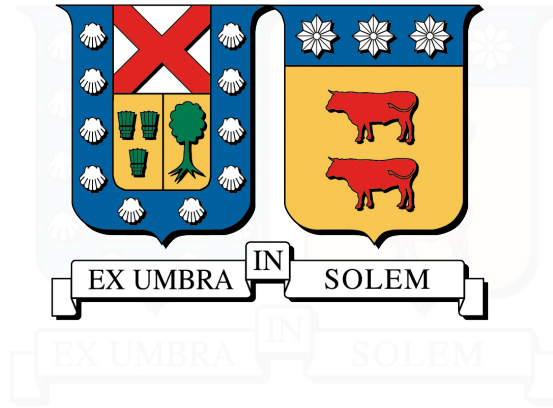


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INDUSTRIAS
VALPARAÍSO - CHILE



RECONSTRUCCIÓN DE CAMPOS DE TEMPERATURA Y VELOCIDAD EN LLAMAS AXISIMÉTRICAS MEDIANTE SPARSE SENSING Y REDES NEURONALES INFORMADAS POR LA FÍSICA

CONSTANZA DELÉN LÓPEZ LOZANO

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA INDUSTRIAL
Y AL TÍTULO DE
INGENIERA CIVIL INDUSTRIAL

PROFESOR GUÍA	:	Dr. FELIPE A. ESCUDERO BARROS
PROFESOR CORREFERENTE INTERNO	:	Dr. RODRIGO A. DEMARCO BULL
PROFESOR CORREFERENTE INTERNO	:	Dr. GONZALO CARVAJAL BARRERA
PROFESOR CORREFERENTE EXTERNO	:	Dr. BENJAMÍN HERRMANN PRIESNITZ

agosto, 2025



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): Memoria o trabajo de título; Tesis de Postgrado;

Título del trabajo: Reconstrucción de campos de temperatura y velocidad en llamas axisimétricas mediante sparse sensing y redes neuronales informadas por la física.

Nombre del candidato(a): Constanza Delén López Lozano

Carrera / Grado: Magíster en Ciencias de la Ingeniería Industrial

Campus: Casa Central Valparaiso ; **Departamento:** Industrias

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Felipe Escudero, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL

El trabajo **NO contiene información que amerite confidencialidad** y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por:

6 meses; 12 meses; 2 años; 3 años; 5 años; 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

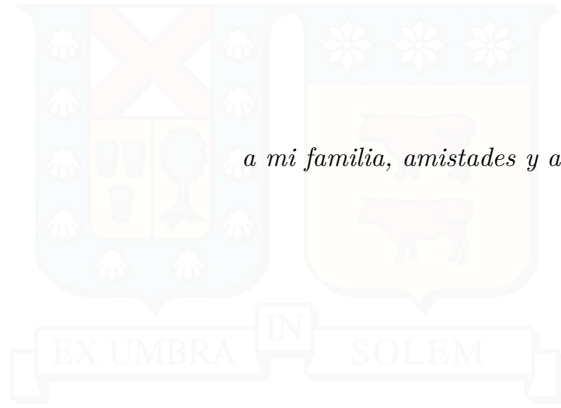
Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 05/08/2025 ; Firma: 

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 05/08/2025 ; Firma: 

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.



a mi familia, amistades y a los bebis...

AGRADECIMIENTOS

Quiero iniciar agradeciendo a mi fan número 1, quien cree en mí cuando yo misma dejo de hacerlo: mi mamá. Es la más preocupada, consentidora, y la mejor cocinera. Con mi mamá me gasté toda la suerte de mi vida: siempre está ahí para mí, me escucha atentamente, me aconseja cuando lo necesito, me hace reír con sus ocurrencias y me prepara los mejores almuerzos. Cada día llego a casa y me espera con el pan recién tostado, con las empanadas fritas o los calzones rotos que le pido, con su lasagna especial o su sopita de pescado. Gracias por tu amor incondicional. Te amo.

A los hombres más importantes de mi vida. Mi papi, quien me ha dado alas para volar y motivarme a alcanzar lo que sea (menos los pedales del auto). Aunque diga lo contrario, me ama más que a Colo-Colo...En este centenario ¿quien le ha dado más alegrías? Mi compañero de juegos olímpicos, juegos panamericanos, tenis y Fórmula 1. Gracias por cuidar de mi, por irme a buscar en la noche, por las pizzas de los martes, por tus chistes malos y por arroparme antes de dormir. Ya tengo 25, pero siempre seré su *cajada chica*. Te amo. Y Diego, como decía la canción de Barney: "*porque siempre ahí está y desea mi bienestar es mi hermano...quiero a mi hermano*". Gracias por soportar mi mal humor y mis llantos; estoy agradecida por la alegría que le traes a mi vida. La pasión y entusiasmo que tienes por tu carrera, y la forma en que vives la vida, me inspiran a ser un poco más como tú.

A mis abuelos que mi cuidan desde el cielo. A mi abuela Lucha, que cada día me recuerda el significado de la paciencia. Te adoro.

Le agradezco a todas las amistades que hice en el camino. En especial a mi Ñaña y a mi Ñaño Nicolás: no puedo imaginar mi vida universitaria sin pensar en ustedes: estudiando en la biblio, botando el carrito de Física 110, reprobando los certámenes de mate 2 y llorando cuando vimos *Coco*. Amigos como ustedes son difíciles de encontrar, soy afortunada de tenerlos.

Gracias a todo el equipo EC2G. A mis chicos franceses: Javier, por el cafecito y el chisme; Valeska, por los consejos y las risas. Amandis y Mathi, por su experiencia y apoyo. A las nuevas generaciones: Javi, Cami, Martín, Max y Laura; son todos muy secos, confíen en ustedes mismos y no duden en pedir ayuda si lo necesitan. A mis profesores Rodrigo Demarco y Gonzalo Olivares, por creer en sus estudiantes y transmitir todo su conocimiento. Y a Felipe Escudero, por darme todas las oportunidades y herramientas para crecer como ingeniera e investigadora; por ser la definición de profesor guía: comprometido, paciente y entusiasta.

A Vincenzo, mi chikis, mi caramelito, mi ayudante de combustión y de métodos no intrusivos. Te agradezco infinito por estar conmigo a la distancia, por compartir tus ideas, por confiar en mí y apoyarme en todo lo que hago. Por las bromitas, los apapachos y por formar la familia Barney-Fiú. Conocerme en el EC2G es lo mejor que me ha pasado, gracias por amarme tal y como soy.

Finalmente, quiero agradecerle a quien abrazo todas las noches: mi pequeño Bebito Barney. Ha estado conmigo desde que tengo memoria y me ha acompañado religiosamente en todo este proceso. Durante incontables noches de desvelo, ha sido mi fiel compañero, mi paño de lágrimas y mi soporte emocional. Te adoro y te llevaré conmigo siempre.

"A veces, las cosas más pequeñas ocupan el mayor espacio en tu corazón." — Winnie the Pooh

RESUMEN EJECUTIVO

Este trabajo presenta una metodología combinada - denominada SSPINNs, que integra la aplicación de Sparse sensing (SS) y redes neuronales informadas por la física (PINNs), para la reconstrucción de campos de temperatura y velocidad en llamas axisimétricas. Mediante SS es posible determinar las posiciones óptimas para un número limitado de mediciones puntuales en regiones libres de hollín, por ejemplo con termocuplas, complementadas con técnicas óptimas no intrusivas basadas en la emisión espectral del soot, el cual solo provee de información en la región de hollín. Se genera una base de datos de campos de temperatura y fracción en volumen de hollín a partir de simulaciones detalladas de llamas que incluyen la una cinética química extensa y mecanismos de formación de partículas. Esta base de datos es aumentada con variaciones aleatorias en su distribución espacial, en magnitud y geometría, dentro de los rangos físico esperados. Usando estos datos, se emplea la descomposición en valores singulares (SVD) para reducir la dimensionalidad, mientras que se hace uso de la descomposición QR para indentificar las posiciones óptimas para los sensores. Este enfoque garantiza una configuración experimental factible para obtener la información de la temperatura en las regiones libre de hollín. Con estas mediciones estatégicamente posicionadas, se reconstruye el campos de temperatura en todo el dominio, aprovechando la aproximación de bajo rango proporcionada por la SVD. Posteriormente, se entrena una PINN a partir del campo de temperatura reconstruido para resolver ecuaciones de transporte de momentum, masa y energía para encontrar el campo de velocidad correspondiente. El método es demostrado en una llama de coflujo en un quemador tipo Yale y validado en un quemador tipo Santoro, donde está disponible la data experimental de velocidad y temperatura. Los resultados muestran que SSPINNs puede estimar la temperatura a partir de las mediciones dispersas de forma confiable, y aproximar con precisión el campo de velocidad sin la necesidad de técnicas experimentales más sofisticadas, como velocimetría por imágenes de partículas (Particle Image Velocimetry, PIV). Por lo tanto, la metodología ofrece una vía prometedora para la caracterización eficiente y basada en datos en sistemas de combustión.

Palabras clave: Reconstrucción de campos de temperatura, ubicación de sensores dispersos, descomposición QR, PINNs, temperatura del hollín, llamas de difusión laminar.

ABSTRACT

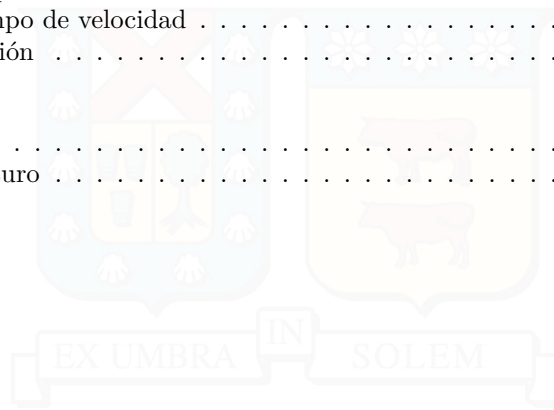
This work presents a combined methodology—referred to as SSPINNs—that integrates optimal sensor placement via sparse sensing (SS) with physics-informed neural networks (PINNs) to reconstruct temperature and velocity fields in axisymmetric flames. The SS procedure determines optimal positions for a limited number of point measurements taken in soot-free regions (e.g., via thermocouples), complementing widely used non-intrusive optical techniques based on soot spectral emission, which only provide data within the sooting region. A database of temperature and soot volume fraction fields is generated from detailed flame simulations that include comprehensive chemical kinetics and particle production mechanisms. This dataset is further augmented with randomized variations in spatial distribution, magnitude, and geometry, within physically expected ranges. Using this augmented dataset, a singular value decomposition (SVD) is employed to reduce dimensionality, while a QR decomposition is used to identify optimal sensor locations. This approach ensures a feasible experimental setup for obtaining complementary temperature information in soot-free regions. With these strategically placed measurements, temperature fields are reconstructed across the entire flow domain leveraging the low-rank approximation provided by the previous SVD. Subsequently, a PINN is trained on the reconstructed temperature field to solve the coupled mass, momentum, and energy transport equations, thereby inferring the corresponding velocity field. The method is demonstrated on a coflow flame from a Yale-type burner and validated on the well-known Santoro flame, where both experimental temperature and velocity data are available. Results show that SSPINNs can reliably estimate temperature from sparse measurements and accurately approximate velocity fields without the need for more sophisticated experimental techniques like particle image velocimetry. Therefore, this methodology offers a promising avenue for efficient, data-driven flow characterization in combustion systems.

Keywords: thermal field reconstruction, sparse sensing, optimal sensor placement, QR decomposition, pinns, soot temperature, laminar diffusion flames.

Índice de Contenidos

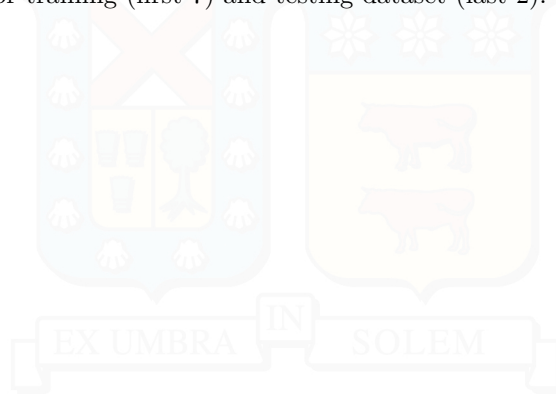
1. Introducción	1
1.1. Objetivo General	3
1.2. Objetivos Específicos	3
2. Antecedentes	4
2.1. Combustión	4
2.1.1. Emisión de gases de efecto invernadero y contaminantes	4
2.1.2. Hollín	6
2.2. Aplicaciones del Sparse Sensing	7
2.2.1. Digital Twins y simulaciones	7
2.2.2. Dinámica de fluidos computacional	8
2.2.3. Monitoreo y diagnóstico estructural	8
2.2.4. Pysensors	9
2.3. Aplicaciones las PINNs	9
3. Marco teórico	10
3.1. Llamas laminares de difusión	10
3.2. Temperatura del hollín	11
3.2.1. Técnicas ópticas para la medición de temperatura	11
3.2.2. Deconvolución de Onion-Peeling	12
3.2.3. Técnicas de medición de temperatura fuera de la zona de hollín	13
3.2.4. Limitaciones y motivación para métodos alternativos	14
3.3. Sparse Sensing	14
3.3.1. Descomposición ortogonal propia	15
3.3.2. Sparse Sensing para la reconstrucción	15
3.3.3. Descomposición SVD	16
3.3.4. Factorización QR	17
3.4. Redes Neuronales	19
3.4.1. Redes Neuronales Artificiales	19
3.4.2. Redes neuronales informadas por la física	20
3.4.3. Ecuaciones físicas consideradas	21
3.4.4. Aplicaciones y desafíos	22
4. Metodología	24
4.1. Generación de datos	25
4.1.1. Llamas simuladas	26
4.1.2. Aumento del conjunto de datos	26
4.2. Reconstrucción mediante SS	27
4.2.1. Formulación general del problema	27
4.2.2. Restricciones de ubicación	27
4.3. Aplicación de PINNs para la recuperación de la velocidad	32
4.3.1. Formulación del problema físico	32
4.3.2. Normalización de las ecuaciones	34
4.3.3. Estructura de la red neuronal y funciones de pérdida	34
4.3.4. Dominio de entrenamiento y condiciones de borde	37
4.3.5. Optimización y hardware	38
4.3.6. Pipeline de entrenamiento de la PINN	38
4.3.7. Integración con resultados	39

4.4. Validación de la metodología propuesta	40
4.4.1. Validación numérica	40
4.4.2. Validación experimental	41
4.4.3. Frameworks y herramientas utilizadas	42
5. Análisis de Resultados	43
5.1. Estimación de temperatura mediante SS	43
5.2. Estimación del campo de velocidad	44
5.3. Validación y discusión	47
6. Discusión	50
6.1. Conclusiones	50
6.1.1. Trabajo Futuro	51
Bibliografía	53



Índice de Tablas

4.1. Flame conditions for training (first 7) and testing dataset (last 2). 26



Índice de Figuras

2.1. Balance Nacional de Energía. Unidades en TCal.	5
2.2. Ilustración gráfica de los procesos de formación de hollín.	6
3.1. Llama de difusión laminar en coflujo	10
3.2. (a) Evaluación de la distribución del coeficiente de absorción espectral dentro de una llama axisimétrica, y (b) discretización del dominio del problema.	13
3.3. Conjunto de datos \mathbf{X}	16
3.4. Representación Descomposición SVD.	17
3.5. Representación Descomposición SVD truncada.	17
3.6. Metodología de selección de sensores.	18
4.1. Esquema de la metodología SSPINNs	24
4.2. Conjunto de datos	25
4.3. Representación matricial de la disponibilidad de sensores	31
4.4. Dominio de entrenamiento para la PINN, mostrando los collocation points internos y las condiciones de borde aplicadas en cada frontera.	37
4.5. Esquema que integra los resultados del SS con el entrenamiento de la PINN.	39
4.6. Representación de la reconstrucción de temperatura mediante SS	40
5.1. Comparación de la reconstrucción de la temperatura utilizando SS y SS con sensores predeterminados. Los puntos blancos indican la ubicación de los sensores.	43
5.2. Residuo de la función de pérdida durante el entrenamiento para la predicción de los campos v and u respectivamente, para la llama de testeo Santoro en las iteración 3600, 7400, 11200 y 14800.	45
5.3. Comparación de los resultados de velocidad utilizando PINN y diferentes inputs de campos de temperatura para el entrenamiento.	46
5.4. Dispersión en la reconstrucción del campo de temperatura y velocidad.	47
5.5. Comparación de los diferentes campos de temperatura obtenidos.	49

1 | Introducción

El uso intensivo de combustibles fósiles durante los últimos 100 años ha dejado múltiples consecuencias en el planeta, contribuyendo enormemente al calentamiento global y perjudicando la calidad del aire y la salud de las personas. La exposición continua a contaminantes derivados de la combustión, como las pequeñas partículas de hollín, puede provocar enfermedades respiratorias crónicas, asma, cáncer de pulmón y problemas cardiovasculares [1], afectando la calidad de vida de la población y disminuyendo su esperanza de vida [2].

Específicamente, las partículas de hollín son un subproducto de la combustión incompleta que es conocido por su potencial cancerígeno y su tamaño, lo que permite a estas partículas penetrar profundamente en los pulmones [3]. Es por esto que una caracterización exhaustiva de las propiedades del hollín y su producción es esencial para cumplir con las regulaciones y así mejorar la comprensión de los procesos de combustión. Para facilitar este estudio se suelen emplear técnicas no intrusivas bien controladas y repetibles basados en la emisión de las partículas de hollín, aplicados en configuraciones más sencillas como por ejemplo en llamas laminares axisimétricas de coflujo.

La información extraída de dichos diagnósticos ópticos puede ser usada para desarrollar y testear cinéticas químicas y modelos de producción de hollín, que puedan ser empleados en configuraciones más complejas como llamas turbulentas, las cuales están presentes en sistemas industriales [4, 5]. Sin embargo, el uso de estas técnicas necesita de la resolución de un problema mal condicionado, resultando en un mayor error, especialmente en la línea central de la llama [6].

Además, se requiere de una producción considerable de hollín para que sea posible convertir estas señales en propiedades relevantes para su estudio, como la fracción en volumen de hollín (f_s) y la temperatura, ya que estas técnicas dependen de la radiación de cuerpo negro del hollín. Esto implica que su aplicación se ve limitada en llamas con bajas concentraciones de hollín o en regiones alejadas de la zona de formación de partículas, como la zona de gases de combustión. En estos casos, la caracterización completa de la llama requiere la implementación de diagnósticos complementarios, que permitan acceder a la temperatura y a otras variables clave fuera de la región de emisión de hollín, asegurando así una representación integral del comportamiento térmico de la llama [7, 8, 9].

Las simulaciones numéricas pueden ser de ayuda para caracterizar llamas y sus propiedades, sin embargo la modelación computacional de estas requiere del manejo de cinéticas químicas complejas lo que incluye: i) identificar las especies involucradas en el proceso de combustión, ii) comprender los mecanismos de formación y crecimiento del hollín, iii) determinar cómo las propiedades de la superficie que afectan el crecimiento y la oxidación. Esto supone además un alto costo computacional [10].

Por estas razones, es esencial identificar mejores alternativas en términos de costo y efectividad, que permitan el análisis de las características del hollín a partir de información limitada. En este contexto, el uso de herramientas de Data Driven y Machine Learning (ML) puede ser una alternativa

para mejorar la precisión y eficiencia tanto en la experimentación como en el modelado numérico.

Un enfoque efectivo es el uso de Sparse Sensing (SS), recientemente desarrollado por Manohar et al. [11], el cual que permite una reconstrucción precisa de campos dinámico a partir de una pequeña cantidad de mediciones estratégicamente posicionadas, lo cual es adecuado para sistemas como este donde la recolección de datos es desafiante y computacionalmente costosa.

Ese trabajo combina un algoritmo de tipo greedy basado en la factorización QR para la selección de sensores óptimos [12] con una representación de bajo rango del campo de interés, en términos de una descomposición ortogonal propia (proper orthogonal decomposition, POD) en modos [13], obtenidos desde un conjunto de observaciones de los campos completos [11]. Este marco de trabajo fue extendido para tener en cuenta las ubicaciones restringidas o más costosas [14], siendo empleado en una variedad de aplicaciones incluyendo la reconstrucción de campos de velocidad en flujos turbulentos, la construcción de gemelos digitales para el control y monitoreo de sistemas complejos en reactores [15] y hornos [16, 17, 18], y en la identificación de separaciones en el ensamblado de aeronaves [19].

Por otra parte, las redes neuronales han sido consistentemente aplicadas en los últimos años para asistir tanto a las simulaciones numéricas como a las mediciones experimentales. Sin embargo, generalmente se entienden como cajas negras que requieren de una gran cantidad de datos para el entrenamiento [20]. En ese contexto, las PINNs han emergido como un enfoque prometedor para aprovechar las mediciones disponibles e incorporar las leyes de la física en el proceso de aprendizaje [21].

Las PINNs identifican soluciones óptimas en escenarios complejos ya que integran las ecuaciones gobernantes dentro de su función de pérdida. Por esta razón, son un método eficiente para la reconstrucción precisa de datos, particularmente en fenómenos físicos complejos. Por ejemplo, existen investigaciones previas donde se han aplicado PINNs para mejorar las técnicas de reconstrucción existentes en campos de estudio como la combustión y la dinámica de fluidos [22, 23, 24].

Se propone una metodología combinada basada en SS y PINNs para reconstruir campos de temperatura y velocidad en llamas axisimétricas no premezcladas. SS permitirá recuperar campos de temperatura en todas las regiones de la llama a partir de mediciones experimentales no intrusivas en la zona de hollín y mediciones puntuales con termocuplas en ubicaciones óptimas fuera de esta zona. Para ello, se emplearán algoritmos de SS con restricciones para la elección de los sensores óptimos, lo que facilitará el proceso de validación experimental de la técnica, aportando con información adicional sobre el sistema estudiado. Posteriormente, el campo de velocidad se obtendrá mediante una PINN entrenada con los datos del campo de temperatura reconstruido. En primera instancia, esta estrategia se evaluará con un modelo numérico basado en simulaciones de fracción en volumen de hollín, temperatura y velocidad en llamas de coflujo, para luego dar paso a la validación experimental.

Este enfoque permite que solo sea necesario el uso de técnicas clásicas ampliamente usadas por la comunidad que estudia la combustión, como line-of-sight attenuation (LOSA), complementada con unas pocas mediciones de temperatura por termocuplas y las leyes de la física, sea posible recuperar campos completos de temperatura y velocidad en toda la llama. De esta manera, se reduce significativamente el costo experimental al evitar técnicas más complejas como PIV o el uso de una gran cantidad de otras herramientas experimentales.

1.1. Objetivo General

Aplicar estrategias de *Sparse Sensing* y *redes neuronales informadas por la física* para reconstruir campos de temperatura y velocidad en llamas de difusión axisimétricas, incorporando restricciones para la ubicación óptima de los sensores, y aprovechando información física para inferir variables no medidas a partir del campo térmico reconstruido.

1.2. Objetivos Específicos

1. **Reconstruir el campo de temperatura** a partir de mediciones puntuales integrando técnicas de *Sparse Sensing*, considerando restricciones experimentales asociadas a la geometría de la llama y la accesibilidad de regiones críticas.
2. **Estimar el campo de velocidad** empleando *redes neuronales informadas por la física* que utilicen el campo de temperatura reconstruido como entrada, garantizando consistencia con las ecuaciones de conservación de masa, energía y transporte de momentum.
3. **Aplicar y validar la metodología** en escenarios experimentales, utilizando el procedimiento de reconstrucción propuesto, junto con la realización mediciones con termocuplas y técnicas ópticas no intrusivas, para evaluar la precisión y robustez del enfoque SSPINNs en llamas laminares de laboratorio.
4. **Analizar y discutir los resultados obtenidos** para evaluar la precisión, robustez y aplicabilidad del enfoque combinado SSPINNs, identificando posibles mejoras, limitaciones actuales y futuras líneas de desarrollo.

2 | Antecedentes

2.1. Combustión

La combustión es un proceso exotérmico de oxidación rápida donde un combustible, típicamente un hidrocarburo, reacciona con un oxidante, liberando energía térmica, luz y productos gaseosos. Termodinámicamente, se trata de una reacción redox que se sostiene cuando el calor liberado supera las pérdidas energéticas del sistema. Parámetros como la temperatura de ignición, la relación estequiométrica y el tiempo de residencia determinan el régimen de llama y la eficiencia de la combustión [25, 26].

En condiciones ideales, la combustión produce CO_2 y H_2O , pero en la práctica, factores como la mezcla deficiente o la falta de oxígeno generan productos incompletos como CO , NO_x , hidrocarburos no quemados (UHCs) y hollín. En llamas de difusión, comunes en aplicaciones industriales, las zonas ricas en combustible favorecen la formación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (polycyclic aromatic hydrocarbons, PAHs) y nanopartículas de hollín [27, 28].

La formación de estos productos de combustión incompleta está fuertemente condicionada por el campo de temperatura y las condiciones locales del flujo, que controlan tanto las tasas de reacción como el transporte y el tiempo de residencia del combustible. Este aspecto es central para esta tesis, ya que la reconstrucción precisa de los campos térmicos y de velocidad es esencial para comprender y predecir la evolución del hollín.

Por esta razón, el estudio detallado del campo térmico y de las condiciones hidrodinámicas resulta esencial para comprender y predecir la formación de hollín, motivando el desarrollo de metodologías avanzadas de reconstrucción de temperatura y velocidad como las abordadas en esta tesis.

2.1.1. Emisión de gases de efecto invernadero y contaminantes

La combustión de hidrocarburos en vehículos, centrales y biomasa genera emisiones significativas de gases de efecto invernadero (CO_2 , CH_4 , NO_x) y partículas finas (PM_{2-5}), responsables de graves consecuencias sanitarias y climáticas. Según la OMS, más del 99 % de la población vive en áreas con contaminación por partículas superior a las directrices que reducen el riesgo para la salud, estimándose 4.2 millones de muertes prematuras por contaminación ambiental en 2021 y cerca de 6.7 millones incluyendo el total del aire interior y exterior [29].

Las evidencias epidemiológicas son contundentes: Dockery et al. (1993) [2] observaron que un aumento de $10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ en PM_{2-5} se asocia con incrementos en mortalidad por enfermedades respiratorias y cardiovasculares en seis ciudades de EEUU [30]. Posteriormente, Pope et al. (2002) [31] identificaron asociaciones claras entre exposición prolongada a partículas finas y cáncer de pulmón, así como mortalidad cardiopulmonar.

Como consecuencia, la Organización Mundial de la Salud (OMS) ha endurecido sus recomendaciones, fijando en 2021 un nuevo límite anual para PM_{2-5} de solo $5 \mu g/m^3$, reduciendo a la mitad su valor anterior, y afirmando que no existe un umbral seguro por debajo del cual no se observen efectos sobre la salud [32].

Además del impacto directo sobre la salud, estas emisiones contribuyen significativamente al cambio climático. El CO_2 es el principal gas de efecto invernadero antropogénico, responsable de más del 60 % del forzamiento radiativo neto desde 1750. Sin embargo, contaminantes como el hollín (black carbon) también tienen un impacto climático directo, ya que absorben radiación solar y alteran la dinámica de nubes y el albedo de superficies nevadas. De hecho, el hollín tiene un potencial de calentamiento global cientos de veces superior al CO_2 en escalas de tiempo cortas (20 años), lo que lo convierte en un objetivo clave para mitigación climática a corto plazo [33, 34].

La combustión sigue siendo un componente central de la matriz energética global y nacional. En Chile, sectores estratégicos como la generación eléctrica, el transporte y la minería mantienen una alta dependencia de combustibles fósiles, debido a su alta densidad energética y confiabilidad operativa. Según el Balance Nacional de Energía 2023, aproximadamente el 56 % del consumo final de energía en el país corresponde a derivados del petróleo, lo que sitúa a esta fuente como dominante en la matriz energética nacional [35]. Además, el mismo informe indica que el sector de Industria y Minería consumió el 37,7 % del total energético, consolidándose como el mayor usuario de energía en términos sectoriales.

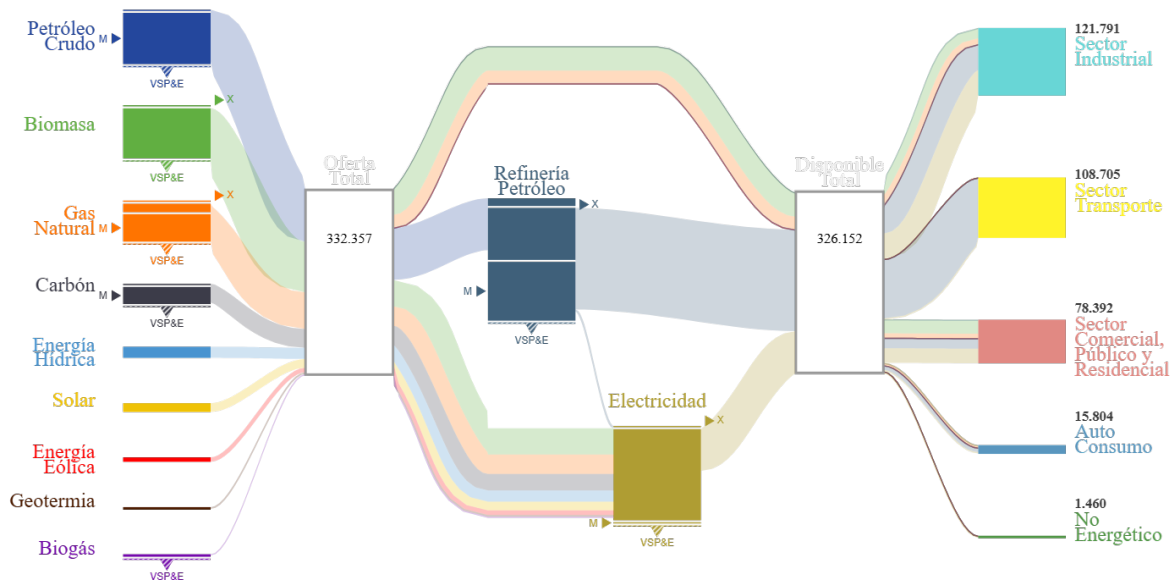


Figura 2.1: Balance Nacional de Energía. Unidades en TCal.

Fuente: Ministerio de Energía [35].

Estos datos demuestran que, aunque las energías renovables están ganando participación en la generación eléctrica (68 % en 2024), el uso de combustibles fósiles persiste de forma sustancial, sobre todo en procesos industriales de alta demanda térmica como la minería, producción de acero y cemento.

En este contexto, los combustibles fósiles siguen siendo la principal fuente de energía en estos sectores estratégicos y no tiene una sustitución inmediata viable en el corto plazo.

Este contexto evidencia que, pese a los esfuerzos de transición energética, la combustión continuará desempeñando un papel relevante durante los próximos años. Por ello, resulta crucial comprender en detalle sus procesos fundamentales; incluyendo la distribución de temperatura, las condiciones del flujo y la formación de contaminantes como el hollín, y así mejorar la eficiencia energética, optimizar los sistemas de combustión y mitigar los impactos sobre la salud y el clima.

2.1.2. Hollín

El *black carbon*, también conocido como hollín, se genera por la combustión incompleta y constituye una fracción peligrosa del PM_{2-5} . Estas nanopartículas penetran profundamente en los pulmones y en la circulación sistémica, desencadenando respuestas inflamatorias, estrés oxidativo, y daños genéticos. Estudios epidemiológicos han vinculado la exposición a black carbon con un aumento significativo en enfermedades cardiovasculares, respiratorias y muertes prematuras [36, 37]

En particular, la formación de nanopartículas de hollín en llamas de difusión ocurre bajo condiciones muy específicas, que combinan una mezcla rica en combustible ($\phi > 1$), temperaturas intermedias entre 1300 y 1800 K y un tiempo de residencia suficiente para que se produzcan las etapas de nucleación, crecimiento superficial y agregación de partículas [38], como se muestra en la Figura 2.2.

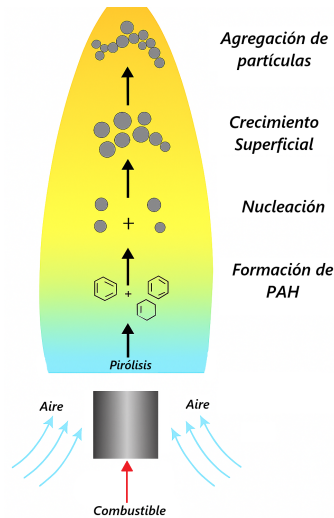


Figura 2.2: Ilustración gráfica de los procesos de formación de hollín.

Fuente: Xi et al. [39]

En estas condiciones, los PAHs evolucionan hacia nanoesferas primarias de carbono, que luego pueden coagularse formando agregados fractales característicos del hollín. Fuera de estas regiones, por ejemplo, en zonas de post-llama o en la periferia de llamas pobres en hollín, la producción de nanopartículas es mínima, lo que dificulta la aplicación de técnicas ópticas basadas en radiación de cuerpo negro.

A nivel fisiológico, el hollín actúa tanto de forma directa como vehículo de contaminantes tóxicos. Niranján y Thakur (2017) [40] reportan que induce estrés oxidativo, inflamación crónica y daño al ADN, lo que puede desencadenar enfermedades crónicas y cáncer. Shiraiwa et al. (2012) [41] y Pöschl (2020) [42] destacan además que el hollín transporta PAHs, proteínas alergénicas y especies reactivas de oxígeno, incrementando su toxicidad.

Desde el punto de vista climático, el hollín contribuye significativamente al calentamiento global. Según Bond et al. (2013)[33], el hollín es el segundo mayor contribuyente al calentamiento global después del CO₂, especialmente en escalas de tiempo cortas. Su impacto también es particularmente importante en regiones con nieve o hielo, ya que al depositarse sobre estas superficies reduce su albedo y acelera su derretimiento.

Estas investigaciones refuerzan la necesidad de estudiar la temperatura y concentración de hollín en plataformas controladas (como llamas laminares), para comprender mejor su evolución, propiedades ópticas y su efecto en los procesos de emisión. La disponibilidad de datos cuantitativos permitidos por las metodologías ópticas es clave para modelar el comportamiento del hollín en condiciones reales, cerrando así el ciclo entre experimentación y evaluación climática.

2.2. Aplicaciones del Sparse Sensing

El SS surge como una técnica poderosa para el análisis y modelado de sistemas complejos, permitiendo reconstruir campos físicos a partir de un número reducido de mediciones estratégicamente ubicadas. Para esta tesis, su aplicación se centra en la reconstrucción de un campo de temperatura con alta precisión, reduciendo la cantidad de sensores necesarios y optimizando tanto los recursos computacionales como experimentales.

El SS se fundamenta en la teoría de la compresión de datos y la representación dispersa, donde se busca representar una señal o campo de manera eficiente con el menor número de muestras posible, lo que a su vez se basa en la premisa del *Compressed Sensing*. Donoho, D. [43] demostró que a través de esta metodología, señales de alta dimensión pueden ser recuperadas con un número muy reducido de muestras. Entonces, un objeto, representado por un vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, puede ser compresible y reconstruido por solo un cantidad m de la información de \mathbf{x} , donde $m \ll n$.

2.2.1. Digital Twins y simulaciones

En el contexto de la reconstrucción de campos físicos, SS ha sido ampliamente utilizado para optimizar la ubicación de sensores en sistemas donde las mediciones son costosas o invasivas. Manohar et al. [11] demostró su efectividad en flujos turbulentos, sentando bases para su aplicación en *Digital Twins* (DTs) de sistemas dinámicos. Dicha investigación ha dado paso a la aplicación del SS en reactores nucleares [16] para la construcción de DTs.

Un *Digital Twins* o gemelo digital es la simulación de un sistema, que integra modelación física tanto espacial como temporal, actualización con sensores, estadísticas, entre otra información que

permita reflejar el estado en tiempo real de su sistema “gemelo” [44], lo que es útil en características críticas como almacenamiento de energía, propulsión, protección térmica y/o soporte vital. El Sparse Sensing brinda de una metodología ideal para la creación de estos sistemas.

En combustión, Procacci et al. [15] emplearon SS para desarrollar un DT capaz de predecir la distribución de temperatura con errores menores a los de simulaciones numéricas, en un reactor operando bajo condiciones MILD¹. De manera similar, en el trabajo de Aversano et al. [17] se validó un DT para la predicción de la distribución temperaturas y especies contaminantes en un horno, a través de Compressed Sensing. Mas recientemente, Donato et al. [18] combina mediciones experimentales y simulaciones numéricas en CFD (Computational fluid dynamics) para construir un DT de un horno industrial aplicando SS y Gaussian Process Regression (GPR).

2.2.2. Dinámica de fluidos computacional

Los métodos basados en datos presentan un gran desafío, justamente son altamente dependientes de la base de datos, la cual es fundamental para el entrenamiento de los modelos que se busca desarrollar. Lamentablemente, en muchos casos la información experimental es difícil de replicar y/o las simulaciones numéricas pueden requerir supercomputadores que funcionen durante largos periodos de tiempo, lo que dificulta el acceso a la data suficiente [20]. Por esta razón, la combinación de *Sparse Sensing* con otras técnicas puede ser prometedor para resolver problemas complejos, especialmente en CFD.

SS permite la reconstrucción precisa de campos dinámicos a partir de un número limitado de mediciones, es ideal para sistemas donde la recolección de datos es técnicamente desafiante o costosa computacionalmente, como en el caso del CFD. En Willcox, K. & Peraire, J. (2002) [45] se emplean elementos del SS, como la descomposición ortogona, para reducir un modelo CFD que describe el movimiento lineal no estacionario de un perfil aerodinámico bidimensional, resultando en una reducción comparable con una simulación completa del modelo CFD.

2.2.3. Monitoreo y diagnóstico estructural

SS también ha sido aplicado en monitoreo de estructuras críticas en diversas disciplinas. En Ostachowicz et al. [46] se revisa su utilidad para reducir costos en sistemas de monitoreo basados en vibraciones, deformaciones y ondas elásticas, sin comprometer la calidad. Esto muestra cómo la integración de modelos físicos y datos experimentales puede mejorar la precisión de los sistemas de diagnóstico.

En Gul et al. [47] proponen *sensor clustering* para la detección y localización de cambios estructurales. Incluso en la industria aeronáutica, Manohar et al. [19] demuestra la capacidad del SS para mejorar el ensamblaje de las piezas en la construcción de aeronaves, analizando los patrones de ensamblado existentes e identificando los “gaps” en ensamblajes, favoreciendo la calidad de la producción.

¹“Flameless” debido a las bajas concentraciones de oxígeno

2.2.4. Pysensors

Debido a la utilidad del SS en diferentes campos, han surgido paquetes en Python como *Pysensors* que permiten seleccionar y ubicar un conjunto disperso de sensores para tareas de clasificación y reconstrucción [48]. En específico, Pysensors implementa los algoritmos base para estas tareas, permitiendo que no sea necesario desarrollar códigos desde cero. Pysensor no está exento de limitaciones dado que su uso en sistemas complejos puede requerir de algoritmos que aún no están presentes en las últimas versiones, los cuales faciliten su posterior validación experimental.

De igual manera es una herramienta que ha tenido aplicaciones en investigaciones, como en el caso de Geibel & Bangga [49] donde se utilizó Pysensors para la ubicación óptima de los sensores en la predicción de la velocidad en las estelas de las turbinas eólicas. Asimismo en el trabajo de Demo, N. et al. [50] se implementa Pysensors, con el objetivo de trabajar con información reducida para la construcción de una base, que posteriormente se utilizará como input para en entrenamiento de una red neuronal.

2.3. Aplicaciones las PINNs

El aprendizaje automático (*Machine Learning*, ML) es un conjunto de métodos capaces de inferir patrones complejos a partir de datos, sin necesidad de programar explícitamente cada relación matemática [51]. En los últimos años, ha existido un crecimiento en el interés de aplicar técnicas de ML para mejorar la investigación de distintas disciplinas físicas, lo que se evidencia en el aumento en la cantidad de publicaciones relacionadas [52].

No obstante los intentos por integrar ML no están exentos de inconvenientes, como la dependencia de los modelos al conjunto de datos de entrenamiento y la incapacidad del ML para alinearse con las leyes que rigen física. Sin embargo, dentro de las herramientas del ML supervisado, las PINNs integran directamente las leyes de conservación en su función de pérdida [53], lo que permite reconstruir campos físicos coherentes sin depender de grandes conjuntos de datos experimentales. En la Subsección 3.4.4 se detallarán más aplicaciones de esta herramienta.

En el contexto de esta tesis, el uso combinado de *Sparse Sensing* y PINNs ofrece un enfoque sinérgico: SS reduce el número de mediciones necesarias, mientras que las PINNs utilizan estas mediciones junto con las ecuaciones de la física para reconstruir los campos de velocidad y temperatura en toda la llama.

3 | Marco teórico

3.1. Llamas laminares de difusión

Las llamas laminares de difusión o no premezcladas son ampliamente utilizadas en investigación fundamental por su estructura bien definida, estabilidad y representatividad de procesos clave en combustión. En ellas, el combustible y el oxidante se introducen por separado y la mezcla ocurre por difusión molecular, lo que genera un frente de llama en la interfaz entre ambos [25, 54].

Estas llamas se dividen típicamente en tres zonas: precalentamiento, reacción y postllama, con una clara diferenciación entre regiones libres de hollín (centro) y zonas radiantes externas donde se forma hollín [55]. Estas condiciones favorecen la formación de hollín ya que promueven rutas de formación molecular complejas que llevan a la nucleación, crecimiento superficial y agregación de partículas de carbono.

Dado su papel dual como fuente de energía y contaminantes, el estudio de la combustión, sus productos y mecanismos asociados resulta esencial tanto para el desarrollo de tecnologías más limpias como para la comprensión de sus impactos en salud y cambio climático.

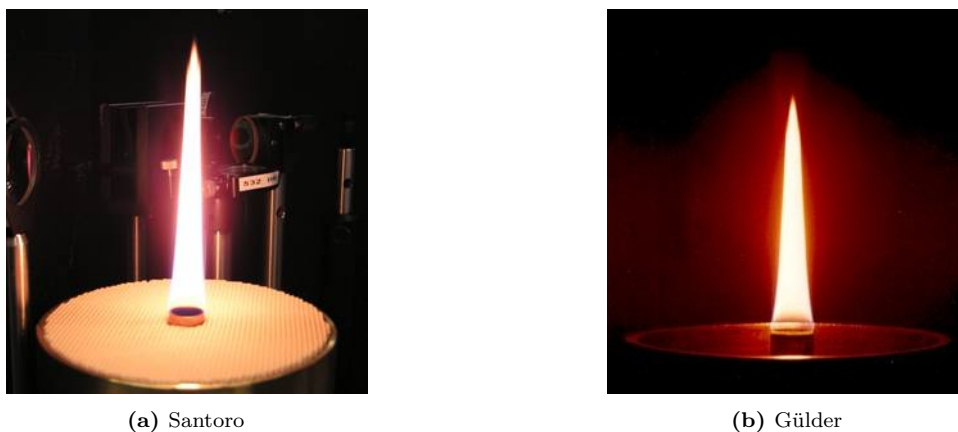


Figura 3.1: Llama de difusión laminar en coflujo

Fuente: LII workshop 2005.

Los quemadores tipo Santoro y Gülder en la Figura 3.1 son frecuentemente utilizados en estudios experimentales por su simplicidad y representatividad [56]. Estas llamas son utilizadas no solo para estudiar temperatura y velocidad, sino también procesos de formación, crecimiento y madurez del hollín, así como la influencia de condiciones experimentales como el índice de oxígeno (OI) y la adición de hidrógeno en la composición del combustible. Su geometría axisimétrica permite aplicar técnicas ópticas basadas en mediciones integradas en línea de visión, aprovechando la simetría para reconstruir campos locales de propiedades físicas y químicas.

3.2. Temperatura del hollín

El hollín incandescente en llamas de difusión laminar emite radiación térmica, cuya intensidad depende de su temperatura y propiedades ópticas. Esta radiación se describe por la ley de Planck para un cuerpo negro:

$$I_{\lambda}^{BB}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}, \quad (3.1)$$

donde $I_{\lambda}^{BB}(T)$ es la irradiancia de cuerpo negro a temperatura T , h la constante de Planck, c la velocidad de la luz, k la constante de Boltzmann y λ la longitud de onda. Sin embargo, las partículas de hollín no se comportan como cuerpos negros ideales, por lo que su irradiancia se ve atenuada por efectos de la absorción, modelado generalmente como:

$$\kappa_{\lambda} = \frac{6\pi f_v}{\lambda E(m)}, \quad (3.2)$$

donde κ_{λ} corresponde al coeficiente de absorción, f_v es la fracción de en volumen de hollín y $E(m)$ es un parámetro óptico dependiente del grado de madurez del hollín[57].

3.2.1. Técnicas ópticas para la medición de temperatura

En llamas laminares, la estimación de la temperatura del hollín se basan principalmente mediante técnicas ópticas no intrusivas, que analizan la radiación térmica emitida por las partículas de hollín. En su forma más general, se mide la intensidad de radiación emitida a lo largo de la línea de visión (LOS) en una o más longitudes de onda y se relaciona con la temperatura local mediante la siguiente expresión:

$$I_{\lambda}^{emi} = \int \kappa_{\lambda}(s) \cdot I_{\lambda}^{BB}(T) ds \quad (3.3)$$

Esta formulación, constituye un problema inverso donde se busca recuperar la temperatura local $T(s)$ a partir de señales integradas y un modelo físico de la interacción óptica. Para resolverlo, se emplean distintos métodos que simplifican o complementan la información.

Una de las técnicas más extendidas es la pirometría de dos colores, que estima la temperatura del hollín a partir del cociente de intensidades medidas en dos longitudes de onda cercanas. Suponiendo una emisividad constante en ambas bandas, la expresión resultante, de donde se puede recuperar la temperatura, es:

$$\frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} = \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^5 \cdot \frac{e^{\frac{c_2}{\lambda_2 T}} - 1}{e^{\frac{c_2}{\lambda_1 T}} - 1}, \quad (3.4)$$

donde $c_2 = \frac{hc}{k}$. Esta técnica presenta ventajas prácticas: reduce el impacto de errores de calibración absoluta y evita requerimientos de conocimiento preciso sobre f_v o $E(m)$ [58]. No obstante, su validez puede verse comprometida si las longitudes de onda utilizadas están muy separadas o si el hollín presenta variaciones de composición espectral significativas.

Complementariamente, se puede utilizar la técnica de extinción por línea de visión (Line-of-Sight Attenuation, LOSA), que evalúa la atenuación de una fuente de luz conocida al atravesar una zona con hollín, y se basa la ley de Beer-Lambert [59]:

$$I = I_0 \cdot e^{-\int \kappa_\lambda(s) ds} \quad (3.5)$$

Mediante esta medida, es posible estimar la fracción en volumen de hollín f_v , y en combinación con la emisión, realizar una inversión conjunta para obtener tanto f_v como T de forma más robusta.

3.2.2. Deconvolución de Onion-Peeling

Todas las técnicas mencionadas anteriormente entregan medidas integradas a lo largo de la línea de visión. Para recuperar los perfiles locales de temperatura y fracción de hollín en configuraciones axisimétricas (como las llamas de coflujo), es necesario aplicar técnicas de reconstrucción espacial. La más utilizada es la transformada inversa de Abel, que permite calcular un perfil radial o propiedad local $f(r)$ a partir de la proyección medible $P(y)$:

$$f(r) = -\frac{1}{\pi} \int_y^R \frac{P'(y)}{\sqrt{y^2 - r^2}} dy \quad (3.6)$$

El algoritmo más común para implementarla es el llamado onion-peeling, en el que los valores se reconstruyen iterativamente desde el borde exterior hacia el eje de la llama, como se muestra en la figura 3.2. Este procedimiento permite obtener campos bidimensionales de temperatura, pero es altamente sensible al ruido en las señales medidas, especialmente cerca del eje de simetría, donde los errores pueden amplificarse.

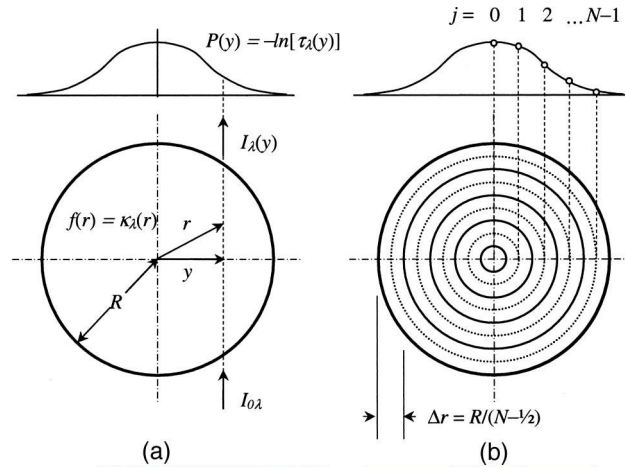


Figura 3.2: (a) Evaluación de la distribución del coeficiente de absorción espectral dentro de una llama axisimétrica, y (b) discretización del dominio del problema.

Fuente: Daun 2006 et al.[60]

3.2.3. Técnicas de medición de temperatura fuera de la zona de hollín

La medición de temperatura en llamas de difusión presenta diferentes desafíos dependiendo de la presencia o ausencia de hollín. Como fue anteriormente mencionado, dentro de la zona de hollín es posible emplear pirometría de incandescencia de hollín, pero fuera de esta región se requieren métodos alternativos. En el trabajo de Kempema et al. [8], se seleccionaron cuatro técnicas de termometría con capacidades complementarias para cubrir distintas regiones del campo:

1. **Pirometría de hollín:** Basada en la emisión del hollín en la llama, permite estimar la temperatura local dentro de la zona de formación de partículas. Su principal limitación es que no puede proporcionar información fuera de la región de hollín.
2. **Thin filament pyrometry (TFP):** Emplea filamentos delgados insertados en la llama, cuya radiación incandescente permite medir la temperatura local, pues la radiación incandescente se correlaciona con la temperatura del gas circundante [61]. Esta técnica es relativamente simple, pero intrusiva y con resolución espacial limitada.
3. **Thermographic phosphor thin filament (TPTF) thermometry:** Consiste en recubrir filamentos delgados con fósforos termográficos, los cuales emiten luminiscencia dependiente de la temperatura. [62]. Esta técnica permite obtener temperaturas en regiones donde la pirometría de hollín o TFP no son aplicables, mejorando la sensibilidad fuera de la zona de partículas.
4. **Rayleigh structured laser illumination planar imaging (SLIPI):** Se basa en la dispersión elástica de luz láser por las moléculas del gas. Esta técnica permite inferir la temperatura a partir de la densidad molecular con la ley de los gases ideales. SLIPI es eficaz en zonas libres de hollín sin la necesidad de introducir sensores físicos [63].

El uso combinado de estas técnicas permite obtener un campo bidimensional de temperatura que abarca tanto la región con hollín como las zonas sin presencia de este. En particular, la implementación

de SLIPI y TPTF extiende la capacidad de medición hacia la periferia de la llama, donde los métodos basados en incandescencia no son efectivos.

Estos diagnósticos avanzados son esenciales para la validación de simulaciones numéricas y para el desarrollo de metodologías de reconstrucción como la propuesta en esta tesis.

3.2.4. Limitaciones y motivación para métodos alternativos

Estas metodologías ópticas, si bien poderosas, presentan limitaciones considerables. Requieren equipamiento costoso, procedimientos de calibración exhaustivos, sensibilidad al ruido y conocimiento detallado de propiedades ópticas, cuya incertidumbre afecta directamente los resultados. Además, la resolución espacial depende de la calidad del proceso de inversión y puede degradarse en zonas con bajo nivel de emisión o altos gradientes [58]. Por otra parte, su aplicación se ve limitada en ambientes turbulentos o tridimensionales.

Estos desafíos motivan el desarrollo de enfoques alternativos que permitan reconstruir campos físicos a partir de información parcial o dispersa, integrando la física y el aprendizaje automático, lo que ha impulsado el desarrollo de enfoques híbridos como el que se presenta en esta tesis, que combina *Sparse Sensing* con redes neuronales informadas por la física.

3.3. Sparse Sensing

Como se menciona en el Capítulo 2, el concepto de Sparse Sensing hace referencia a la disposición estratégica de sensores en un entorno a estudiar, optimizando así la recolección de datos. En lugar de recoger un conjunto de mediciones de gran dimensión y luego comprimirlo, también es posible adquirir mediciones comprimidas y obtener la señal en su totalidad [64]. Al colocar los sensores estratégicamente, se puede minimizar el número de sensores necesarios sin dejar de captar información esencial sobre el estado del sistema.

Esto se basa en los principios de medición comprimida o *Compressed Sensing*, que postula que un conjunto de señales puede ser comprimida a través de un procedimiento no lineal ψ de tal manera que $\mathbf{x} = \psi(x_i)_{i=1,\dots,n}$ con $\psi \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Luego, es posible reconstruir completamente las señales a partir de un número reducido de elementos de dicho conjunto [43]. Siendo $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ un vector de n elementos que representa los datos o señales a estudiar, el sistema lineal se formula de la siguiente manera:

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\mathbf{x} \quad (3.7)$$

donde $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^s$ corresponde a las señales en las s ubicaciones óptimas y $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{s \times n}$ mapea la señal en función de la ubicación de los sensores. Si $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{s \leq n}$ es un vector que indica los modos de la base que se encuentran activos y se aplica la transformada o base ψ a la Ecuación 3.7, el problema queda representado por:

$$\mathbf{y} = \mathbf{C}\Psi\mathbf{a}_s \quad (3.8)$$

En el contexto de esta investigación, la Ecuación 3.7 relaciona un campo de temperatura x que requiere ser reconstruido con sólo s mediciones puntuales, que se almacenan en el vector y . Entonces, el desafío está en encontrar aquellas mediciones que maximizan la información reconstruida, lo cual está dado por la matriz C . Sin embargo, obtener C no es sencillo debido a que no es invertible pues $s \ll n$, lo que produce que el sistema esté mal condicionado y tenga infinitas soluciones.

3.3.1. Descomposición ortogonal propia

La descomposición ortogonal propia (POD) es un procedimiento para extraer una base de un conjunto de datos, obteniendo una descomposición en *modos*. Las ventajas de utilizar una POD radican en sus propiedades matemáticas [13], que la convierten en una descomposición ideal para la compresión de datos. POD expresa un conjunto de datos de gran dimensión $\mathbf{x} \in \mathbb{R}$ a través de combinaciones lineales de un pequeño número de modos ψ_i [11].

$$\mathbf{x}_i \approx \sum_{k=1}^{q=s} \psi_k a_k \quad (3.9)$$

Siguiendo la metodología propuesta por Manohar et al. (2018) [11], en la Ecuación 3.8 la base Ψ se trunca con q modos, de tal manera que $\Psi_q \approx \Psi$:

$$\mathbf{y} \approx \mathbf{C}\Psi_q\mathbf{a}_s \quad (3.10)$$

Para abordar el mal condicionamiento del sistema, se emplea un operador Θ que combina C y Ψ_q :

$$\mathbf{y} = (\mathbf{C}\Psi_q)\mathbf{a}_s = \Theta \cdot \mathbf{a}_s \quad (3.11)$$

3.3.2. Sparse Sensing para la reconstrucción

Con un enfoque generalizado para la reconstrucción, se pueden entender los sensores óptimos como aquellas ubicaciones donde la información debe estar disponible, de modo que se minimice el error de reconstrucción. Esto significa que si se desea elegir s sensores entre n posiciones candidatas, existen $\binom{n}{s}$ combinaciones posibles. Estas ubicaciones pueden representar los píxeles de una imagen o directamente posiciones en un entorno de estudio donde se debe realizar la medición de la propiedad y en función de estas reconstruir la misma en todo el entorno.

El objetivo de la reconstrucción radica en la recuperación de información desconocida o de difícil acceso, en función de mediciones puntuales, por lo que no tiene sentido reconstruir propiedades que ya se encuentran disponibles en su totalidad. Es por esto que el propósito es integrar información conocida

dentro del conjunto de datos y elaborar una base para el mismo, que permita determinar los sensores óptimos. Con dicha información se podrán llevar a cabo mediciones en entornos similares al conjunto de datos, que no se encuentren dentro de el y del cual no exista información completa, y aplicar la metodología de reconstrucción.

De este modo se provee de una técnica de menor costo que posibilita la reproducción de información a la que no se tenía certeza. Volviendo a la Ecuación 3.9, si $\mathbb{X} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ representa la data, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n$ es uno de los m elementos de \mathbb{X} , entonces la base ψ_i sólo corresponde a un elemento del conjunto de datos. Por consiguiente la representación del conjunto de datos completo se muestra a continuación:

$$\mathbb{X} = \Psi \cdot \mathbf{a}_s \quad (3.12)$$

Se requiere entonces de un conjunto de entrenamiento que se adapte a un problema en específico. En la Figura 3.3, si \mathbb{X} es una base de datos de rostros como el ejemplo de las Eigenfaces, \mathbf{x}_i puede ser la imagen de una cara [64]. Para esta investigación \mathbb{X} representará un conjunto de campos de temperatura de diferentes llamas laminaras de difusión.

$$\mathbb{X} = \begin{bmatrix} | & | & | & \cdots & | \\ \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_3 & \cdots & \mathbf{x}_m \\ | & | & | & & | \end{bmatrix} \quad (n \times m)$$

Figura 3.3: Conjunto de datos \mathbb{X}

3.3.3. Descomposición SVD

Existen diferentes métodos para la transformación y compresión del conjunto de datos \mathbb{X} , en este caso se hará uso de la descomposición en valores singular (SVD), que es de las más importantes en la era computacional, lo que la convierte en una herramienta esencial para el Data-Driven [64]. La SVD consiste en una generalización de la transformada de Fourier (FFT), y su idea principal es descomponer una matriz rectangular en 3 matrices: 2 matrices ortogonales y 1 matriz diagonal [65].

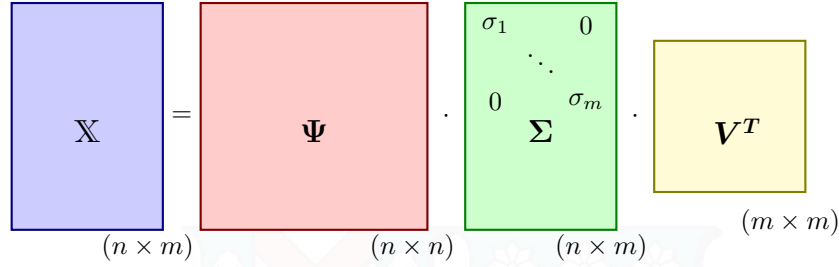


Figura 3.4: Representación Descomposición SVD.

Como se muestra en Figura 3.4, la matriz Σ contiene en su diagonal los valores singulares o propios de la matriz \mathbb{X} , los cuales son no negativos y decrecientes. En cambio las columnas de las matrices ortogonales \mathbf{U} y \mathbf{V}^T son llamados vectores singulares o propios, izquierdo y derecho respectivamente [66]. Tanto las columnas de \mathbf{U} y \mathbf{V}^T constituyen bases ortonormales, pese a ello la base \mathbf{U} se utiliza para entender y trabajar con las filas de \mathbb{X} , pues las filas de \mathbb{X} pueden expresarse como combinaciones lineales de las columnas de \mathbf{U} .

Luego, Ψ en la Ecuación 3.12 es la matriz \mathbf{U} de la descomposición anterior. Aplicando el truncamiento con q modos se obtiene que $\mathbb{X} \approx \hat{\mathbb{X}} = \mathbf{U}_q \mathbf{a}_q$:

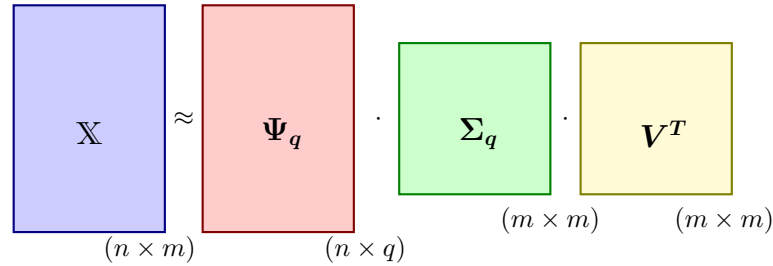


Figura 3.5: Representación Descomposición SVD truncada.

$$\mathbb{X} = \Psi \Sigma V^T \approx \Psi_q \Sigma_q V_q^T \quad (3.13)$$

Entonces con $y \approx \hat{y}$, el sistema lineal para el SS, si $q = s$ es:

$$\hat{y} = C \Psi_q \mathbf{a}_q = \Theta \mathbf{a}_q \quad (3.14)$$

3.3.4. Factorización QR

El desafío que enfrenta el Sparse Sensor Placement es la elección óptima de sensores, de tal manera que se ubique la menor cantidad de sensores, minimizando el error de reconstrucción. Es por esto que se hacen uso de herramientas de descomposición que reduzcan el costo de evaluar todas las combinaciones posibles. La metodología propuesta por Manohar, et al en [67] hace uso de la factorización QR como método de selección, basado en aplicaciones anteriores en problemas de mínimos cuadrados [68, 69] y ubicación de sensores [70].

La factorización QR es una base POD basada en datos para seleccionar los mejores y menos lugares de medición para la reconstrucción, superando el rendimiento de los sensores aleatorios. La factorización de una matriz \mathbf{A} de orden $n \times m$ se presenta de la siguiente forma:

$$\mathbf{A}^T \mathbf{P} = \mathbf{Q} \mathbf{R} \quad (3.15)$$

donde las matrices \mathbf{Q} y \mathbf{R} tiene un orden de $n \times n$, y \mathbf{R} es una matriz triangular superior. La matriz de permutación \mathbf{P} , permuta las columnas de \mathbf{A}^T tal que las primeras q columnas de \mathbf{R} sean linealmente independientes, esto significa que la factorización no es única, ya que pueden existir múltiples combinaciones de linealmente independientes.

La aplicación de la factorización en el contexto del SS está relacionada con la resolución del sistema lineal 3.14, específicamente en el cálculo de $\Psi_q \cdot \mathbf{C}$, pues a partir de dicha operación es posible encontrar Θ . Dado que \mathbf{C} contiene los sensores a ubicar y no existe una única manera seleccionar los sensores, es posible relacionar la matriz \mathbf{C}^T con la matriz de permutación \mathbf{P} de la factorización QR.

$$\Psi_q^T \mathbf{C}^T = \mathbf{Q} \mathbf{R} \quad (3.16)$$

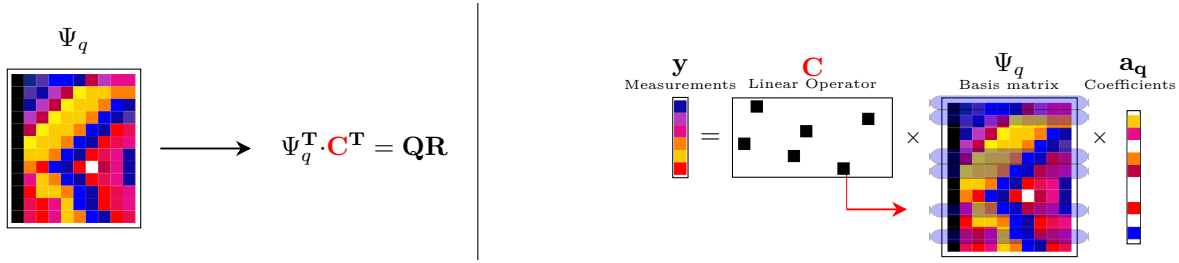


Figura 3.6: Metodología de selección de sensores.

La matriz \mathbf{C}^T debe ser construida de tal forma que el sistema esté bien condicionado. \mathbf{C}^T debe ser “incoherente” respecto a Ψ_q^T , esto significa que las filas de \mathbf{C}^T no deberían estar correlacionadas con las columnas de Ψ_q^T . La estrategia para pivotar y realizar la factorización QR en el Sparse Sensors es la propuesta en [71], que en síntesis establece una selección de aquellas columnas de Ψ_q^T que tengan la norma-2 máxima iniciando con $\mathbf{R} = \Psi_q^T$.

$$s_i^{(k)} = \|\mathbf{R}_{k:m,i}\|_2, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.17)$$

Para cada iteración k se busca $\mathbf{argmax}(s^{(k)})$. Como se evidencia en la Figura 3.6, es posible encontrar la matriz de mapeo \mathbf{C} y así encontrar $\Theta = \mathbf{C} \Psi_q$. Resolviendo el sistema de ecuaciones 3.14 obtenemos \mathbf{a}_q . Finalmente $\mathbf{x}_{\text{recon}}$ es la reconstrucción requerida:

$$\mathbf{x}_{\text{recon}} = \Psi_q \cdot \mathbf{a}_q \quad (3.18)$$

3.4. Redes Neuronales

En las últimas décadas, el aprendizaje automático ha emergido como una herramienta poderosa para el análisis y modelado de sistemas complejos, con aplicaciones en visión por computador, procesamiento de señales, finanzas, ciencias físicas e ingeniería. Dentro de esta familia de técnicas, las redes neuronales artificiales (ANNs) y sus variantes modernas han cobrado protagonismo por su capacidad para aproximar funciones no lineales, aprender representaciones jerárquicas de datos, y adaptarse a contextos donde las relaciones explícitas son difíciles de modelar mediante métodos tradicionales [51].

Las redes neuronales permiten aprender relaciones funcionales a partir de datos, sin requerir una especificación previa de la forma de la solución. Esto las hace especialmente útiles en contextos donde los datos disponibles son ruidosos, escasos o costosos de obtener. Sin embargo, esto también puede conducir a un sobreajuste (overfitting) o soluciones físicamente inconsistentes. Para abordar esta limitación, se han desarrollado enfoques híbridos que combinan el aprendizaje automático con conocimiento físico, como las redes neuronales informadas por la física (PINNs), utilizadas en este trabajo.

A continuación se describen los fundamentos de las redes neuronales artificiales, su formulación matemática, y posteriormente el marco teórico que sustenta a las PINNs como herramienta para resolver ecuaciones diferenciales parciales mediante aprendizaje automático.

3.4.1. Redes Neuronales Artificiales

Las redes neuronales artificiales son modelos computacionales inspirados en la estructura del sistema nervioso, ampliamente utilizados para la aproximación de funciones no lineales complejas. Basadas en la estructura y funcionamiento de las neuronas biológicas, las ANNs están compuestas por unidades llamadas *neuronas*, organizadas en capas (de entrada, ocultas y de salida) y conectadas entre sí mediante pesos ajustables. Cada neurona realiza una transformación que combina los datos de entrada con un conjunto de parámetros (pesos y sesgos), seguida de una función de activación no lineal:

$$a_j^{(l)} = \sigma \left(\sum_i w_{ji}^{(l)} a_i^{(l-1)} + b_j^{(l)} \right) \quad (3.19)$$

donde $a_j^{(l)}$ representa la activación de la neurona j en la capa l , $w_{ji}^{(l)}$ los pesos desde la capa anterior, $b_j^{(l)}$ un sesgo aditivo, y $\sigma(\cdot)$ una función de activación no lineal, como ReLU, tanh o sigmoide [51].

Durante el entrenamiento de una ANN, el objetivo es minimizar una función de pérdida \mathcal{L} , que cuantifica el error entre la predicción de la red \hat{y} y los datos observados y . Esto se logra mediante técnicas de optimización como el descenso de gradiente:

$$\theta^* = \arg \min_{\theta} \mathcal{L}(y, \hat{y}) \quad (3.20)$$

donde θ representa el conjunto de todos los pesos y sesgos de la red. El algoritmo de entrenamiento más común es *backpropagation*, junto con métodos avanzados como Adam, una variante del descenso de gradiente estocástico que adapta dinámicamente la tasa de aprendizaje para cada parámetro [72].

El uso de redes neuronales se sustenta teóricamente en el teorema de aproximación universal [73, 74], que establece que una red con una sola capa oculta y suficientes neuronas puede aproximar cualquier función continua en un dominio compacto. Sin embargo, las redes profundas (con múltiples capas ocultas) permiten representar funciones altamente complejas de forma más eficiente, lo que ha impulsado el auge del *deep learning* en numerosos campos científicos e ingenieriles.

En años recientes, las ANNs han mostrado un enorme potencial para modelar fenómenos físicos, especialmente cuando se integran con conocimientos previos en forma de restricciones físicas. Esta idea ha dado lugar al desarrollo de arquitecturas híbridas, como las redes neuronales informadas por la física (PINNs), que se exploran en la siguiente sección.

3.4.2. Redes neuronales informadas por la física

Las PINNs constituyen un paradigma emergente dentro del *machine learning* aplicado al ámbito científico. A diferencia de las redes neuronales tradicionales, que se entrenan exclusivamente con datos, las PINNs integran directamente las leyes físicas del sistema, normalmente en forma de EDPs, dentro del proceso de entrenamiento. Esta formulación híbrida permite que el modelo no solo se ajuste a los datos disponibles, sino que también satisfaga las restricciones físicas impuestas por el problema, lo que resulta especialmente valioso en contextos con datos escasos o ruidosos.

Este enfoque fue introducido formalmente por Raissi et al. [53], y desde entonces ha sido aplicado con éxito en áreas como dinámica de fluidos, transferencia de calor, electromagnetismo, acústica y modelado de materiales [21, 75]. El principio fundamental consiste en entrenar una red neuronal $u_{\theta}(x)$, parametrizada por θ , para aproximar la solución de una EDP del tipo:

$$\mathcal{N}[u(x)] = 0, \quad x \in \Omega \quad (3.21)$$

donde \mathcal{N} es un operador diferencial que representa la física del sistema y Ω es el dominio espacial o espacio-temporal.

A diferencia de métodos clásicos, las PINNs no requieren una discretización explícita del dominio. En su lugar, utilizan **diferenciación automática (AD)** para evaluar derivadas de la red neuronal respecto a sus entradas. Esta técnica permite calcular los residuos de la ecuación diferencial en cualquier punto del dominio sin errores de discretización, lo cual representa una ventaja frente a métodos numéricos tradicionales [76].

La función de pérdida total de una PINN suele estar compuesta por la suma ponderada de

distintos términos:

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \lambda_{\text{data}}\mathcal{L}_{\text{data}} + \lambda_{\text{EDP}}\mathcal{L}_{\text{EDP}} + \lambda_{\text{bc}}\mathcal{L}_{\text{bc}} \quad (3.22)$$

donde:

- $\mathcal{L}_{\text{data}}$: mide el error sobre los datos conocidos (experimentales o simulados).
- \mathcal{L}_{EDP} : evalúa el residuo de la ecuación física evaluada en el dominio.
- \mathcal{L}_{bc} : penaliza el error sobre las condiciones de borde o iniciales.

Esta estructura permite que el modelo aprenda tanto de los datos como del conocimiento físico, actuando como un solucionador aproximado que generaliza más allá de los puntos observados. Gracias a esta capacidad, las PINNs se han convertido en una herramienta prometedora para resolver problemas inversos, inferencia de parámetros, o la reconstrucción de campos físicos en dominios complejos.

3.4.3. Ecuaciones físicas consideradas

En esta tesis, las PINNs se utilizan para estimar el campo de velocidad a partir de un campo de temperatura reconstruido. Las ecuaciones empleadas corresponden a simplificaciones de las ecuaciones de conservación en régimen estacionario:

Conservación de masa (flujo incompresible):

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

Conservación de momentum (Navier-Stokes):

$$\begin{aligned} \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} &= -\nabla p \mu \nabla^2 \vec{u} \\ \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} \end{aligned} \quad (3.23)$$

Conservación de energía:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = \rho c_p \vec{u} \cdot \nabla T$$

Aunque la temperatura no se resuelve directamente por PINNs en este caso, sí es utilizada como entrada auxiliar, integrando información experimental reconstruida mediante técnicas de sparse sensing.

3.4.4. Aplicaciones y desafíos

Las PINNs han demostrado ser una herramienta prometedora en una amplia gama de aplicaciones en ciencias e ingeniería. Su capacidad para incorporar leyes físicas como restricciones en la función de pérdida las hace particularmente atractivas en dominios donde las mediciones directas son limitadas o intrusivas, como en combustión, dinámica de fluidos o transferencia de calor [53, 21, 22].

En dinámica de fluidos, las PINNs han sido utilizadas para resolver flujos laminares y turbulentos [23], o para reconstruir campos de velocidad a partir de datos incompletos de velocimetría por imágenes de partículas (PIV) [77, 75, 24], demostrando su flexibilidad frente a distintos tipos de ecuaciones diferenciales.

Una ventaja clave de las PINNs es su capacidad para trabajar con datos dispersos o incompletos, compensando la falta de información empírica mediante el conocimiento físico del sistema. Esto resulta altamente relevante en escenarios experimentales, donde las restricciones instrumentales, térmicas u ópticas impiden un acceso directo a todas las variables de interés. Por ejemplo, en llamas laminares, el uso de sensores invasivos se ve limitado, lo que restringe la obtención de campos como la velocidad o la concentración de especies. En estos casos, el uso de PINNs combinado con estrategias de reconstrucción y selección óptima de sensores permite recuperar dichos campos a partir de información parcial [24].

Además de resolver problemas directos, las PINNs han demostrado gran potencial en formulaciones inversas, donde se busca estimar parámetros físicos desconocidos o condiciones de contorno a partir de datos observados de forma parcial. En estos casos, la red no solo ajusta sus salidas a observaciones disponibles, sino que también debe cumplir con las ecuaciones diferenciales que modelan el fenómeno, lo que permite inferir propiedades no observables directamente. Por ejemplo, Meng et al.[78] y Zhu et al.[79] aplicaron PINNs para recuperar parámetros de transporte y condiciones internas en ecuaciones gobernantes.

Sin embargo, a pesar de sus ventajas conceptuales, las PINNs enfrentan desafíos importantes. El entrenamiento puede ser costoso computacionalmente, especialmente en dominios tridimensionales o con geometrías complejas. También existe una sensibilidad significativa a la elección de hiperparámetros y a la escala relativa entre los términos de la función de pérdida, lo que puede resultar en un desequilibrio entre los términos físicos y los términos de datos [80]. Esto puede llevar a soluciones que cumplen parcialmente las ecuaciones diferenciales pero no se ajustan bien a los datos experimentales, o viceversa.

Para abordar estas limitaciones, se han propuesto diversas extensiones al marco original de PINNs:

- XPINNs: Dividen el dominio en subregiones, entrenando redes locales de manera paralela, para mejorar la escalabilidad y capturar mejor los fenómenos locales [81]
- fPINNs: Incorporan esquemas explícitos de integración temporal, permitiendo una mejor estabilidad numérica en problemas transitorios [82].
- Adaptive PINNs: Ajustan dinámicamente los pesos relativos λ_i entre los términos de la función de pérdida durante el entrenamiento, promoviendo un aprendizaje más equilibrado [80].

Estos avances evidencian el papel creciente de las PINNs como una herramienta flexible y robusta en la modelación de fenómenos físicos complejos, especialmente cuando se combinan con técnicas de reducción de orden, reconstrucción y aprendizaje supervisado e inverso.



4 | Metodología

La metodología desarrollada en este trabajo combina estrategias de *Sparse Sensing* (PINNs) para la reconstrucción de campos de temperatura y velocidad en llamas de difusión axisimétricas. El procedimiento completo consta de cinco etapas principales:

1. Generación de un conjunto de datos de referencia basado en simulaciones de llamas laminares.
2. Aumento y preprocesamiento del conjunto de datos para ampliar su representatividad.
3. Selección óptima de sensores considerando restricciones físicas y experimentales.
4. Reconstrucción del campo de temperatura a partir de mediciones dispersas.
5. Estimación del campo de velocidad mediante el entrenamiento de PINNs.

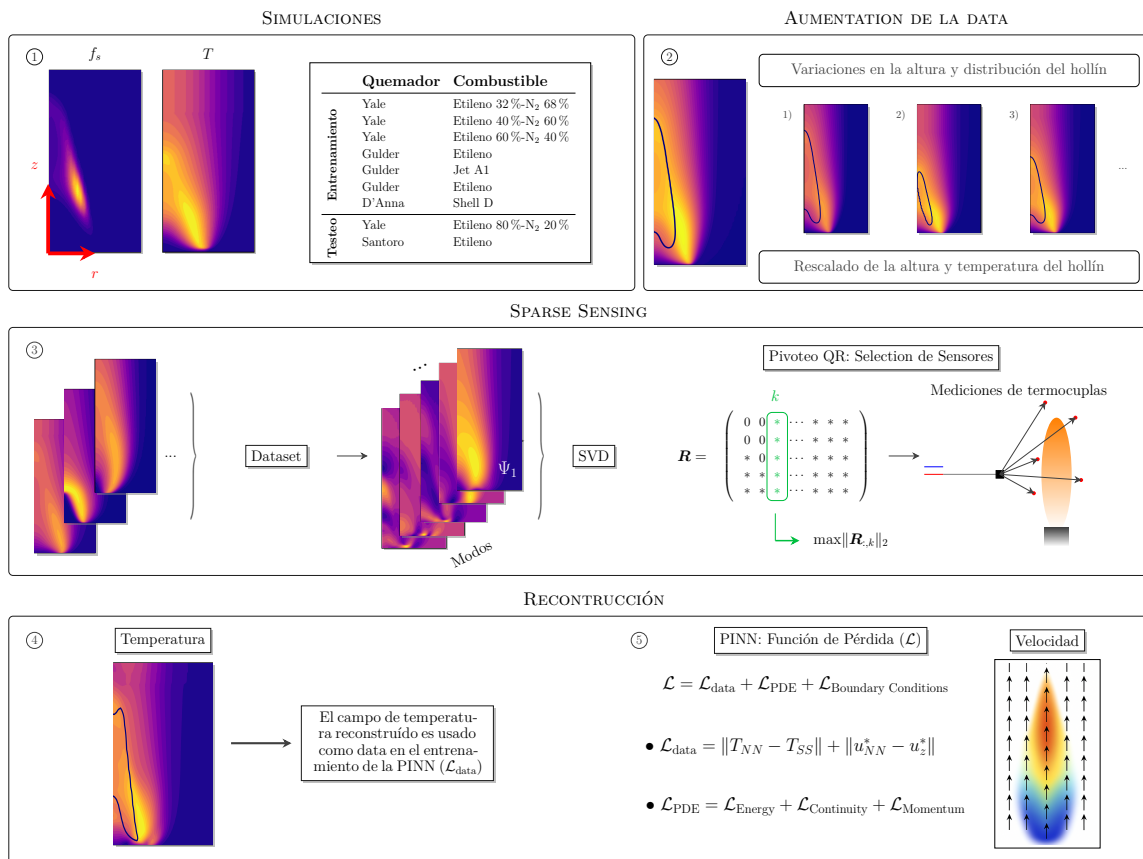


Figura 4.1: Esquema de la metodología SSPINNs

En las siguientes secciones se describe detalladamente cada etapa de la metodología, desde la construcción de la base de datos hasta la validación numérica de los resultados.

4.1. Generación de datos

Siguiendo la técnica del SS, la matriz \mathbb{X} debe contener el conjunto de datos relacionado al objetivo de la investigación. En esta instancia, la data-base estará compuesta por campos de temperatura de llamas laminares de difusión, por ende se tendrán m campos de n píxeles o posiciones. Como se ve en la Figura 4.2, cada llama es un campo bidimensional de tamaño $n_y \times n_x$ que se representa como un vector de tamaño n .

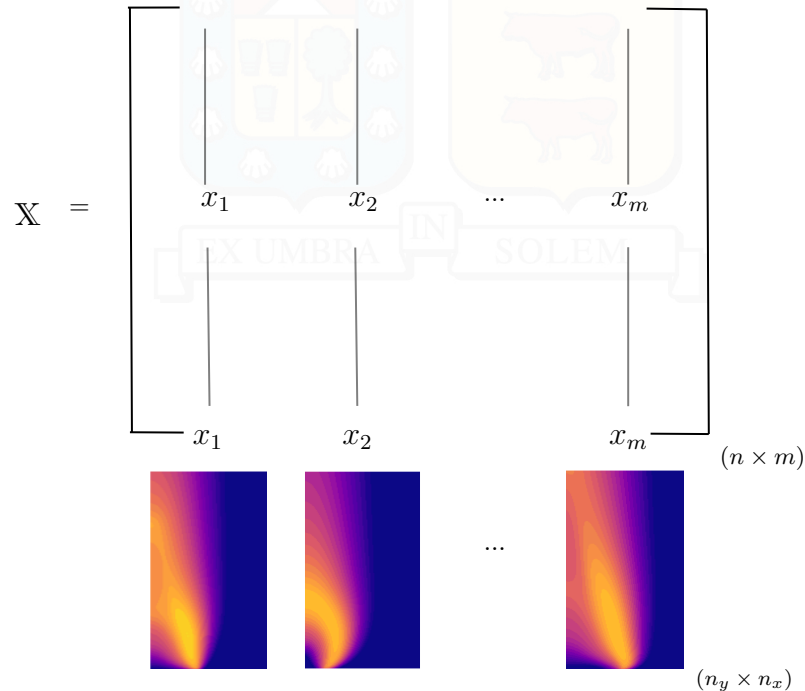


Figura 4.2: Conjunto de datos

El objetivo es que el conjunto sea representativo de la propiedad que se desea reconstruir. Para obtener las llamas que van a formar parte de la base de datos, se utilizarán campos de temperatura de llamas simuladas de diferentes quemadores y combustibles, teniendo así un amplio conjunto de datos que sea capaz de captar las características del sistema, extendiendo la capacidad de reconstrucción del método.

Si se pretende utilizar un conjunto de datos limitado, no será necesario incurrir en una gran cantidad de simulaciones numéricas, que pueden ser costosas computacionalmente si no se tienen el equipamiento adecuado, sin embargo se restringirá la capacidad de reconstrucción y por lo tanto la aplicación del SS perdería sentido. Es primordial que el conjunto de datos sea lo más variado posible para así generalizar su aplicación, sin dejar de tener en cuenta los costos que esto puede conllevar.

4.1.1. Llamas simuladas

La simulación numérica de los campos de temperatura de las llamas se obtuvieron con el código CoFlame, el cual es un código en *FORTRAN*² que puede modelar llamas laminares axisimétricas de difusión de forma radial y axial, resolviendo los modelos de formación de hollín, velocidad, temperatura, conservación de especies, entre otras ecuaciones [83].

Esto permite simular llamas de referencia de diferentes combustibles y quemadores, con diferentes ratios de equivalencia entre combustible y aire. En la Tabla 4.1 se muestran las llamas que serán utilizadas como base para el conjunto de datos.

Tabla 4.1: Flame conditions for training (first 7) and testing dataset (last 2).

	Burner	Fuel	V_{ox} (cm/s)	V_{fuel} (cm/s)	Ref
Train	Yale	Ethylene 32 % - N ₂ 68 %	35.00	35.00	[84]
	Yale	Ethylene 40 % - N ₂ 60 %	35.00	35.00	[84]
	Yale	Ethylene 60 % - N ₂ 40 %	35.00	35.00	[84]
	Gülder	Ethylene	61.26	3.47	[85]
	Gülder	Jet A1	54.78	10.98	[86]
	D'Anna	Ethylene	30.93	9.45	[87]
	Gülder	Shell D	84.10	12.11	[88]
Test	Yale	Ethylene 80 % - N ₂ 20 %	35.00	35.00	[84]
	Santoro	Ethylene	8.90	3.80	[56]

Con el procedimiento de la Subsección 4.1.2 es posible obtener múltiples campos de temperatura desde cada una de las llamas de referencia lo que incrementa sintéticamente el tamaño del conjunto de datos, sin necesidad de realizar demasiadas simulaciones.

El aumento sintético permite que la metodología generalice su desempeño ante variaciones geométricas y térmicas sin necesidad de ejecutar un gran número de simulaciones. Cada llama base genera múltiples realizaciones mediante perturbaciones controladas de su temperatura máxima, escalado relativo y altura, evitando exceder los límites físicos. Este enfoque genera una base de datos lo suficientemente variada como para entrenar y validar la estrategia de *Sparse Sensing* y, posteriormente, el modelo PINN.

4.1.2. Aumento del conjunto de datos

Por las razones mencionadas al inicio de esta sección, tener un conjunto de datos amplio y variado es de suma importancia para el éxito de la metodología. Para evitar la simulación de un gran número de llamas, se aumentará la data a través de la metodología propuesta en [89, 90], donde se

²Lenguaje de programación

toma un conjunto de llamas de referencia base que luego son procesadas para obtener campos con variaciones estadísticas para su geometría y valores de referencia para temperatura.

Las variaciones utilizadas para la temperatura se obtienen con las ecuaciones a continuación, donde T_s corresponde a un vector de temperaturas de tamaño n . Cada función depende de el vector T_s en la iteración anterior.

$$T_{s1} = T_{min} \cdot (1 + \rho) \cdot \frac{T_s}{max(T_s)} \quad (4.1)$$

$$T_{s2} = T_s - 273 \cdot T_s \cdot \frac{\ln(\rho)}{max(T_s)} \quad (4.2)$$

$$T_{s3} = T_s \cdot \frac{e^\rho}{max(T_s)} \quad (4.3)$$

donde ρ es un número random $\in [0, 1]$ y $T_{min} = 1850K$. Dependiendo del valor de ρ , T_s se calculará con una de las ecuaciones de 4.3, evitando que se supere una $T_{max} = 2200K$. Por otra parte las variaciones geométricas están dadas por alteraciones en la altura de la llama que modifican el campo de temperatura de la misma. A su vez, estas alteraciones modifican la ubicación de la zona de hollín de cada llama, lo que será importante para las restricciones detalladas en Sección 4.2.

El preprocesamiento de la data será fundamental en este caso, debido a la diferencia de tamaño entre los quemadores, por lo que es necesario que el conjunto de datos sea rescalado y normalizado [91].

4.2. Reconstrucción mediante SS

4.2.1. Formulación general del problema

Debido a las dificultades que supone la colocación de termocuplas en el sistema, es esencial restringir la selección de sensores de modo que sea posible realizar mediciones experimentales que validen la metodología. Asimismo, como ya fue mencionado, se requiere que la mayor cantidad de sensores óptimos se encuentren ubicados en la zona de máximo hollín de la llama que se desea reconstruir, de modo que sólo deban ejecutarse algunas mediciones con termocuplas.

4.2.2. Restricciones de ubicación

En el contexto de este trabajo es a lo menos importante evaluar este aspecto, ya que para llevar a la práctica la metodología se deben realizar mediciones experimentales. La toma mediciones en regiones donde no se tienen las técnicas adecuadas para hacerlo puede incurrir en un error que por consiguiente aumentará el error de reconstrucción.

La incorporación de restricciones a la metodología, no implica necesariamente un efecto negativo en la búsqueda de la optimalidad, que pueda llegar a arriesgar el proceso de reconstrucción. Esto se debe a que la naturaleza del problema admite infinitas soluciones, y se está buscando conseguir la mejor reconstrucción posible a partir de una cantidad limitada y establecida de sensores, en comparación al universo total. Si bien una restricción incrementa el error de reconstrucción, pues impide que un sensor “necesario” se ubique, la colocación de sensores adicionales puede ayudar a mejorar esta situación, evitando así ubicar sensores en zonas poco convenientes.

Se estudiaron 4 tipos de restricciones para la ubicación de los sensores, cada una afectando a la Ecuación 3.17 en la factorización QR, donde l es el sensor seleccionado en cada iteración k , de un total de p sensores que van a seleccionarse. Un esquema básico para representar esta metodología es el siguiente:

Algorithm 1 QR

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2$ 
4:    $s \leftarrow \text{CONSTRAINT}(s)$ 
5:    $l \leftarrow \text{argmax}(s)$ 
6:   ...
7: end for

```

Los casos a estudiar son **(i) Costo por ubicación**, **(ii) Región restringida**, **(iii) Ubicaciones Predeterminadas** y **(iv) Distancia entre sensores**. Las 3 primeras están implementadas en la librería "Pysensors", que se basan en la propuesta de Karnik et al. [16] y Clark et al. [92], mientras para (iv) que se presentará un enfoque de solución. A continuación se explican cada una de estas:

Restricción de costos

La descomposición QR se adapta, agregando una función de costos que condicione la elección de un sensor, haciendo que su posición sea inaccesible, debido a que posee un costo infinito [92]. Para ello se tiene un vector $\eta \in \mathbb{R}^n$, que asocia un costo a cada posición $i = 1, \dots, n$. El vector $s^{(k)}$ entonces está dado por:

$$s_i^{(k)} = \|R_{k:m,i}\|_2 - \eta_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (4.4)$$

De este modo, se castiga la elección de un sensor óptimo en una posición no deseada. Esto puede implementarse en posiciones específicas donde sea imposible admitir la colocación de un sensor, como por ejemplo en regiones cercanas a la boquilla del quemador de una llama.

Algorithm 2 QR: Cost Constraint

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2 - \eta$ 
4:    $l \leftarrow \operatorname{argmax}(s)$ 
5:   ...
6: end for

```

Región restringida

Al igual que en el caso anterior, esta restricción permite seleccionar una región donde se limite la colocación de sensores. No obstante, bajo esta nueva restricción se permitirá un máximo de sensores dentro de la región limitada, lo cual es especialmente útil cuando se necesita que la mayor cantidad de sensores se establezcan en una zona específica y un par de ellos estén fuera de dicha región, como es el objetivo de esta propuesta.

Sea γ una lista de ubicaciones que representan una región o zona a evitar, y r la cantidad máxima de sensores que puedan colocarse en dicha región. En cada k iteración, se verifica la lista de sensores ya escogidos, utilizando un contador *count* para determinar la cantidad de sensores de γ que se encuentren en dicha lista:

Algorithm 3 QR: Region Constraint

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2$ 
4:   if  $\text{count} \geq r$  then
5:      $s[\gamma] = 0$ 
6:   end if
7:    $l \leftarrow \operatorname{argmax}(s)$ 
8:   ...
9: end for

```

El condicional en este algoritmo evita que se ubiquen más sensores de los permitidos en la región restringida, penalizando el vector s en esas posiciones, sin embargo si de por sí la zona γ no es óptima, no se ubicarán sensores ahí. Dicho esto, se tiene la siguiente opción donde ahora r es la cantidad exacta de sensores que pueden ubicarse en γ .

Algorithm 4 QR: Region Constraint

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2$ 
4:   if  $count < r$  and  $p > k \geq (p - (r - \gamma))$ 
     then
5:      $s[! = \gamma] = 0$ 
6:   end if
7:    $l \leftarrow \arg \max(s)$ 
8:   ...
9: end for

```

En este caso si finalizando las iteraciones aun no se ubican los $r \in \gamma$ sensores requeridos, se penaliza a las posiciones fuera de γ generando que los $r - count$ sensores a seleccionar sean obligatoriamente parte de γ .

Sensores Predeterminados

En este caso γ es una lista de ubicaciones que se desea que formen parte del conjunto seleccionado y c la cantidad mínima de sensores en γ que se deben seleccionar. Análogo al caso anterior se utiliza un contador $count$ para determinar la cantidad de sensores de γ que hayan sido escogidos. Luego, desde la iteración $k = p - c$, si la cantidad de sensores predeterminados **seleccionados** $count$ no supera la cantidad de sensores predeterminados que desean activarse, se inhabilita la elección de sensores que se encuentren fuera de γ . El procedimiento se detalla a continuación:

Algorithm 5 QR: Predetermined Sensors

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2$ 
4:   if  $k \geq p - c$  and  $count < c$  then
5:      $s[! = \gamma] = 0$ 
6:   end if
7:    $l \leftarrow \operatorname{argmax}(s)$ 
8:   ...
9: end for

```

A fin de cuentas esta restricción fuerza una elección dentro de γ , impidiendo que se ubiquen sensores en las demás posiciones posibles.

Distancia entre sensores

Se tiene que d es la distancia mínima que debe existir entre sensores. Por otra parte del conjunto P guarda a los sensores que se van eligiendo en cada iteración:

Algorithm 6 QR: Distance

```

1:  $R \leftarrow \Psi_q$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots, p$  do
3:    $s \leftarrow \|R\|_2$ 
4:   if  $\|i - \mathbb{P}[\cdot]\|_2 < d$  then
5:      $s[i] = 0$ 
6:   end if
7:    $l \leftarrow \operatorname{argmax}(s)$ 
8:   ...
9: end for
  
```

La condición evita que se ubiquen sensores a una distancia menor a d de otro sensor ya posicionado. Si bien esta restricción es sencilla de comprender, tiene dificultades en su implementación, puesto que se debe asegurar que el siguiente sensor óptimo no sea parte de la vecindad de **alguno** de los sensores ya seleccionados. Esto implica hacer comparaciones con cada uno de estos, lo que es costoso computacionalmente y requiere de iteraciones adicionales dentro de cada iteración k .

Por otra parte las n posiciones posibles forman parte de una matriz de $n_x \times n_y$, esto quiere decir que hay un sistema de coordenadas asociado a $i = 1, \dots, n$, en 2 dimensiones para esta situación. Para solucionar esto, se construyó el siguiente arreglo matricial:

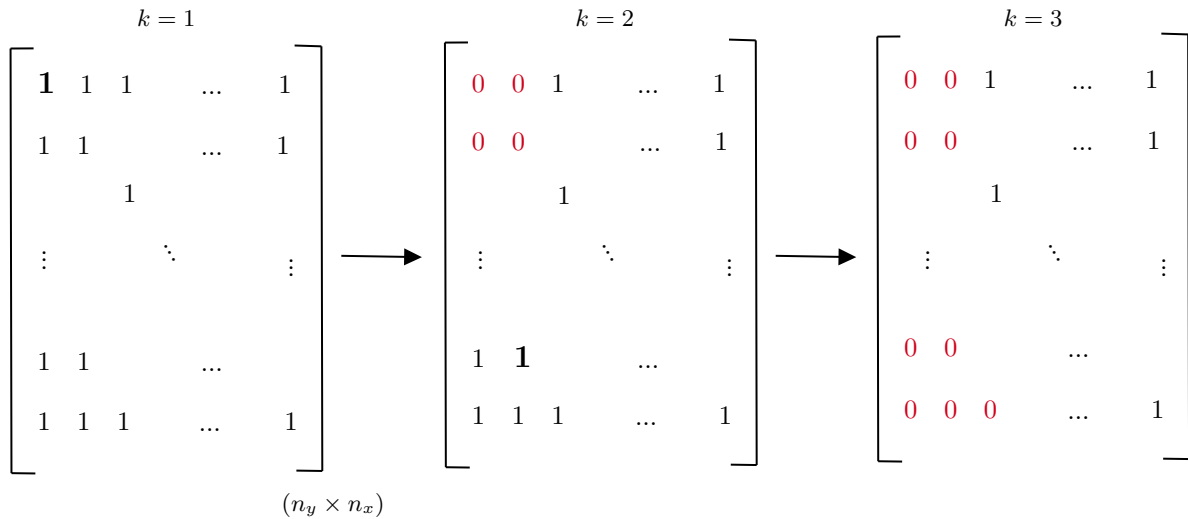


Figura 4.3: Representación matricial de la disponibilidad de sensores

Seleccionando el primero sensor, se le otorga un valor de 0 a la posición que representa en el

arreglo matricial, y a su vecindad. En la Figura 4.3, la posición $(0, 0)$ está marcada como un sensor óptimo, de este modo la matriz de disponibilidades en la siguiente iteración se modifica, marcando como 0 a dicha posición y su vecindad. Lo mismo sucede en la iteración $k = 2$. En este caso la distancia de separación d corresponde a 1 posición.

Es visible que esta condición es bastante útil pues, desde el punto de vista experimental, existe una complejidad asociada a realizar mediciones en posiciones tan cercanas entre sí, especialmente con el uso de herramientas con las termocuplas.

Con los antecedentes necesarios ya es posible establecer por completo la estructura de esta investigación. Ahora, con el propósito de definir la validación de la aplicación del SS en el contexto de los campos de temperatura en llamas laminares de difusión, es fundamental tener una metodología que pueda asegurar la eficacia de su aplicación.

Una vez determinada la ubicación óptima de sensores bajo las restricciones descritas, la estrategia de *Sparse Sensing* permite reconstruir el campo de temperatura completo mediante la combinación de mediciones puntuales y la aproximación de bajo rango obtenida con la descomposición SVD. Estos campos reconstruidos constituyen la entrada para la etapa posterior, en la que se utilizan PINNs para inferir el campo de velocidad, tal como se describirá a continuación.

4.3. Aplicación de PINNs para la recuperación de la velocidad

Una vez reconstruido el campo de temperatura mediante SS, se emplea una red neuronal informada por la física para estimar el campo de velocidad bidimensional $(v(r, z), u(r, z))$, donde v y u representan las componentes radial y axial de la velocidad, respectivamente. Este enfoque permite predecir la dinámica del flujo sin necesidad de disponer de un conjunto completo de datos de velocidad, utilizando en su lugar la temperatura reconstruida y la física del sistema como principales fuentes de información.

4.3.1. Formulación del problema físico

Se considera una llama laminar axisimétrica en estado estacionario, descrita en coordenadas cilíndricas (r, z) . Bajo este marco, el campo de velocidad (v, u) se relaciona con el campo de temperatura $T(r, z)$ a través de las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\rho v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u) = 0 \quad (4.5)$$

Ecuaciones de cantidad de movimiento:

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial v}{\partial r} + \rho u \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial p}{\partial r} &= \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \\ - \frac{2}{3r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right) - \frac{2}{3r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2\mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (rv) + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial z} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \rho \left(v \frac{\partial u}{\partial r} + u \frac{\partial u}{\partial z} \right) &= \rho g - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) \\ + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} rv \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Ecuación de energía (con $T = T_{SS}$):

$$\left(v \frac{\partial T}{\partial r} + u \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) \quad (4.8)$$

donde $\nu(T) = \mu(T)/\rho(T)$ es la viscosidad cinemática y $\alpha(T) = k(T)/(\rho(T)c_p(T))$ la difusividad térmica. Se define k como la conductividad térmica, c_p como el calor específico y ρ como la densidad. Estas propiedades se consideran dependientes de la temperatura local, la cual es predicha por la PINN durante el entrenamiento, y se compara con la temperatura reconstruida por SS.

Estas ecuaciones constituyen el sistema físico que la PINN debe satisfacer durante su entrenamiento. La red neuronal se entrena de modo que las soluciones propuestas para v y u respeten estas relaciones en todo el dominio, aprovechando el campo de temperatura $T_{SS}(r, z)$ previamente reconstruido con *Sparse Sensing*.

Cálculo de parámetros físicos dependientes de la temperatura

En cada *epoch* de entrenamiento, la PINN predice el campo de temperatura $T_\theta(r, z)$ en los *collocation points*. A partir de este campo, se calculan las propiedades físicas requeridas:

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \frac{p \cdot W}{R \cdot T} \\ \mu(T) &= (T/300)^{0.7} \cdot 1.835 \cdot 10^{-5} \\ k(T) &= \mu(T) \cdot cp/Pr \\ c_p(T) &\approx c_{p0} = 1300 \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde p es la presión, W el peso molecular de la mezcla, R la constante de gases, y Pr el número de Prandtl. De esta forma, tanto $\nu(T)$ como $\alpha(T)$ se actualizan dinámicamente con la predicción de la red, capturando la dependencia de las propiedades del flujo con la temperatura, lo que mejora la consistencia física del entrenamiento de la PINN. Estas relaciones se fundamentan en investigaciones previas que emplearon PINNs para recuperar propiedades físicas en flujos a altas temperaturas como Liu et al. y Cai et al. [23, 22].

Este enfoque permite que la PINN aprenda no solo el campo de velocidad, sino también la influencia de la variación de propiedades físicas con la temperatura, aun cuando no se disponga de mediciones experimentales directas de velocidad.

4.3.2. Normalización de las ecuaciones

Para el entrenamiento de la PINN se emplearon ecuaciones adimensionales, donde las variables de velocidad, presión y temperatura se escalaron mediante: la velocidad característica v_c , la longitud característica l_c , la presión característica p_c y temperatura característica T_c , según la formulación propuesta por McAllister et al. [93]:

$$\bar{v} = \frac{v}{v_c}, \quad \bar{u} = \frac{u}{v_c}, \quad \bar{r} = \frac{r}{l_c}, \quad \bar{z} = \frac{z}{l_c}, \quad \bar{T} = \frac{T}{T_c}, \quad \bar{p} = \frac{p}{p_c},$$

Ecuación de continuidad:

$$\frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\rho \bar{r} \bar{v}) + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\rho \bar{u}) = 0 \quad (4.10)$$

Ecuación de cantidad de movimiento (radial):

$$\begin{aligned} & \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{r}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{z}} - \frac{2\mu}{\rho v_c l_c \bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{r}} \right) - \frac{\mu}{\rho v_c l_c} \left(\frac{\partial^2 \bar{v}}{\partial \bar{z}^2} + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} \right) \right) \\ & + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho v_c l_c \bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{v}) + \bar{r} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} \right) + \frac{2\mu \bar{v}}{\rho v_c l_c \bar{r}^2} - \frac{2}{3} \frac{\mu}{\rho v_c l_c \bar{r}} \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} + \frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{v}) \right) + \frac{l_c}{p_c \rho v_c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} = 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

Ecuación de cantidad de movimiento (axial):

$$\begin{aligned} & \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} - \frac{g l_c}{v_c^2} - \frac{\mu}{\rho v_c l_c \bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{r}} + \bar{r} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \bar{z}} \right) \\ & - \frac{2\mu}{\rho v_c l_c} \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \bar{z}^2} + \frac{2\mu}{3 \rho v_c l_c} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \left(\frac{1}{\bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} (\bar{r} \bar{v}) + \frac{\partial \bar{u}}{\partial \bar{z}} \right) + \frac{l_c}{p_c \rho v_c^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{z}} = 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

Ecuación de energía:

$$\bar{v} \cdot v_c \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} + \bar{u} \cdot v_c \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{z}} - \frac{k}{\rho c_p l_c \bar{r}} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r} \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{r}} \right) - \frac{k}{\rho c_p l_c} \left(\frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \bar{z}^2} \right) = 0 \quad (4.13)$$

4.3.3. Estructura de la red neuronal y funciones de pérdida

La red neuronal utilizada en este trabajo recibe como entrada las coordenadas espaciales (r, z) y entrega como salida las componentes de velocidad $(v(r, z), u(r, z))$. Esta posee una arquitectura *fully-connected feedforward* profunda, donde cada capa está formada por un conjunto de neuronas interconectadas con la capa anterior y la siguiente. En este caso se empleó una estructura con **5 capas**

ocultas de 50 neuronas cada una, la cual se obtuvo de un análisis iterativo en donde se testearon distintas configuraciones.

Cada neurona aplica una transformación lineal seguida de una **función de activación** no lineal, lo cual permite a la red aproximar funciones altamente complejas. En términos generales, la salida de la neurona j en la capa l se calcula como en la Ecuación 3.19.

Funciones de Activación

Las funciones de activación son esenciales para introducir *no linealidad* en la red, ya que sin ellas el modelo se comportaría como una combinación lineal de las entradas, sin capacidad para representar fenómenos complejos [51]. Existen múltiples funciones de activación empleadas en redes neuronales, siendo algunas de las más utilizadas:

- **Sigmoide:** $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$, acota la salida entre 0 y 1. Es útil en problemas de clasificación pero susceptible a saturación.
- **Tanh:** $\tanh(x)$. Produce salidas en $[-1, 1]$ y es frecuente en PINNs por su suavidad y derivadas continuas.
- **ReLU (Rectified Linear Unit):** $\max(0, x)$. Ampliamente usada en *deep learning* por su simplicidad y mitigación parcial del gradiente desvanecido.
- **Exp:** $\sigma(x) = e^x$. Utilizada para modelar comportamientos crecientes o con fuertes gradientes.

En este trabajo se evaluaron varias funciones de activación, incluyendo **tanh**, **ReLU**, **exponencial** y **sigmoide**, con el fin de analizar su influencia en la reconstrucción de los campos de velocidad. Si bien **tanh** suele ser la elección por defecto en PINNs, la función exponencial mostró ventajas al representar el campo de temperatura y sus gradientes, por lo que se utilizó un enfoque combinado donde se empleó una función de activación **exponencial** para la predicción de T y **tanh** para lo demás.

Entradas y salidas de la red:

En general, la red posee la siguiente estructura:

$$(r, z) \longrightarrow (u_{\theta}(r, z), v_{\theta}(r, z), T_{\theta}(r, z)) \quad (4.14)$$

donde θ representa el conjunto de parámetros (pesos y sesgos) de la red. Las derivadas necesarias para evaluar los residuos de las ecuaciones diferenciales se obtienen mediante diferenciación automática, sin necesidad de discretización adicional.

Antes del entrenamiento, las coordenadas espaciales (r, z) y los campos de temperatura son **normalizados** para evitar desbalances de escala que puedan dificultar la convergencia de la red. Además, los pesos de la red se inicializan con el método de **Xavier** (*Glorot initialization*), lo cual distribuye los valores iniciales de forma consistente con la profundidad de la red, reduciendo el riesgo de saturación en las primeras iteraciones.

Función de pérdida total:

La función de pérdida total se construye como combinación de residuos físicos evaluados mediante diferenciación automática:

$$\mathcal{L}_{\text{total}} = \lambda_{\text{EDP}} \mathcal{L}_{\text{EDP}} + \lambda_{\text{data}} \mathcal{L}_{\text{data}} + \lambda_{\text{bc}} \mathcal{L}_{\text{bc}} \quad (4.15)$$

Donde:

- \mathcal{L}_{EDP} : Penaliza el incumplimiento de las ecuaciones físicas.
- \mathcal{L}_{bc} : Penaliza el incumplimiento de las condiciones de borde.
- $\mathcal{L}_{\text{data}}$: Penaliza la discrepancia entre la predicción de la red y los datos de entrada:

$$\mathcal{L}_{\text{data}} = \|T_{\theta} - T_{SS}\| + \|u_{\theta}^* - u_z^*\| \quad (4.16)$$

Para $\mathcal{L}_{\text{data}}$ se considera:

- Los datos de entrada proporcionados por la temperatura reconstruida T_{SS} en comparación con la predicción de red T_{θ} .
- Un dato puntual de velocidad axial en la región superior de la llama. Esta corresponde a una estimación, que se calcula desde $u_z^* = \sqrt{u_0^2 + 2az}$, donde u_0 es la velocidad en la entrada del quemador, y se asume una aceleración debido a la flotabilidad constante de $a = 25$ m/s [56].

Residuo físico:

Los residuos diferenciales de las ecuaciones físicas son evaluados en un conjunto de puntos discretos dentro del dominio Ω , denominados *collocation points*. Este conjunto incluye tanto puntos internos como puntos localizados en los bordes, lo que permite evaluar simultáneamente los términos asociados a la física y a las condiciones de borde. En este trabajo, se seleccionó aproximadamente un 20% del total de puntos del dominio como *collocation points*, distribuidos aleatoriamente para garantizar una cobertura representativa del campo.

Durante cada *epoch* de entrenamiento, la función de pérdida se evalúa en todos estos puntos, calculando los residuos de continuidad, cantidad de movimiento y energía. Por ejemplo, el residuo de la ecuación de continuidad se expresa como:

$$\mathcal{R}_{\text{cont}}(r, z) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r v_{\theta}(r, z)) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u_{\theta}(r, z)), \quad (4.17)$$

donde v_{θ} y u_{θ} representan las predicciones de la PINN para las componentes radial y axial de la velocidad, respectivamente. De manera análoga, se calculan los residuos \mathcal{R}_u , \mathcal{R}_v y $\mathcal{R}_{\text{energía}}$ para las ecuaciones de momento y energía, respectivamente.

La pérdida física total se define como la suma de los residuos al cuadrado evaluados en todos los *collocation points* $\{(r_i, z_i)\}_{i=1}^{N_f}$:

$$\mathcal{L}_{\text{EDP}} = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \left[\mathcal{R}_{\text{cont}}^2(r_i, z_i) + \mathcal{R}_u^2(r_i, z_i) + \mathcal{R}_v^2(r_i, z_i) + \mathcal{R}_{\text{energía}}^2(r_i, z_i) \right], \quad (4.18)$$

donde N_f es el número de collocation points.

Cabe señalar que un mayor número de *collocation points* puede mejorar la fidelidad de la solución, pero incrementa significativamente el costo computacional, ya que la red debe evaluar la función de pérdida en cada uno de ellos, en cada *epoch*.

4.3.4. Dominio de entrenamiento y condiciones de borde

El comportamiento de la llama se modela imponiendo condiciones de borde que reflejan la simetría y los límites abiertos del sistema:

- **Eje de simetría ($r = 0$):** Se aplica simetría axial, imponiendo $v = 0$ y $\frac{\partial v}{\partial r} = 0$.
- **Borde inferior (quemador):** Se prescribe la velocidad de entrada axial $u = u_{\text{inlet}}$ en la zona correspondiente a la inyección del combustible y $v = 0$ para reflejar flujo sin componente radial en la entrada.
- **Bordes laterales y superiores:** Se imponen condiciones de salida libre, representadas por gradientes nulos: $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ y $\frac{\partial v}{\partial n} = 0$, donde n es la dirección normal a la frontera.

Estas condiciones de borde se integran en la función de pérdida como el término \mathcal{L}_{bc} , forzando a la red a cumplir las restricciones físicas en los límites del dominio durante el entrenamiento. La Figura 4.4 muestra el dominio de entrenamiento junto con las fronteras donde se aplican las condiciones físicas.

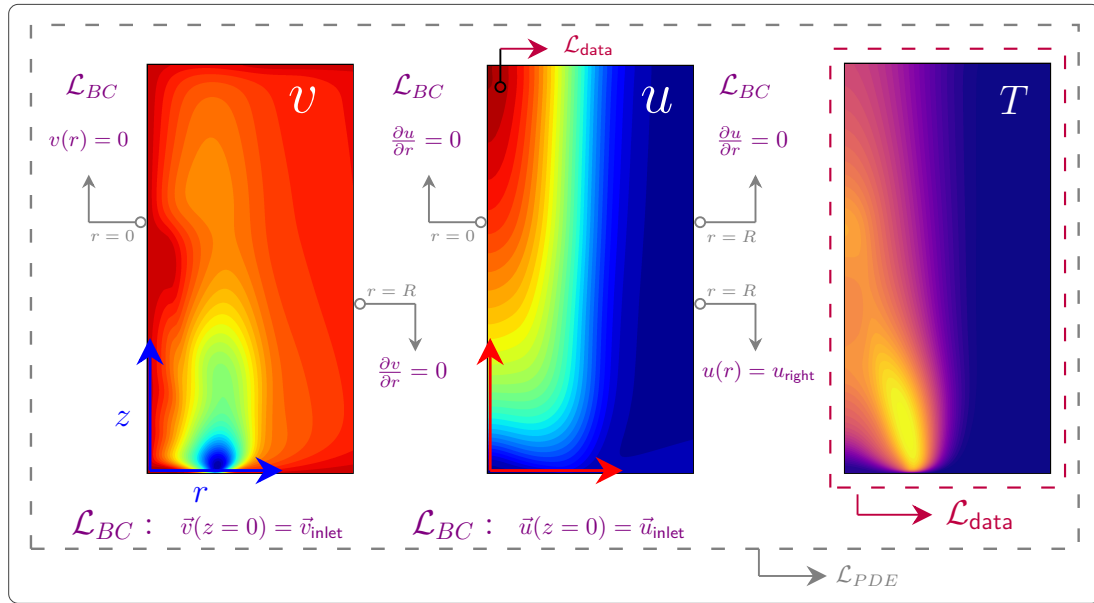


Figura 4.4: Dominio de entrenamiento para la PINN, mostrando los collocation points internos y las condiciones de borde aplicadas en cada frontera.

4.3.5. Optimización y hardware

El entrenamiento de la red se realiza mediante el uso del optimizador *Adam* [72], con una tasa de aprendizaje $\eta = 10^{-3}$. Se evaluó el uso de un *learning rate scheduler* que ajustara esta tasa para favorecer la convergencia en etapas finales del entrenamiento, sin embargo, este enfoque produjo *saltos* en la función de pérdida que afectaron negativamente la estabilidad y precisión de la predicción, por lo que finalmente se optó por mantener una tasa de aprendizaje constante.

Los pesos de la función de pérdida, $(\lambda_{\text{EDP}}, \lambda_{\text{data}}, \lambda_{\text{bc}})$, se ajustaron de manera empírica con el fin de equilibrar la contribución de los términos de datos, residuos físicos y condiciones de borde. Este balance es crítico, ya que un desajuste puede ocasionar que la red priorice el cumplimiento de ciertos términos en detrimento de otros, afectando la coherencia física de la solución.

El criterio de convergencia se basó en la estabilización de la pérdida total $\mathcal{L}_{\text{total}}$ y de los residuos físicos bajo un umbral predefinido, garantizando que las soluciones obtenidas fueran consistentes con la física del sistema. En los casos analizados, se requirieron en promedio 15.000 *epochs* para alcanzar la convergencia.

El hardware utilizado para los experimentos incluyó un procesador **AMD Ryzen 7 5800X**, 32 GB de RAM y una **GPU NVIDIA GeForce RTX 3060** con 8 GB de memoria. Con esta configuración, el entrenamiento de la red demandó aproximadamente entre 15 y 20 minutos, dependiendo del número de *collocation points* y la cantidad total de *epochs*.

4.3.6. Pipeline de entrenamiento de la PINN

La coherencia física del entrenamiento se asegura mediante tres mecanismos principales: (i) el cumplimiento de las ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía en todo el dominio, (ii) la incorporación de la temperatura reconstruida mediante *Sparse Sensing* como restricción de datos, y (iii) la imposición de condiciones de borde adecuadas. De esta manera, la PINN puede inferir campos de velocidad completos a partir de información experimental mínima.

A continuación, se presenta el **pipeline de entrenamiento** implementado, resumido en forma de pseudocódigo:

Algorithm 7 Entrenamiento de la PINN para campos de velocidad

- 1: **Input:** Campo de temperatura $T(r, z)$ reconstruido, parámetros físicos (ν, α)
- 2: Generar *collocation points* $\{(r_i, z_i)\}$ en el dominio
- 3: Inicializar la red neuronal u_θ, v_θ
- 4: **while** no convergencia **do**
- 5: Predecir $u_\theta(r_i, z_i), v_\theta(r_i, z_i)$
- 6: Calcular derivadas mediante autograd
- 7: Evaluar residuos $\mathcal{R}_{\text{cont}}, \mathcal{R}_u, \mathcal{R}_v$
- 8: Construir pérdidas: $\mathcal{L}_{\text{EDP}}, \mathcal{L}_{\text{bc}}, \mathcal{L}_{\text{data}}$
- 9: $\mathcal{L}_{\text{total}} = \lambda_{\text{EDP}}\mathcal{L}_{\text{EDP}} + \lambda_{\text{bc}}\mathcal{L}_{\text{bc}} + \lambda_{\text{data}}\mathcal{L}_{\text{data}}$
- 10: Actualizar pesos θ con *Adam*
- 11: **end while**
- 12: **Output:** Campos de velocidad $(u_\theta, v_\theta, T_\theta)$

4.3.7. Integración con resultados

El enfoque SSPINNs desarrollado en este trabajo consiste en un acoplamiento secuencial entre la reconstrucción de temperatura y la estimación del campo de velocidad. Como se ve en la Figura 4.5, primero, la estrategia de *Sparse Sensing* determina la ubicación óptima de sensores y reconstruye el campo de temperatura $T_{SS}(r, z)$ en todo el dominio a partir de mediciones puntuales. Luego, este campo reconstruido actúa como entrada para la PINN, que lo utiliza en dos formas:

1. Como referencia para el campo de temperatura T_θ , predicho por la red, limitando las soluciones a campos físicamente consistentes con la temperatura reconstruida T_{SS} .
2. En las primeras iteraciones, para calcular los parámetros en las ecuaciones de cantidad de movimiento, energía y masa.

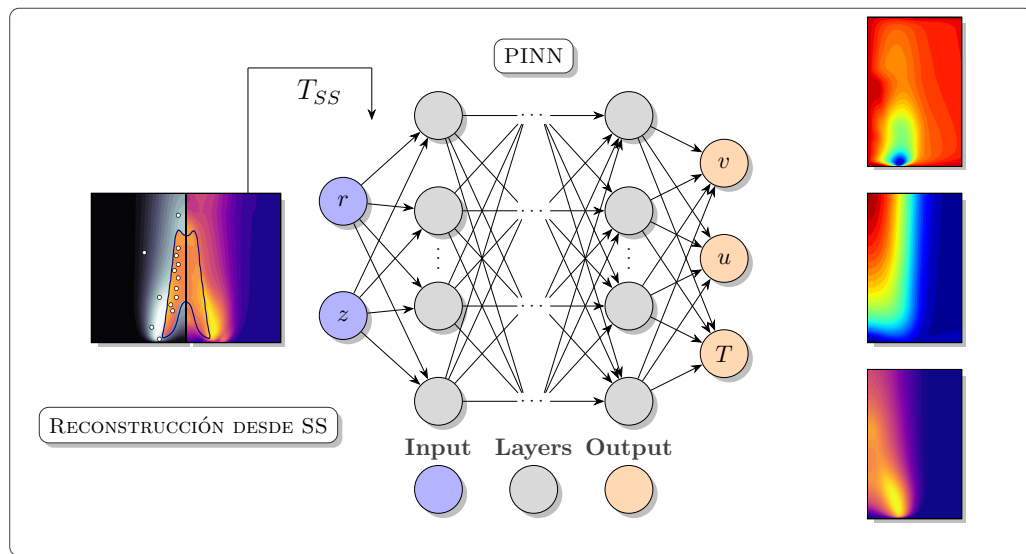


Figura 4.5: Esquema que integra los resultados del SS con el entrenamiento de la PINN.

De este modo, la PINN utiliza un conjunto mínimo de información experimental, para inferir un campo de velocidad completo (v, u) sin requerir mediciones de velocidad como PIV.

4.4. Validación de la metodología propuesta

Dado que este estudio no incluyó una validación experimental completa, se diseñaron entornos numéricos que emulan condiciones de medición realistas. Para ello, se redujo la resolución espacial de los campos simulados, representando el muestreo limitado característico de un arreglo experimental con termocuplas. Esta aproximación permite analizar el impacto que tiene la ubicación de los sensores sobre la calidad de la reconstrucción.

En condiciones experimentales, la punta de la termocupla no coincide de manera exacta con la posición óptima definida por la estrategia de *Sparse Sensing*. El diámetro físico del sensor y las tolerancias en su instalación generan desplazamientos que pueden llevar a mediciones en posiciones adyacentes, equivalentes a celdas vecinas en la simulación. Esta desviación introduce errores sistemáticos que se propagan en la reconstrucción del campo de temperatura y, posteriormente, en la estimación del campo de velocidad mediante PINNs. Por lo tanto, esta etapa numérica permite cuantificar la sensibilidad de la metodología frente a mediciones desplazadas respecto a las posiciones óptimas.

La reconstrucción obtenida con SS y la predicción de la PINN se comparan con los campos simulados completos, cuantificando errores globales. Este enfoque permitió verificar la robustez de la metodología frente a datos dispersos y ruidosos, sentando las bases para su validación experimental futura en un laboratorio de combustión.

4.4.1. Validación numérica

Inicialmente, para testear la metodología se utilizarán los resultados de un campo de temperatura simulado del cual se tiene su información completa, que se denominará x_p . Este campo no será parte del conjunto \mathbb{X} , de este modo la posición óptima no se verá influenciada directamente por el campo a reconstruir, sino que será suficiente con la información entregada por los modos principales del conjunto de entrenamiento. La finalidad es que a partir de las ubicaciones óptimas resultantes se aplique SS para reconstruir el campo.

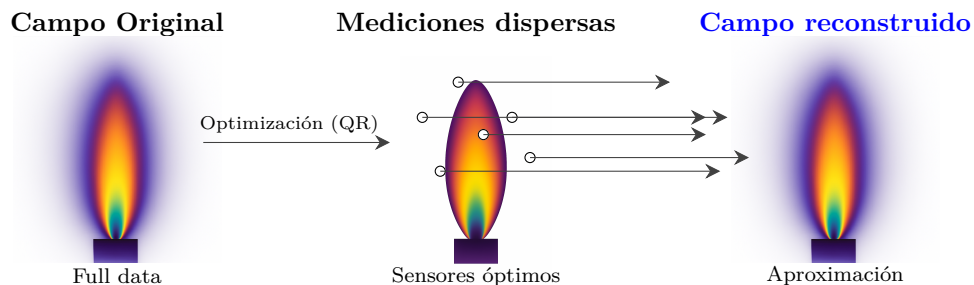


Figura 4.6: Representación de la reconstrucción de temperatura mediante SS

Como se muestra en la Figura 4.6, la estrategia de SS consiste en seleccionar un conjunto reducido de posiciones para los sensores a partir del análisis del conjunto de datos simulado. En esta etapa metodológica, las ubicaciones óptimas se determinan considerando las restricciones explicadas en la Subsección 4.2.2, lo que permite evaluar de manera controlada el rendimiento de la reconstrucción.

Si bien en este trabajo se aplicaron todas las restricciones descritas previamente para la ubicación óptima de sensores, las más relevantes fueron: **distancia mínima entre sensores, regiones restringidas y sensores predeterminados**. Estas restricciones se definieron considerando la factibilidad experimental, de acuerdo con los siguientes criterios:

1. Mantener una distancia mínima entre sensores para evitar mediciones redundantes y garantizar una adecuada cobertura espacial en la región libre de hollín.
2. Priorizar las zonas donde el acceso experimental es más sencillo, facilitando el posicionamiento y manipulación del *setup* de termocuplas.
3. Favorecer la densidad de mediciones en las regiones de mayor concentración de hollín, donde las técnicas ópticas presentan mejor desempeño, limitando al mismo tiempo el número de mediciones con termocuplas en la periferia de la llama.

La aplicación de estas restricciones tiene un doble objetivo. En primer lugar, evita la colocación de sensores demasiado próximos, promoviendo una distribución espacial eficiente que maximiza la información recuperada. En segundo lugar, permite asignar un mayor número de mediciones a las zonas de máximo hollín y un número limitado a la región exterior, donde las termocuplas son más adecuadas. Finalmente, la inclusión de regiones preferentes para la instalación de sensores asegura que la metodología propuesta sea viable para una futura implementación experimental.

A partir de estas posiciones, se obtiene un campo reconstruido que puede compararse con el campo original x_v , identificando regiones donde la estrategia ofrece una alta fidelidad y otras donde la reconstrucción resulta más desafiante. Este enfoque permite establecer los criterios para evaluar la efectividad del método antes de su implementación experimental, asegurando que incluso con un número limitado de sensores se mantenga un error aceptable en la mayor parte del dominio.

4.4.2. Validación experimental

Una vez determinadas las posiciones óptimas de los sensores mediante SS, la siguiente fase prevista consistía en validar la reconstrucción del campo de temperatura en una llama laminar de laboratorio. Esta etapa buscaba reproducir condiciones experimentales reales, en las que las mediciones se realizan con acceso limitado y su precisión depende de la correcta instrumentación y calibración.

La validación experimental planteada se basa en el uso de termocuplas tipo R, montadas en un sistema de traslación motorizado que permite posicionarlas en las ubicaciones óptimas identificadas por el algoritmo. Este tipo de termocuplas son ampliamente utilizadas para medir temperatura en llamas de difusión [94, 95, 96].

Cada medición de temperatura requiere una corrección por pérdidas de calor por radiación y

conducción, que se obtiene mediante un balance de energía en estado estacionario:

$$q_{\text{conducción}} + q_{\text{convección}} + q_{\text{radiación}} = 0 \quad (4.19)$$

donde el flujo convectivo depende de la velocidad local y del gradiente térmico del gas, mientras que el flujo radiativo se corrige utilizando la emisividad efectiva de la unión y la temperatura del entorno [97]. Esta corrección es esencial para compensar la subestimación de la temperatura real en la llama.

En este escenario, la reconstrucción con SS se basaría en estas mediciones puntuales y la temperatura en la zona de hollín obtenida mediante técnicas ópticas no intrusivas, previamente descritas en la Sección 3.2. La validación se realizaría comparando el campo reconstruido con un campo de temperatura simulado o perfiles de temperatura experimentales independientes disponibles en la literatura. Esta comparación permitiría cuantificar la exactitud del enfoque de bajo costo frente a métodos ópticos avanzados.

Adicionalmente, para la validación del campo de velocidad reconstruido mediante PINNs, se plantea el uso de PIV, una técnica óptica no intrusiva ampliamente utilizada para medir campos de velocidad en flujos reactivos [98]. PIV permite obtener mapas bidimensionales de la velocidad instantánea a partir del seguimiento de partículas de trazado dispersas en el flujo, iluminadas mediante un láser en plano.

Estos datos experimentales servirían como referencia para evaluar la precisión de las PINNs en la estimación de las componentes (v, u) , especialmente en la región central de la llama, donde los gradientes de velocidad son más pronunciados. La comparación pixel a pixel con las predicciones de la red permitiría cuantificar la capacidad de la metodología para reproducir el comportamiento hidrodinámico de la llama sin recurrir a un conjunto denso de mediciones experimentales.

Sin embargo, esta validación experimental no se llevó a cabo a pesar de estar dentro del alcance de este trabajo, por lo que los resultados presentados se limitan a entornos numéricos que emulan las condiciones de medición con sensores puntuales, como se describió en la Subsección 4.4.1. Aun así, la metodología descrita establece un marco claro para la implementación futura, que permitirá extender la aplicación de SS y PINNs hacia entornos experimentales reales.

4.4.3. Frameworks y herramientas utilizadas

La metodología fue implementada en **Python 3.10**, utilizando las siguientes librerías y frameworks:

- **PyTorch**: para la construcción de las PINNs, entrenamiento con autograd y evaluación de los residuos físicos.
- **NumPy/Matplotlib**: para el manejo de datos y visualización de resultados.
- **PySensors**: para la optimización de la ubicación de sensores mediante descomposición QR con restricciones.

5 | Análisis de Resultados

5.1. Estimación de temperatura mediante SS

La eficacia del método de *Sparse Sensing* (SS) fue evaluada sobre dos llamas laminares de difusión: una llama de etileno al 80% diluido con N_2 en un quemador tipo Yale (Yale80), y una llama de etileno/aire en un quemador tipo Santoro, ambas presentadas previamente en la Tabla 4.1. Para este propósito, se empleó una base de datos compuesta por 35 campos de temperatura generados mediante la estrategia de aumento de datos descrita en la Sección 4.1.2. Esta base se derivó de siete llamas simuladas de entrenamiento, lo que permite, por construcción, utilizar hasta 35 modos de la descomposición en valores singulares (SVD), y, por tanto, definir un máximo de 35 sensores candidatos.

Cabe destacar que la base de datos incluye múltiples llamas de Yale con distintas diluciones de etileno, mientras que la llama de Santoro no forma parte del conjunto de entrenamiento, lo que constituye un caso de extrapolación interesante para evaluar la capacidad de generalización del método.

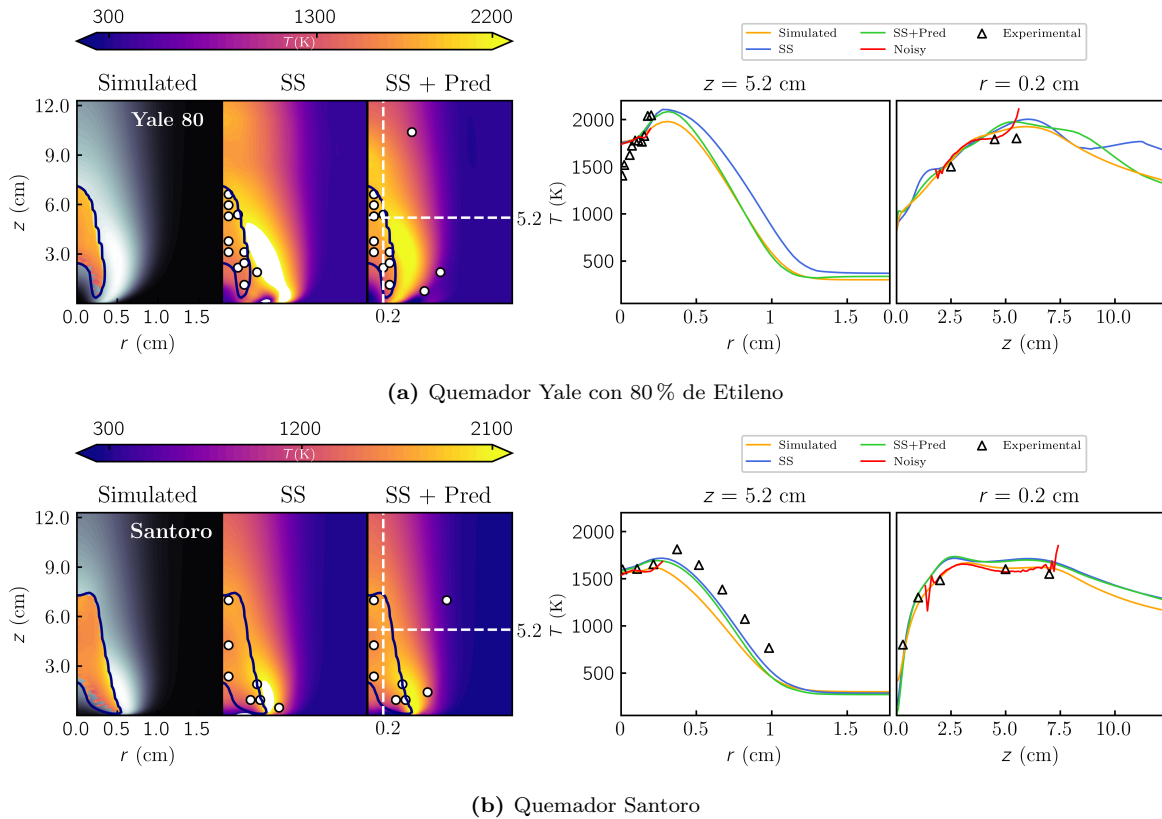


Figura 5.1: Comparación de la reconstrucción de la temperatura utilizando SS y SS con sensores predeterminados. Los puntos blancos indican la ubicación de los sensores.

Para la reconstrucción de temperatura, se utilizaron 11 sensores en el caso de la llama Yale80 y 13 en el caso SS+Pred, que incluye ubicaciones predeterminadas seleccionadas estratégicamente para mejorar la viabilidad experimental y la calidad de reconstrucción. Mientras que para la llama Santoro se emplearon 7 sensores bajo la estrategia SS, y 8 sensores en la variante SS+Pred. La Figura 5.1 muestra los resultados correspondientes a ambas llamas. En cada columna, se observa:

- **Izquierda:** El campo reconstruido mediante deconvolución óptica (basado en emisión de hollín).
- **Centro:** El campo de temperatura reconstruido por SS,
- **Derecha:** Reconstrucción del campo de temperatura con la versión SS+Pred.

Como se indica en la figura, la zona de hollín está marcada con un colormap específico, mientras que las regiones fuera de ella aparecen en gris, indicando la imposibilidad de recuperar temperatura por medios ópticos en dichas regiones.

Los resultados evidencian que el método SS permite reconstruir adecuadamente el campo de temperatura completo, incluso en regiones no cubiertas por los métodos ópticos tradicionales. Para el caso de la llama Santoro, fuera del conjunto de entrenamiento, la reconstrucción también muestra buen comportamiento, lo cual subraya la capacidad del método para generalizar a nuevas configuraciones.

Además, en la Figura 5.1, se presentan los perfiles radiales a $z = 5.2$ cm y axiales a $r = 0.2$ cm. Para la llama Yale80, tanto SS como SS+Pred reproducen con alta precisión la distribución térmica, con pequeñas sobreestimaciones en el rango $0.4 \leq r \leq 0.7$ cm. La curva axial coincide con la referencia numérica hasta aproximadamente 6 cm, donde se detecta un leve ruido en las predicciones. En la llama Santoro, la reconstrucción del perfil radial presenta subestimación en el intervalo $0.3 \leq r \leq 0.7$ cm en el caso SS, y ligera sobreestimación con SS+Pred. No obstante, el perfil axial muestra buen acuerdo con la simulación numérica y con las mediciones experimentales disponibles hasta una altura de 8 cm.

5.2. Estimación del campo de velocidad

Una vez reconstruido el campo de temperatura mediante SS, se emplearon *Physics-Informed Neural Networks* (PINNs) para estimar el campo de velocidad bidimensional (u, v) asociado a la llama laminar axisimétrica. Este enfoque permite recuperar el campo completo de velocidades utilizando como entrada únicamente el campo de temperatura y mediciones puntuales de velocidad, evitando la necesidad de mediciones experimentales complejas.

El entrenamiento de la PINN se formuló como se describe en la Sección 4.3, integrando la información del campo de temperatura reconstruido en la función de pérdida junto con los residuos de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía.

La Figura 5.2 muestra la evolución de la función de pérdida durante el entrenamiento, así como las predicciones intermedias de los campos de velocidad en distintas épocas (epochs). El entrenamiento se prolongó hasta 15.000 iteraciones, punto en el cual la función de pérdida alcanzó un régimen estacionario sin mejoras significativas.

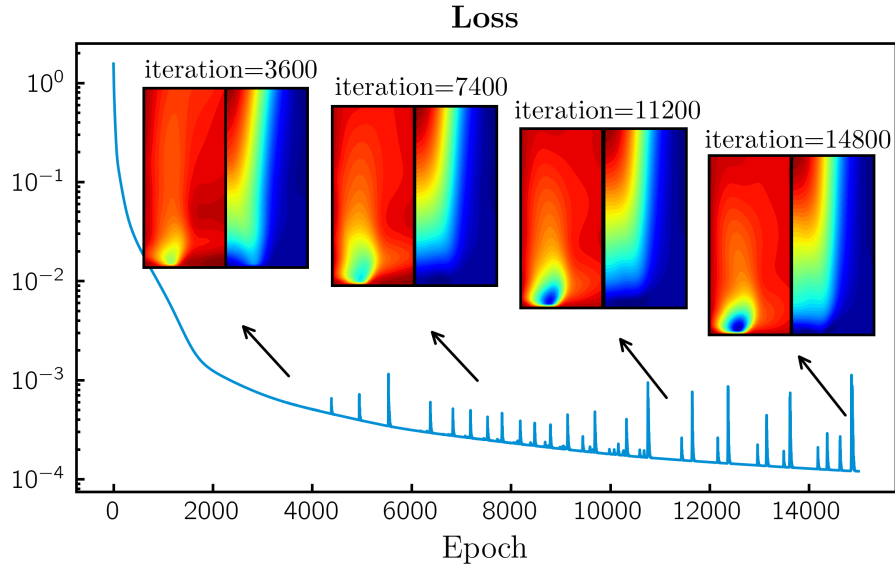


Figura 5.2: Residuo de la función de pérdida durante el entrenamiento para la predicción de los campos v and u respectivamente, para la llama de testeo **Santoro** en las iteración 3600, 7400, 11200 y 14800.

Se observa que, en la primera etapa, la predicción del campo de velocidad radial v es difuso y presentan un patrón poco definido, a diferencia de la velocidad axial u , reflejando que la red aún no ha aprendido adecuadamente la estructura del flujo. A medida que avanza el entrenamiento (7.400 y 11.200 iteraciones), las predicciones muestran gradualmente una mayor coherencia espacial, con la aparición de zonas de velocidad bien definidas cerca del eje central de la llama. Finalmente, los campos predichos presentan una distribución estable y físicamente consistente, en concordancia con la convergencia observada en la función de pérdida.

Cabe destacar que los picos puntuales en la curva de pérdida se asocian a ajustes locales en los pesos durante la optimización, típicos de la dinámica del optimizador *Adam* en presencia de términos de pérdida con magnitudes muy diferentes. La disminución general de la pérdida en varias órdenes de magnitud evidencia que la red logra satisfacer progresivamente las restricciones físicas y de datos incluidas en la formulación.

La Figura 5.3 presenta los resultados finales de reconstrucción del campo de velocidad:

- **Izquierda:** Campo de velocidad simulado de referencia (ground truth).
- **Centro:** Reconstrucción usando PINNs con el campo de temperatura simulado (T_{SIM}).
- **Derecha:** Reconstrucción usando PINNs con el campo de temperatura obtenido tras deconvolución y Sparse Sensing (T_{SS}).

Ambas reconstrucciones presentan estructuras de flujo similares a la referencia numérica. El flujo ascendente principal se reproduce de forma coherente, mientras que las componentes radiales reflejan el patrón de recirculación hacia el eje, consistente con la física del sistema. La similitud entre los resultados obtenidos con T_{SIM} y T_{SS} es especialmente alentadora, pues sugiere que la metodología es viable para aplicaciones experimentales donde el campo térmico debe reconstruirse indirectamente.

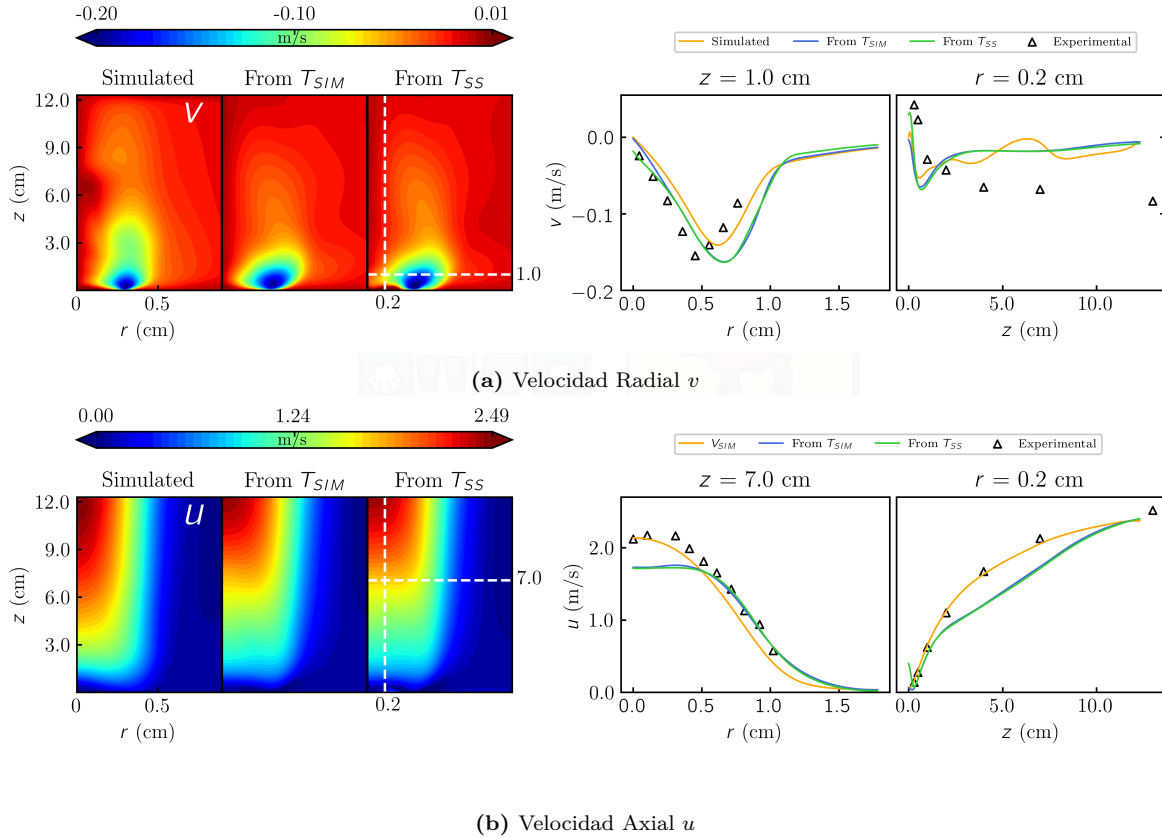


Figura 5.3: Comparación de los resultados de velocidad utilizando PINN y diferentes inputs de campos de temperatura para el entrenamiento.

La Figura 5.3 muestra también los perfiles radiales y axiales de las velocidades u y v en posiciones representativas de la llama ($z = 1$ cm para v , $z = 7$ cm para u , y $r = 0.2$ cm para perfiles axiales). Los triángulos representan datos experimentales [56].

Los perfiles radiales presentan un buen acuerdo con la simulación de referencia, con subestimaciones leves en las regiones periféricas de la llama ($r > 0.5$ cm), donde los gradientes son menos pronunciados y la información indirecta de temperatura es limitada. Por su parte, los perfiles axiales muestran una subestimación sistemática de la componente u a lo largo de la altura de la llama, atribuible a dos factores principales:

1. Pequeñas discrepancias en la reconstrucción térmica en el eje de la llama, que afectan el gradiente convectivo en la PINN.
2. La naturaleza inversa del problema, donde la velocidad axial depende de residuos de momentum calculados indirectamente a partir del campo de temperatura.

Aunque las predicciones de la PINN presentan un desempeño satisfactorio, ciertas discrepancias locales son evidentes:

- Cercanías al borde del quemador: la componente radial v muestra mayores errores, producto de gradientes fuertes y la ausencia de datos en esas regiones.

- Extremos superiores de la llama: el error aumenta por la baja densidad de información y la amplificación de pequeñas inexactitudes en el campo térmico.

Cabe destacar que las reconstrucciones con T_{SIM} y T_{SS} son prácticamente idénticas en todos los perfiles, lo que valida la robustez del enfoque ante el uso de campos de temperatura reconstruidos a partir de mediciones dispersas.

5.3. Validación y discusión

Un análisis cuantitativo del error se muestra en la Figura 5.4, donde se comparan los valores reconstruidos de temperatura con la referencia, punto por punto. Para la llama Yale80, la mayoría de los puntos se alinean con la diagonal ideal, con mayor dispersión únicamente en regiones de alta temperatura, típicamente ubicadas fuera de la zona de hollín, lo cual limita el soporte informativo de los datos ópticos. Por su parte, la llama Santoro exhibe mayor variabilidad en las temperaturas bajas, atribuidas a su exclusión del conjunto de entrenamiento, lo que demuestra un comportamiento esperado en escenarios de extrapolación.

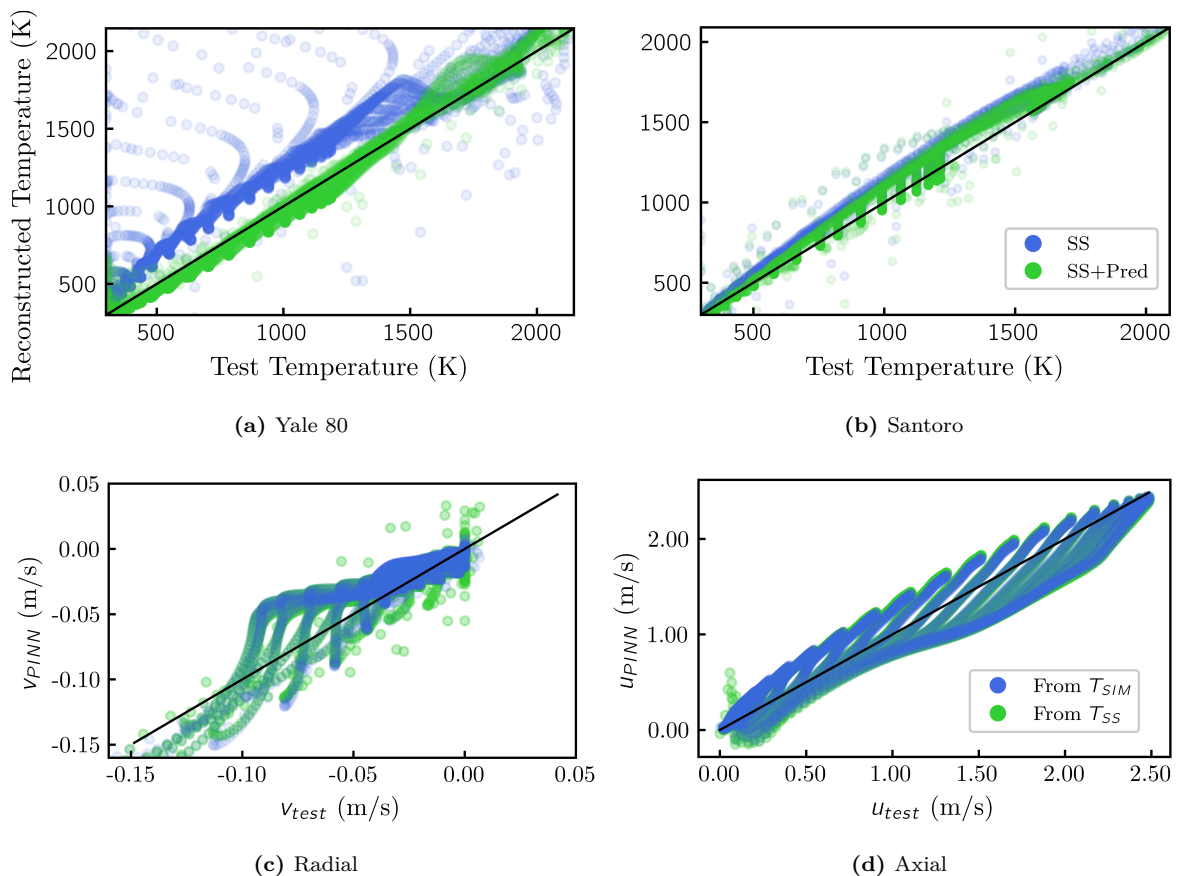


Figura 5.4: Dispersión en la reconstrucción del campo de temperatura y velocidad.

A pesar de estas diferencias, los resultados globales indican que la metodología SS, combi-

nando información dispersa, SVD y restricciones experimentales, logra una reconstrucción robusta y físicamente coherente de los campos térmicos en llamas de difusión axisimétricas. La inclusión de sensores predeterminados (SS+Pred) ofrece una alternativa práctica para mejorar el rendimiento sin comprometer la aplicabilidad experimental, tal como se validó en esta tesis.

A su vez, la Figura 5.4 muestra los gráficos de dispersión de las componentes de velocidad reconstruidas frente a los valores de referencia para la validación numérica de las PINNs. Tanto en el caso radial como axial, se comparan los resultados obtenidos usando la temperatura simulada T_{SIM} y la reconstruida mediante SS T_{SS} . Se observa que la mayoría de los puntos se alinean en torno a la diagonal negra, que representa una reconstrucción perfecta.

En el caso de la componente radial, los valores muestran una mayor dispersión cerca de las regiones de bajo flujo, donde las velocidades son pequeñas ($\leq 0.05\text{m/s}$), y el error relativo aumenta por efecto de la relación señal/ruido. La reconstrucción a partir de T_{SS} introduce ligeras desviaciones adicionales, pero mantiene la coherencia con el comportamiento general del flujo.

Para la componente axial, los puntos presentan una alineación más estrecha con la diagonal, indicando una buena correlación entre la predicción y el valor de referencia. Se evidencia una subestimación sistemática en la zona de alta velocidad, lo cual coincide con las diferencias observadas en los campos de velocidad cerca de la salida del quemador. Esto puede deberse al uso de la medición puntual de velocidad en la parte superior de la llama, la cual se estimó suponiendo una aceleración constantes debido a la flotabilidad y es parte de la función de pérdida de la data \mathcal{L}_{data} . No obstante, la similitud entre los resultados obtenidos desde ambos campos de temperatura confirma que el error de reconstrucción de la temperatura no compromete significativamente la predicción de la velocidad.

En la Figura 5.5 se presentan cinco escenarios para evaluar la reconstrucción de temperatura y su posterior uso en la predicción de campos de velocidad mediante PINNs. El primer caso corresponde al campo de temperatura desde la simulación (SIM), que se utiliza como referencia. El segundo escenario (Max SS), muestra la reconstrucción al ubicar el número máximo de sensores posibles, representando el límite superior de precisión alcanzable con la metodología SS. El tercer caso (T_{SS}) corresponde a la reconstrucción de temperatura con un número reducido de sensores y sus posiciones óptimas determinadas por SS, resultado presentado anteriormente. Finalmente, los dos últimos escenarios corresponden a los resultados de la PINN: primero al predecir el campo de temperatura utilizando como entrada la temperatura simulada (PINNs con T_{SIM}) y luego empleando como entrada la temperatura reconstruida mediante Sparse Sensing (PINNs con T_{SS}).

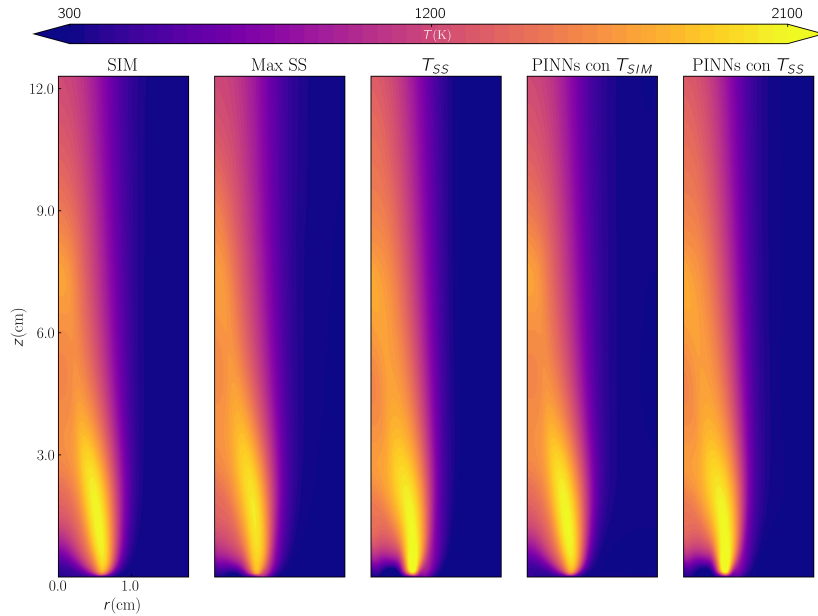


Figura 5.5: Comparación de los diferentes campos de temperatura obtenidos.

La comparación entre estos escenarios permite evaluar de forma detallada el efecto de la reducción de sensores y el impacto de la calidad del campo de temperatura de entrada sobre la predicción final de la PINN. Se observa que tanto la reconstrucción T_{SS} como la predicción de la PINN con T_{SS} reproducen adecuadamente la estructura general de la llama, capturando las regiones de máxima temperatura cerca del eje central y la atenuación hacia la periferia.

Sin embargo, existen ligeras diferencias en la zona inferior de la llama, cerca del quemador, donde los gradientes térmicos son más pronunciados. La comparación también evidencia que el uso de la temperatura simulada como entrada para la PINN entrega resultados casi idénticos al campo de referencia, mientras que la combinación PINNs + T_{SS} introduce pequeñas desviaciones en las regiones donde el T_{SS} no es preciso. Esta evaluación integral es fundamental para establecer un balance entre la reducción de sensores y la fidelidad del campo reconstruido en aplicaciones experimentales.

A pesar de estas limitaciones, estos resultados demuestran que la metodología propuesta es capaz de reconstruir campos de velocidad físicamente consistentes utilizando solo campos de temperatura reconstruidos, siendo robusta ante las ligeras imprecisiones introducidas por el proceso de *Sparse Sensing*.

6 | Discusión

6.1. Conclusiones

Este trabajo presentó un enfoque integral para la reconstrucción de campos de temperatura en llamas de difusión axisimétricas, combinando técnicas de optimización para la ubicación de sensores con modelos de aprendizaje profundo informados por leyes físicas. Esta integración metodológica permitió abordar un problema complejo con múltiples restricciones prácticas, ofreciendo una solución eficiente y físicamente coherente para contextos donde las mediciones completas son costosas, intrusivas o directamente inviables.

Se llevó a cabo un análisis riguroso de la literatura sobre metodologías de reconstrucción de campos térmicos en llamas y otros sistemas de combustión, identificando avances recientes en reducción de orden, optimización de sensores y modelos que combinen experimentos y datos. Esta revisión permitió justificar la relevancia del enfoque adoptado y evidenció que, aunque existen métodos experimentalmente estos requieren que ejecuten múltiples técnicas diferentes para obtener un campo completo. Por otro lado, las simulaciones numéricas incurrir en altos costos computacionales para la resolución de las ecuación gobernantes mientras. Además, se posicionó este trabajo en una intersección disciplinaria relevante, integrando herramientas de modelado físico, simulación computacional y machine learning.

Se implementaron algoritmos de ubicación óptima de sensores capaces de incorporar restricciones realistas, tales como zonas restringidas, sensores predeterminados, distancias mínimas y regiones críticas. Los resultados demostraron que incluso con restricciones severas, es posible recuperar el campo térmico con alta precisión, manteniendo errores relativos globales por debajo del 5%. Esto confirma la robustez del enfoque y su aplicabilidad en escenarios experimentales reales, donde la ubicación libre de sensores no siempre es factible.

Uno de los objetivos de esta investigación, correspondiente a la validación experimental de la metodología, no pudo completarse con mediciones reales dentro del alcance de este trabajo. Sin embargo, se diseñó un entorno de prueba basado en simulaciones de llamas laminares que emulan condiciones experimentales, incorporando limitaciones como discretización espacial reducida y acceso parcial al dominio. Este enfoque permitió realizar una validación representativa, demostrando que la metodología de reconstrucción mediante *Sparse Sensing* y el posterior entrenamiento de las PINNs puede ofrecer resultados precisos incluso en escenarios realistas con datos limitados.

En una segunda etapa, se aplicaron redes neuronales informadas por la física para recuperar el campo de velocidad a partir del campo de temperatura reconstruido. Se resolvieron las ecuaciones de Navier-Stokes estacionarias sin presión en dos dimensiones, utilizando como entrada exclusivamente datos parciales. La estructura de la red y la formulación de pérdida permitieron capturar los gradientes de velocidad y respetar las condiciones físicas del flujo, incluso con información limitada.

Se observó que la calidad de la reconstrucción depende críticamente de la correcta ponderación de los términos en la función de pérdida, lo que motivó a testear múltiples configuraciones de hiperparámetros. De esto se concluyó que sin la incorporación de la data de temperatura reconstruida u otra información externa adicional, se dificulta la predicción que la red es capaz de hacer.

Los experimentos numéricos mostraron que este enfoque es robusto y escalable a distintas geometrías, aunque existe un costo computacional asociado. De igual forma, este costo es significativamente menor al de una simulación DNS o al aparato experimental requerido para implementar mediciones de PIV.

Se puede decir que los resultados obtenidos permiten concluir que la combinación de ubicación óptima de sensores y redes neuronales informadas por la física constituye una estrategia efectiva y versátil para la reconstrucción de campos físicos en sistemas con acceso limitado a datos. Esta aproximación no solo logra alta fidelidad en la recuperación de variables clave como la temperatura y la velocidad, sino que también ofrece una solución robusta, escalable y compatible con restricciones experimentales reales. El enfoque propuesto aporta así una herramienta poderosa para la caracterización de sistemas térmicos complejos en el contexto de la investigación en combustión.

6.1.1. Trabajo Futuro

Los resultados obtenidos en este estudio sugieren que la combinación de estrategias de *Sparse Sensing* (SS) con redes neuronales informadas por la física (PINNs) constituye un enfoque robusto y flexible para la reconstrucción de campos físicos en sistemas con acceso limitado a datos experimentales. Sin embargo, para consolidar esta metodología como una herramienta aplicable en entornos reales, es fundamental avanzar hacia su validación experimental completa.

Como línea inmediata de trabajo futuro se propone aplicar el enfoque desarrollado sobre llamas laminares medidas experimentalmente, utilizando técnicas ópticas no intrusivas y sensores puntuales (termocuplas), de forma que el campo de temperatura reconstruido pueda ser comparado con mediciones directas. Esta validación permitirá cuantificar el error en condiciones reales, considerando la presencia de ruido experimental, discretización espacial limitada, y efectos ópticos no modelados.

Adicionalmente, si se dispone de mediciones puntuales de velocidad mediante anemómetros, estas podrían incorporarse como datos de soporte en el entrenamiento de las PINNs. Incluso un conjunto reducido de puntos de velocidad serviría para reforzar el aprendizaje supervisado y reducir la ambigüedad de los campos reconstruidos, mejorando la precisión de la estimación de la velocidad sin requerir técnicas experimentales intrusivas o de alto costo como PIV.

Además, se plantea evaluar la sensibilidad del método ante errores sistemáticos en las mediciones, asociados a la sensibilidad de las termocuplas o anemómetros, perturbaciones en la geometría de la llama e incertezas asociadas a la ubicación de los sensores. En un experimento real, la instalación de un sensor raramente coincide con la posición óptima calculada, por lo que resulta relevante cuantificar cómo el error de reconstrucción varía cuando la medición se realiza próxima, pero no exactamente en la ubicación óptima. Este análisis permitirá identificar la tolerancia espacial de la estrategia de *Sparse Sensing* y definir márgenes aceptables para la implementación experimental.

Por otro lado, la incorporación de técnicas de regularización física y ponderación adaptativa en la función de pérdida de la PINN podría aumentar la robustez del entrenamiento frente a datos ruidosos o desplazamientos de los sensores. Ajustar dinámicamente los pesos de los términos asociados a los datos, las ecuaciones físicas y las condiciones de frontera permitiría equilibrar la influencia de cada componente durante el entrenamiento. Este enfoque busca evitar que errores locales o ruido experimental dominen el aprendizaje, garantizando que la solución final mantenga coherencia física y estabilidad numérica.

En esta línea, una dirección relevante consiste en perfeccionar el acoplamiento entre el proceso de selección óptima de sensores y el modelo PINN. El presente trabajo aborda esta integración de manera secuencial, pero trabajos futuros podrían explorar esquemas iterativos donde la red neuronal oriente dinámicamente el diseño de sensores, estableciendo un ciclo de optimización entre datos y modelo.

En conjunto, se espera que esta metodología combinada pueda establecerse como una alternativa práctica para entornos donde las limitaciones experimentales impiden la caracterización completa de los campos físicos, ofreciendo una vía eficiente para inferir variables internas a partir de información parcial. Aunque este estudio se ha centrado en llamas laminares estacionarias, el enfoque es extensible a otros sistemas gobernados por ecuaciones diferenciales y sujetos a restricciones de acceso experimental, lo que le confiere un amplio potencial de aplicación en ciencia e ingeniería.

Bibliografía

- [1] 3rd Pope, C. Arden, Richard T. Burnett, Michael J. Thun, Eugenia E. Calle, Daniel Krewski, Kazuhiko Ito, and George D. Thurston. Lung cancer, cardiopulmonary mortality, and long-term exposure to fine particulate air pollution. *JAMA*, 287(9):1132–1141, 2002.
- [2] D. W. Dockery, 3rd Pope, C. A., X. Xu, J. D. Spengler, J. H. Ware, M. E. Fay, Jr Ferris, B. G., and F. E. Speizer. An association between air pollution and mortality in six u.s. cities. *The New England journal of medicine*, 329(24):1753–1759, 1993.
- [3] Kathrin Selzle Manabu Shiraiwa and Ulrich Pöschl. Hazardous components and health effects of atmospheric aerosol particles: reactive oxygen species, soot, polycyclic aromatic compounds and allergenic proteins. *Free Radical Research*, 46(8):927–939, 2012. PMID: 22300277.
- [4] F.N. Egolfopoulos, N. Hansen, Y. Ju, K. Kohse-Höinghaus, C.K. Law, and F. Qi. Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 43:36–67, 2014.
- [5] R. Hilbert, F. Tap, H. El-Rabii, and D. Thévenin. Impact of detailed chemistry and transport models on turbulent combustion simulations. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 30(1):61–117, 2004.
- [6] Emil O. Åkesson and Kyle J. Daun. Parameter selection methods for axisymmetric flame tomography through tikhonov regularization. *Appl. Optics*, 47(3):407–416, Jan 2008.
- [7] Chul Kim, Fangqian Xu, P. Sunderland, Abdelrahman El-Leathy, and G. Faeth. Soot formation and oxidation in laminar flames. *Collection of Technical Papers - 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 24, 01 2006.
- [8] Nathan J. Kempema, Richard R. Dobbins, Marshall B. Long, and Mitchell D. Smooke. Constrained-temperature solutions of coflow laminar diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 38(2):1905–1912, 2021.
- [9] Yngve Ögren, Alexey Sepman, Zhechao Qu, Florian M. Schmidt, and Henrik Wiinikka. Comparison of measurement techniques for temperature and soot concentration in premixed, small-scale burner flames. *Energy & Fuels*, 31(10):11328–11336, 2017.
- [10] Murray J. Thomson. Modeling soot formation in flames and reactors: Recent progress and current challenges. *Proc. Combust. Inst.*, 39(1):805–823, 2023.
- [11] KrithiKa Manohar, Bingni W. Brunton, J. Nathan Kutz, and Steven L. Brunton. Data-drive sparse sensor placement for reconstruction: Demonstrating the benefits of exploiting known patterns. *IEEE Control Syst. Mag.*, 38(3):63–86, June 2018.
- [12] Zlatko Drmac and Serkan Gugercin. A new selection operator for the discrete empirical interpolation method—improved a priori error bound and extensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 38(2):A631–A648, 2016.
- [13] Gal Berkooz, Philip Holmes, and John L Lumley. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 25(1):539–575, 1993.
- [14] Emily Clark, Travis Askham, Steven L Brunton, and J Nathan Kutz. Greedy sensor placement with cost constraints. *IEEE Sens. J.*, 19(7):2642–2656, 2018.
- [15] Alberto Procacci, Ruggero Amaduzzi, Axel Coussement, and Alessandro Parente. Adaptive digital twins of combustion systems using sparse sensing strategies. *Proceedings of the Combustion Institute*, 39(4):4257–4266, 2023.

- [16] Niharika Karnik, Mohammad G. Abdo, Carlos E. Estrada-Perez, Jun Soo Yoo, Joshua J. Cogliati, Richard S. Skifton, Pattrick Calderoni, Steven L. Brunton, and Krithika Manohar. Constrained optimization of sensor placement for nuclear digital twins. *IEEE Sens. J.*, 24(9):15501–15516, 2024.
- [17] Gianmarco Aversano, Marco Ferrarotti, and Alessandro Parente. Digital twin of a combustion furnace operating in flameless conditions: reduced-order model development from cfd simulations. *Proc. Combust. Inst.*, 38(4):5373–5381, 2021.
- [18] Laura Donato, M. Mustafa Kamal, Alberto Procacci, Marianna Cafiero, Saurabh Sharma, Chiara Galletti, Axel Coussement, and Alessandro Parente. Integrating data assimilation and sparse sensing for updating a digital twin of a semi-industrial furnace. *Proc. Combust. Inst.*, 40(1):105284, 2024.
- [19] Krithika Manohar, Thomas Hogan, Jim Buttrick, Ashis G. Banerjee, J. Nathan Kutz, and Steven L. Brunton. Predicting shim gaps in aircraft assembly with machine learning and sparse sensing. *Journal of Manufacturing Systems*, 48:87–95, 2018.
- [20] Steven L. Brunton, Bernd R. Noack, and Petros Koumoutsakos. Machine learning for fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 52:477–508, 2020.
- [21] George Em Karniadakis, Ioannis G. Kevrekidis, Lu Lu, Paris Perdikaris, Sifan Wang, and Liu Yang. Physics-informed machine learning. *Nat. Rev. Phys.*, 2021.
- [22] Shengze Cai, Zhicheng Wang, Frederik Fuest, Young Jin Jeon, Callum Gray, and George Em Karniadakis. Flow over an espresso cup: inferring 3-d velocity and pressure fields from tomographic background oriented schlieren via physics-informed neural networks. *J. Fluid Mech.*, 915:A102, 2021.
- [23] Shiyu Liu, Haiou Wang, Jacqueline Chen, Kun Luo, and Jianren Fan. High-resolution reconstruction of turbulent flames from sparse data with physics-informed neural networks. *Combust. Flame*, 260:113275, 02 2024.
- [24] Shiyu Liu, Haiou Wang, Zhiwei Sun, Kae Ken Foo, Graham J. Nathan, Xue Dong, Michael J. Evans, Bassam B. Dally, Kun Luo, and Jianren Fan. Reconstructing soot fields in acoustically forced laminar sooting flames using physics-informed machine learning models. *Proc. Combust. Inst.*, 40(1):105314, 2024.
- [25] Stephen R. Turns. *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill Education, 3rd edition, 2012.
- [26] Irvin Glassman, Richard A. Yetter, and Nick G. Glumac. *Combustion*. Academic Press, 5th edition, 2014.
- [27] Michael Frenklach. Reaction mechanism of soot formation in flames. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4:2028–2037, 2002.
- [28] Mitchell D. Smooke, Michael B. Colket III, and et al. Computational and experimental study of soot formation in a coflow laminar diffusion flame. *Combustion and Flame*, 137:541–552, 2004.
- [29] Román Pérez Velasco and Dorota Jarosińska. Update of the who global air quality guidelines: Systematic reviews – an introduction. *Environment International*, 170:107556, 2022.
- [30] California Air Resources Board. Inhalable particulate matter and health (pm10 and pm2.5), 2022. Accessed: 2025-07-14.
- [31] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2000.
- [32] World Health Organization. Who global air quality guidelines: Particulate matter (pm2.5 and pm10), ozone, nitrogen dioxide, sulfur dioxide and carbon monoxide, 2021. Accessed: 2025-07-14.

- [33] Tami C. Bond, Sarah J. Doherty, David W. Fahey, Piers M. Forster, Terje Berntsen, Benjamin J. DeAngelo, Mark G. Flanner, Steven Ghan, Bernd Kärcher, Dorothy Koch, et al. Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment. *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, 118(11):5380–5552, 2013.
- [34] Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC). Climate change 2021: The physical science basis. contribution of working group to the sixth assessment report, 2021. Accessed: 2025-07-14.
- [35] Ministerio de Energía de Chile. Balance nacional de energía 2023. <https://energia.gob.cl/noticias/nacional-balance-nacional-de-energia-2023-confirma-caida-de-la-participacion-del-carbon-en-la-generacion-de-electricidad>, 2025. Accessed: 2025-07-14.
- [36] David Segersson, Kristina Eneroth, Lars Gidhagen, Christer Johansson, Gunnar Omstedt, Anders Engström Nylén, and Bertil Forsberg. Health impact of pm10, pm2.5 and black carbon exposure due to different source sectors in stockholm, gothenburg and umea, sweden. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 14(7), 2017.
- [37] Indramani Dhada, Sadiq Waziri, Vishal, Sudhakar Singha, Bijaya Padhi, and Shailesh Samal. Expected health risk out of black carbon and particulate matter in the indoor environment of an industrial cluster of chandigarh in india. *Scientific Reports*, 15, 2025.
- [38] Andrea D’Anna. Combustion-formed nanoparticles. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32:593–613, 12 2009.
- [39] Jianfei Xi, Guoqing Yang, Jie Cai, and Zhongzhu Gu. A review of recent research results on soot: The formation of a kind of carbon-based material in flames. *Frontiers in Materials*, 8:695485, 05 2021.
- [40] R. Niranjana and A. K. Thakur. The toxicological mechanisms of environmental soot (black carbon) and carbon black: Focus on oxidative stress and inflammatory pathways. *Frontiers in immunology*, 8(763), 2017.
- [41] Manabu Shiraiwa, Kathrin Selzle, and Ulrich Pöschl. Hazardous components and health effects of atmospheric aerosol particles: reactive oxygen species, soot, polycyclic aromatic compounds and allergenic proteins. *Free Radical Research*, 46(8):927–939, 2012. PMID: 22300277.
- [42] Ulrich Pöschl. *Air Pollution, Oxidative Stress, and Public Health in the Anthropocene*. Springer International Publishing, 2020.
- [43] D.L. Donoho. Compressed sensing. *IEEE Trans. Inf. Theory*, 52(4):1289–1306, 2006.
- [44] Edward H. Glaesgen and Doane Stargel. The digital twin paradigm for future nasa and u.s. air force vehicles. 2012.
- [45] Karen E. Willcox and Jaime Peraire. Balanced model reduction via the proper orthogonal decomposition. *AIAA Journal*, 40:2323–2330, 2002.
- [46] Wieslaw M. Ostachowicz, Rohan N Soman, and Paweł H. Malinowski. Optimization of sensor placement for structural health monitoring: a review. *Structural Health Monitoring*, 18:963 – 988, 2019.
- [47] Mustafa Gul and F. Necati Catbas. Structural health monitoring and damage assessment using a novel time series analysis methodology with sensor clustering. *Journal of Sound and Vibration*, 330(6):1196–1210, 2011.
- [48] Brian M. de Silva, Krithika Manohar, Emily Clark, Bingni W. Brunton, Steven L. Brunton, and J. Nathan Kutz. Pysensors: A python package for sparse sensor placement, 2021.
- [49] Martin Geibel and Galih Bangga. Data reduction and reconstruction of wind turbine wake employing data driven approaches. *Energies*, 15(10), 2022.

- [50] N. Demo, M. Tezzele, and G. Rozza. A deepnet multi-fidelity approach for residual learning in reduced order modeling. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences volume*, 10(12), 2023.
- [51] Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, and Aaron Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016.
- [52] Giuseppe Carleo, Ignacio Cirac, Kyle Cranmer, Laurent Daudet, Maria Schuld, Naftali Tishby, Leslie Vogt-Maranto, and Lenka Zdeborová. Machine learning and the physical sciences. *Reviews of Modern Physics*, 91(4), December 2019.
- [53] M. Raissi, P. Perdikaris, and G.E. Karniadakis. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, 378:686–707, 2019.
- [54] Jurgen Warnatz, Ulrich Maas, and Robert W. Dibble. *Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*. Springer, 4th edition, 2006.
- [55] Irvin Glassman and {Richard A.} Yetter. *Combustion*. Elsevier Inc., United States, 2008.
- [56] J. J. Horvath R. J. Santoro, T. T. Yeh and H. G. Semerjian. The transport and growth of soot particles in laminar diffusion flames. *Combust. Sci. Technol.*, 53(2-3):89–115, 1987.
- [57] Jérôme Yon, Juan José Cruz, Felipe Escudero, José Morán, Fengshan Liu, and Andrés Fuentes. Revealing soot maturity based on multi-wavelength absorption/emission measurements in laminar axisymmetric coflow ethylene diffusion flames. *Combustion and Flame*, 227:147–161, 2021.
- [58] D. R. Snelling, K. A. Thomson, G. J. Smallwood, O. L. Guider, E. J. Weckman, and R. A. Fraser. Spectrally resolved measurement of flame radiation to determine soot temperature and concentration. *AIAA Journal*, 40(9):1789–1795, 2002.
- [59] M.F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press. Academic Press, 2013.
- [60] Kyle J. Daun, Kevin A. Thomson, Fengshan Liu, and Greg J. Smallwood. Deconvolution of axisymmetric flame properties using tikhonov regularization. *Applied optics*, pages 4638–4646, 2006.
- [61] V. Vilimpoc, L. P. Goss, and B. Sarka. Spatial temperature-profile measurements by the thin-filament-pyrometry technique. *Opt. Lett.*, 13(2):93–95, Feb 1988.
- [62] S. W. Allison and G. T. Gillies. Remote thermometry with thermographic phosphors: Instrumentation and applications. *Review of Scientific Instruments*, 68(7):2615–2650, 07 1997.
- [63] Elias Kristensson, Andreas Ehn, Joakim Bood, and Marcus Aldén. Advancements in rayleigh scattering thermometry by means of structured illumination. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(3):3689–3696, 2015.
- [64] Steven L. Brunton and J. Nathan Kutz. *Data-Driven Science and Engineering: Machine Learning, Dynamical Systems, and Control*. Cambridge University Press, second edition, 2022.
- [65] Herve Abdi. *Singular Value Decomposition (SVD) and Generalized Singular Value Decomposition (GSVD)*. 2006.
- [66] Dan Kalman. A singularly valuable decomposition: The svd of a matrix. *The College Mathematics Journal*, 27(1):2–23, 1996.
- [67] Krithika Manohar, Bingni W. Brunton, J. Nathan Kutz, and Steven L. Brunton. Data-driven sparse sensor placement. *ArXiv*, abs/1701.07569, 2017.
- [68] Pranay Seshadri, Akil Narayan, and Sankaran Mahadevan. Effectively subsampled quadratures for least squares polynomial approximations, 2017.

- [69] E. Anderson, Z. Bai, and J. Dongarra. Generalized qr factorization and its applications. *Linear Algebra and its Applications*, 162-164:243–271, 1992.
- [70] L. P. Heck, J. A. Olkin, and K. Naghshineh. Transducer placement for broadband active vibration control using a novel multidimensional qr factorization. *Journal of Vibration and Acoustics*, 120(3):663–670, 07 1998.
- [71] P. Businger and G.H. Golub. Linear least squares solutions by householder transformations. *Numerische Mathematik*, 7:269–276, 1965.
- [72] Diederik P. Kingma and Jimmy Ba. Adam: A method for stochastic optimization. *CoRR*, abs/1412.6980, 2014.
- [73] George V. Cybenko. Approximation by superpositions of a sigmoidal function. *Mathematics of Control, Signals and Systems*, 2:303–314, 1989.
- [74] Kurt Hornik, Maxwell Stinchcombe, and Halbert White. Multilayer feedforward networks are universal approximators. *Neural Networks*, 2(5):359–366, 1989.
- [75] Salvatore Cuomo, Vincenzo Schiano di Cola, Fabio Giampaolo, Gianluigi Rozza, Maziar Raissi, and Francesco Piccialli. Scientific machine learning through physics-informed neural networks: Where we are and what’s next. *Journal of Scientific Computing*, 92(88), 2022.
- [76] Atilim Gunes Baydin, Barak A. Pearlmutter, Alexey Andreyevich Radul, and Jeffrey Mark Siskind. Automatic differentiation in machine learning: a survey. *Journal of Machine Learning Research*, 18(153):1–43, 2018.
- [77] Chengping Rao, Pu Ren, Qi Wang, Oral Buyukozturk, Hao Sun, and Yang Liu. Encoding physics to learn reaction-diffusion processes. *Nat. Mac. Intell.*, 5(7):765–779, July 2023.
- [78] Xuhui Meng, Zhongqiang Li, and George Em Karniadakis. Ppinn: Parareal physics-informed neural network for time-dependent pdes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 370, 2020.
- [79] Yin hao Zhu, Nicholas Zabaras, Phaedon-Stelios Koutsourelakis, and Paris Perdikaris. Physics-constrained deep learning for high-dimensional surrogate modeling and uncertainty quantification without labeled data. *Journal of Computational Physics*, 394:56–81, 2019.
- [80] Sifan Wang, Hanwen Wang, and Paris Perdikaris. And pinns for all: Physics-informed neural networks with adaptive activation functions. *Journal of Computational Physics*, 469:111543, 2022.
- [81] Ameya D. Jagtap, Kenji Kawaguchi, and George Em Karniadakis. Extended physics-informed neural networks (xpinn): A generalization of pinns. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 372, 2020.
- [82] Lu Lu, Xuhui Meng, Zhiping Mao, and George Em Karniadakis. Deepxde: A deep learning library for solving differential equations. *SIAM Review*, 63(1):208–228, January 2021.
- [83] Nick A. Eaves, Qingan Zhang, Fengshan Liu, Hongsheng Guo, Seth B. Dworkin, and Murray J. Thomson. Coflame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames. *Comput. Phys. Commun.*, 207:464–477, 2016.
- [84] M.D. Smooke, M.B. Long, B.C. Connelly, M.B. Colket, and R.J. Hall. Soot formation in laminar diffusion flames. *Combust. Flame*, 143(4):613–628, 2005. Special Issue to Honor Professor Robert W. Bilger on the Occasion of His Seventieth Birthday.
- [85] Fengshan Liu, Hongsheng Guo, Gregory J Smallwood, and Ömer L Gülder. Effects of gas and soot radiation on soot formation in a coflow laminar ethylene diffusion flame. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 73(2):409–421, 2002. Third International Symposium on Radiative Transfer.

- [86] Mijail Littin, Felipe Escudero, Juan J. Cruz, Ignacio Verdugo, Dongping Chen, Andrés Fuentes, and Rodrigo Demarco. Understanding soot production in a jet a-1 laminar coflow non-premixed flame. *Proc. Combust. Inst.*, 40(1):105534, 2024.
- [87] A. D’Anna, A. Rolando, C. Allouis, P. Minutolo, and A. D’Alessio. Nano-organic carbon and soot particle measurements in a laminar ethylene diffusion flame. *Proc. Combust. Inst.*, 30(1):1449–1456, January 2005.
- [88] Martin Weiss, Mijail Littin, Felipe Escudero, Fengshan Liu, and Rodrigo Demarco. Evaluation of Extended Reaction Mechanisms in Soot Modeling in a Vaporized Gasoline Laminar Coflow Diffusion Flame. 2024. Available at SSRN: <https://ssrn.com/abstract=4792792>.
- [89] A. Rodríguez, F. Escudero, J.J. Cruz, G. Carvajal, and A. Fuentes. Retrieving soot volume fraction fields for laminar axisymmetric diffusion flames using convolutional neural networks. *Fuel*, 285:119011, 2021.
- [90] Jorge Portilla, Juan J. Cruz, Felipe Escudero, Alonso Rodríguez, Rodrigo Demarco, Andrés Fuentes, and Gonzalo Carvajal. Towards low-cost soot pyrometry in laminar flames using broadband emission measurements and artificial neural networks. *Journal of the Energy Institute*, 109:101258, 2023.
- [91] Md Manjurul Ahsan, M. A. Parvez Mahmud, Pritom Kumar Saha, Kishor Datta Gupta, and Zahed Siddique. Effect of data scaling methods on machine learning algorithms and model performance. *Technologies*, 9(3), 2021.
- [92] Emily Clark, Travis Askham, Steven L. Brunton, and J. Nathan Kutz. Greedy sensor placement with cost constraints. *IEEE Sens. J.*, 19(7):2642–2656, April 2019.
- [93] S. McAllister, J.Y. Chen, and A.C. Fernandez-Pello. *Fundamentals of Combustion Processes*. Mechanical Engineering Series. Springer New York, 2011.
- [94] Christopher R. Shaddix. A new method to compute the proper radiant heat transfer correction of bare-wire thermocouple measurements. Sandia National Laboratories (SNL-CA), Livermore, CA (United States), 04 2017.
- [95] R. L. Farrow, P. L. Mattern, and L. A. Rahn. Comparison between cars and corrected thermocouple temperature measurements in a diffusion flame. *Applied Optics*, 21(17):3119–3125, 1982.
- [96] A. Sato, K. Hashiba, M. Hasatani, S. Sugiyama, and J. Kimura. A correctional calculation method for thermocouple measurements of temperatures in flames. *Combustion and Flame*, 24:35–41, 1975.
- [97] C R Shaddix. Correcting thermocouple measurements for radiation loss: A critical review. Sandia National Labs., Livermore, CA (US), American Society of Mechanical Engineers, New York, NY (US), 07 1999.
- [98] Ronald J. Adrian. Particle-imaging techniques for experimental fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 23(1):261–304, 1991.