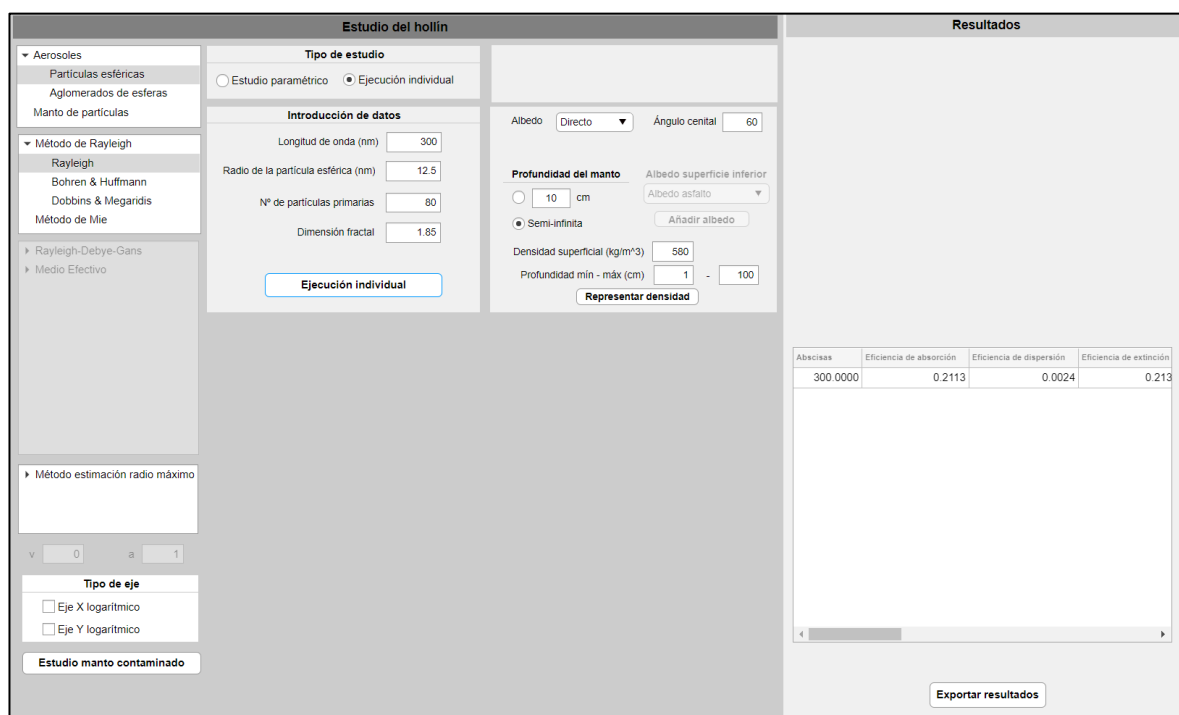


Figura A.30. Parámetros por especificar si se desea realizar un estudio paramétrico: variable el rango en el que se desea parametrizar, eje de ordenadas a mostrar en la gráfica y tipo de eficiencia o sus derivados.

Para visualizar lo mencionado hasta el momento, se muestran varias ejecuciones a modo de ejemplo de las combinaciones y del tipo de estudio posibles. El análisis se ha realizado para el índice de refracción de hollín calculado con la correlación de Chang & Charalampopoulos (1990).

En la Figura A.31 se observan los resultados de seleccionar una ejecución individual de aerosoles de partículas esféricas empleando la ecuación de Rayleigh y con los parámetros de entrada de 300 nm de longitud de onda y 12.5 nm del tamaño. Además, si el valor introducido por el usuario no coincide, se realiza una interpolación de los valores de la base de datos.



Abcisas	Eficiencia de absorción	Eficiencia de dispersión	Eficiencia de extinción
300.0000	0.2113	0.0024	0.213

Figura A.31. Ejecución individual para partículas esféricas con la ecuación de Rayleigh.

En la Figura A.32 se muestra un estudio paramétrico de aglomerados de esferas empleando la expresión de Rayleigh para la absorción y corrigiendo la dispersión con la expresión de Mountain & Mulholland. Se ha parametrizado la longitud de onda en un rango de 300 a 2000 nm escogiendo mostrar las eficiencias de absorción, de dispersión y de extinción.

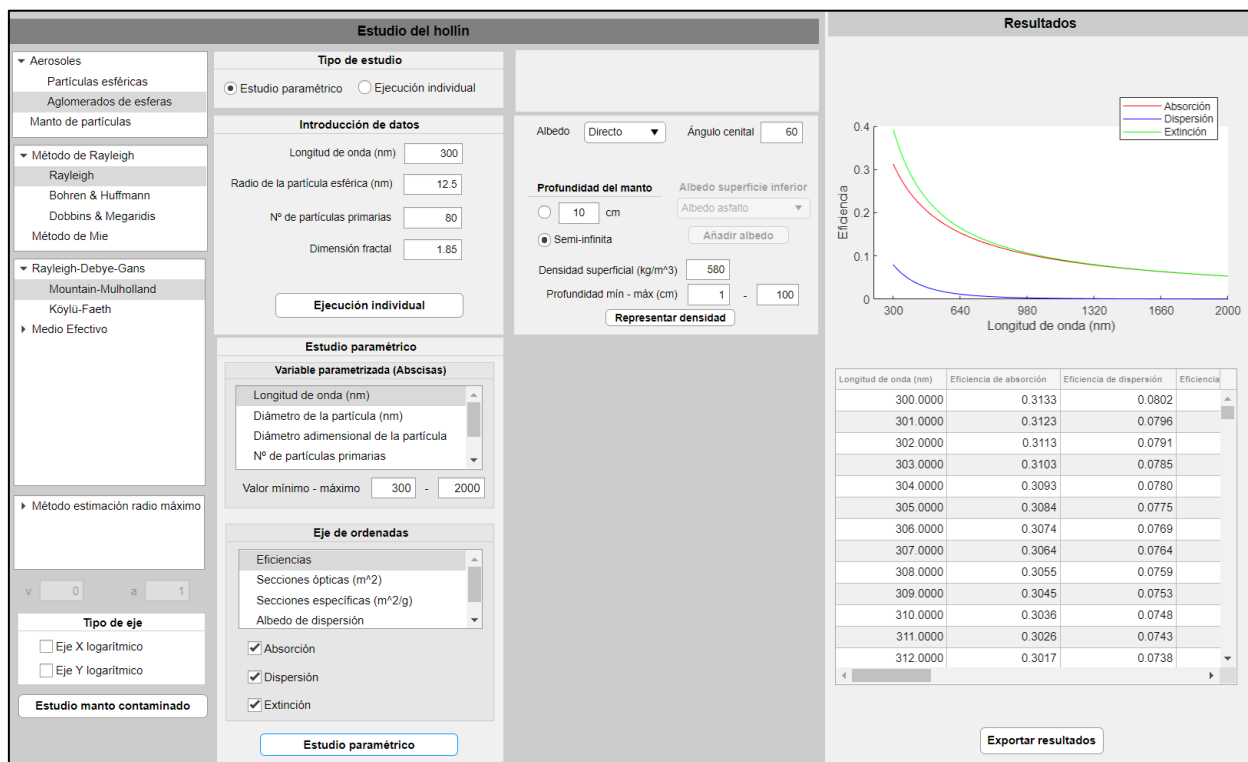


Figura A.32. Estudio paramétrico de la longitud de onda para aglomerados de esferas empleando la expresión de Rayleigh y la corrección de Mountain & Mulholland.

Otro posible estudio de basa en aplicar el método de Medio Efectivo a aglomerados de esferas empleando la solución de Mie y la regla de mezcla de Maxwell-Garnett y estimando el radio máximo con el método geométrico. Se ha realizado igualmente un estudio paramétrico de la longitud de onda mostrando en este caso el albedo de dispersión, como se observa en la Figura A.34.

Cabe decir, que se incluye adicionalmente, la posibilidad de mostrar los ejes de la gráfica de forma lineal o logarítmica, tanto el eje de abscisas o de ordenadas de forma conjunta o independientemente. Para ello, basta con seleccionar, en el caso de querer mostrar uno de los ejes logarítmico en el panel que se indica en la Figura A.33 el eje que se desea cambiar de lineal a logarítmico, y viceversa.

**Tipo de eje**

☐ Eje X logarítmico

☐ Eje Y logarítmico

Figura A.33. Selección de ejes logarítmico, eje X, eje Y o ambos.

En el caso de la ejecución de la Figura A.34 se muestra el eje de ordenadas de forma logarítmica.

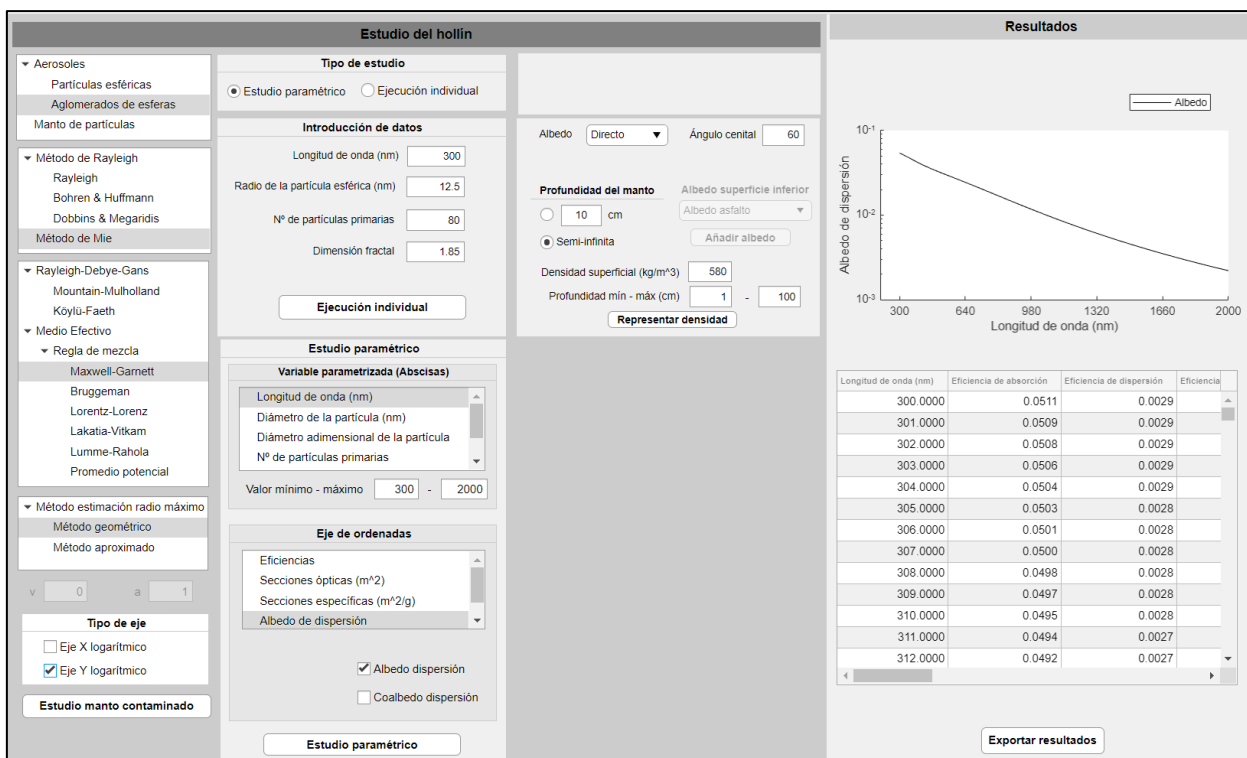


Figura A.34. Estudio paramétrico de la longitud de onda para aglomerados de esferas empleando la solución de Mie, la regla de mezcla de Maxwell-Garnett y la estimación del radio máximo por el método geométrico.

Además de un estudio paramétrico de la longitud de onda, las propiedades ópticas se pueden mostrar en función de la energía (en eV) o en función de la frecuencia (en Hz). En la Figura A.35 se muestra un estudio paramétrico de la energía para partículas esféricas de hollín empleando la expresión de Rayleigh y mostrando las secciones ópticas de absorción, dispersión y extinción, mientras que en la Figura A.36 se hace un estudio de aglomerados de hollín y se muestran las eficiencias en función de la frecuencia.

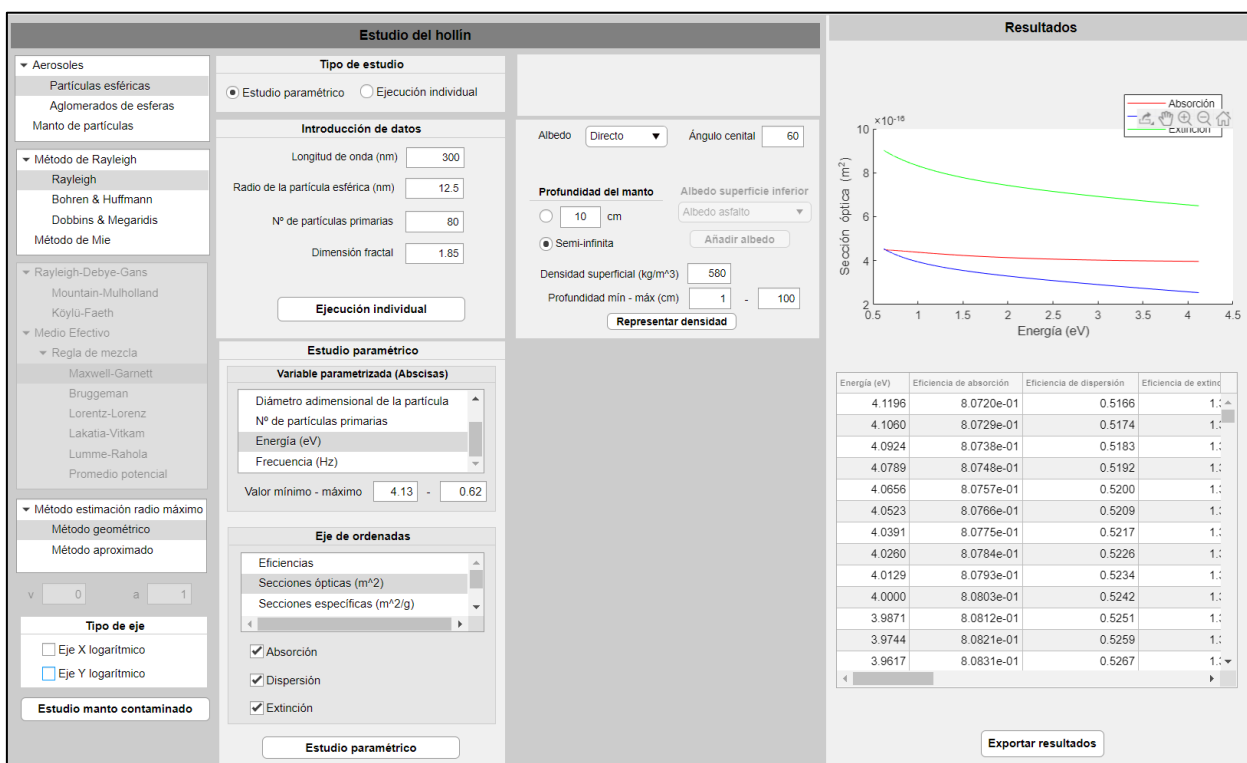


Figura A.35. Estudio paramétrico de la energía (en eV) para partículas esféricas de hollín empleando la expresión de Rayleigh y mostrando las secciones ópticas de absorción, dispersión y extinción.

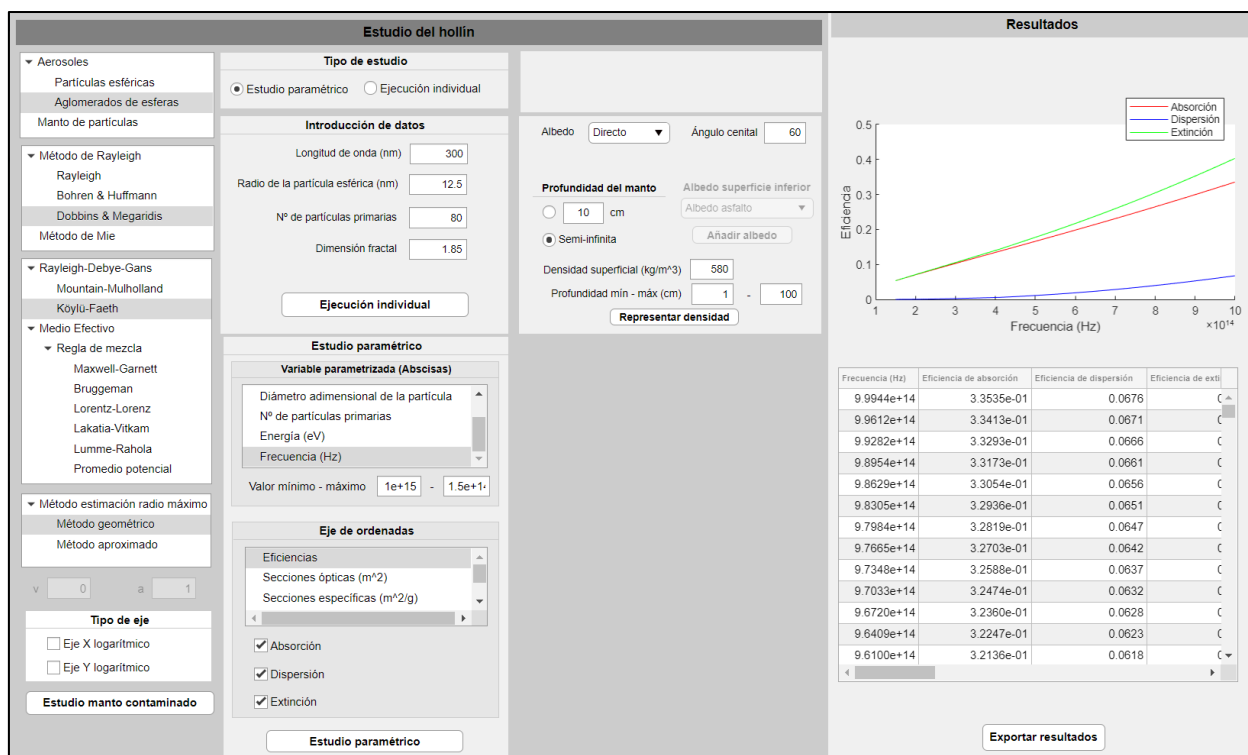


Figura A.36. Estudio paramétrico de la frecuencia (en Hz) para aglomerados de hollín empleando la expresión de Dobbins & Megaridis para la absorción corrigiendo la dispersión con el factor propuesto de Köylü & Faeth mostrando las eficiencias de absorción, dispersión y extinción.

Otro estudio diferente a los anteriores se muestra en la Figura A.37, donde se hace un barrido del número de partículas primarias obteniendo el albedo de dispersión a través de la solución de Mie identificando al aglomerado con la esfera que lo circunscribe a través de la regla de mezcla de Lumme - Rahola empleando el parámetro  $\nu$  nulo y la estimación el radio máximo por el método geométrico.

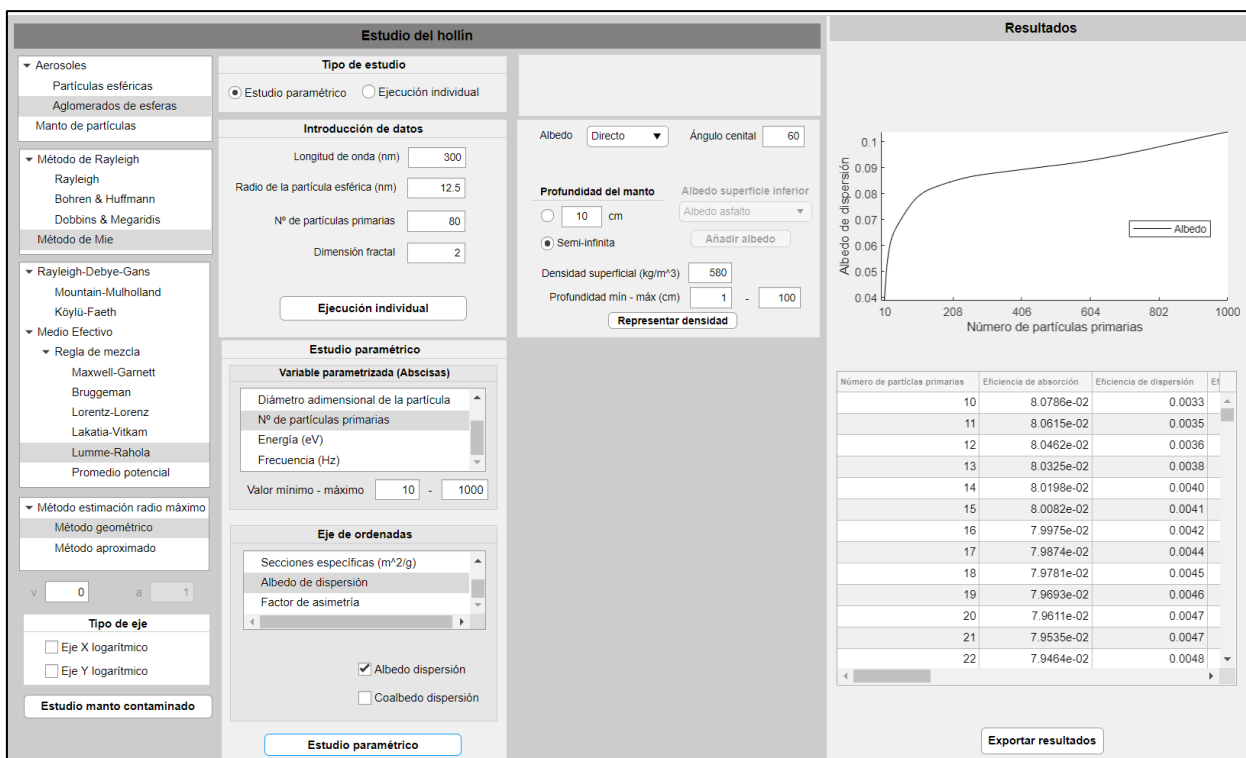


Figura A.37. Estudio paramétrico del número de partículas primarias para aglomerados de esferas empleando la solución de Mie, la regla de mezcla de Lumme-Rahola con el parámetro  $v$  nulo y la estimación del radio máximo por el método geométrico.

#### AII.4.2. Hielo

A diferencia del hollín, para las partículas de hielo se pueden hacer distintas combinaciones de estudio, como las que se indican en el esquema de la Figura A.38. Se habilita analizar las partículas con la solución de Mie debido al mayor tamaño de estas partículas, mientras que no se puede aplicar la expresión de Rayleigh porque no cumplen las condiciones del régimen de Rayleigh, tal y como se ha comentado anteriormente.

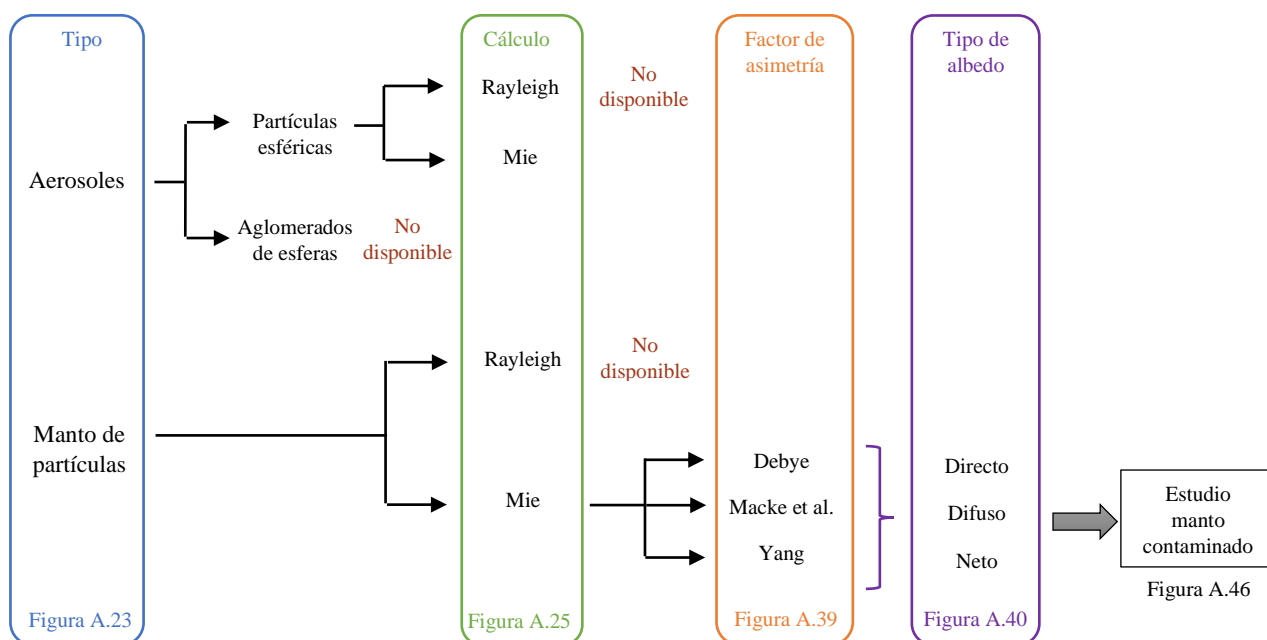


Figura A.38. Esquema de las combinaciones de cálculo posibles para el hielo.

Para realizar el cálculo del factor de asimetría se debe especificar la expresión a emplear, ya que se ofrece la posibilidad de aplicar la ecuación de Debye, la propuesta por Macke et al. especificando los parámetros  $g_{ref}$  y  $g_{dif}$  y la propuesta por Yang donde se debe indicar adicionalmente el valor de  $f_d$ . Los valores de estos parámetros propuestos para el usuario se indican en la Figura A.39.

Factor de asimetría	Debye ▼	
Factor de asimetría	Macke et al. ▼	
	g ref	0.78
	g dif	0.997
Factor de asimetría	Yang ▼	
	$f_d$	0.02
	g ref	0.785
	g dif	0.987

Figura A.39. Selección del tipo de cálculo del factor de asimetría en función de la propuesta de Debye, Macke et al. o Yang.

Por otro lado, también se debe indicar, en el caso de estudio de un manto de partículas, el tipo de albedo que se desea calcular ya sea directo, difuso o neto, debiendo especificar en cada caso, si es necesario, el ángulo cenital y/o la nubosidad existente. Las opciones disponibles se muestran en la Figura A.40.

Albedo	Directo ▼	Ángulo cenital	60
Albedo	Difuso ▼		
Albedo	Neto ▼	Ángulo cenital	60
		Nubosidad (%)	50

Figura A.40. Selección del tipo de albedo: directo, difuso o neto.

Adicionalmente, se debe especificar la profundidad del manto, indicando la densidad superficial y la profundidad mínima y máxima expresada en centímetros. Estos parámetros se introducen en el panel que se muestra en la Figura A.41, donde, también se habilita la opción de representar la densidad del manto en la gráfica existente en la pantalla y los resultados numéricos en la tabla, tal y como se muestra en la Figura A.42.

Densidad	
Densidad superficial (kg/m <sup>3</sup> )	580
Representar	
Profundidad mín - máx (cm)	1 - 100

Figura A.41. Panel en el que se introducen los parámetros para calcular la densidad y poder representarla.

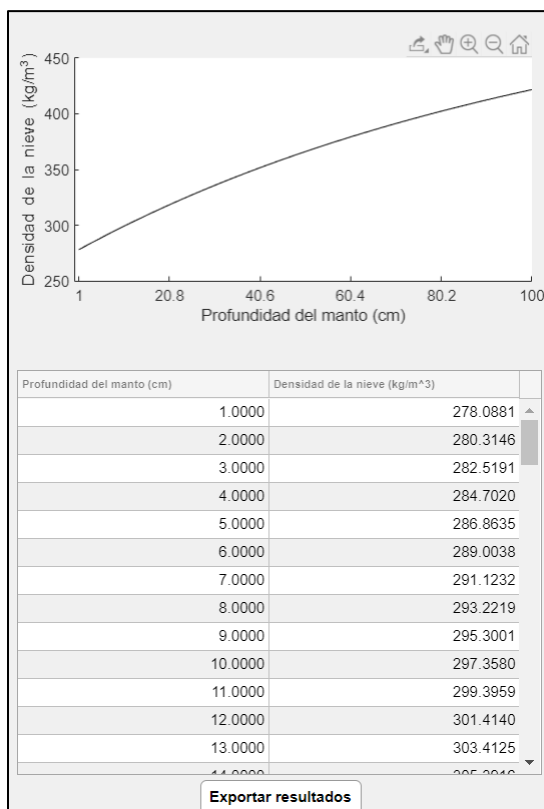


Figura A.42. Representación gráfica y valores numéricos de la densidad de la nieve.

Algunos ejemplos de posibles ejecuciones se muestran a continuación, tanto para aerosoles de hielo como mantos nevados. En la Figura A.43 se muestra un estudio realizado para partículas esféricas de hielo empleando la expresión de Mie mostrando el albedo de dispersión en función de la longitud de onda, mientras que en la Figura A.44 se realiza en función de la energía. Por otro lado, en la Figura A.45 se realiza un estudio del manto nevado mostrando el factor de asimetría (calculado con la expresión de Yang).

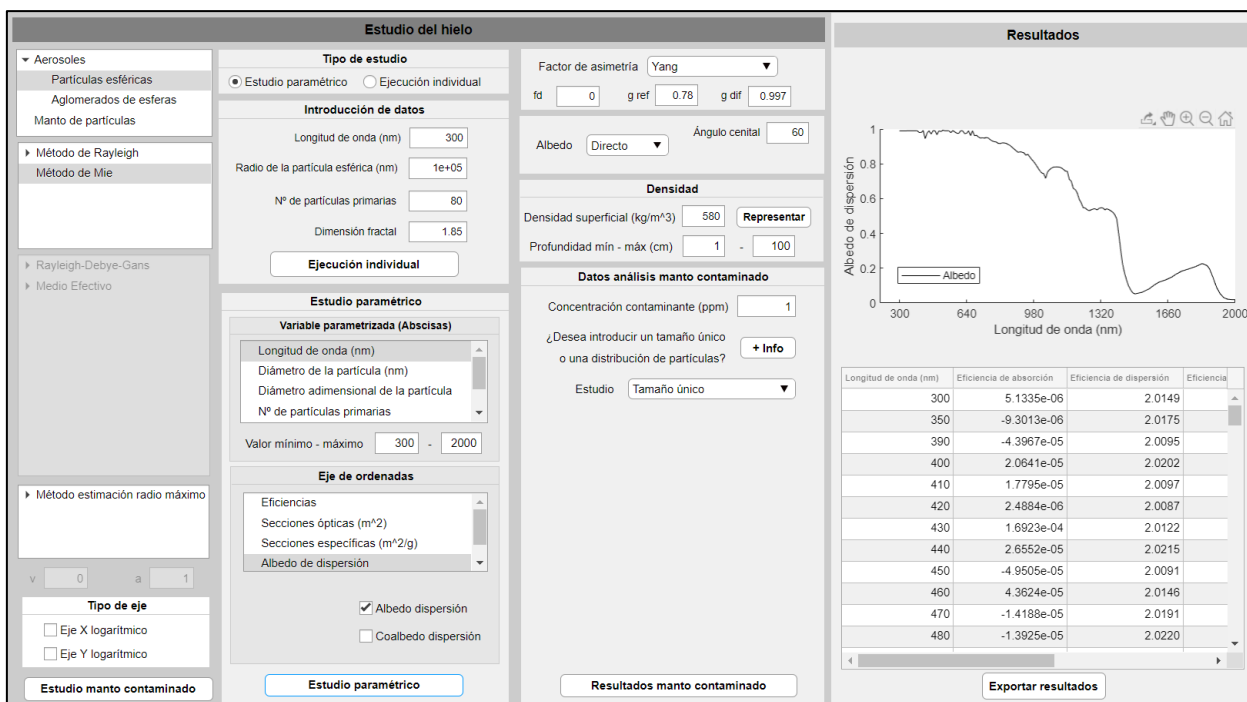


Figura A.43. Estudio de aerosoles de hielo empleando la solución de Mie y mostrando el albedo de dispersión en función de la longitud de onda.

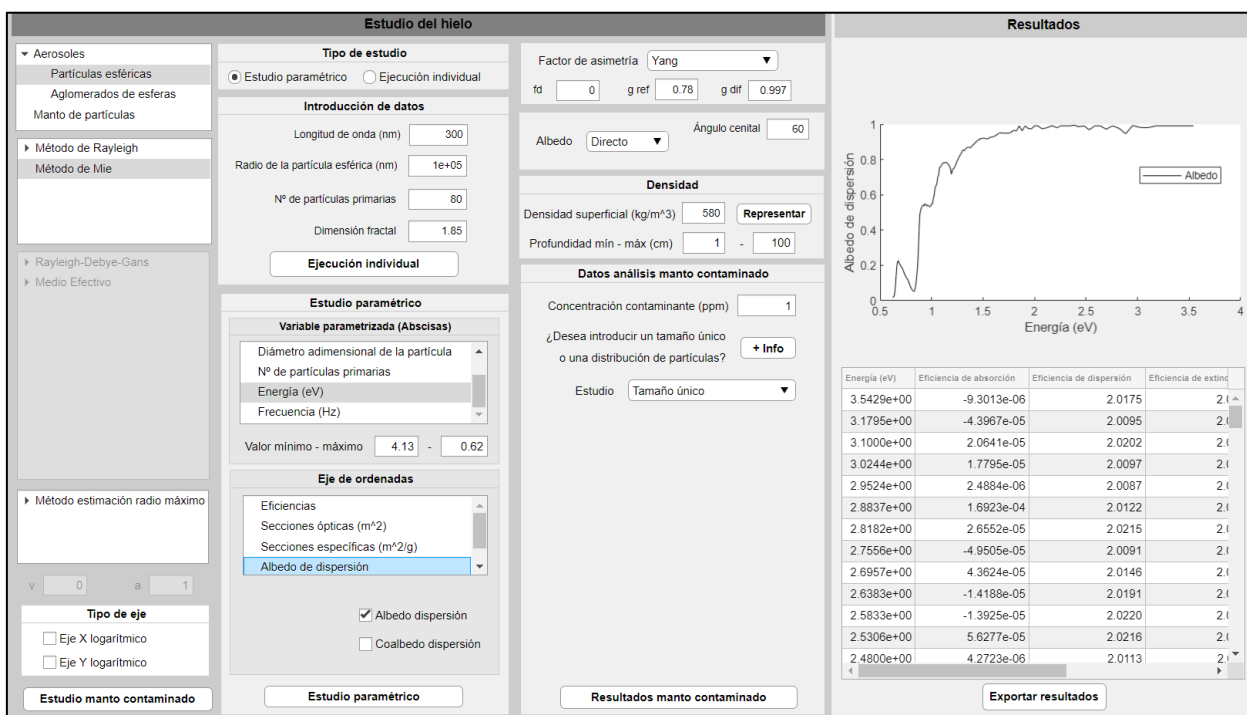


Figura A.44. Estudio de aerosoles de hielo empleando la solución de Mie y mostrando el albedo de dispersión en función de la energía.



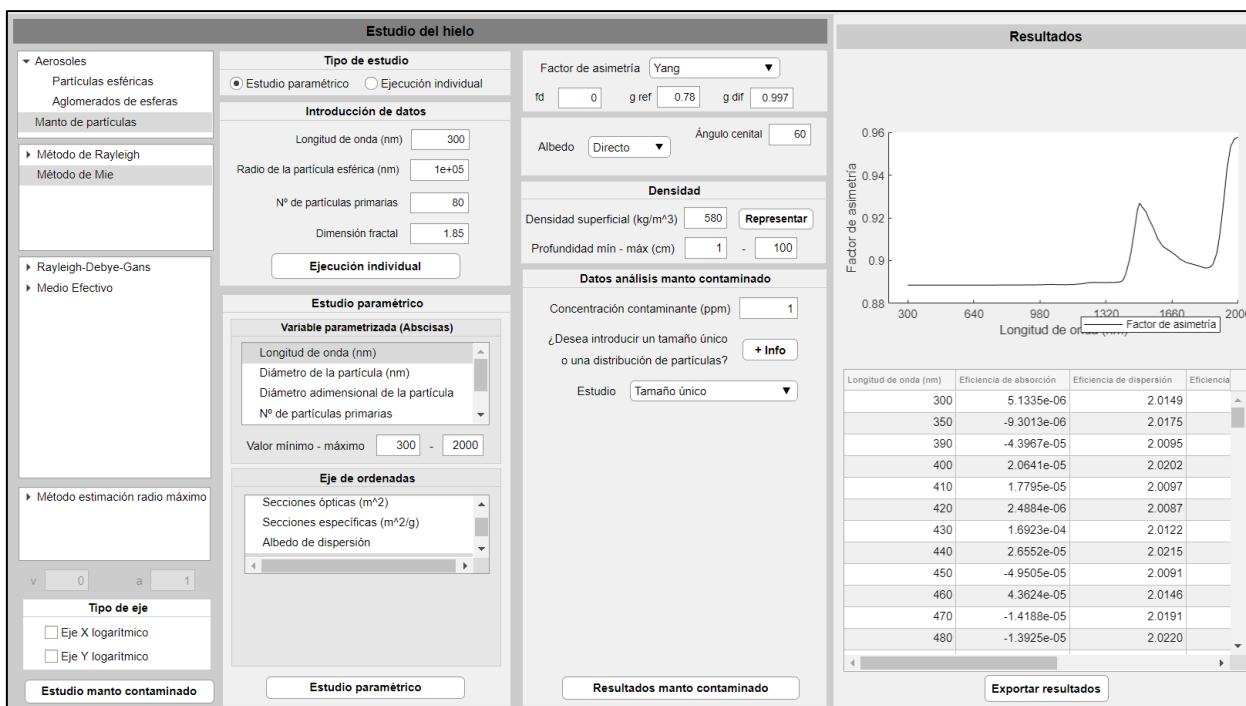


Figura A.45. Estudio del manto de nieve empleando la solución de Mie y mostrando el factor de asimetría obtenido con la expresión y los parámetros de Yang.

Tras haber realizado el estudio del manto de hielo, existe la posibilidad de contaminar dicho manto con partículas de hollín, siendo necesario pulsar el botón “Estudio manto contaminado” que abre la pantalla de “Selección de material” donde se debe escoger el material a contaminar el manto, en este caso hollín, con el que, pulsando “Siguiente” en dicha pantalla, lleva al usuario de nuevo a la pantalla de “Estudio de material”. En dicha pantalla se debe escoger realizar un estudio de aglomerados de esferas e indicar en el panel de la Figura A.49 los parámetros necesarios.

En la Figura A.46 y en la Figura A.47 se muestran un esquema con los pasos a seguir a la hora de realizar un estudio de manto contaminado y un ejemplo con las pantallas, respectivamente. Igualmente, en la Figura A.1 se puede observar en la ruta verde el proceso a seguir si se desea contaminar un manto.

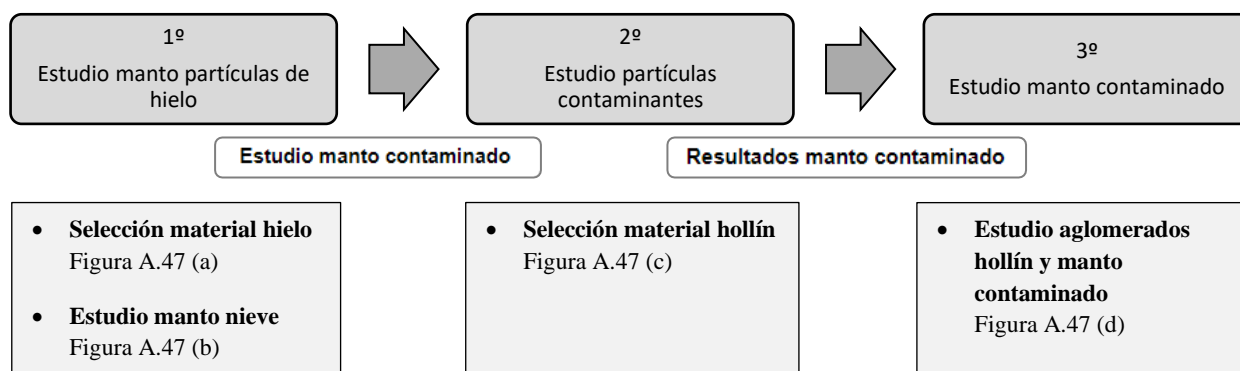
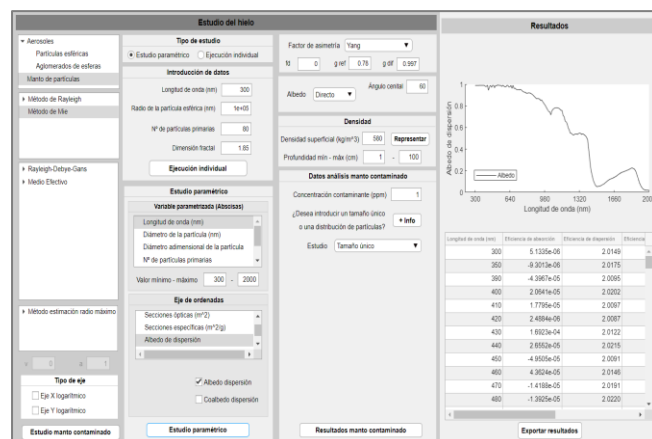


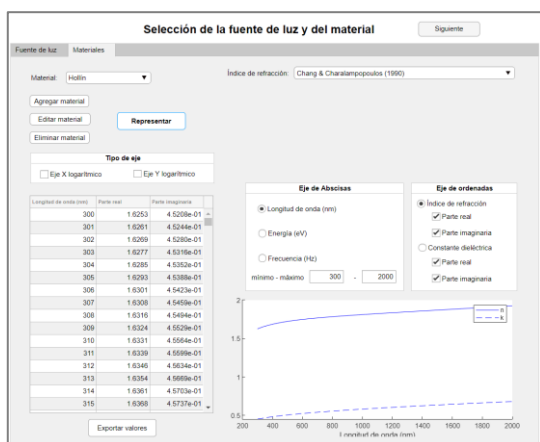
Figura A.46. Esquema de la secuencia de pantallas a seguir en el caso de realizar un estudio del manto contaminado con partículas de hollín.



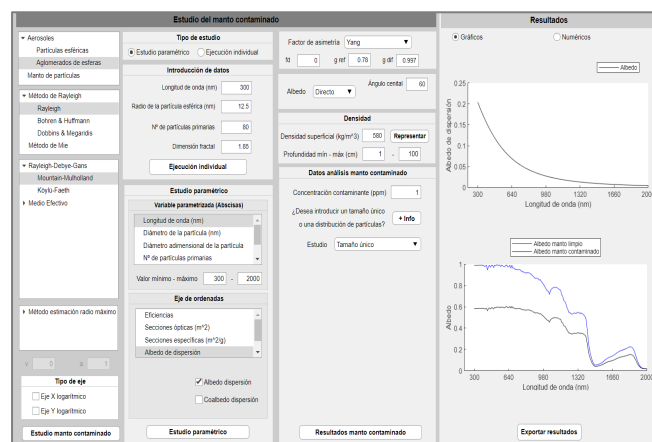
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura A.47. Secuencia de pantallas para realizar el estudio del manto contaminado donde la pantalla (a) hace referencia a la selección del hielo, la (b) al estudio del manto nevado, la (c) a la selección del hollín y la (d) al estudio del manto contaminado.

A la hora de pasar de la pantalla de la Figura A.47 (b) a la pantalla de la Figura A.47 (c) sale un mensaje informativo para el usuario que indica la necesidad de haber realizado un estudio paramétrico de la longitud de onda en la pantalla de la Figura A.47 (b). Este mensaje es el que se muestra en la ventana emergente de la Figura A.48.

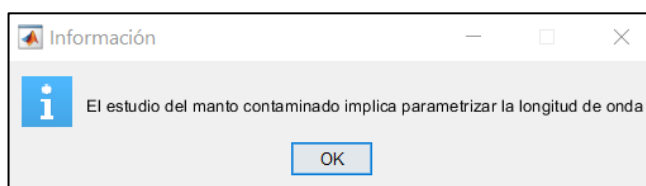


Figura A.48. Pantalla emergente informativa de que es necesario realizar un barrido de longitud de onda el realizar el estudio del manto para poder continuar el estudio del manto contaminado.

Por lo tanto, al seleccionar contaminar el manto con un material, se debe indicar algunos parámetros adicionales, los cuales se indican en la Figura A.49. Es necesario indicar la concentración de contaminante (en partes por millón) así como indicar si se tratan de aglomerados de tamaño único o de una distribución de tamaños de partículas (imponiendo la dimesión fractal o el número de partículas primarias).

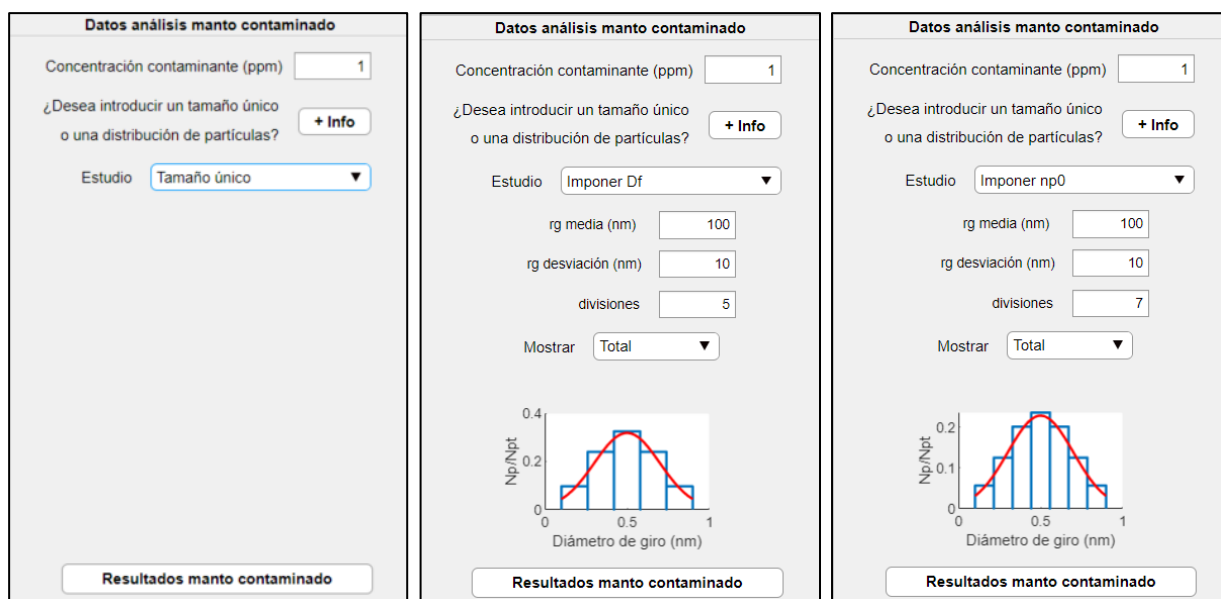


Figura A.49. Panel de estudio con los datos y parámetros a introducir para realizar el análisis del manto contaminado.

Para facilitar al usuario elegir una opción u otra, se incluye un botón “+Info” que abre una pantalla emergente (mostrada en la Figura A.50) que indica las especificaciones y los parámetros necesarios para realizar el estudio.

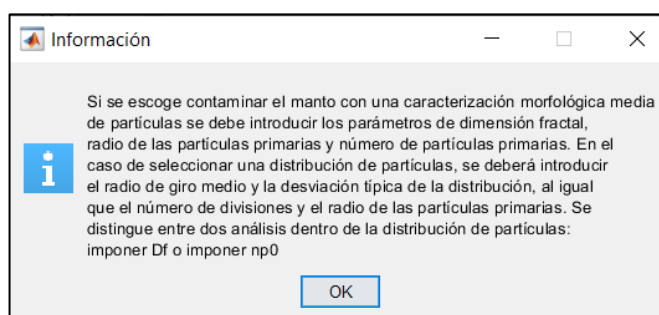


Figura A.50. Pantalla de información acerca de la pregunta de introducir un tamaño de partículas único o de una distribución de tamaños.

Igualmente, si se hace un estudio de distribución de tamaños de partículas (imponiendo  $D_f$  o imponiendo  $n_{p0}$ ) en el desplegable de “Mostrar” que aparece en la Figura A.49 se debe indicar si se desea mostrar todos los canales indicados, la media o un canal en particular, en función del número de divisiones seleccionado anteriormente.

En la Figura A.51 se muestran los resultados de un estudio de un manto contaminado con aglomerados de hollín con tamaño único, mostrando en la gráfica superior el albedo del hollín y en la parte inferior el albedo del manto limpio de la nieve y el manto contaminado. En la Figura A.52 se muestran los mismos resultados, pero numéricos, donde las tablas se sitúan en la misma posición que las gráficas. Esta opción de representar ambas gráficas o ambas tablas de resultados numéricos sólo se puede escoger en el caso de realizar el estudio de los mantos contaminados.

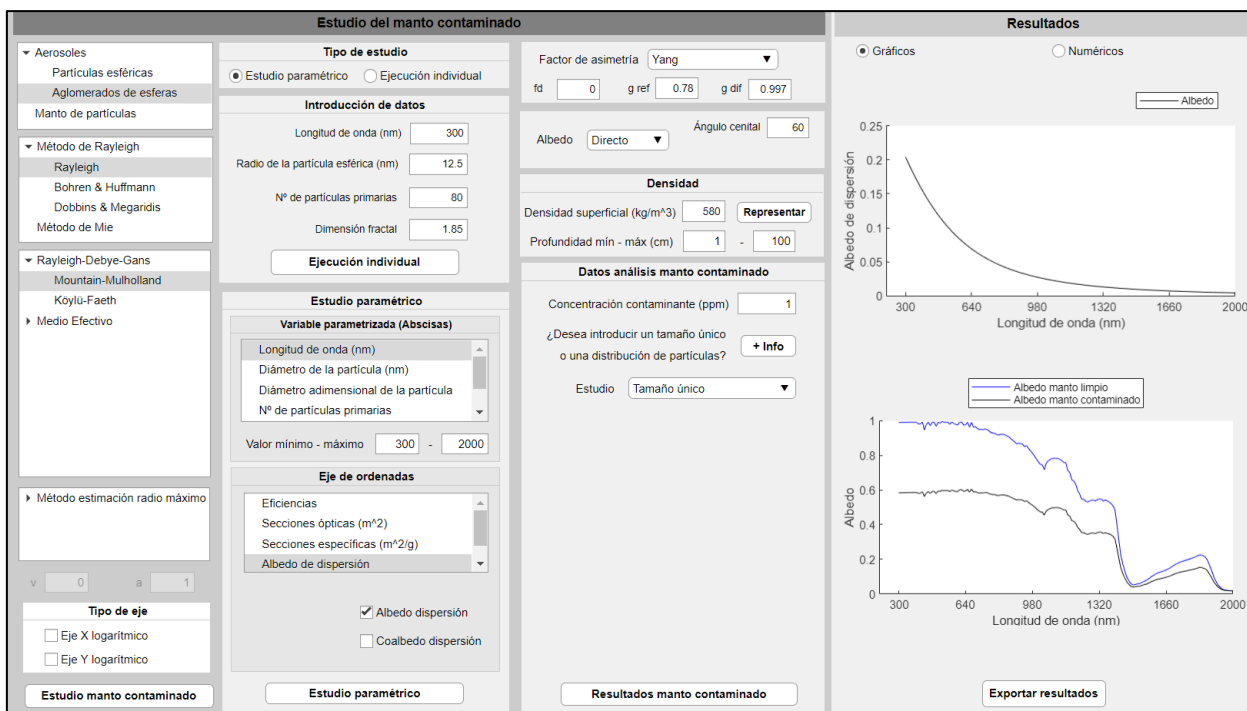


Figura A.51. Ejecución del análisis de manto nevado contaminado con aglomerados de hollín de tamaño único mostrando los resultados gráficos del hollín en la gráfica superior y del manto contaminado en la inferior.

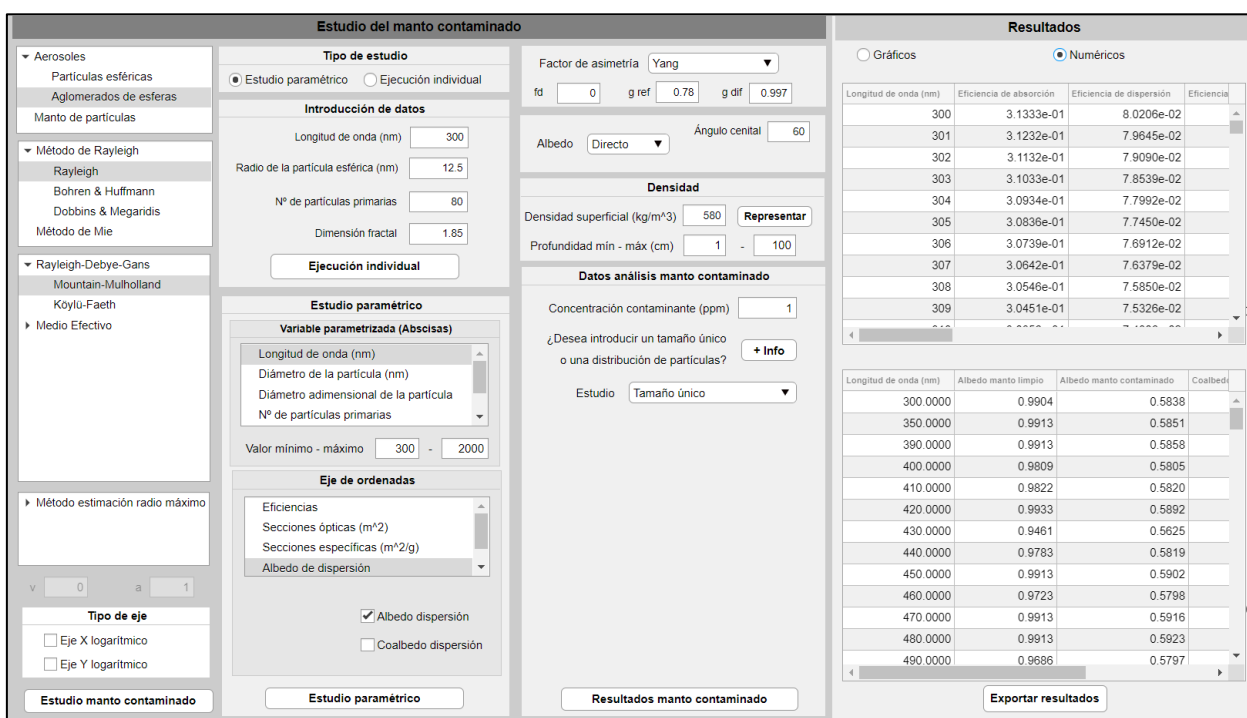


Figura A.52. Misma ejecución que la mostrada en la Figura A.51 pero mostrando los resultados numéricos.

En el caso de seleccionar el estudio de “Imponer  $D_f$ ” o de “Imponer  $n_{p0}$ ”, se debe indicar el radio de giro medio, la desviación de la distribución y el número de canales o divisiones. Esta distribución escogida se muestra en la gráfica de la . Además, es necesario indicar si se desea mostrar los resultados de todos los canales, la media o un canal específico. Tras realizar esto, se pulsa el botón “Resultados manto contaminado” y se obtienen a la derecha de la pantalla los valores numéricos y las gráficas resultantes del material con el que se ha contaminado y del manto contaminado. En la Figura A.53 se muestra un ejemplo

de una ejecución imponiendo la dimensión fractal mostrando las gráficas resultantes (mostrando una ampliación de las gráficas en la Figura A.54 empleando los iconos de la Figura A.9), mientras que en la Figura A.55 se indican los resultados numéricos del estudio realizado.

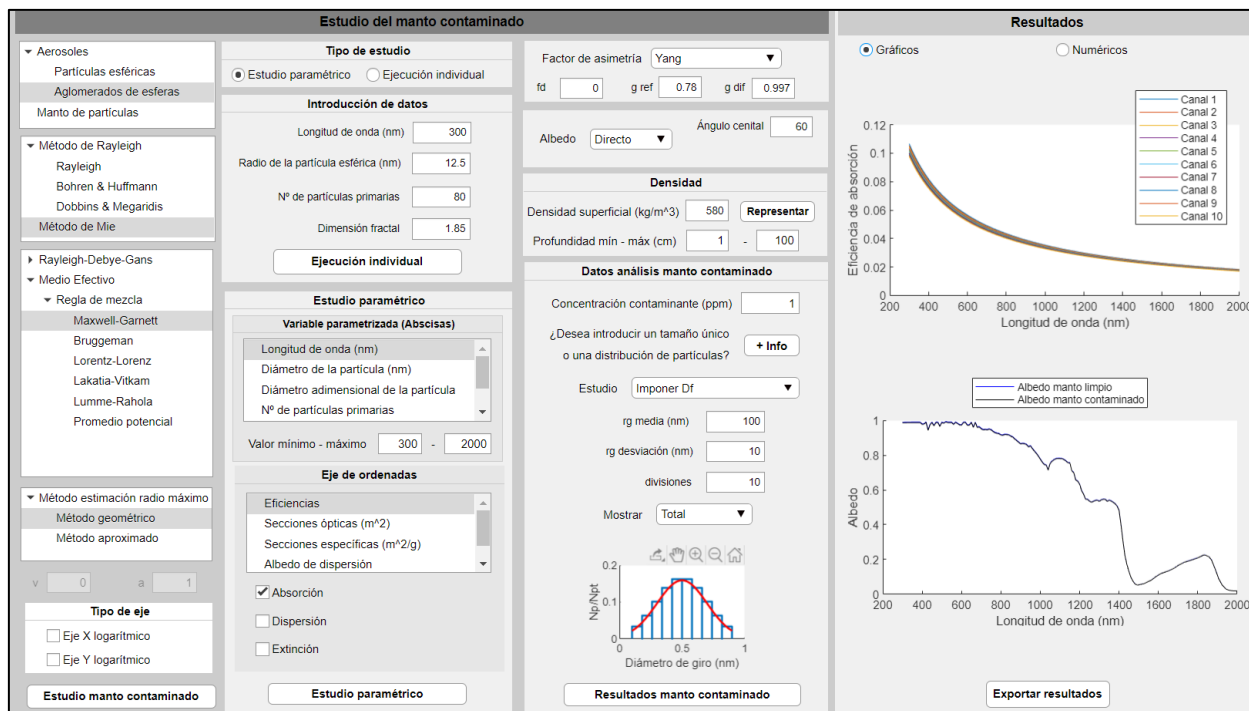


Figura A.53. Ejecución del análisis de manto nevado contaminado con aglomerados de hollín imponiendo la dimensión fractal y mostrando los resultados gráficos del hollín en la gráfica superior y del manto contaminado en la inferior.

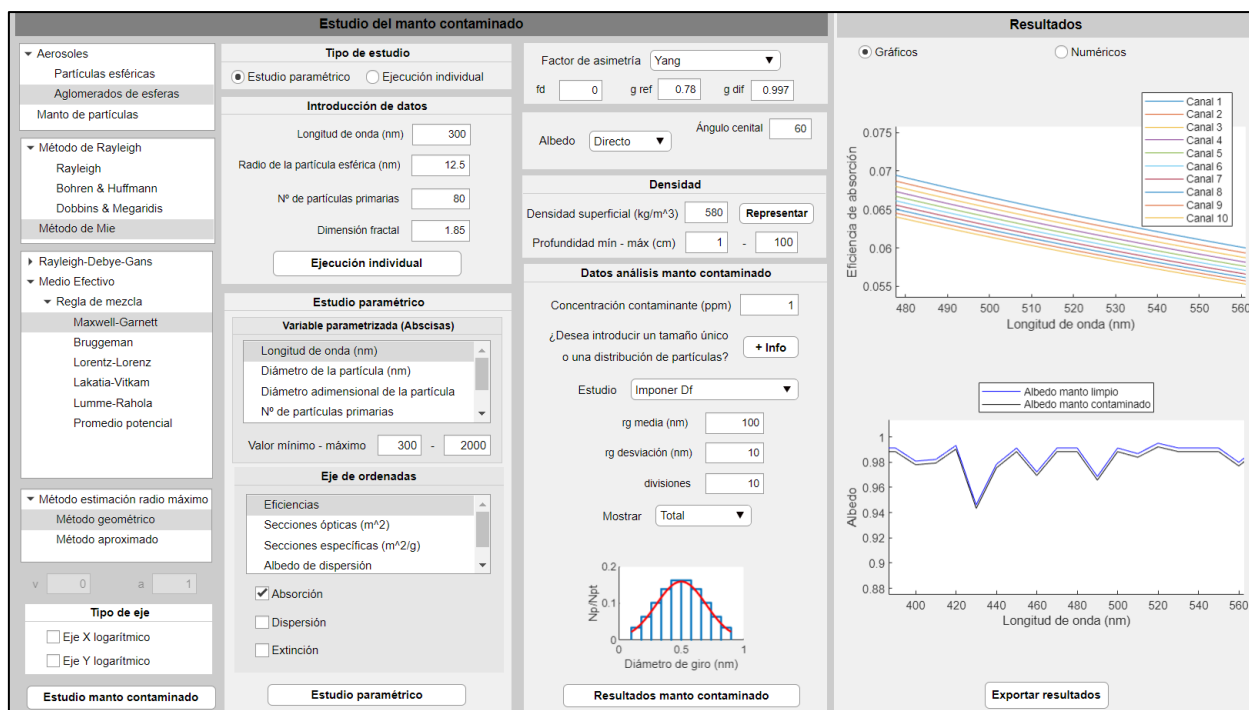


Figura A.54. Ampliación de las gráficas resultantes de la Figura A.53.

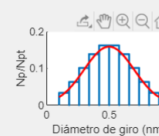
**Estudio del manto contaminado**

**Tipo de estudio**  
☒ Estudio paramétrico ☐ Ejecución individual

**Introducción de datos**  
 Longitud de onda (nm)   
 Radio de la partícula esférica (nm)   
 Nº de partículas primarias   
 Dimensión fractal   
 Ejecución individual

**Estudio paramétrico**  
**Variable parametrizada (Abscisas)**  
 Longitud de onda (nm)  
 Diámetro de la partícula (nm)  
 Diámetro adimensional de la partícula  
 Nº de partículas primarias  
 Valor mínimo - máximo  -

**Eje de ordenadas**  
 Eficiencias  
 Secciones ópticas (m<sup>2</sup>)  
 Secciones específicas (m<sup>2</sup>/g)  
 Albedo de dispersión  
☒ Absorción  
☐ Dispersión  
☐ Extinción

**Factor de asimetría** Yang  
 fd  g ref  g dif   
 Albedo  Ángulo cenital   
**Densidad**  
 Densidad superficial (kg/m<sup>3</sup>)  Representar  
 Profundidad mín - máx (cm)  -   
**Datos análisis manto contaminado**  
 Concentración contaminante (ppm)   
 ¿Desea introducir un tamaño único o una distribución de partículas?   
 Estudio   
 rg media (nm)   
 rg desviación (nm)   
 divisiones   
 Mostrar   
  
 Np/Npt  
 Diámetro de giro (nm)  
 Resultados manto contaminado

**Resultados**  
☐ Gráficos ☒ Numéricos

Longitud de onda (nm)	Eficiencia de absorción	Eficiencia de dispersión	Eficiencia
300	1.0178e-01	1.1503e-02	
301	1.0147e-01	1.1438e-02	
302	1.0117e-01	1.1373e-02	
303	1.0086e-01	1.1309e-02	
304	1.0056e-01	1.1246e-02	
305	1.0026e-01	1.1182e-02	
306	9.9964e-02	1.1120e-02	
307	9.9688e-02	1.1057e-02	
308	9.9375e-02	1.0995e-02	
309	9.9081e-02	1.0934e-02	

Longitud de onda (nm)	Albedo manto limpio	Albedo manto contaminado	Coeficiente
300.0000	0.9904	0.9875	
350.0000	0.9913	0.9883	
390.0000	0.9913	0.9883	
400.0000	0.9809	0.9780	
410.0000	0.9822	0.9793	
420.0000	0.9933	0.9904	
430.0000	0.9461	0.9434	
440.0000	0.9783	0.9755	
450.0000	0.9913	0.9884	
460.0000	0.9723	0.9694	
470.0000	0.9913	0.9884	
480.0000	0.9913	0.9884	
490.0000	0.9686	0.9658	

Exportar resultados

Figura A.55. Misma ejecución que la mostrada en la Figura A.53 pero mostrando los resultados numéricos.