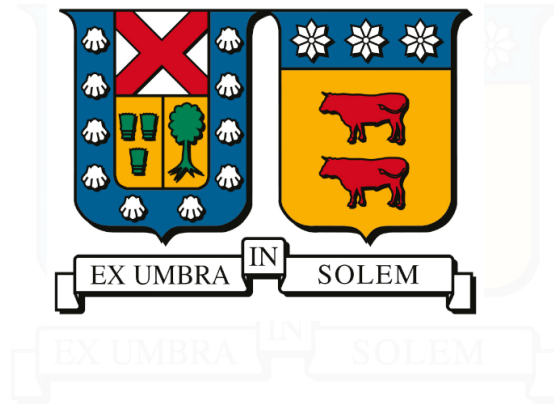


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE ELECTRÓNICA
VALPARAISO - CHILE



**DESARROLLO DE INSTRUMENTACIÓN DE BAJO COSTO PARA
PIROMETRÍA DE HOLLÍN USANDO CÁMARAS A COLOR
Y REDES NEURONALES ARTIFICIALES**

JORGE ALEXIS PORTILLA GÓMEZ

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
DOCTOR EN INGENIERÍA ELECTRÓNICA

DIRECTOR DE TESIS : GONZALO CARVAJAL B.

Abril 2024



A mi familia ...

Resumen

La temperatura de las partículas de hollín en el interior de una llama es una propiedad importante para comprender los procesos de formación de material particulado en sistemas de combustión, el cual a su vez se relaciona a la liberación de calor y eficiencia de estos sistemas. Las partículas de hollín emiten radiación en un amplio rango espectral, la cual puede ser medida mediante instrumentos ópticos y relacionada con la temperatura del hollín mediante la resolución de un problema inverso.

Entre las técnicas disponibles, las basadas en señales de emisión de banda ancha (BEMI) son atractivas debido a su implementación con cámaras a color, lo que reduce la complejidad y el costo del setup experimental en comparación con métodos más complejos. El principio de BEMI consiste en capturar la radiación emitida en múltiples longitudes de onda y asociarla con la temperatura mediante ecuaciones derivadas de la radiación del cuerpo negro y la atenuación de la luz en el camino óptico del sensor. La estimación de temperatura implica la deconvolución de las emisiones de hollín integradas a lo largo del camino óptico entre la llama y el sensor. Tradicionalmente, este problema se ha abordado mediante métodos numéricos iterativos sensibles al ruido de medición, lo que dificulta obtener estimaciones precisas y repetibles, incluso con configuraciones de referencia en llamas canónicas.

Estudios recientes emplean redes neuronales artificiales (ANNs) para estimar la temperatura del hollín a partir de señales ópticas, y se han demostrado los beneficios del uso de ANNs para caracterizar las propiedades del hollín en términos de tolerancia al ruido y costo computacional para resolver el problema inverso. La mayoría de los estudios realizados hasta ahora han empleado datos sintéticos de llamas canónicas o capturados en condiciones experimentales. En el contexto experimental, los datos capturados para una misma llama pueden variar dependiendo del setup óptico utilizado.

La metodología empleada para desarrollar una técnica de bajo costo basada en ANNs para pirometría de hollín a partir de señales BEMI integra etapas como la generación de datos con base física, la calibración de instrumentos y las campañas experimentales, con el fin de entrenar y validar las ANNs. En primer lugar, se utiliza un entorno numérico para simular mediciones experimentales BEMI. Se emplea el algoritmo numérico CoFlame, ampliamente utilizado para modelar el hollín en llamas laminares de difusión de coflow, con el fin de generar soluciones de referencia. Estas soluciones se utilizan para crear conjuntos de campos de temperatura ampliados, a partir de los cuales se obtienen las proyecciones en el plano de la cámara. Seguidamente, se validan e implementan las arquitecturas de ANNs propuestas para reemplazar el proceso de deconvolución. Dado que el rendimiento de una ANN depende de conjuntos de datos de entrenamiento representativos, se establece un proceso sistemático que permite la iteración sobre las distintas etapas para generar datos que reflejen los fenómenos observados en diversas condiciones operativas y que puedan extrapolarse a campañas experimentales.

Las evaluaciones indican que el uso de ANNs para pirometría de hollín tiene ventajas sobre la deconvolución clásica en términos de sensibilidad al ruido experimental. Durante el entrenamiento, las ANNs capturan el efecto de la auto-absorción, corrigiendo así la subestimación de temperatura característica de la técnica BEMI, sin necesidad de mediciones de extinción de luz. Este estudio demuestra la viabilidad de entrenar algoritmos de ANNs con datos generados mediante simulaciones numéricas para estimar de manera consistente la temperatura del hollín en llamas experimentales. Además, es posible estimar valores de temperatura en diversas condiciones de llama, incluso para aquellas no incluidas explícitamente en el conjunto de datos de entrenamiento. La metodología evaluada utiliza distintos quemadores de referencia y disposiciones ópticas de arreglos BEMI, lo que evidencia la capacidad de la metodología para operar con elementos ópticos de distinto nivel de sofisticación.

El presente estudio avanza el estado del arte mediante la evaluación las capacidades de generalización de las ANNs y la validación experimental de los técnicas basadas en ANNs. Se establece una base teórica y práctica que allana el camino hacia el desarrollo de instrumentación precisa y de bajo costo para pirometría de hollín, impulsando así la reproducibilidad y el escrutinio de los resultados reportados por la comunidad científica.

Agradecimientos

En primer lugar, deseo expresar mi agradecimiento hacia mi supervisor, el Profesor Gonzalo Carvajal, y mi co-supervisor, el Profesor Andrés Fuentes, por su invaluable orientación, consejo y apoyo durante el desarrollo de esta tesis. También me gustaría reconocer las contribuciones de Alonso Rodríguez, quien estableció las bases de esta línea de investigación y con quien colaboré durante gran parte de mis estudios.

Adicionalmente, deseo expresar mi agradecimiento por las contribuciones de los miembros del Grupo de Conversión de Energía y Combustión de la Universidad Técnica Federico Santa María en los resultados presentados en esta tesis. Específicamente, a Juan José Cruz, quien me guió durante las campañas experimentales e instruyó sobre las técnicas de pirometría de hollín y los procesos asociados a la recolección y procesamiento de señales experimentales; y a Felipe Escudero, quien realizó las simulaciones numéricas y proporcionó el entorno utilizado para generar el conjunto de datos sintéticos necesarios para entrenar los modelos de aprendizaje automático.

Esta tesis fue parcialmente financiada por la Dirección de Postgrado y Programas de la Universidad Técnica Federico Santa María, a través del Programa de Iniciación a la Investigación Científica (PIIC) y el proyecto interno USM 2023 PI_M_23_05; y la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo de Chile (ANID) a través del programa de investigación Fondecyt/Regular 1221372 y ANID SCIA Proyecto Anillo de Investigación en Ciencia y Tecnología – ACT210052.

Índice general

Resumen	i
Agradecimientos	ii
Índice de figuras	v
Índice de tablas	viii
Nomenclatura	ix
1. Introducción	1
1.1. Contexto y motivación	1
1.2. Definición del problema de investigación	3
1.3. Objetivos	5
1.4. Metodología	6
1.5. Alcances y contribuciones	7
1.6. Organización del informe	8
2. Antecedentes	10
2.1. Monitoreo de propiedades del hollín	10
2.2. <i>Modulated Absorption/Emission</i> - MAE	11
2.2.1. Estimación de fracción en volumen de hollín	12
2.2.2. Estimación de temperatura del hollín	13
2.3. Pírometría de hollín basada en señales de emisión - EMI	14
2.3.1. Emisión de banda ancha - BEMI	15
2.4. Deconvolución <i>onion-peeling</i>	17
2.5. Enfoques basados en ANN para el diagnóstico de combustión	19
3. Generación de conjuntos de datos y aprendizaje automático para pírometría de hollín	22
3.1. Emulación de mediciones de hollín y generación de conjuntos de datos	22
3.1.1. Solución de referencia para la temperatura del hollín en una llama CLAD	23
3.1.2. Aumento del conjunto de llamas simuladas	24
3.1.3. Proyección de llamas simuladas a mediciones BEMI	25
3.2. Conjunto de datos para diseño de ANNs	26
3.3. Técnicas de aprendizaje automático	28
3.3.1. Redes neuronales <i>fully-connected feed forward</i>	28
3.3.2. Redes Neuronales Convolucionales	30
3.4. Pírometría de hollín basada en señales BEMI y ANNs	32
3.4.1. Pírometría de hollín usando MLP	32
3.4.2. Pírometría de hollín usando U-Net	33
3.4.3. Pírometría de hollín usando Attention U-Net	34

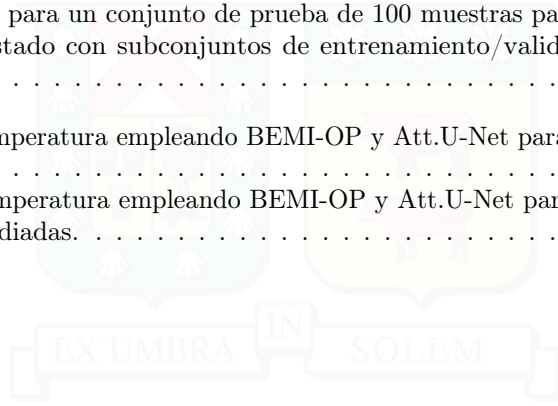
3.5. Entrenamiento de las ANNs	35
4. Validación numérica usando datos simulados	37
4.1. Validación de la metodología mediante una sola llama canónica	37
4.2. Análisis de la robustez y sensibilidad de los modelos de ANN respecto al conjunto de datos	40
4.3. Evaluación de la generalización de los modelos basados en CNN	43
5. Validación con datos de campañas experimentales	50
5.1. Montaje experimental	50
5.2. Validación de modelos ANN con datos experimentales para una única llama canónica . .	52
5.3. Validación experimental de las capacidades de generalización de las CNNs	55
5.3.1. Evaluación con llamas canónicas	55
5.3.2. Evaluación de capacidad de interpolación a nuevos datos	59
5.4. Evaluación de la robustez al ruido de las técnicas basadas en señales BEMI	60
5.5. Validación usando distintas cámaras RGB	64
6. Conclusiones y trabajo futuro	69
Bibliografía	71
A. Calibración de instrumentos	77
A.1. Calibración de mediciones experimentales realizadas con cámaras RGB	77
A.2. Calibración de la respuesta espectral de filtros infrarrojos y lentes ópticos.	78
B. Determinación del tamaño del conjunto de entrenamiento	81
C. Resultados de sintonización de hiperparámetros de las ANNs	82
D. Análisis del número de imágenes requeridas para la técnica BEMI	84

Índice de figuras

1.1. Montajes ópticos experimentales para las técnicas clásicas de MAE y BEMI en pirometría de hollín.	4
2.1. Esquema general del arreglo óptico para estimar f_s en una llama CLAD.	12
2.2. Esquema del arreglo óptico BEMI para capturar la radiación emitida por las partículas de hollín.	15
2.3. Sensibilidad espectral para una configuración óptica experimental de BEMI.	16
2.4. Tabla de búsqueda de la temperatura del hollín para cada una de las cuatro relaciones de color de los campos $H_{\{R,G,B\}}$ obtenidas a partir de modelos matemáticos del proceso y equipos ópticos.	17
2.5. Esquema de las mediciones integradas de llama en la línea de visión del fotodetector.	18
2.6. Esquema de las secciones radialmente discretas para el algoritmo de deconvolución de onion-peeling.	19
3.1. Descripción general del proceso para generar las señales simuladas.	23
3.2. Soluciones de referencia para los campos de T_s y f_s en una llama CLAD de Yale utilizando CoFlame.	27
3.3. Ejemplos de campos de temperatura de hollín en el conjunto de datos aumentado y sus correspondientes señales emuladas capturadas por una cámara RGB.	27
3.4. Estructura generalizada de una red MLP y la representación esquemática de una sola neurona artificial.	29
3.5. Ejemplo de una operación de convolución 2D.	31
3.6. Arquitectura MLP para regresión línea a línea de T_s	32
3.7. Arquitectura U-Net modificada.	33
3.8. Arquitectura Attention U-Net propuesta para la pirometría de color de hollín óptico de banda ancha.	34
4.1. Yale-60 de referencia y sus correspondientes predicciones utilizando técnicas clásicas de pirometría de hollín y modelos de ANN.	38
4.2. Comparación de perfiles T_s para una solución CoFlame Yale-60 aplicando diferentes técnicas a las señales proyectadas $P_{\{R,G,B\}}$ sin ruido añadido y con ruido gaussiano añadido.	39
4.3. Comparación perfiles horizontales T_s a una HAB de 3.5 cm para una solución CoFlame Yale-60 aplicando diferentes técnicas a las señales proyectadas $P_{\{R,G,B\}}$ sin ruido añadido y con ruido gaussiano añadido.	40
4.4. Campos de referencia T_s para una imagen arbitraria en el conjunto de prueba, y el error con respecto a este campo para las estimaciones obtenidas con los diferentes modelos de ANN.	41
4.5. Inferencias sobre imágenes arbitrarias extraídas de cada subconjunto de test de las condiciones reportadas en la Tabla 3.1 usando los modelos previamente entrenados usando el conjunto de datos de entrenamiento Yale- $\{32,40,60,80\}$	45

4.6. Gráfico de dispersión entre los valores de groundtruth y los valores estimados por los modelos ANN a nivel de píxel para un total de 100 campos 2D pertenecientes al subconjunto Yale-60.	46
4.7. Gráfico de dispersión entre las ANNs y la temperatura de referencia correspondiente para todos los píxeles que contienen información sobre llamas en el conjunto de datos de prueba.	47
4.8. Soluciones de CoFlame de referencia de T_s y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de modelos ANN entrenados utilizando diferentes conjuntos de datos.	47
4.9. Soluciones de CoFlame de referencia de T_s y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo por U-Net y Attention U-Net entrenados con todos los datos generados para las cuatro condiciones de llama.	48
4.10. Gráfico de dispersión entre los valores groundtruth y valores estimados para todos los datos del conjunto de prueba.	49
5.1. Imagen del arreglo óptico experimental de BEMI y MAE capturada en el laboratorio del <i>Energy Conversion and Combustion Group (EC2G)</i>	51
5.2. Estimación de T_s para las llamas Yale experimentales obtenida con MAE o EMI tradicional y BEMI para cada condición de llama.	53
5.3. Validación de los modelos de ANN con datos experimentales para un única condición de llama Yale-60. Los subgráficos de la izquierda muestran el error relativo entre BEMI-OP y las ANNs con respecto al campo de T_s absoluta obtenido con MAE para la llama Yale-60.	54
5.4. Campos T_s experimentales y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo Attention U-Net entrenado con los datos generados para las cuatro condiciones de llamas indicadas en la Tabla 3.1.	56
5.5. Error absoluto de T_s a lo largo del trayecto vertical de máx $\{f_s\}$ obtenido con señales BEMI utilizando OP y Attention U-Net en comparación con el obtenido con MAE/EMI para todos los casos.	57
5.6. Estimación de T_s para la llama Yale-60 experimental obtenida con la técnica MAE y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de modelos CNN entrenados utilizando diferentes subconjuntos de datos.	58
5.7. Campos T_s experimentales y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo Attention U-Net entrenado con datos generalizados Yale- $\{32,40,60,80\}$, se emplea para estimar campos de T_s correspondientes a las condiciones reportadas en la Tabla 5.1.	60
5.8. Proyecciones al plano de la cámara recolectadas bajo distintas configuraciones de captura para la llama experimental Yale-60.	62
5.9. Campos de temperatura absoluta estimada para las distintas configuraciones de captura de datos. La fila superior corresponde a BEMI-OP y la fila inferior a las estimaciones de temperatura obtenidas usando Att. U-Net.	62
5.10. Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y trayectoria de máx $\{f_s\}$ para todos los casos empleando BEMI-OP.	63
5.11. Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y trayectoria de máx $\{f_s\}$ para todos los casos de configuración de parámetros de captura de datos empleando Att. U-Net.	64
5.12. Estimación de T_s para la llama de Gülder experimental obtenida con MAE tradicional y BEMI-OP utilizando las diferentes cámaras.	65
5.13. Comparación de los campos T_s obtenidos con MAE y los obtenidos con señales BEMI utilizando OP, MLP y CNN para la llama experimental. El panel izquierdo muestra el error de los campos obtenidos con las tres técnicas utilizando señales BEMI cuando se comparan con MAE. Los gráficos central y derecho muestran la temperatura absoluta del hollín para los perfiles verticales a lo largo de la línea central y la trayectoria de máxima concentración de hollín, respectivamente.	67
5.14. Error absoluto de T_s a lo largo de la trayectoria vertical de máx $\{f_s\}$ obtenido con señales BEMI utilizando OP y ANNs al compararlo con lo obtenido con MAE para todas las cámaras.	68

A.1. Radiancia espectral de la fuente de luz de banda ancha utilizada para la calibración de los arreglos ópticos de BEMI y MAE.	78
A.2. Esquema del arreglo óptico para caracterizar la transmisividad espectral de la lente óptica.	79
A.3. Calibración de la respuesta espectral del filtro infrarrojo y lente óptico para un setup experimental de BEMI conformado por una cámara Basler acA2040-55uc equipada con una lente AF-S Nikkor 50mm.	80
B.1. Función de pérdida para un conjunto de prueba de 100 muestras para Attention U-Net, U-Net y MLP ajustado con subconjuntos de entrenamiento/validación de diferentes tamaños.	81
D.1. Estimaciones de temperatura empleando BEMI-OP y Att.U-Net para distintas imágenes individuales.	85
D.2. Estimaciones de temperatura empleando BEMI-OP y Att.U-Net para distintos números de imágenes promediadas.	85




Índice de tablas

2.1. Resumen de los trabajos recientes de ANNs basados en medidas de radiación para el diagnóstico de combustion.	20
3.1. Condiciones de llama para generar datos sintéticos usando Coflame y el quemador Yale.	24
3.2. Dominio de búsqueda de hiperparámetros para MLP, U-Net y Att. U-Net.	36
5.1. Condiciones de llama para validar la metodología propuesta usando mediciones experimentales de llamas con condiciones no consideradas explícitamente en el entrenamiento de la ANN.	59
5.2. Parámetros de ganancia y tiempos de exposición para capturar mediciones experimentales de la llama experimental Yale-60.	61
C.1. Hiperparámetros seleccionados para U-Net y Att. U-Net.	82
C.2. Hiperparámetros seleccionados para MLP.	83

Nomenclatura

Acrónimos



ANN	Artificial neural network
BEMI	Broadband emission
BIT	Beijing institute of technology
BMAE	Broadband MAE
CCD	Charge-coupled device
CLAD	Coflow laminar axisymmetric diffusion
CMOS	Complementary metal-oxide-semiconductor
CNN	Convolutional neural network
DLR	German aerospace center
EC2G	Energy conversion and combustion group
EMCCD	Electron-multiplying CCD
EMI	Emission technique
FTIR	Fourier-transform infrared
HAB	Height above burner
HACA	Hydrogen-abstraction carbon-addition
IFS	International sooting flames
LCC	Low carbon college
LED	Light-emitting diode
LII	Laser-induced incandescence
LOSA	Line-of-sight attenuation
MAE	Modulated absorption emission
ML	Machine learning
MLP	Multi-layer perceptron
MSE	Mean square error
NPL	National physical laboratory
OP	Onion-peeling
PAH	Poly-cyclic aromatic hydrocarbons
RMSE	Root-mean-square error
SKLE	State key laboratory of engine
TDLAS	Tunable diode laser absorption spectroscopy
TiRe-LII	Time-resolved LII
TLAF	Two-line atomic fluorescence flame

1 | Introducción

Esta tesis aborda el diseño, implementación y validación de una metodología basada en aprendizaje automático diseñada para la caracterización de la temperatura del hollín en llamas de difusión laminares axi-simétricas canónicas (*Coflow Laminar Axisymmetric Diffusion* o CLAD). El enfoque de este estudio se centra en obtener estimaciones bidimensionales de los campos de temperatura del hollín a partir de mediciones de emisión de banda ancha obtenidas con una cámara RGB. En este contexto, el estudio establece una base teórico-práctica para el desarrollo de instrumentación de bajo costo, en términos de reducir la complejidad tanto de los setup experimentales usados típicamente en aplicaciones científicas como de las técnicas para el procesamiento de los datos, facilitando así la reproducibilidad y escrutinio de los experimentos entre distintos grupos de investigación.

En este capítulo se presenta la motivación de este trabajo de tesis, se delimitan los principios generales que guían la caracterización de los campos de temperatura del hollín con la metodología propuesta que utiliza aprendizaje automático. Además, se plantean los alcances y las contribuciones del trabajo, junto con la organización de los capítulos siguientes.

1.1. Contexto y motivación

En los últimos años, la demanda de energía ha aumentado considerablemente, con los combustibles fósiles siendo responsables de la mayor parte de los requerimientos globales [1]. Este incremento ha provocado un aumento en la contaminación atmosférica, especialmente por emisiones de gases de efecto invernadero y material particulado, como el hollín [2]. El hollín está formado por aglomerados carbonosos nanométricos que constan de decenas a cientos de partículas primarias, aproximadamente esféricas y con tamaños de alrededor de $100\mu\text{m}$ [3, 4]. Las partículas de hollín generadas por sistemas de combustión aumentan la transmisión de energía del proceso debido a la radiación emitida por el cuerpo en combustión; sin embargo, las partículas generadas en exceso son liberadas al medio ambiente debido a la oxidación incompleta en ambientes ricos en combustible a alta temperatura. Se ha identificado al hollín como uno de los principales contribuyentes a las emisiones de gases de efecto invernadero [5], con impactos negativos en la salud [6, 7] y el medio ambiente [8--11]. En respuesta a esta problemática, varias instituciones ambientales han establecido regulaciones para reducir las emisiones de material particulado en sistemas de combustión industrial [12, 13].

Dentro del estudio de los procesos de combustión y la formación de hollín en las llamas, se requieren estimaciones precisas y exactas de las propiedades del hollín. Entre estas, la temperatura es una de las más importantes propiedades termodinámicas y juega un papel crucial en los parámetros que influyen en estos procesos, dado que está directamente relacionada con la liberación de calor y la eficiencia del sistema de combustión [14]. Por lo tanto, obtener mediciones precisas y exactas de los campos de temperatura del hollín es crucial para desarrollar nuevos modelos de combustión y comprender la formación de hollín en las llamas. Además, la temperatura se utiliza como referencia para comparar el modelado numérico del fenómeno con los resultados de la caracterización experimental [15], lo cual subraya su importancia. En consecuencia, se ha generado un interés significativo en la comunidad científica por desarrollar métodos precisos para cuantificar la temperatura del hollín, lo que se extiende tanto a estudios en llamas laminares y turbulentas como a aplicaciones prácticas en dispositivos de

combustión [16].

La formación de hollín es un proceso complejo que comprende varios fenómenos físicos y químicos, algunos de los cuales ocurren simultáneamente [17]. Con el propósito de facilitar el estudio de la formación de hollín, los investigadores normalmente estudian las propiedades de las partículas formadas dentro de una llama en ambientes controlados de laboratorio, usando llamas CLAD generadas en quemadores de referencia [18]. Sin embargo, aún empleando este escenario simplificado, la caracterización experimental de las propiedades del hollín en las llamas CLAD sigue siendo un problema abierto y desafiante dentro de la comunidad de combustión [19--21].

Las partículas de hollín emiten radiación en un amplio espectro de longitud de onda [17], la cual puede ser medida con métodos ópticos [22] y correlacionarse con la temperatura de las partículas a través de un modelo inverso. El uso de instrumental óptico para capturar las señales de emisión del hollín resulta atractivo debido a que son no invasivos y ofrecen un rápido tiempo de respuesta en comparación a técnicas directas como termocuplas [23]. Dentro del instrumental óptico, las cámaras se destacan por ofrecer una amplia resolución espacial y temporal para analizar la distribución de temperatura en el volumen de una llama. Dentro de las técnicas experimentales que incorporan el uso de cámaras para realizar pirometría se encuentran las basadas en *Modulated Absorption/Emission* (MAE) [16] y las basadas solo en señales de emisión (EMI) [15, 24]. Estas técnicas se basan en capturar señales de radiación en múltiples bandas espectrales para luego incorporarlas en la resolución de un problema inverso derivado de un modelo explícito que relaciona la propagación de radiación en el medio con la temperatura. En el caso de MAE, se realizan mediciones de emisión de hollín y extinción de luz a lo largo de la línea de vista del sensor, las cuales se relacionan con la temperatura en modelos matemáticos que ya han sido aceptados en la comunidad científica; sin embargo, la implementación de MAE requiere la alineación y sincronización precisa entre cámaras y fuentes de luz, lo que da lugar a montajes complejos que introducen incertidumbre en las mediciones y solo resultan adecuados para entornos de laboratorio altamente controlados.

Alternativamente, las técnicas basadas en EMI solo consideran mediciones de emisión y omiten las de extinción de luz, simplificando considerablemente el instrumental con respecto a MAE, al mismo tiempo de requerir un modelo simplificado que asume un modelo para la función de absorción con dependencia espectral. Las mediciones de emisión en distintas longitudes de onda se obtienen mediante cámaras monocromáticas. Estas están acopladas a una rueda de filtros de banda angosta, que se alternan para capturar múltiples imágenes. Por otro lado, la variante EMI de banda ancha (BEMI) propone realizar las capturas de imágenes usando una cámara a color, lo cual permite la captura simultánea en longitudes de onda alrededor de los tres canales de color Red, Green, Blue (RGB). En general, en comparación a las otras técnicas clásicas aceptadas en la comunidad científica para realizar estimaciones de temperatura de hollín en llamas CLAD, BEMI resulta particularmente atractiva debido a la simplicidad del montaje experimental; sin embargo, la necesidad de asumir un modelo matemático simplificado para resolver el problema inverso suele derivar en una pérdida de exactitud con respecto a técnicas más sofisticadas como MAE [20].

Por otro lado, independientemente del instrumental utilizado para capturar las señales de radiación, mapear las mediciones a la temperatura en llamas CLAD requiere resolver problemas inversos no lineales mal condicionados. Estos problemas suelen abordarse mediante técnicas de deconvolución de señales basadas en procesos numéricos iterativos, que son altamente sensibles al ruido. Además, para suavizar las señales reconstruidas, se requiere un paso de regularización [25, 26]. En general, la regularización requiere ajustar parámetros basados en un proceso de prueba y error o la aplicación del método L-curve [27] para obtener las variables deseadas. En la práctica, el método L-curve se utiliza para establecer un criterio que establece un compromiso entre la suavidad de las señales recuperadas y la exactitud; sin embargo, las variaciones en la razón señal a ruido en diferentes alturas de llama suele generar discontinuidades en el campo 2D de distribución de temperatura reconstruido [28, 29]. Adicionalmente, la elección de un parámetro de regularización puede ser un proceso que impide obtener estimaciones de temperatura consistentes, incluso para las mismas condiciones de llama, lo que afecta la reproducibilidad de los resultados.

Estudios recientes asociados al diagnóstico de procesos de combustión han propuesto el uso de ANNs para estimar diversas propiedades de llamas a partir de imágenes, con el fin de reemplazar la deconvolución usando un modelo de ANNs, evitando así modelar explícitamente y realizar suposiciones de los principios físico-químicos subyacentes [30,31]. Las estructuras adaptativas de las ANNs permiten capturar las relaciones entre los datos de entrada y salida mediante un proceso de entrenamiento iterativo utilizando conjuntos de datos de ejemplo, sin necesidad de una caracterización explícita del modelo físico que rige los procesos subyacentes. El estado del arte presenta evidencia que una red entrenada con un conjunto representativo de pares de mediciones y el valor asociado de la propiedad de interés en la llama, es capaz de realizar directamente el mapeo inverso de nuevas mediciones mediante operaciones directas, evitando el uso de procedimientos iterativos con parámetros ajustables.

El grupo de investigación en el cual se desarrolló esta tesis, fue pionero en la comunidad científica en el uso de ANNs para el monitoreo de propiedades de hollín en llamas CLAD. En específico, el trabajo reportado en [32] evalúa el uso de redes convolucionales para predecir la fracción en volumen de hollín a partir de mediciones obtenidas con la técnica MAE. Los resultados muestran que una red entrenada con un conjunto de datos representativo de la llama observada puede predecir la fracción en volumen de hollín con mayor exactitud, precisión y alta tolerancia al ruido de medición, en comparación a las técnicas de deconvolución numérica tradicionales. Desde entonces, múltiples trabajos han reportado el uso de redes neuronales para predecir distintas propiedades de llamas CLAD a partir de mediciones obtenidas con equipamiento diverso (para detalles, ver Capítulo 2).

Un factor común de las técnicas en el estado del arte basadas en ANNs, es que el uso de redes se ha enfocado en mejorar la exactitud y precisión de las predicciones obtenidas utilizando técnicas bien establecidas en la comunidad científica, las cuales requieren la configuración e interconexión de múltiples componentes (fuentes láser, espectrómetros, generadores de funciones, etc.), dispuestos en sofisticados arreglos ópticos que son difíciles de reproducir, limitando la reproducción y escrutinio de los resultados. En el contexto de este trabajo de tesis, argumentamos que las ANNs también tienen el potencial de mejorar la exactitud y precisión de las predicciones de propiedades de hollín utilizando mediciones obtenidas con equipamiento más simple, como el utilizado en la técnica BEMI para pirometría de hollín, requiriendo solo una cámara a color con su correspondiente arreglo óptico.

El presente trabajo de tesis aborda el desarrollo y validación de una metodología integral para la estimación de temperatura de hollín en llamas CLAD, utilizando ANNs para mejorar la precisión y exactitud de las estimaciones obtenidas por medio de la técnica BEMI. La metodología propuesta considera todas las etapas necesarias para la implementación de la técnica, desde la integración de herramientas para la generación de conjuntos de datos de entrenamiento y validación, diseño y entrenamiento de las ANNs utilizando simulaciones numéricas, hasta directrices para la configuración y calibración del montaje experimental para la captura y procesamiento de datos en entornos de laboratorio utilizando las redes entrenadas.

1.2. Definición del problema de investigación

La Figura 1.1 muestra un arreglo óptico experimental con las componentes requeridas para realizar pirometría de hollín en llamas CLAD utilizando mediciones capturadas con cámaras. Las componentes marcadas en recuadros amarillos corresponden a las componentes utilizadas para la técnica MAE, incluyendo una fuente de luz externa y una cámara, además de las interfaces necesarias para sincronizar el apagado/encendido de la fuente de luz con la captura de las imágenes, para así obtener mediciones de emisión y extinción de luz, lo cual permite incorporar el efecto de la auto-absorción del hollín en la línea vista del sensor en el modelo inverso. Por otro lado, los recuadros rojos hacen referencia a dos cámaras a color con sus correspondientes arreglos de lentes y filtros, cada una de las cuales se utilizan para implementar BEMI. Como se mencionó previamente, la técnica BEMI simplifica considerablemente el montaje experimental con respecto a MAE, pero solo permite medir directamente la emisión integrada de la llama, la cual incorpora el efecto de auto-absorción del hollín en la línea vista del sensor, pero este no es directamente separable. Debido a esto, las técnicas clásicas para pirometría de hollín basadas en emisión utilizan un modelo inverso simplificado que omite el efecto de auto-absorción

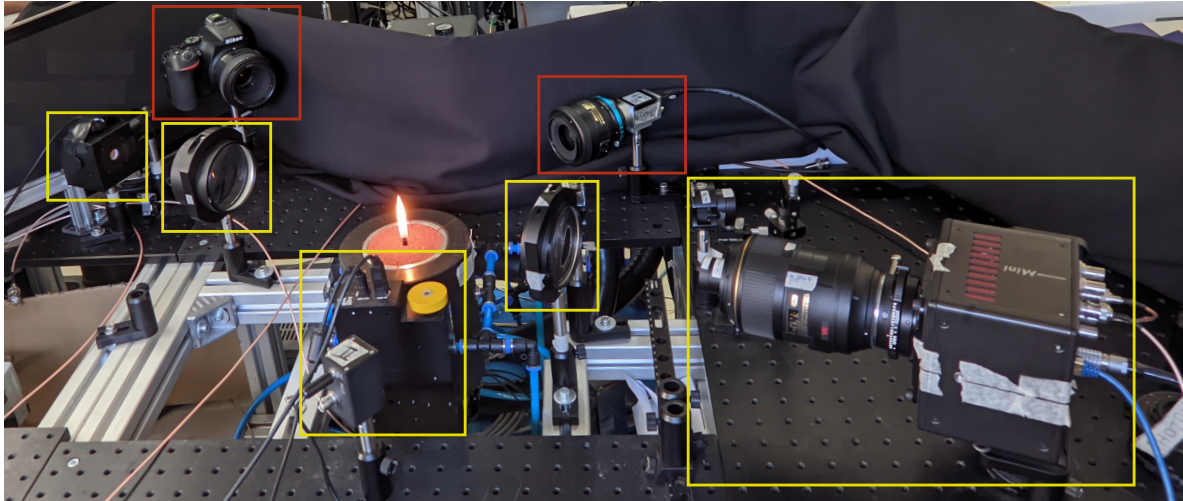


Figura 1.1: Montajes ópticos experimentales para las técnicas clásicas de MAE y BEMI en pirometría de hollín. Los recuadros rojos hacen referencia a los arreglos ópticos de BEMI de diferentes niveles de sofisticación (cámaras comerciales e industriales) mientras que los recuadros amarillos corresponden a los componentes ópticos requeridos para la técnica MAE. Imagen capturada en el laboratorio del *Energy Conversion and Combustion Group (EC2G)* de la Universidad Técnica Federico Santa María.

del hollín, lo cual suele resultar en estimaciones de menor exactitud que las estimaciones obtenidas mediante MAE. Más detalles sobre las características específicas de las componentes del montaje se entregan en el Capítulo 5.

Considerando el contexto provisto, **el trabajo de investigación desarrollado en esta tesis se enfoca en el diseño y validación de una metodología basada en redes neuronales artificiales para la estimación de temperatura de hollín en llamas CLAD utilizando mediciones obtenidas con equipamiento de bajo costo como el requerido para BEMI.** Se apunta a explotar las propiedades de aprendizaje de las ANNs para mejorar la exactitud y precisión de las estimaciones de temperatura con respecto a las obtenidas mediante técnicas clásicas basadas en métodos numéricos que requieren la definición de un modelo matemático explícito. Haciendo referencia a la Figura 1.1, se busca que la metodología desarrollada permita obtener estimaciones de temperatura utilizando el equipamiento contenido en alguno de los cuadros rojos, que sean equivalentes a las que se obtendrían utilizando el conjunto de componentes en los cuadros amarillos.

En el contexto de este trabajo, el aspecto de bajo costo de la instrumentación considera las siguientes características:

- El costo monetario del equipamiento necesario para realizar mediciones experimentales. En el caso de BEMI, solo se requiere una cámara a color con su arreglo óptico, eliminando la necesidad de incorporar fuentes de luz y sus respectivas interfaces. Además, se apunta a facilitar la utilización de cámaras a color industriales y comerciales, las cuales suelen ser más económicas que las cámaras científicas usualmente utilizadas en MAE.
- Facilidad de uso del equipamiento. Al evitar la interconexión de múltiples componentes de alta precisión, se reduce la necesidad de contar con personal experto y el tiempo necesario para realizar los montajes.
- Tolerancia al ruido de medición experimental, para así facilitar la realización de experimentos en entornos menos controlados que los que normalmente se establecen en laboratorios científicos.
- Bajo costo computacional del procesamiento de los problemas inversos, para así facilitar la implementación de los algoritmos en plataformas embebidas para monitoreo y ajuste en línea al momento de realizar las mediciones, en lugar de guardar los datos para realizar un procesamiento

posterior para su análisis en estaciones de trabajo o servidores.

- Capacidad de generalización de las técnicas para su implementación con equipamiento de distinta gama y aplicables a un rango amplio de condiciones de llama.

Las principales hipótesis sobre las que se basa el trabajo son:

- ***Es posible utilizar ANNs para realizar pirometría de hollín en llamas CLAD a partir de mediciones de emisión capturadas con cámaras a color.*** Una ANN diseñada y entrenada con datos estadísticamente representativos de las llamas observadas inferirá un modelo inverso a partir de datos de entrenamiento, sin requerir simplificaciones explícitas acerca de los fenómenos físico-químicos subyacentes. La red entrenada será robusta al ruido y no requerirá sintonización de parámetros de regularización, reduciendo la incertidumbre en las estimaciones a partir de datos experimentales en comparación a métodos numéricos tradicionales.
- ***Una ANN adecuadamente diseñada puede inferir relaciones complejas entre el groundtruth de temperatura en la llama y las correspondientes señales de radiación emitida capturadas con una cámara a color.*** Dado un conjunto de datos de entrenamiento representativo del comportamiento entrada-salida, una ANN inferirá un modelo a partir de un proceso iterativo de entrenamiento, sin requerir de simplificaciones explícitas normalmente aplicadas en los métodos numéricos tradicionales asociados a BEMI. En este contexto, se espera que la ANN entrenada con señales BEMI incorpore el efecto de auto-absorción en el modelo inferido, permitiendo obtener estimaciones de temperatura equivalentes a las obtenidas mediante técnicas más avanzadas como MAE, pero con un setup experimental mucho más simple.

1.3. Objetivos

El objetivo general es el diseño, implementación, y validación de una metodología basada en ANNs para la estimación de la temperatura de partículas de hollín en llamas CLAD a partir de mediciones de emisión capturada con cámaras a color. El trabajo de tesis apunta a la generación de evidencia empírica acerca de la efectividad de las técnicas basadas en ANNs para realizar pirometría de hollín en llamas CLAD de forma precisa y repetible utilizando equipamiento óptico de bajo costo.

Los objetivos específicos se listan a continuación:

1. Desarrollar un procedimiento sistemático para la generación de conjuntos de datos que, a partir de modelos numéricos para las propiedades de una llama objetivo y del camino óptico, permitan emular mediciones obtenidas con técnicas BEMI sujetas a variaciones estadísticas que representen distorsiones y ruido experimental bajo distintas condiciones de operación.
2. Implementar distintos modelos de ANN especializados para la obtención de temperatura de hollín a partir de mediciones de emisión de banda ancha simuladas, evaluando el desempeño mediante métricas cuantitativas para el error entre campos de temperatura estimados por la ANN y los groundtruth correspondientes para distintos niveles de ruido.
3. Validación funcional de modelos ANN seleccionados utilizando datos experimentales de llamas laminares axisimétricas canónicas capturados con un setup experimental de referencia. En este caso, debido a la falta de groundtruth, se apunta a obtener evaluaciones cualitativas comparando los campos de temperatura obtenidos con ANNs con los campos obtenidos con técnicas clásicas como MAE.
4. Validación funcional extensiva de la metodología propuesta utilizando datos experimentales obtenidos con distintas configuraciones de llamas CLAD y cámaras a color de distinta calidad, realizando comparaciones cualitativas con la técnica MAE que requieren equipamiento óptico más complejo.

1.4. Metodología

Esta sección describe la metodología para desarrollar y evaluar una técnica de bajo costo basada en ANNs para la medición de campos de temperatura del hollín (T_s) en llamas CLAD basada en BEMI. A continuación, se presentan las etapas principales de la metodología.

1. Emulación de mediciones BEMI experimentales

Con el fin, de emular mediciones de radiación emitida en un amplio rango espectral se propone usar como base el framework descrito en [31, 32]. El objetivo se basa en generar diferentes llamas de referencia con el fin de aumentar los conjuntos de datos para representar una amplia gama de distribuciones de temperatura y concentración de hollín. El proceso empleado para emular señales BEMI considera tres pasos principales:

- **Generación de soluciones con CoFlame:** se utiliza el código CoFlame [33] para simular una llama Yale o Gülder CLAD [34] (según corresponda), este código incluye la solución de ecuaciones de conservación de masa, momentum, energía, fracciones de masa de especies y balance de población de partículas de hollín, proporcionando acceso a propiedades detalladas del sistema reactivo. Específicamente, los campos T_s y la fracción en volumen de hollín (f_s) son suficientes para simular señales de intensidad de radiación (emisión) de la llama, que serían capturadas por una cámara.
- **Aumento del conjunto de datos:** la solución de CoFlame obtenida en el paso previo es costosa computacionalmente, por lo que se propone manipular la solución CoFlame de referencia obtenida para generar un conjunto de datos que contenga un amplio rango de campos f_s y T_s que representen distintos tamaños de llama, distribuciones de hollín y valores de T_s .
- **Simulación de señales experimentales:** se genera un conjunto de datos conformado con pares de campos de T_s obtenidos en el aumento de datos en la etapa anterior y sus correspondientes proyecciones 2D capturadas por la cámara $P_{\{R,G,B\}}$. El mismo procedimiento se repite para cada par de T_s / f_s en el conjunto de datos aumentado en la etapa anterior.

2. Pirometría de hollín empleando ANNs

Utilizando los datos simulados, se implementan y evalúan distintos modelos de ANNs para resolver el problema inverso. Modelos de ANNs considerados incluyen MLPs, U-Net y Attention U-Net. Estos modelos se implementarán utilizando la API de Keras, y herramientas como RayTune [35] para la sintonización de hiperparámetros. Para realizar la evaluación se obtendrán métricas de error entre campos de temperatura inferidos y el groundtruth asociado en regiones de interés como el eje central vertical de la llama y el camino de máxima concentración de hollín.

3. Campañas Experimentales

El código CoFlame utilizado en el framework numérico para emular un conjunto de datos con llamas, puede usar la llama Yale o Gülder [34], la cual, se puede establecer en el laboratorio del EC2G. A continuación se listan las campañas experimentales propuestas:

- Se evalúa la aplicabilidad de la técnica para distintos montajes ópticos. En este caso, se propone capturar mediciones BEMI para una misma llama de referencia utilizando lentes y cámaras de distinta calidad (científicas, industriales, y comerciales), y comparar las estimaciones obtenidas con ANNs sintonizadas para cada caso con las técnicas numéricas tradicionales y lo reportado en la literatura.
- Se evalúa la respuesta de la técnica basada en ANNs (empleando un único modelo ANN) a distintas condiciones de llama para un mismo setup óptico. En este caso, se propone capturar mediciones BEMI y MAE para distintas llamas de referencia con cada setup óptico.

Durante el desarrollo de cada etapa de los experimentos, es necesario generar nuevos datos simulados considerando la sensibilidad espectral de cada arreglo óptico. Por lo que, cada arreglo óptico

(cámara RGB, lente, y filtro IR) utilizado para adquirir mediciones BEMI experimentalmente debe ser caracterizado en sus componentes a fin de generar la curva de sensibilidad espectral.

Finalmente, con el objetivo de realizar una validación funcional extensiva de la metodología basada en ANNs se realizarán experimentos tanto con el quemador Yale y Gülder, por tanto, en cada caso se generan datos numéricos utilizando una solución CoFlame de una llama correspondiente, seguido de una validación experimental que involucra la iteración de los pasos 1 al 3.

1.5. Alcances y contribuciones

El trabajo de investigación desarrollado en esta tesis se enmarca en un contexto multidisciplinario que considera los siguientes alcances:

- El foco del trabajo está en el desarrollo de nuevas técnicas de procesamiento de datos para mejorar las estimaciones de temperatura de hollín obtenidas a partir del procesamiento de imágenes a color de llamas CLAD. Se considera que las imágenes son capturadas utilizando montajes experimentales basados en cámaras ya establecidos en la comunidad de combustión. No se considera el desarrollo de nuevos sensores o la incorporación de nuevo instrumental, sino que solo nuevas técnicas para el procesamiento de los datos.
- A lo largo de este reporte se hace referencia a las técnicas clásicas para estimación de temperatura basadas en MAE y EMI usando deconvolución numérica. En este trabajo se revisan estas técnicas clásicas para ilustrar conceptos fundamentales que son relevantes para entender las nuevas técnicas propuestas para el procesamiento basado en ANNs. En este contexto, se utilizan teorías y modelos tal como están reportados en el estado del arte al momento de iniciar esta tesis. El trabajo reportado en este documento no considera el desarrollo de nuevas teorías o nuevos modelos de los procesos de combustión subyacentes.
- Para efectos de validación de las técnicas propuestas utilizando datos experimentales, y a falta de una referencia absoluta para la temperatura real en la llama, las comparaciones se realizan utilizando como referencia las estimaciones de temperatura obtenidas para la misma llama mediante la técnica MAE. Si bien el uso de MAE con datos experimentales también se encuentran sujeto a incertezas en la captura y procesamiento de datos, se aplicaron diversos procedimientos de calibración y ajustes de entorno operacional para aumentar la confiabilidad de las estimaciones, contando con el apoyo de investigadores especialistas en combustión.

Las principales contribuciones al estado del arte generadas del trabajo de tesis incluyen:

- El diseño y validación práctica de una metodología y un conjunto de herramientas para el diseño de ANNs entrenadas para realizar predicciones de temperatura de hollín en llamas CLAD utilizando imágenes a color. Los resultados presentados extienden el estado del arte asociado al uso de ANNs en tareas de monitoreo de combustión, demostrando que las ANNs representan una herramienta útil para reducir la complejidad y el costo de los montajes experimentales típicamente utilizados en laboratorios científicos para realizar monitoreo de combustión.
- Se establecen márgenes asociados a la capacidad de generalización de las ANNs, identificándose requerimientos en los rangos de operación para que un mismo modelo de ANN entrenado con un conjunto de ejemplos representativo pueda ser utilizado para predecir temperatura de hollín en llamas CLAD con distinta geometría y distribución de temperatura generadas en un mismo quemador canónico. Al momento de iniciar esta tesis, toda la literatura sobre monitoreo con ANNs se enfocaba en el análisis de llamas específicas, y no existían análisis sobre la generalidad de los modelos entrenados.
- Se valida la aplicabilidad general de la metodología y se establecen directrices para realizar pirometría de hollín utilizando distintos quemadores de referencia y cámaras con arreglos ópticos de distinta gama, incluyendo cámaras comerciales e industriales.

Se espera que las herramientas desarrolladas y la evidencia generada en este trabajo sobre la utilidad efectiva de las ANNs para obtener mediciones consistentes utilizando cámaras a color de distinta gama, facilite la reproducibilidad de experimentos y el escrutinio de las caracterizaciones de temperatura reportadas por distintos grupos de investigación. A su vez, se espera que la metodología presentada sirva de base para el desarrollo de investigación aplicada hacia nuevas técnicas de instrumentación, con el fin de avanzar en la caracterización y el entendimiento de los procesos de combustión en entornos más complejos, como llamas pulsadas o turbulentas, avanzando hacia el monitoreo de procesos de combustión en entornos industriales.

Al momento de completar este trabajo de tesis, los códigos utilizados para generación de datos y el diseño de las ANNs se encuentran disponibles bajo solicitud ¹. Se planea trabajar en el corto plazo en mejorar la documentación y usabilidad de los códigos, para dejarlos libremente disponibles para la comunidad científica.

Como parte de la investigación desarrollada, se han generado resultados que han sido reportados en los siguientes artículos científicos revisados por pares:

- Portilla, J., Cruz, J. J., Escudero, F., Rodríguez, A., Demarco, R., Fuentes, A., & Carvajal, G. (2023). Towards Low-Cost Soot Pyrometry Using Broadband Emission and Artificial Neural Networks, *Journal of the Energy Institute*, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.joei.2023.101258>.
- Rodríguez, A., Portilla, J., Cruz, J. J., Escudero, F., Demarco, R., Fuentes, A., & Carvajal, G. (2021). Improving Broadband Emission-Based Soot Pyrometry Using Convolutional Neural Networks. 2021 IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC). <https://doi.org/10.1109/I2MTC50364.2021.9460106>.
- Rodriguez, A., Diomedi, A., Portilla, J., Garces, H., & Carvajal, G. (2019). Automatic Classification of Soot Propensity in Flames Using Image Processing and Machine Learning. IEEE CHILEAN Conference on Electrical, Electronics Engineering, Information and Communication Technologies, CHILECON 2019. <https://doi.org/10.1109/CHILECON47746.2019.8988106>.

1.6. Organización del informe

A continuación, se presenta la organización de este informe de tesis:

- En el Capítulo 2 se describen las ecuaciones utilizadas en las metodologías para caracterizar la temperatura del hollín. Además, se ofrece una breve explicación del proceso de deconvolución presente en la caracterización de las propiedades del hollín en llamas CLAD. Finalmente, se presenta un estudio del estado del arte de aplicaciones recientes de diagnóstico de combustión para estimar propiedades del hollín basadas en ANNs.
- El Capítulo 3 presenta una introducción a las ANNs y se proponen distintas arquitecturas de ANN para pirometría hollín en llamas CLAD. Además, se detalla una descripción general de las arquitecturas de los modelos propuestos, junto con una metodología sistemática para la generación de datos sintéticos fundamentados en principios físicos para entrenar las distintas instancias de los modelos de ANNs.
- En el Capítulo 4 se lleva a cabo una validación numérica de la técnica propuesta para estimar la temperatura del hollín en llamas CLAD utilizando datos simulados. El uso de datos numéricos con pares de entrada y salida permite realizar análisis cuantitativos detallados.
- En el Capítulo 5 se presentan los resultados experimentales al comparar la metodología propuesta con técnicas clásicas, utilizando datos obtenidos en campañas experimentales. Primero, se lleva a cabo una validación de la metodología propuesta utilizando una sola condición de llama canónica. Luego, se presenta la validación experimental de las capacidades de generalización de las técnicas basadas en ANNs.

¹<https://github.com/jorgeaportilla/ml4soot-temperature>

- El Capítulo 6 resume las principales conclusiones de este informe de trabajo de tesis y proporciona pautas para futuros trabajos.



2 | Antecedentes

Este capítulo describe los modelos matemáticos utilizados en las metodologías para la caracterización de temperatura de hollín con las técnicas *Modulated Absorption/Emission* y las basadas únicamente en señales de emisión (EMI) en llamas CLAD, así como el esquema general de los montajes ópticos necesarios para obtener mediciones experimentales que permitan calcular estas propiedades. Seguidamente, se hace una breve descripción del proceso de deconvolución presente en la caracterización de las propiedades del hollín en llamas CLAD, lo cual tradicionalmente se resuelve mediante métodos numéricos ligados a problemas inversos mal condicionados. Finalmente, se realiza una revisión del estado del arte asociado al uso de ANNs para el diagnóstico de llamas CLAD.

2.1. Monitoreo de propiedades del hollín

Los sistemas de combustión prácticos suelen operar en un régimen turbulento, lo que dificulta el estudio de la producción de hollín debido al movimiento desorganizado e irregular del flujo de oxidante y combustible. Generalmente, el análisis de la emisión de hollín en llamas turbulentas se realiza mediante conceptos como flamelet laminar [36], que considera una llama turbulenta como un conjunto de llamas laminares y estables. Por lo tanto, los estudios sobre la formación de hollín realizados bajo un régimen laminar en entornos de laboratorio pueden extrapolarse a sistemas turbulentos.

Las llamas pueden clasificarse como laminares o turbulentas, siendo posible identificarlas mediante su número de Reynolds, un parámetro adimensional que se calcula en función de la relación entre las fuerzas inerciales y viscosas. Cuando el número de Reynolds supera el valor de 2000, la llama se considera turbulenta; de lo contrario, se clasifica como laminar [37]. Con el objetivo de garantizar la reproducibilidad de los experimentos en distintos laboratorios, la comunidad académica dedicada al estudio de fenómenos asociados a la combustión ha establecido un conjunto de llamas de referencia generadas con quemadores estandarizados y condiciones operativas específicas. Algunos ejemplos son el quemador Yale [38] y el quemador Santoro [34], ambos integrados en los quemadores de referencia del *International Sooting Flames (ISF)* [39]. En este trabajo, nos referimos a estas llamas como llamas de difusión laminares axi-simétricas canónicas, o CLAD. En llamas de difusión, el combustible y el oxidante se encuentran inicialmente separados, y solo se mezclan en la región de reacción. Por lo tanto, las llamas CLAD presentan un campo de velocidad simple, lo que facilita la realización de mediciones experimentales reproducibles. Además, estas llamas se estabilizan mediante un flujo de aire circundante continuo (coflow), lo que proporciona un entorno para aislar la llama de perturbaciones externas.

La radiación emitida en un amplio rango espectral por las partículas de hollín en el interior de una llama se puede medir mediante métodos in-situ y ex-situ, tanto invasivos como no invasivos [22, 40], y puede relacionarse con las propiedades del hollín. Los diagnósticos ópticos basados en imágenes para estimar la temperatura del hollín utilizando cámaras son preferibles a los métodos invasivos, como la introducción de una termocupla en la llama, ya que proporcionan una alta resolución temporal y espacial sin alterar las condiciones de las partículas y las llamas. Además, algunos métodos invasivos tienen tiempos de respuesta lentos (generalmente en segundos) en comparación con los diagnósticos ópticos basados en imágenes, que tienen tiempos de respuesta en el rango de los gigahercios [23].

Las mediciones de radiación emitida por una llama contienen información sobre la emisión de

hollín integrada a lo largo de la línea de visión, la cual puede ser atenuada por la absorción y dispersión debido a la interacción entre las partículas de hollín antes de llegar al fotodetector. Por simplicidad en el análisis, los investigadores suelen asumir que las dimensiones de las partículas de hollín son pequeñas en comparación con la longitud de onda de detección, lo que permite suponer que las interacciones entre las partículas y la radiación ocurren dentro del régimen de Rayleigh [41], lo que a su vez permite despreciar los efectos de la dispersión de luz. Estudios científicos adoptan estas consideraciones, lo que tiene como efecto que las llamas sean analizadas solo como un medio emisor y absorbente [42]. En consecuencia, las configuraciones experimentales para determinar la distribución espacial de las propiedades del hollín basadas en la radiación emitida por las partículas de hollín emplean mediciones de emisión de llama y extinción de la luz.

Una propiedad importante para el estudio de las partículas de hollín es la temperatura de dichas partículas dentro de una llama, la cual guarda relación con la liberación de calor y el rendimiento de un sistema de combustión. La medición del campo de temperatura de las partículas de hollín puede calcularse utilizando modelos que se basan en la radiación emitida por estas partículas dentro de la llama, capturada en múltiples longitudes de onda. Como se mencionó en las secciones anteriores, existen algunas técnicas que, además de considerar las señales de radiación emitida, tienen en cuenta la radiación térmica auto-absorbida a lo largo del camino óptico. A fin de incorporar la auto-absorción de las partículas de hollín, las técnicas clásicas como MAE requieren mediciones adicionales de extinción de luz para determinar la cantidad de hollín presente dentro de la llama.

Las técnicas MAE y EMI capturan las intensidades de llama en diferentes longitudes de onda, ya sea empleando filtros monocromáticos de banda estrecha [43] o utilizando una cámara a color [25], que permite capturar simultáneamente múltiples bandas espectrales alrededor de las longitudes de onda de los canales rojo, verde y azul (RGB). En las técnicas EMI, cuando se utiliza una cámara RGB para detectar la intensidad de la radiación emitida en la línea de visión, la técnica se denomina pirometría de emisión de banda ancha (broadband emission pyrometry o BEMI) [15]. En este trabajo de tesis, nos enfocamos principalmente en mediciones obtenidas utilizando la técnica experimental BEMI, ya que se presenta como una opción prometedora para implementaciones de bajo costo al no requerir fuentes láser y permitir el uso de cámaras RGB industriales y científicas con diferentes niveles de sofisticación.

En las siguientes secciones se proporciona una descripción de las técnicas MAE, EMI y BEMI, así como también de la técnica atenuación de línea de vista (*Line-Of-Sight Attenuation* o LOSA) empleada por MAE para obtener mediciones de extinción de luz.

2.2. *Modulated Absorption/Emission* - MAE

La técnica MAE se utiliza para medir la temperatura del hollín (T_s) y la fracción en volumen de hollín (f_s) dentro de una llama mediante la realización de mediciones simultáneas de extinción de luz y emisión de llama en múltiples bandas espectrales. Las medidas adicionales de extinción se deben a que esta técnica experimental considera la radiación térmica autoabsorbida a lo largo del camino óptico. Sin embargo, este método óptico es costoso, ya que la configuración experimental requiere plataformas ópticas sofisticadas con una sincronización precisa entre una fuente láser y la cámara de captura.

La configuración experimental de MAE para determinar la distribución espacial de T_s y f_s emplea mediciones simultáneas de emisión de llama (con la luz de fondo apagada) y extinción de la luz (con la luz de fondo encendida). Estas mediciones requieren un fotodetector, filtros monocromáticos y una fuente de luz externa (como una luz LED). Para capturar señales experimentales con y sin luz de fondo, se necesita un generador de pulsos para producir la señal de disparo que sincroniza el fotodetector y la fuente de luz externa. Las señales se capturan mientras se intercambia el filtro monocromático a diferentes longitudes de onda de detección, como λ_1 y λ_2 . Se ajustan los tiempos de exposición de manera iterativa mediante un proceso de prueba y error con el objetivo de maximizar la detección de señal en cada longitud de onda.

A continuación se presenta una descripción de los procedimientos y ecuaciones utilizados para determinar T_s y f_s a partir de mediciones de extinción de luz y emisión, respectivamente.

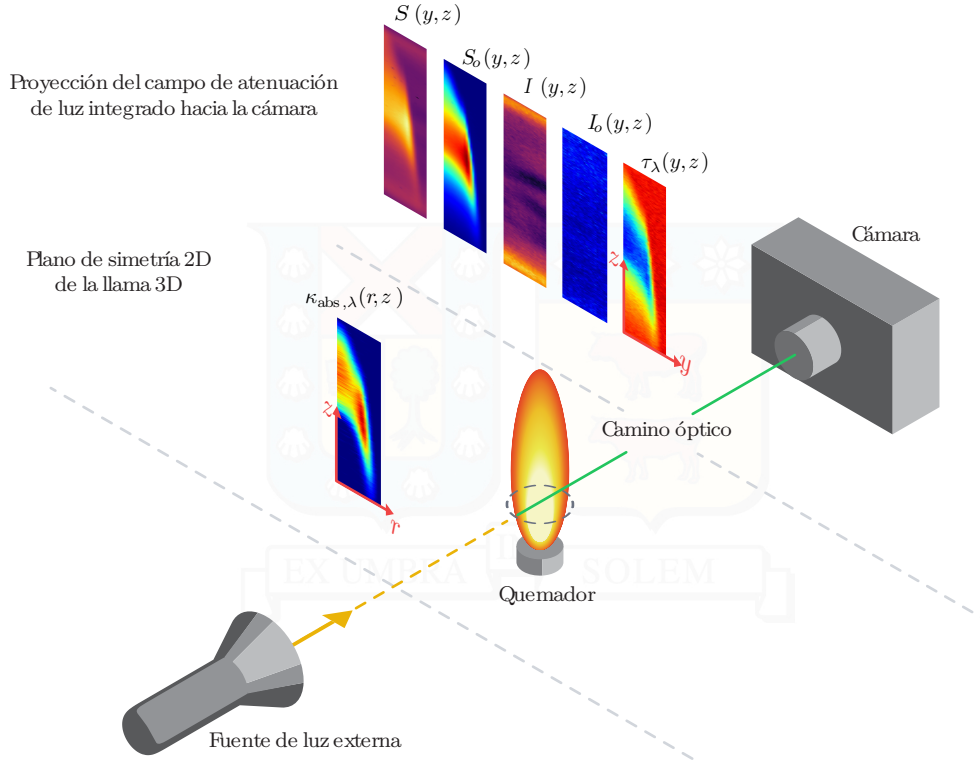


Figura 2.1: Esquema general del arreglo óptico para estimar f_s en una llama CLAD. Los elementos ópticos representados en este esquema corresponden a los elementos enmarcados en los recuadros amarillos de la Figura 1.1.

2.2.1. Estimación de fracción en volumen de hollín

La fracción en volumen de hollín es una medida que indica la proporción del volumen ocupado por las partículas de hollín en relación con el volumen total de la mezcla, que comprende tanto el volumen del hollín como el de la mezcla de gases en la llama. Los procedimientos experimentales para estimar las distribuciones de la fracción de volumen de hollín en llamas CLAD, como la técnica LOSA, requieren resolver un problema inverso mal condicionado para recuperar los campos de interés a partir de medidas indirectas de la transmisividad del hollín [44].

La Figura 2.1 ilustra la configuración y las variables utilizadas para estimar f_s en una llama CLAD. LOSA es una técnica experimental para la estimación del coeficiente de extinción κ_{ext} en llamas mediante el uso de sensores ópticos. Se basa en la premisa de que un haz de luz de longitud de onda λ se extinguirá debido a la absorción y dispersión de partículas de hollín distribuidas al atravesar una llama [31]. A partir de las señales capturadas por la cámara, se construye un campo 2D de la transmisividad, que representa la fracción de luz transmitida a través de la llama. Esta representación se logra estableciendo una relación entre la intensidad de luz capturada por la cámara al atravesar la llama (i) y la intensidad nominal emitida por la fuente de luz externa (i_o). Este valor se puede calcular mediante la siguiente ecuación:

$$\tau_\lambda(y, z) = \frac{i}{i_o} = \frac{S - S_o}{I - I_o}, \quad (2.1)$$

donde S y S_o son la intensidad de la llama medida por la cámara con el láser encendido y apagado, respectivamente, mientras que I e I_o son la intensidad del fondo con el láser encendido y apagado, respectivamente, y y, z corresponden a las coordenadas cartesianas.

Para determinar la fracción en volumen de hollín, se necesita medir el coeficiente de absorción κ_λ de las partículas de hollín dentro de la llama. Suponiendo, que las partículas de hollín generadas

por el proceso de combustión son lo suficientemente pequeñas como para estar dentro del régimen de Rayleigh, la fracción volumétrica local de hollín puede estimarse en función del coeficiente local de absorción de hollín como [45]:

$$f_s = \kappa_\lambda \frac{\lambda}{6\pi E_m}, \quad (2.2)$$

donde λ es la longitud de onda de la fuente de luz de referencia y E_m es la función de absorción del hollín se supone que es un valor conocido que puede calcularse utilizando diferentes métodos [46, 47]. Del mismo modo, suponiendo que las partículas de hollín son pequeñas en relación con λ , podemos despreciar la dispersión de la luz y suponer que el coeficiente de absorción es igual al coeficiente de extinción ($\kappa = \kappa_{\text{ext}}$). Por lo tanto, se puede relacionar el campo de transmisividad τ_λ medido con la técnica LOSA con κ_{ext} mediante la siguiente expresión:

$$-\ln[\tau_\lambda(y, z)] = \int_{l_0(y)}^{l_1(y)} \kappa_{\text{ext},\lambda}(l, z) dl, \quad (2.3)$$

donde $l_0(y)$ y $l_1(y)$ delimitan la sección donde la llama está presente a lo largo del camino óptico entre la fuente de luz externa y la cámara. Por lo tanto, para obtener f_s a partir de mediciones de LOSA, es necesario calcular la inversa de la expresión (2.3) para obtener κ_{ext} a partir de τ_λ . Esto implica calcular la inversa de una ecuación integral no lineal de tipo Abel [25, 48], que representa un problema mal condicionado en el que pequeñas perturbaciones en las señales capturadas inducen variaciones significativas en las propiedades del hollín recuperadas [34]. Por lo tanto, se añade la regularización de Tikhonov para ayudar a estabilizar las estimaciones en las técnicas clásicas de deconvolución [15, 24].

2.2.2. Estimación de temperatura del hollín

La emisión local del hollín a una longitud de onda dada λ se representa como:

$$J_\lambda(T_s, f_s) = \kappa_\lambda(f_s) I_\lambda^{bb}(T_s), \quad (2.4)$$

donde:

- κ_λ corresponde al coeficiente de absorción de hollín representado por el régimen de Rayleigh, reescribiendo la expresión (2.2) como [45]:

$$\kappa_\lambda = \frac{f_s 6\pi E_m}{\lambda}, \quad (2.5)$$

con E_m siendo la función de absorción de hollín considerando un índice de refracción m que a su vez depende de la longitud de onda (esta función se asume conocida [46], aunque sigue siendo un tema de debate en la comunidad de combustión). Para la expresión (2.5) se consideró la aproximación de Rayleigh de la teoría de Mie y se despreciaron los efectos de dispersión.

- I_λ^{bb} es la intensidad de radiación de cuerpo negro que depende de T_s (establecido por la ley de Planck):

$$I_\lambda^{bb} = \frac{2h\pi c^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda k_b T_s} - 1)}, \quad (2.6)$$

donde c es la velocidad de la luz, h es la constante de Plank y k_b es la constante de Boltzmann.

La cámara recibe una proyección 2D I_λ de emisiones locales de hollín integradas a lo largo de la línea de visión (l). Al despreciar la extinción de radiación asociada a los efectos de dispersión, la intensidad de la radiación en la línea de visión detectada por la cámara queda representada por [45]:

$$I_\lambda(y, z) = \int_l J_\lambda(l, z) \exp\left(-\int_{l'} \kappa_\lambda(l', z) dl'\right) dl, \quad (2.7)$$

donde y, z son las coordenadas de píxel de la cámara, y l' es el camino óptico desde la posición l hasta los sensores.

Para determinar la temperatura de las partículas de hollín, se ha establecido en la literatura que se puede llevar a cabo la pirometría de hollín utilizando la técnica MAE de uno o dos colores. En ambos casos, las ecuaciones asociadas para estimar T_s requieren conocer el coeficiente de absorción de hollín (κ_λ), el cual se puede obtener con mediciones de extinción de luz utilizando una fuente de luz externa. Como se menciona en la Sección 2.2.1, el campo κ_λ se puede obtener resolviendo el problema de deconvolución, una vez se obtenga la transmisividad del medio (τ_λ), dada por $\tau_\lambda = \exp[-\int \kappa_{ext,\lambda} dl]$.

Usando la técnica MAE de un color podemos calcular la temperatura del hollín T_s combinando mediciones de absorción (extinción medida a una longitud de onda λ) y de emisión a la misma longitud de onda [49]:

$$T_{s,MAE-1C}(r, z) = \left(-\frac{k_b \lambda}{hc} \ln \left(\frac{\lambda^5 J_\lambda(r, z)}{2hc^2 \gamma \kappa_\lambda(r, z)} \right) \right)^{-1}, \quad (2.8)$$

donde γ corresponde a un factor de calibración absoluta para las mediciones de emisión.

Para utilizar la técnica MAE de dos colores, podemos obtener los campos de intensidad de hollín locales, J_{λ_1} y J_{λ_2} , por medio de un proceso de deconvolución. Seguidamente, podemos estimar T_s utilizando las relaciones de intensidad para dos longitudes de onda de detección de banda estrecha espectral, con $\lambda_1 < \lambda_2$, utilizando la siguiente expresión [16, 50]:

$$T_{s,MAE-2C}(r, z) = \frac{\frac{hc}{k_b} \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right)}{\ln \left[\frac{J_{\lambda_1}(r, z) \kappa_{\lambda_2}(r, z) \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^5}{J_{\lambda_2}(r, z) \kappa_{\lambda_1}(r, z)} \right]}. \quad (2.9)$$

2.3. Pirometría de hollín basada en señales de emisión - EMI

La técnica EMI simplifica la configuración del montaje óptico con respecto a la técnica MAE, ya que no requiere mediciones adicionales de extinción de luz para determinar la cantidad de hollín dentro de la llama, eliminando la necesidad de una fuente de luz externa sincronizada con la cámara. En cambio, EMI requiere asumir un modelo para la función de absorción con dependencia espectral, para lo cual se han propuesto distintos modelos en la literatura [46, 47].

Al despreciar los efectos de la auto-absorción a lo largo del camino óptico [19], la técnica EMI simplifica el procedimiento de inversión para determinar la temperatura del hollín. Como resultado, en las expresiones para obtener la temperatura del hollín utilizando la técnica EMI, se elimina el término exponencial en la expresión (2.7). Por lo tanto, la intensidad de la radiación en la línea de visión detectada por la cámara se convierte en [19]:

$$I_\lambda(y, z) = \int_l J_\lambda(l, z) dl. \quad (2.10)$$

Cuando se utiliza la técnica EMI para determinar la temperatura de hollín, la expresión (2.9) se puede expresar solo en términos de emisión si se asume un modelo para E_m , debido a que κ_λ se relaciona con f_s por el régimen de Rayleigh (expresión (2.5)), donde f_s es una propiedad del hollín independiente de la longitud de onda. Por lo tanto, para el caso de la técnica de EMI, podemos calcular T_s como:

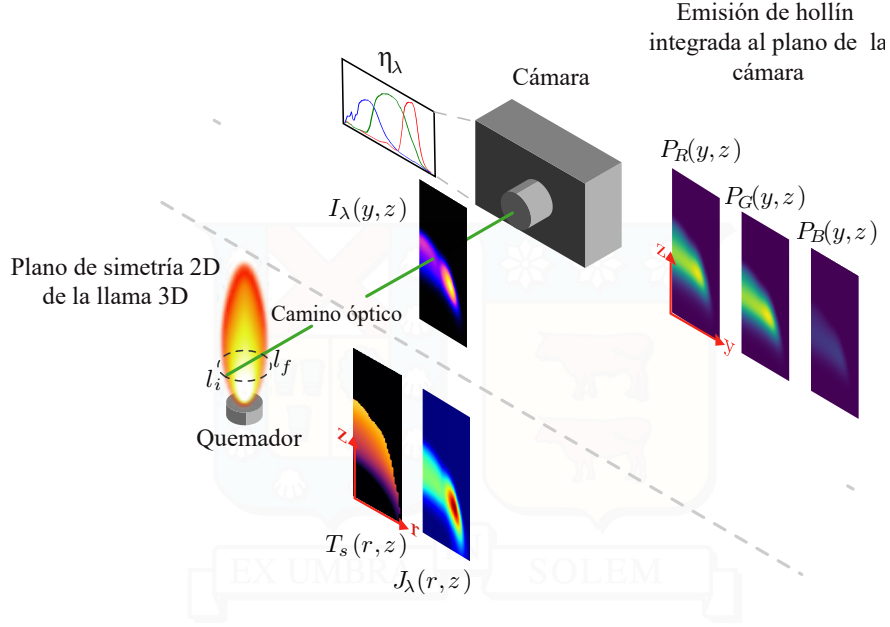


Figura 2.2: Esquema del arreglo óptico BEMI para capturar la radiación emitida por las partículas de hollín.

$$T_{s,EMI}(r, z) = \frac{\frac{hc}{k_b} \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right)}{\ln \left[\frac{J_{\lambda_1}(r, z) E_{m,\lambda_2} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^6}{J_{\lambda_2}(r, z) E_{m,\lambda_1} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^6} \right]}, \quad (2.11)$$

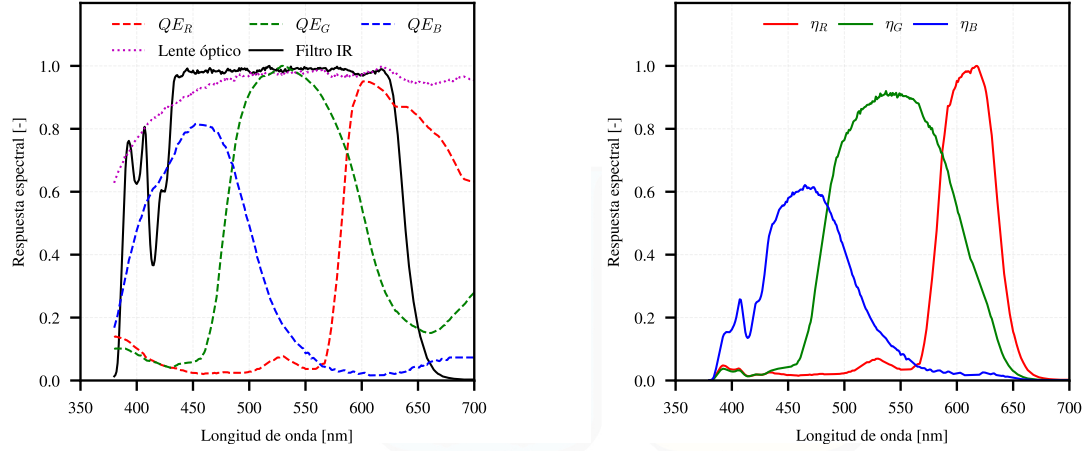
la simplificación de la técnica EMI con respecto a MAE y la necesidad de un modelo E_m pueden generar desviaciones de alrededor de 50K en los valores estimados de la temperatura del hollín [19].

2.3.1. Emisión de banda ancha - BEMI

Cuando se utilizan sensores RGB, se integra la expresión (2.10) sobre las longitudes de onda de detección de la cámara RGB. Al llegar a los sensores de la cámara, I_λ es ponderada por las curvas de sensibilidad espectral de los sensores η_λ , las cuales indican la eficiencia relativa de detección de señal para cada canal de color. Además, la señal ponderada se integra a lo largo de la banda espectral de cada canal de color. Los campos resultantes proyectados al plano de la cámara a color se pueden expresar como [51]:

$$\begin{aligned} P_i(y, z) &= \int_{\lambda_i} \eta_{i,\lambda} I_\lambda(y, z) d\lambda \\ &= \int_l \int_{\lambda_i} \eta_{i,\lambda} J_\lambda(l, z) d\lambda dl = \int_l \int_{\lambda_i} \eta_{i,\lambda} \kappa_\lambda(l, z) I_\lambda^{bb}(l, z) d\lambda dl \\ &= \int_l H_i(l, z) dl \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde $i \in \{R, G, B\}$ representan los canales rojo, verde y azul. $H_i(l, z) = \int_{\lambda_i} \eta_{i,\lambda} \kappa_\lambda(l, z) I_\lambda^{bb}(l, z) d\lambda$ representa la integración espectral de las emisiones de hollín en las longitudes de onda capturadas alrededor del canal de color correspondiente, que se puede recuperar de la expresión (2.12) a través de una operación de deconvolución. En cuanto a la sensibilidad espectral de los sensores, la Figura 2.3a muestra un ejemplo de las curvas de la respuesta espectral para cada canal de color en una cámara Basler acA2040-55uc (QE_i), el filtro de corte infrarrojo integrado en el sensor (IR), y la lente AF-S



(a) Respuesta del filtro infrarrojo, la lente y el fotodetector.

(b) Sensibilidad espectral del arreglo óptico.

Figura 2.3: Sensibilidad espectral para una configuración óptica experimental de BEMI. La sensibilidad del arreglo óptico está conformada por la eficiencia cuántica del sensor de la cámara RGB ($QE_{\{R,G,B\}}$), el filtro de corte de infrarrojos (IR) y la lente óptica de la cámara.

Nikkor 50mm. Del mismo modo, en la Figura 2.3b se muestra el $\eta_{\lambda,i}$ global obtenido multiplicando las curvas de los distintos componentes.

Para resolver el problema inverso asociado a obtener los valores H_i a partir de los campos P_i medidos con la cámara, las técnicas clásicas de BEMI realizan un proceso numérico de deconvolución del tipo *onion-peeling* (OP). Este tipo de problemas inversos está mal condicionado, lo que significa que el proceso es altamente sensible al ruido y requiere un paso adicional de regularización para suavizar las señales reconstruidas donde se requiere especificar un parámetro de regularización basado en prueba y error que impone un equilibrio entre la suavidad y la exactitud de los campos de temperatura obtenidos [31, 52].

Diferentes funciones relacionan los campos H_i medidos a diferentes longitudes de onda con la temperatura del hollín. En este trabajo, usamos la siguiente expresión que combina los canales R, G y B [15]:

$$\frac{H_G(l)H_B(l)}{H_R(l)^2} = \frac{\left[\int_{\lambda_G} \eta_{G,\lambda} \frac{E_m}{\lambda} I_{\lambda}^{bb}(l, T_s) d\lambda \right] \left[\int_{\lambda_B} \eta_{B,\lambda} \frac{E_m}{\lambda} I_{\lambda}^{bb}(l, T_s) d\lambda \right]}{\left[\int_{\lambda_R} \eta_{R,\lambda} \frac{E_m}{\lambda} I_{\lambda}^{bb}(l, T_s) d\lambda \right]^2}. \quad (2.13)$$

La dependencia de la altura de la llama z se eliminó por simplicidad. El lado izquierdo de la expresión (2.13) representa la relación de los canales G y R de las medidas experimentales deconvolucionadas capturadas con la cámara, mientras que el lado derecho describe una relación equivalente obtenida a partir de modelos matemáticos del proceso y equipos ópticos que podemos evaluar para diferentes temperaturas. Para determinar T_s a partir de las señales experimentales, como se muestra en la Figura 2.4, evaluamos previamente las intensidades de radiación de cuerpo negro en el lado derecho para diferentes temperaturas. Este proceso nos permite construir una tabla de búsqueda con las relaciones de color correspondientes [15, 53].

Si bien la técnica BEMI para estimar la temperatura del hollín es atractiva por su configuración experimental simple, presenta limitaciones en la exactitud y precisión de los resultados. La alta dependencia de la selección de parámetros de regularización puede ser problemática: una regularización insuficiente puede causar distorsiones, mientras que una excesiva puede generar perfiles de temperatura

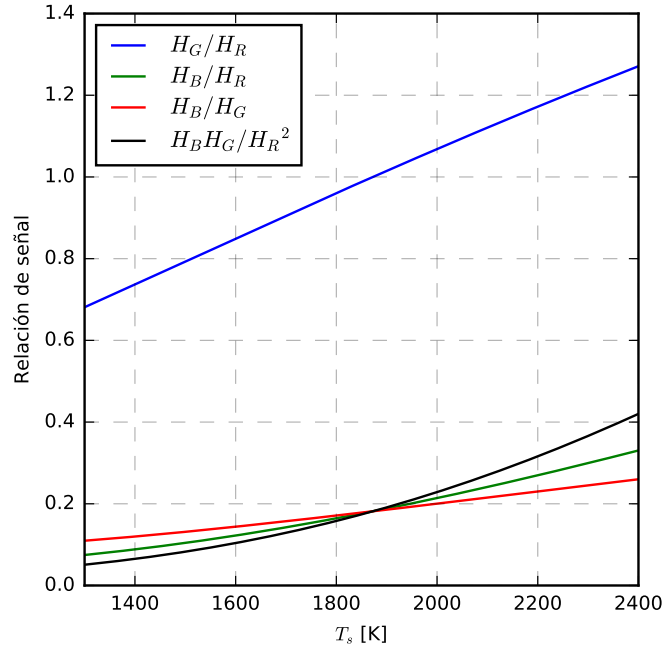


Figura 2.4: Tabla de búsqueda de la temperatura del hollín para cada una de las cuatro relaciones de color de los campos $H_{\{R,G,B\}}$ obtenidas a partir de modelos matemáticos del proceso y equipos ópticos.

con valores negativos no físicos. Por lo tanto, ajustar el parámetro de regularización es difícil cuando la relación señal-ruido (SNR) varía en la llama. La atenuación del ruido en áreas con baja SNR puede llevar a una sobre-regularización y reducción de la precisión en áreas con alta SNR, típicamente regiones con alta carga de hollín [31]. Además, la sensibilidad al ruido de los procedimientos de deconvolución numérica utilizados para resolver el problema inverso en la expresión (2.12) amplifica las incertidumbres en la estimación de T_s en regiones con altas concentraciones de hollín, como la línea central de la llama [49, 54].

La técnica BEMI requiere la incorporación de un modelo para la función de absorción (E_m), para el cual no existe un modelo aceptado en la comunidad científica y actualmente se deriva de heurísticas [20]. Sin embargo, la omisión explícita de los efectos de auto-absorción del hollín en el camino óptico simplifica el análisis matemático y el procesamiento numérico, aunque a costa de excluir información contenida en las mediciones. Se ha demostrado que BEMI tiende a subestimar los valores de temperatura en comparación con otras técnicas que consideran los efectos de autoabsorción, como MAE [19, 53]. Sin embargo, MAE requiere un setup experimental mucho más complejo que incluye una fuente de luz externa, cámara y sistemas de sincronización entre instrumentos.

En general, la literatura indica que la simplicidad del setup experimental de BEMI normalmente conlleva una mayor incertidumbre y una menor exactitud en las estimaciones de temperatura en comparación con otras técnicas más sofisticadas establecidas en la comunidad científica.

2.4. Deconvolución *onion-peeling*

La Figura 2.5 muestra el esquemático de una llama CLAD y sus correspondientes señales proyectadas al plano del fotodetector. La distribución radial de una propiedad del hollín en una llama axisimétrica se obtiene a partir de mediciones integradas en la línea de visión del fotodetector a través de la llama. En el caso de pirometría de emisión para determinar la temperatura de hollín, dada la geometría axisimétrica de la llama y usando un cambio variable en la integral, la expresión (2.12) se convierte en:

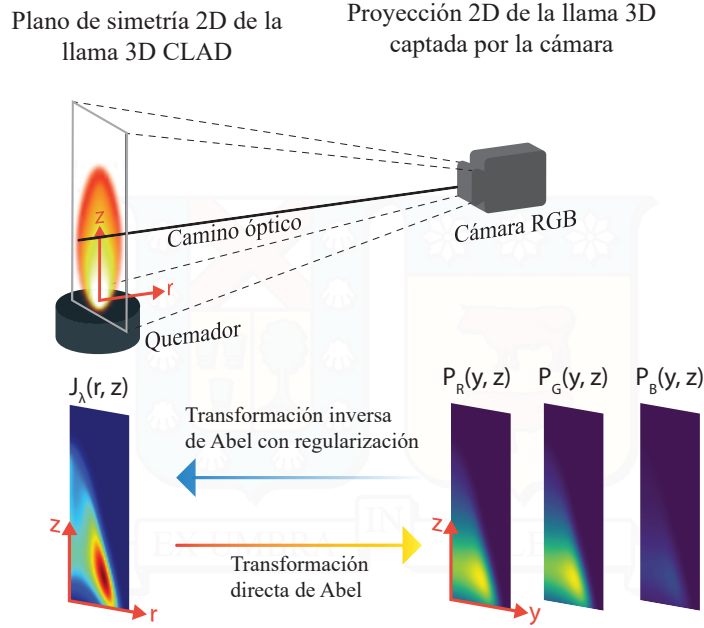


Figura 2.5: Esquema de las mediciones integradas de llama en la línea de visión del fotodetector.

$$P_i(y) = 2 \int_y^R \frac{H_i(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr, \quad (2.14)$$

donde r es la coordenada radial dentro de la llama, y es la coordenada de abscisas de los datos proyectados, y R es el radio de la llama. La expresión (2.14) se puede escribir en forma matricial como $\mathbf{P}_i = \mathbf{A}\mathbf{H}_i$, donde $\mathbf{H}_i = [H_{i,1}, \dots, H_{i,I}]^T$ corresponde a los parámetros desconocidos, $\mathbf{P}_i = [P_{i,1}, \dots, P_{i,I}]^T$ es un set con las proyecciones al plano de la cámara, I corresponde al número de elementos en \mathbf{P}_i y \mathbf{H}_i , y \mathbf{A} corresponde a una matriz con los parámetros geométricos de la medición [55].

La expresión (2.14) es un tipo de ecuación integral de Abel, su solución implica resolver un problema inverso con un sistema de ecuaciones mal condicionadas, debido a que la solución es muy susceptible a pequeñas perturbaciones en las señales de entrada [48]. Por lo tanto, para resolver este problema, en lugar de realizar la transformada inversa usando la inversa de la matriz directamente $\mathbf{H}_i = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{P}_i$, se usa el método de *onion-peeling* [56] con un paso adicional de regularización de Tikhonov para estabilizar el proceso de deconvolución [48]:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \arg \min_{\mathbf{H}} (\|\mathbf{A}\mathbf{H} - \mathbf{P}\|^2) + \alpha \|\mathbf{L}\mathbf{H}\|^2, \quad (2.15)$$

donde \mathbf{L} corresponde a una matriz suavizante que aproxima el operador derivada en el espacio discreto [57] y α es el parámetro de regularización. El paso adicional de regularización tiene como objetivo suavizar las señales reconstruidas donde se requiere especificar el valor del α basado en prueba y error o usando el método L-curve [27], los cuales imponen un tradeoff entre la suavidad y la exactitud de los campos de temperatura obtenidos.

En el método OP, la llama se divide en M elementos anulares espaciados uniformemente de espesor $\Delta_r = R/(M - 1/2)$. La Figura 2.6 muestra un esquema de los datos proyectados y los valores locales de interés dentro de la llama axisimétrica. El problema de minimización mostrado en la expresión (2.15) conduce a una ecuación matricial lineal, y la transformada inversa se puede encontrar resolviendo $(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L})\tilde{\mathbf{H}} = \mathbf{A}^T \mathbf{P}$ [48].

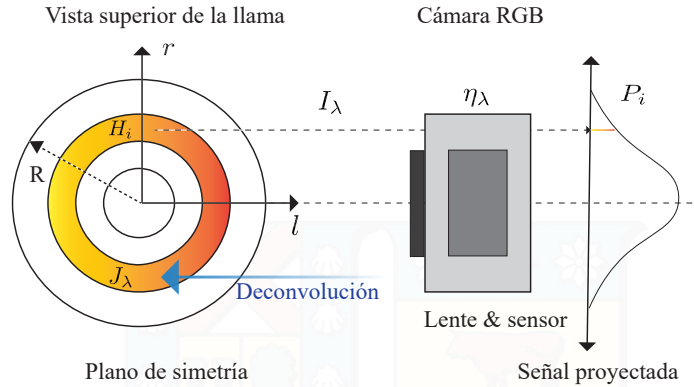


Figura 2.6: Esquema de las secciones radialmente discretas para el algoritmo de deconvolución de onion-peeling.

2.5. Enfoques basados en ANN para el diagnóstico de combustión

Dentro de la literatura reciente relacionada con el diagnóstico de sistemas de combustión, múltiples estudios han propuesto el uso de ANNs como alternativa a los métodos tradicionales de deconvolución numérica para estimar diversas propiedades de una llama a partir de mediciones ópticas. Las ANNs son estructuras adaptables que, dado un conjunto representativo de ejemplos de pares de entrada y salida deseada, pueden ajustar sus parámetros internos para modelar relaciones arbitrariamente complejas de entrada-salida a través de un proceso de entrenamiento iterativo, sin requerir modelos explícitos de los fenómenos subyacentes.

A continuación, se presentan los trabajos más relevantes en el área emergente de la utilización de ANNs para la estimación de variables en llamas CLAD utilizando mediciones ópticas con configuraciones de distinta complejidad. La Tabla 2.1 muestra la línea de tiempo con los trabajos recientes basados en ANNs para el diagnóstico de combustión.

El trabajo [30] muestra un enfoque basado en el perceptrón multicapa (*Multi-Layer Perceptron* o MLP) para recuperar distribuciones de temperatura de hollín (T_{Sp}) y concentraciones (S_p) a partir de señales infrarrojas capturadas con un espectrómetro FTIR (*fourier-transform infrared*). Para entrenar las redes MLP, los autores emplean la base de datos HITEMP 2010 para mezclas de CO₂, H₂O, y CO, la cual se basa en cálculos numéricos juntos con medidas experimentales [64]. En primer lugar, con base en los campos de referencia T_{Sp} y S_p se genera un conjunto de mediciones sintéticas de emisión radiativa utilizando un modelo de cálculo de radiación, con lo cual se generan sets de entrada-salida que se usan para entrenar la red. Posteriormente, para validar la técnica y evaluar el desempeño de la red entrenada, se procesan mediciones espectrales de radiación térmica adquiridas con un espectrómetro FTIR, para esto se utilizó la llama estándar *National Physical Laboratory* (NPL) que proporciona condiciones para la evaluación de la técnica con temperaturas y concentraciones conocidas. Las redes MLP permiten procesar perfiles unidimensionales, por lo que la reconstrucción del campo de temperatura 2D de una llama debe realizarse línea por línea para diferentes alturas de llama. Dado que cada línea se procesa de forma independiente sin considerar la información de los perfiles vecinos, los campos recuperados tienden a mostrar discontinuidades verticales, especialmente en zonas alrededor de la base y la punta de la llama, donde la información de fondo domina sobre la llama.

Posteriormente, en [31], el grupo de investigación con el cual se colabora para realizar esta tesis multidisciplinaria fue pionero al plantear el uso de redes neuronales artificiales (*Convolutional Neural Networks* o CNNs) para recuperar directamente campos 2D de concentración de hollín en una llama, a partir de imágenes obtenidas con mediciones de atenuación de línea de vista (*Line-of-Sight Attenuation* o LOSA) de banda estrecha. A diferencia de las MLP que procesan datos de entrada línea

Tabla 2.1: Resumen de los trabajos recientes de ANNs basados en medidas de radiación para el diagnóstico de combustion.

Año	Equipo ⁽¹⁾	Propiedad de llama recuperada ⁽²⁾	Modelo ANN	Setup Experimental ⁽³⁾	Conjunto de datos para entrenamiento	Ref.
2019	LCC	S_p, T_{Sp}	MLP	Espectrometría FTIR	Simulado (Base de datos HITEMP 2010)	[30]
2020	EC2G	f_s	U-Net	MAE	Simulado (CoFlame)	[31]
2021	EC2G	T_s	U-Net	BEMI	Simulado (CoFlame)	[32]
2021	LCC	f_s, T_s	MLP	MAE	Simulado (Solucionador CFD [58]) y experimental obtenido de [59]	[60]
2022	BIT	f_s, T_s	U-Net	MAE	Experimental obtenido con [59]	[61]
2022	LCC	T_f, CO_2	U-Net	TDLAS	Simulado (Solucionador LaminarSmoke)	[62]
2024	SKLE	f_s, T_s y D_p	MLP	LII, TLAf, TiRe-LII	ICCD Camera, pulsed laser source, band-pass filter (Experimental data).	[63]

⁽¹⁾ LLC: Low Carbon College; EC2G: Energy Conversion and Combustion Group; BIT: Beijing Institute of Technology; SKLE: State Key Laboratory of Engine

⁽²⁾ s_p : species concentration; T_{Sp} : temp. of species; f_s soot volume fraction; T_s : soot temp.; T_f : flame temp.; CO_2 : concentration; D_p : primary particle diameter

⁽³⁾ FTIR: Fourier-transform infrared; TDLAS: Tunable diode laser absorption spectroscopy; LII: Laser-induced incandescence; TLAf: Two-line atomic fluorescence flame.; TiRe-LII: Time-resolved LII

a línea, las CNN procesan los datos empleando filtros convolucionales 2D que consideran la estructura espacial de la llama, incorporando información de perfiles vecinos. En este trabajo, los autores también proponen un enfoque alternativo para la generación de datos de entrenamiento, utilizando un framework numérico que utiliza modelos físicos para simular campos de concentración de hollín para distintas llamas CLAD y sus correspondientes mediciones obtenidas mediante LOSA, incluyendo distorsiones mediante ruido gaussiano. El propósito es que el conjunto de datos contenga suficiente información que permita representar condiciones que pueden ocurrir en campañas experimentales de laboratorio. Esta técnica se testeó extensivamente con datos numéricos y también se validó con un set reducido de datos experimentales para una llama canónica. La configuración experimental utilizada para capturar mediciones de extinción usando LOSA, consta de un LED acoplado a una esfera de integración que proporciona una fuente de luz difusa, que es colimada por una lente acromática y orientada al centro del quemador. La luz transmitida que pasa a través del medio es convergida por una segunda lente acromática y capturada por una lente acoplada a una cámara CCD (*charge-coupled device*).

En [32], los autores realizan un trabajo exploratorio para extender el framework presentado en [31] y aplicarlo a la obtención de los campos de temperatura T_s utilizando mediciones obtenidas mediante BEMI. El objetivo fue evaluar el potencial de las ANNs para compensar las limitaciones asociadas con el uso de instrumentación de bajo costo. No obstante, los resultados reportados son prometedores, la evaluación se realizó únicamente con datos simulados, los cuales representan un conjunto reducido de condiciones de operación. Por consiguiente, solo se puede considerar como una prueba de concepto.

En [60] se propone una metodología basada en MLP para recuperar campos T_s y f_s utilizando señales de emisión de infrarrojo cercano. Este estudio se validó en un doble enfoque. Inicialmente, los autores evalúan la resistencia al ruido de los campos recuperados utilizando los campos numéricos de T_s y f_s proporcionados por [65]. Seguidamente, utilizaron un conjunto de datos de mediciones experimentales capturados con la técnica MAE y una cámara monocromática [66], obteniendo campos T_s y f_s para entrenar y testear los modelos MLP desarrollados. La configuración del setup experimental

para MAE se reporta en [66], esta requiere una fuente de luz externa y un fotodetector para capturar mediciones simultáneas de emisión de llama y extinción de luz. Las señales son capturadas con una cámara Phantom V711 con un sensor CMOS de megapíxeles intensificado y controlado que proporciona cuadros monocromáticos de 8 bits de cada llama visible en 1280×800 píxeles a 100 fotogramas por segundo.

En [61], se propone un enfoque basado en la arquitectura U-Net para recuperar simultáneamente los campos f_s y T_s a partir de mediciones experimentales de emisión de hollín, obtenidas de llamas de etileno diluidas con N₂ y documentadas mediante la técnica MAE [66]. Los resultados confirman lo informado en [32]: las CNN son altamente resistentes al ruido para recuperar las propiedades del hollín. Por otro lado, en [62], se propone una metodología para recuperar los campos de concentración de T_s y CO₂ a partir de mediciones de absorción espectral de múltiples líneas en el infrarrojo medio utilizando U-Net. Para entrenar el modelo, los autores generan campos de concentración simulados de T_s y CO₂ utilizando un solucionador de CFD de código abierto, LaminarSmoke [67]. Los autores muestran resultados experimentales en las mediciones espectrales multilínea de espectroscopia de absorción con láser de diodo sintonizable (*tunable diode laser absorption spectroscopy* o TDLAS) de $4,3 \mu\text{m}$ de dos llamas de difusión de coflow canónicas. Utilizan una configuración compleja que incluye una fuente láser y un motor paso a paso para escanear la llama en la dirección axial. Esta metodología propuesta simplifica la técnica TDLAS porque U-Net solo requiere los datos espectrales medidos a lo largo de la línea central axial de la llama como entrada, lo que reduce la necesidad de escanear en las direcciones axial y radial para obtener los campos de concentración de T_s y CO₂ para llamas axisimétricas.

Recientemente, se ha realizado una primera aproximación para evaluar la capacidad de generalización de los modelos basados en ANNs para la pirometría del hollín. El trabajo en [63] presenta un enfoque basado en MLP para recuperar la fracción de volumen de hollín, la temperatura y el diámetro de partículas primarias a partir de mediciones de luminosidad de hollín. Este enfoque implica el entrenamiento de modelos MLP utilizando dos conjuntos diferentes de seis llamas experimentales. Como resultado de la evaluación sobre la capacidad de generalización de un modelo, debido al número limitado de ejemplos de entrenamiento y a la arquitectura MLP, los resultados revelan que los campos reconstruidos muestran una naturaleza desestructurada y discontinua. En algunos casos, se presentan desviaciones significativas entre los campos estimados y los campos de referencia.

En el estado del arte, se ha establecido que tanto datos experimentales como simulados pueden utilizarse para entrenar un modelo de ANN. Independientemente de la arquitectura de la ANN, un requisito crucial para el funcionamiento eficaz de estos modelos es contar con un conjunto de datos de entrenamiento que incluya mediciones de los fenómenos observados y sus correspondientes valores de temperatura conocidos como groundtruth, y que sean estadísticamente representativos de las condiciones que pueden ocurrir en el proceso objetivo. En este sentido, el uso exclusivo de datos experimentales de una configuración experimental particular, como en el caso de MAE, para entrenar ANNs [60, 61], no es del todo recomendable debido a las complejidades inherentes a dicha configuración. Resulta difícil obtener un conjunto de datos que sea representativo y coherente para diferentes configuraciones de llama y condiciones experimentales. Además, en este escenario, la red neuronal puede aprender a asignar nuevas mediciones a una estimación experimental potencialmente inexacta, que no necesariamente refleja el proceso físico real.

Por otro lado, investigaciones recientes en el estado del arte demuestran que el uso de datos de simulaciones numéricas, que sean representativos de los fenómenos observados, para entrenar modelos de ANNs, conduce a resultados con mayor exactitud y suavidad [30, 31].

En resumen, para lograr un buen desempeño de las ANNs, es crucial disponer de conjuntos de datos de entrenamiento que sean confiables y representativos de los fenómenos subyacentes. Solo mediante la definición y validación de procesos sistemáticos para generar conjuntos de datos que reflejen fielmente los fenómenos observados en diversas condiciones de operación, se podrá aprovechar plenamente el potencial de estas estructuras.

3 | Generación de conjuntos de datos y aprendizaje automático para pirometría de hollín

Este capítulo presenta el entorno numérico utilizado para generar los conjuntos de datos sintéticos con base física, los cuales permiten el entrenamiento de los modelos de aprendizaje automático. A continuación, se proporciona una breve visión general de los conceptos relacionados con las arquitecturas de las redes neuronales *fully-connected feed forward*, las redes neuronales convolucionales y los mecanismos de atención. Estas constituyen la base de la metodología propuesta para llevar a cabo la pirometría de hollín. Seguidamente, se ofrece una descripción del diseño e implementación de tres estructuras diferentes que se evaluarán en la aplicación objetivo.

3.1. Emulación de mediciones de hollín y generación de conjuntos de datos

La simulación de llamas de difusión axi-simétrica laminar implica resolver las ecuaciones que rigen estas llamas, las cuales incluyen mecanismos químicos y especies necesarias para simular los combustibles. Con el propósito de emular mediciones de radiación emitida en un amplio rango espectral, se propone utilizar como base el entorno numérico descrito en [31,32], el cual fue diseñado originalmente para emular la distribución de f_s dentro de la llama. El objetivo es generar diferentes llamas de referencia para ampliar los conjuntos de datos y representar la combustión de varios combustibles en una amplia gama de distribuciones de hollín. El entorno numérico requiere conocer las curvas de respuesta espectral del setup óptico, que resultan de la calibración de los instrumentos, para generar conjuntos de datos conformados por pares de T_s con sus correspondientes campos proyectados $P_{\{R,G,B\}}$ en las bandas espectrales de una cámara RGB.

La Figura 3.1 ilustra el flujo del proceso implementado para generar grandes conjuntos de datos compuestos por diferentes campos T_s de referencia, los cuales sirven como groundtruth, y las proyecciones que simulan las señales capturadas por una cámara en campañas experimentales. Este proceso considera tres pasos principales para emular señales en los planos de llama y cámara: generar una solución CoFlame de referencia para f_s y T_s en una llama estable CLAD, manipular la solución de referencia para aumentar el conjunto de datos, y calcular las proyecciones directas para cada uno de estos.

A continuación se describe el proceso en cada una de las etapas para simular mediciones BEMI experimentales.

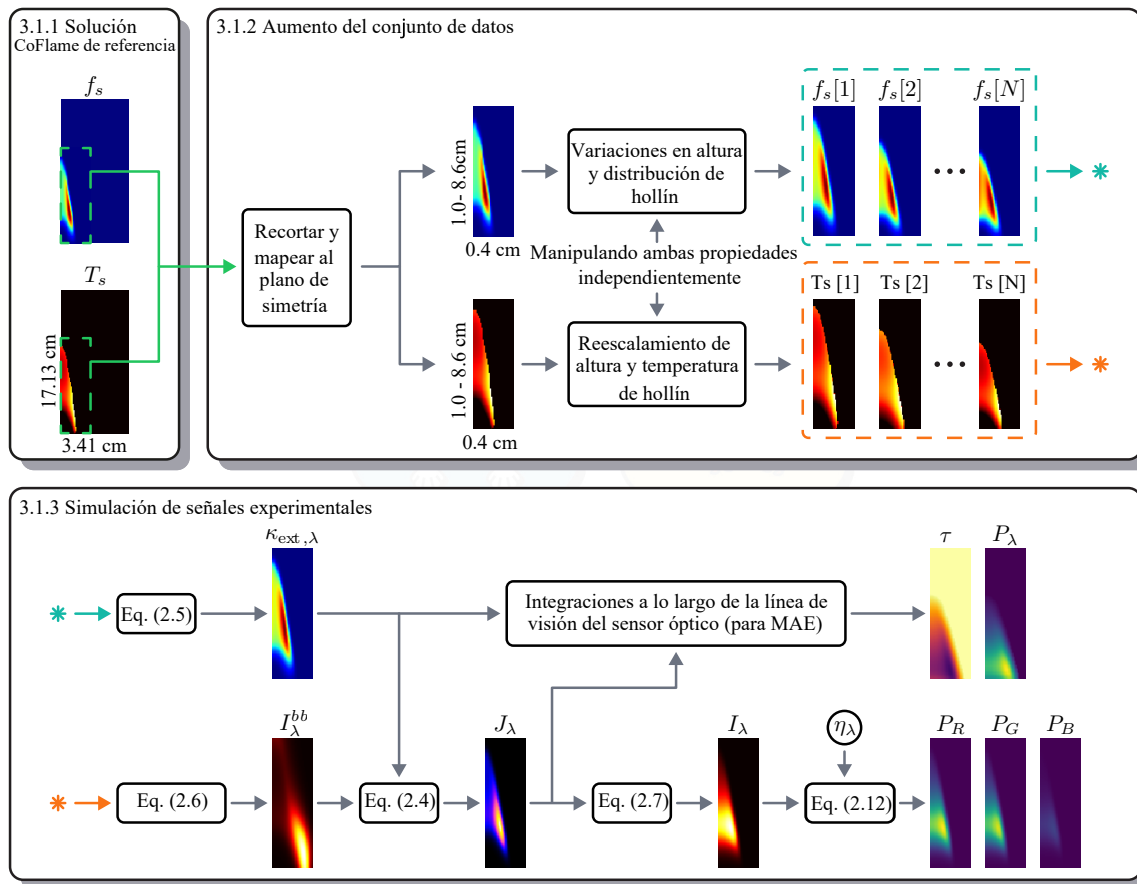


Figura 3.1: Descripción general del proceso para generar las señales simuladas.

3.1.1. Solución de referencia para la temperatura del hollín en una llama CLAD

El entorno numérico requiere soluciones de referencia CoFlame a partir de las cuales se obtiene un conjunto de datos aumentado. Estas soluciones de referencia deben tener características similares a las llamas que se estudiarán experimentalmente en este trabajo.

A continuación se ofrece una breve descripción del código CoFlame. Este código aborda las ecuaciones de conservación de la masa, el momento, la energía, las fracciones de masa de las especies y las densidades numéricas de los agregados de hollín y las partículas primarias de forma totalmente acoplada y en coordenadas cilíndricas. La cinética química de la llama se modela utilizando el mecanismo DLR (*German Aerospace Center*) [68], mientras que la dinámica de las partículas de hollín, incluyendo su formación, crecimiento, contracción y movimiento, se aborda mediante un enfoque seccional fijo. Esto abarca procesos como la nucleación, el crecimiento superficial a través de la adición de carbono por abstracción de hidrógeno (*hydrogen-abstraction carbon-addition* o HACA) [69], condensación de hidrocarburos aromáticos policíclicos (*poly-cyclic aromatic hydrocarbons* o PAH), la oxidación, la fragmentación, la agregación de partículas y la termoforesis. Además, el código calcula las pérdidas radiativas tanto del hollín como de las especies gaseosas resolviendo la ecuación de transferencia radiativa mediante el método de ordenadas discretas en combinación con un modelo estadístico de banda estrecha correlacionada-k [70, 71].

En cuanto a la elección del mecanismo DLR para modelar la cinética química de la llama, se debe a que este fue diseñado especialmente para metano y etileno. Los estudios en el estado del arte

Tabla 3.1: Condiciones de llama para generar datos sintéticos usando Coflame y el quemador Yale.

Flame ID	C_2H_4 (cm ³ /min)	N_2 (cm ³ /min)	Air (L/min)	Height (mm)
Yale-32	80.28	170.59	98.36	25.8
Yale-40	100.35	150.52	98.36	32.0
Yale-60	150.52	100.35	98.36	51.0
Yale-80	200.69	50.17	98.36	74.7

que han adoptado el mecanismo DLR han mostrado buenas predicciones [33, 72].

Específicamente, el mecanismo DLR se basa en la descomposición de la llama en diferentes zonas o secciones para facilitar la simulación de la cinética química. Para este estudio se utilizaron 35 secciones basadas en estudios previos donde se evaluó la sensibilidad del número de secciones [33, 73]. Se realizaron evaluaciones usando 35 secciones para validar que la última sección esté vacía, es decir, que sea lo suficientemente amplio el rango de secciones para capturar todos los rangos de diámetros de partículas. Las especies químicas precursoras del hollín empleadas en las simulaciones de referencia corresponden a los tres PAHs más grandes del mecanismo: benzo[a]pyrene (BAPYR), secondary benzo[a]pyrenyl (BAPYR*S) y benzo(ghi)fluoranthene (BGHIF) [33].

La Figura 3.2 muestra simulaciones de los campos T_s y f_s de llamas canónicas generadas con el código CoFlame, junto con los campos simulados P_i obtenidos a través de las expresiones descritas en el Capítulo 2. Estas llamas corresponden a la llama tipo Yale, que se estudió mediante simulaciones y mediciones en el marco del *International Sooting Flame Workshop*, centrándose específicamente en la llama de co-flow 3 [74]. Esta configuración comparte su diseño básico con la llama de Gülder, utilizando un tubo central para el suministro de combustible y un tubo exterior para el aire, aunque difiere en dimensiones y composición del combustible. El tubo central tiene un diámetro de 4,0 mm y el tubo exterior de 77 mm. La mezcla de combustible comprende de un 32% a un 80% de etileno y de un 68% a un 20% de nitrógeno, respectivamente, y tanto el combustible como el aire se introducen a velocidades de 35 cm/s. Las condiciones utilizadas para las llamas canónicas se resumen en la Tabla 3.1 para un quemador Yale, donde el número en el ID de la llama representa la fracción molar de etileno en una mezcla con nitrógeno en la salida del tubo de combustible. La respuesta espectral considera una configuración óptica que incluye una cámara Basler acA2040-55uc equipada con una lente AF-S Nikkor 50mm.

En particular simulamos un dominio numérico conformado por 402 volúmenes de control (CVs) en la dirección axial (z) y 157 CVs en la dirección radial (r), refiriéndose a 17.13 y 3.41 cm, respectivamente, este dominio no es uniforme, dado que, tiene una resolución alta en la zona de llama para capturar los gradientes pronunciados, debido a reacciones químicas localizadas.

Específicamente, los campos T_s y f_s son suficientes para simular señales de intensidad de radiación (emisión) de la llama, que serían capturadas por una cámara. Las señales sintéticas emulan la propagación de señales a través del camino óptico, requiriéndose f_s para calcular la intensidad proyectada-capturada por la cámara a través del coeficiente de absorción. Además, usamos el campo f_s para determinar la geometría de la llama capturada por el sensor óptico.

3.1.2. Aumento del conjunto de llamas simuladas

En un escenario ideal, sería necesario generar un amplio conjunto de llamas simuladas que abarquen todas las posibles combinaciones de flujo para generar simulaciones numéricas. Sin embargo, debido al alto costo computacional requerido para generar una sola solución de referencia (dependiendo de la estación de trabajo, se requiere aproximadamente una semana de procesamiento por solución), se plantea realizar una etapa de aumento del conjunto de datos. Dado que entrenar algoritmos de ANNs requiere una cantidad considerable de datos, en el orden de miles de ejemplos de entrada y salida, estudios anteriores han propuesto el uso de entornos numéricos, los cuales sirven como base para este trabajo [31, 32]. En general, se podrían explorar diversos procesos para aumentar los datos basados en variaciones geométricas, manteniendo la estructura de la llama como requisito. Sin embargo, el objetivo principal de esta etapa es generar campos de propiedades locales en el plano de la llama y su

correspondiente proyección integrada en el plano de la cámara, estableciendo una relación entre estos campos mediante los modelos matemáticos descritos en el Capítulo 2. Por lo tanto, en este estudio se consideran suficientes las variaciones en la distribución de los campos, temperatura, concentración de hollín y la altura de la llama propuestos en el estado del arte. De este modo, durante la etapa de entrenamiento de las ANNs, el algoritmo aprende a resolver el problema inverso.

En esta etapa, manipulamos la solución CoFlame de referencia obtenida para generar un conjunto de datos que contenga un amplio rango de campos f_s y T_s . A pesar de que, en las llamas reales, ambos campos están intrínsecamente acoplados a través de la contribución de la emisión radiante de partículas sólidas de hollín [75], manipulamos las dos propiedades de forma independiente. Esta simplificación puede generar campos que son parcialmente representativos de las llamas reales; sin embargo, este enfoque facilita la generación de grandes conjuntos de datos que cubren amplios rangos de valores espacialmente correlacionados que se encuentran en las llamas canónicas, lo cual es un requisito clave para el entrenamiento de una ANN.

El procedimiento para aplicar variaciones estadísticas al campo T_s de la referencia CoFlame es una versión extendida del proceso de generación de datos sintéticos de f_s [31], las variaciones realizadas sobre los campos f_s y T_s nos permiten tener mediciones BEMI experimentales, este proceso se explica a continuación:

1. A partir de la solución T_s original, se realiza un mapeo de la región que encierra la llama, cubriendo entre 1.0 y 8,6 cm en z y 1.0 cm en r a un plano de simetría en una imagen de, 128×40 píxeles o $128(z) \times 40(r)$ CVs mediante interpolación bicúbica.
2. La altura de la llama se modifica a un nuevo valor $h_f^* = h_f \pm 3N_r$, donde N_r es un número aleatorio entre 0 y 1, y h_f es la altura de la llama original en centímetros (dependiendo de la solución de referencia, h_f toma los valores de altura reportados en la Tabla 3.1).
3. El campo T_s de referencia es re-escalado a una nueva temperatura de hollín máxima aleatoria que se distribuye entre 1650 y 2250 K para emular diferentes condiciones de llama que son generadas con distintas tasas de flujo y velocidad del combustible y oxidante. Los valores especificados para las modificaciones aleatorias en las propiedades de la llama, se seleccionan para abarcar las condiciones que representan aproximadamente el 90 % de la base de datos ISF-4 de llamas coflow [18, 39].
4. Se repiten los pasos del 1 al 3 para generar instancias adicionales de campos T_s sintéticos.

3.1.3. Proyección de llamas simuladas a mediciones BEMI

La Figura 2.2 ilustra el arreglo óptico y las variables utilizadas para estimar el campo de T_s en una llama CLAD usando BEMI con técnicas clásicas de deconvolución. Para entrenar los modelos de ANNs, se debe generar un conjunto de datos conformado con pares de campos de T_s obtenidos en el aumento de datos y sus correspondientes proyecciones 2D capturadas por la cámara $P_{\{R,G,B\}}$. Cada T_s tiene asociado un campo f_s en el conjunto de datos, estos campos son el punto de partida, cada campo f_s se computa para obtener el coeficiente de absorción de hollín κ_λ (asumido como conocido) a una longitud de onda λ , representado por el régimen de Rayleigh según la expresión (2.5). Seguidamente, usando el campo T_s relacionado con el campo f_s empleado anteriormente, se calcula la intensidad de radiación de cuerpo negro I_λ^{bb} que depende de T_s como lo establece la Ley de Plank (ver expresión (2.6)). Con estos campos se obtiene la emisión local de hollín a una longitud de onda dada J_λ computando la expresión (2.4). La cámara recibe una proyección 2D de la emisión local de hollín I_λ integrada a lo largo de la línea de vista (l), la intensidad de radiación de la llama captada por la cámara se muestra en la expresión (2.7).

El siguiente paso en la etapa de simulación de señales BEMI es resolver la integral descrita en la expresión (2.7) para obtener las emisiones espectrales de llama simuladas correspondientes I_λ . Nuestras simulaciones tienen en cuenta la auto-absorción en las señales proyectadas, ya que se puede extraer κ_λ a partir del campo f_s usando la expresión (2.5). Cuando se emplean sensores RGB, J_λ es integrada espectralmente sobre las longitudes de onda de detección en la cámara RGB y mapeadas a

los campos $P_{\{R,G,B\}}$, para generar estas señales proyectadas integradas espectralmente de banda ancha sintética, se realiza una integración de la expresión (2.12) sobre el espectro capturado por la cámara (380 a 700 nm) que incluye la sensibilidad global del arreglo óptico η_λ .

El procedimiento descrito anteriormente se repite para cada par de T_s / f_s en el conjunto de datos aumentado en la etapa anterior. Asimismo, cada arreglo óptico (cámara RGB, lente y filtro de corte de infrarrojos) para adquirir mediciones BEMI experimentalmente debe ser caracterizado en sus componentes para generar la curva de sensibilidad espectral η_λ . Por lo tanto, el conjunto de datos generado para el entrenamiento de los ANNs es específico para cada configuración experimental. Por lo que, para generar conjuntos de datos para un arreglo óptico determinado se debe caracterizar la respuesta del arreglo óptico (η_λ), con el fin de generar datos representativos del equipamiento de laboratorio. En el Apéndice A.2 se proporciona una descripción de la calibración de los instrumentos.

Las técnicas experimentales de EMI para la pirometría de hollín no requieren el conocimiento del coeficiente de absorción de hollín κ_λ relacionado directamente con f_s ; por lo tanto, se desprecia el término exponencial en la expresión (2.7). Sin embargo, los conjuntos de datos simulados sí incluyen los efectos de la auto-absorción en las señales proyectadas. Se espera entonces, que las ANNs sean capaces de capturar este efecto y corregirlo en sus estimaciones de temperatura del hollín.

3.2. Conjunto de datos para diseño de ANNs

El entorno numérico propuesto en [76] se utiliza para generar conjuntos de datos extensos de pares sintéticos de T_s y sus correspondientes proyecciones $P_{\{R,G,B\}}$ obtenidas a través de las ecuaciones en la Sección 2.3.1. Las simulaciones físicamente fundamentadas mostradas en la Figura 3.2 se utilizan como base para un proceso de aumento de datos que genera nuevas llamas incorporando variaciones aleatorias acotadas en la geometría de la llama y las distribuciones de hollín y temperatura. Generamos un total de 8000 pares de referencia para cada condición de llama descrita en la Tabla 3.1. Además, podemos agregar ruido gaussiano a las proyecciones $P_{\{R,G,B\}}$ para simular el ruido experimental observado en entornos de laboratorio. La Figura 3.3 muestra dos ejemplos de campos T_s generados a partir de cada solución convergente, junto con las correspondientes proyecciones al plano de la cámara. La mitad izquierda de las proyecciones muestra las proyecciones sin añadir ruido, y la mitad derecha muestra la misma proyección con ruido gaussiano con desviación estándar uniformemente distribuida entre 0% y 0.25% del valor máximo observado para el canal P_B .

Es importante mencionar que el enfoque de aumento de datos aplica modificaciones aleatorias acotadas a la geometría, los campos T_s y f_s de las soluciones convergentes de CoFlame, sin considerar el acoplamiento natural entre estos parámetros. En lugar de generar llamas individualmente precisas desde el punto de vista físico, el enfoque tiene como objetivo facilitar la generación rápida de conjuntos de datos arbitrariamente grandes que, en conjunto, sean estadísticamente representativos de las condiciones de llama que se pueden observar en una variedad de llamas laminares experimentales. Como referencia, la generación de cada solución convergente utilizando CoFlame llevó más de 150 horas de procesamiento en una estación de trabajo, entre tanto que el conjunto de datos aumentado de 8000 imágenes derivadas de la solución convergente tomó alrededor de 40 horas en una estación de trabajo equivalente.

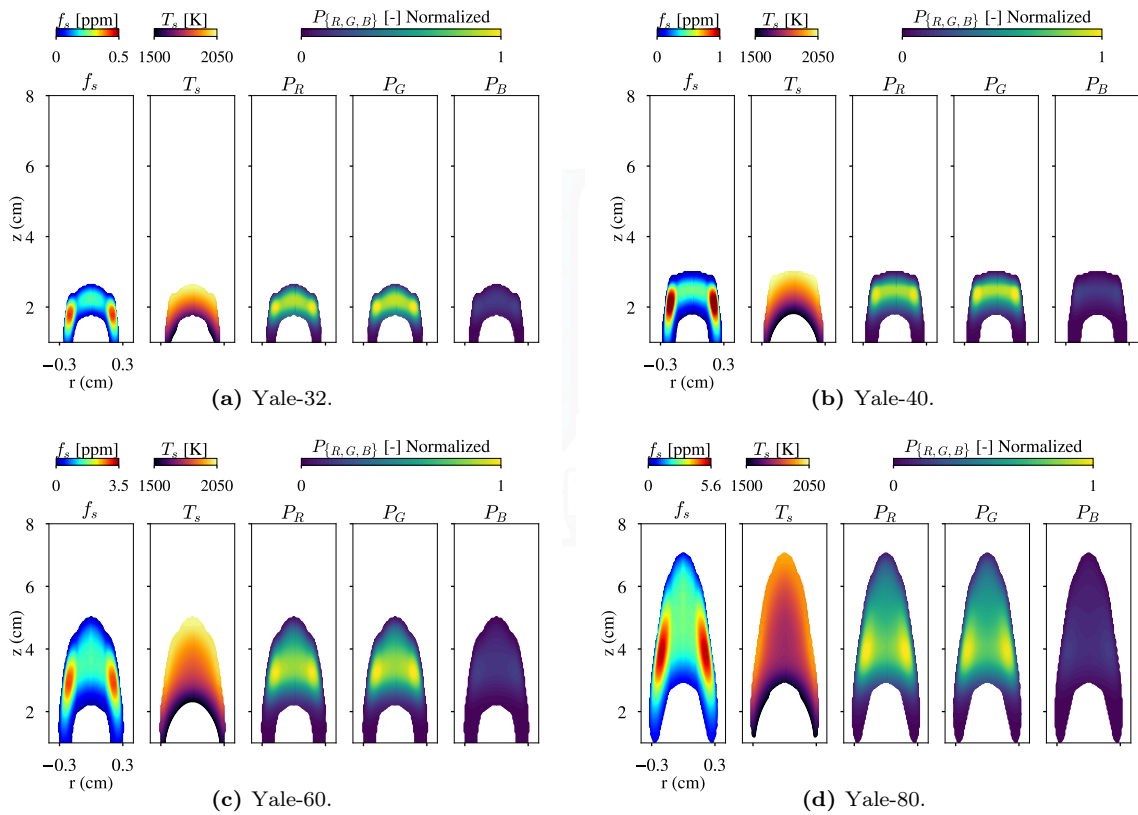


Figura 3.2: Soluciones de referencia para los campos de T_s y f_s en una llama CLAD de Yale utilizando CoFlame. La magnitud de la escala de colores para los campos de f_s de hollín se adaptó para cada caso con el fin de resaltar la distribución espacial del hollín en las diferentes configuraciones canónicas.

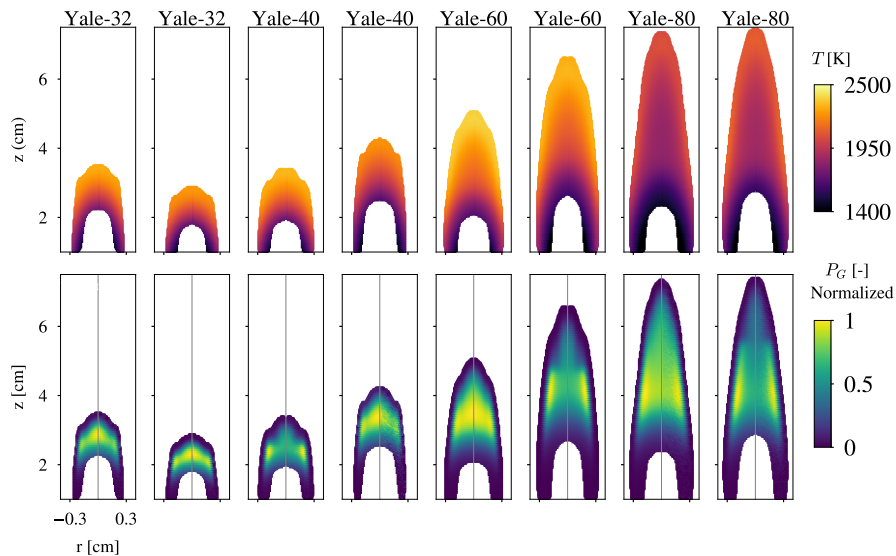


Figura 3.3: Ejemplos de campos de temperatura de hollín en el conjunto de datos aumentado y sus correspondientes señales emuladas capturadas por una cámara RGB.

3.3. Técnicas de aprendizaje automático

Los modelos de aprendizaje automático son algoritmos capaces de aprender a partir de un conjunto de datos estadísticamente representativos del comportamiento deseado [77]. En un entorno de aprendizaje supervisado, el algoritmo de aprendizaje automático adapta un conjunto de parámetros θ para obtener una función de mapeo f^* que relacione la entrada y la salida basada en ejemplos de pares etiquetados de entrada-salida que conforman el conjunto de entrenamiento. Formalmente, dado un conjunto de entrenamiento para alimentar al modelo $\{(\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{Y}^{(1)}), \dots, (\mathbf{X}^{(N)}, \mathbf{Y}^{(N)})\}$ de N pares de vectores de entrada $\mathbf{X}^{(i)}$ con su correspondiente salida deseada $\mathbf{Y}^{(i)}$, el objetivo general de un algoritmo de aprendizaje supervisado es encontrar un conjunto de parámetros θ que produzcan un buen predictor $\hat{\mathbf{Y}}^{(i)}$ para cada entrada, de modo que

$$\hat{\mathbf{Y}}^{(i)} = f^*(\mathbf{X}^{(i)}, \theta) \approx \mathbf{Y}^{(i)}, \quad \forall i = 1, \dots, N. \quad (3.1)$$

Las redes neuronales artificiales (ANNs) forman parte de la familia de algoritmos de aprendizaje automático, las cuales definen un grafo de unidades neuronales conectadas por pesos, y se entrenan para obtener una función de mapeo desde la entrada hasta la salida [78]. En síntesis, las ANNs son estructuras adaptativas que, dado un conjunto de ejemplos de pares de entrada y salida, pueden ajustar sus parámetros internos para modelar relaciones complejas de entrada-salida a través de un proceso de entrenamiento iterativo, sin necesidad de modelos explícitos de los fenómenos subyacentes.

En el contexto de este trabajo, se exploran diversas estructuras de *feed forward* ANNs, con un enfoque particular en las redes neuronales *fully-connected feed forward*, las redes convolucionales y la integración de mecanismos de atención en estructuras clásicas especializadas en el procesamiento de imágenes que se encuentran ampliamente descritas en la literatura. Por consiguiente, este capítulo no pretende ser exhaustivo, sino más bien ofrecer un panorama general y establecer las bases para el diseño inicial.

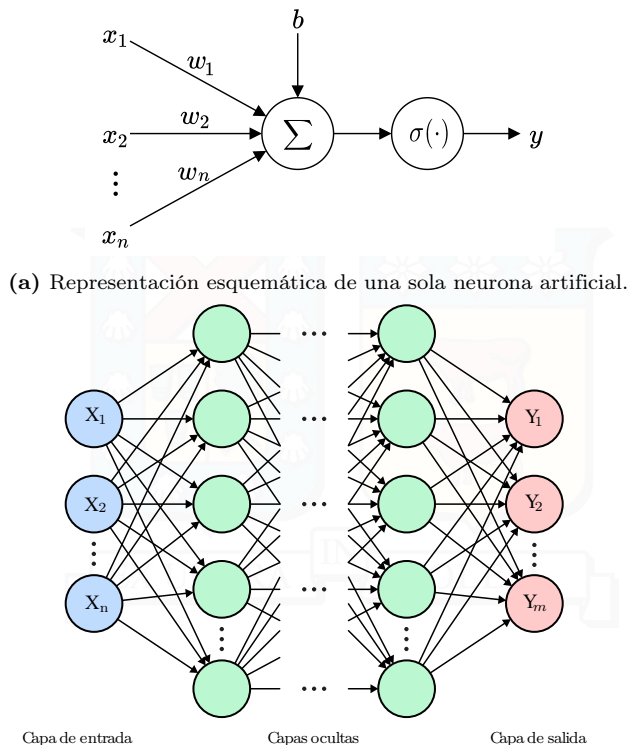
Los detalles sobre la implementación de las ANNs entrenadas y los datos de validación utilizados en los análisis reportados en los capítulos siguientes están disponibles bajo solicitud previa en <https://github.com/jorgeaportilla/ml4soot-temperature>.

3.3.1. Redes neuronales *fully-connected feed forward*

Las redes *feed forward* implementan un mecanismo que busca encontrar una función que mapea una entrada a una salida, aprendiendo el valor de los parámetros que resultan en la mejor aproximación entre los valores reales y los aproximados, como se ilustra en la expresión (3.1). Las redes *feed forward* se denominan así porque la información fluye desde la entrada a la salida sin conexiones de retroalimentación. Es decir, la información se direcciona a través de la función que se evalúa desde la entrada, a través de los cálculos intermedios utilizados para definir f^* y, finalmente, a la salida [79]. Asimismo, las redes neuronales *feed forward* suelen representarse mediante la combinación de varias funciones distintas, donde el modelo se describe como un grafo de unidades interconectadas que muestran cómo se componen estas funciones.

Un tipo de red *feed forward* son las redes neuronales *fully-connected feed forward*, también conocidas como perceptrones multicapa o MLP. Esta arquitectura está compuesta por:

- Unidades de procesamiento llamadas neuronas, las cuales se agrupan en capas.
- Capas de entrada, ocultas y de salida. La capa de entrada recibe los datos, las capas ocultas realizan cálculos intermedios a fin de aprender características importantes de los datos, y la capa de salida produce los resultados finales de la red neuronal.
- Pesos \mathbf{w} que definen las conexiones entre las capas de una red, y se ajustan para realizar mapeos de entrada y salida complejos [78].
- Un sesgo b por capa para modelar funciones que no necesariamente pasan por el origen.



(b) Estructura generalizada de una red *feed forward* conformada por una capa de entrada (círculos azules), capas ocultas (círculos verdes) y capa de salida (círculos rojos). Donde n y m corresponden a las dimensiones de los vectores de entrada y salida, respectivamente.

Figura 3.4: Estructura generalizada de una red MLP y la representación esquemática de una sola neurona artificial.

- Funciones de activación $\sigma(\cdot)$ para modelar no linealidades, por ejemplo, ReLU, sigmoid, tangente hiperbólica, entre otras.
- La Figura 3.4a muestra el diagrama de una única neurona artificial que calcula su salida y aplicando una función de activación $\sigma(\cdot)$ al producto punto entre el vector de entrada $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$ y los pesos de la neurona $\mathbf{w} = [w_1, \dots, w_n]^T$ más un sesgo b , como se muestra en la siguiente expresión:

$$y = \sigma(\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b). \quad (3.2)$$

Como se mencionó anteriormente, las señales se propagan desde la capa de entrada hasta la capa de salida, pasando por varias capas intermedias ocultas. Durante este proceso, se calcula la salida de cada neurona en la red. Este procedimiento se conoce como el *forward pass*.

La Figura 3.4b muestra la estructura generalizada de una red MLP conformada por una capa de entrada (círculos azules), capas ocultas (círculos verdes) y capa de salida (círculos rojos). En esta representación, n y m denotan las dimensiones de los vectores de entrada y salida, respectivamente. Las neuronas suelen agruparse en capas que forman estructuras adaptativas complejas y versátiles, donde todas las neuronas en una capa suelen usar la misma función de activación. Por otra parte, el número de capas ocultas y el número de neuronas en cada capa oculta se determinan generalmente empíricamente o mediante algoritmos de búsqueda de hiperparámetros, teniendo en cuenta la complejidad del modelo y el tamaño del conjunto de datos de entrenamiento [35, 80].

Para entrenar la red, se requiere definir una función de pérdida $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta})$ que cuantifique el costo de seleccionar un conjunto de parámetros $\boldsymbol{\theta} = [\mathbf{W}, \mathbf{b}]$ (donde \mathbf{b} es un vector con los sesgos de todas las capas) para todas las neuronas del modelo. La elección de la función de costo depende del tipo de problema abordado. Generalmente, se dividen en dos tipos: clasificación y regresión. En clasificación, la

red aprende a asignar clases a los datos de entrada, mientras que en regresión, hace predicciones de valores numéricos continuos.

La tarea de reconstruir los campos de temperatura del hollín a partir de imágenes puede modelarse como un problema de regresión. Comúnmente, se emplea el error cuadrático medio (*Mean Square Error* o MSE) como función de costo en problemas de regresión debido a que penaliza de manera significativa los errores grandes. Por lo tanto, se utiliza el MSE para N ejemplos de entrenamiento, definido como:

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) = \text{MSE}(\hat{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}; \boldsymbol{\theta}), \mathbf{Y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|\hat{\mathbf{Y}}^{(i)} - \mathbf{Y}^{(i)}\|^2, \quad (3.3)$$

que cuantifica el cuadrado de la diferencia media entre la salida correcta y la salida predicha por la arquitectura de red (que define el conjunto de parámetros $\boldsymbol{\theta}$) sobre un conjunto de datos.

Para entrenar la red después de definir su estructura y la función de costo. Dado un valor inicial $\boldsymbol{\theta}_0$, para cada paso de entrenamiento k , el algoritmo de aprendizaje realiza el *forward pass* con todos los ejemplos de entrenamiento para obtener el valor actual de $\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}_k)$. Seguidamente, en el *backward pass*, cada parámetro se actualiza en la dirección que minimiza la función de pérdida según

$$\theta_{i,k+1} = \theta_{i,k} - \eta \frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}_k)}{\partial \theta_{i,k}}, \quad \forall \theta_i \in \boldsymbol{\theta}, \quad (3.4)$$

donde $\eta \in \mathbb{R}$ corresponde a la tasa de aprendizaje. El proceso de determinar cada derivada parcial en el grafo computacional es una aplicación directa de la regla en cadena para la derivación conocido como algoritmo de *back-propagation* [81]. El aprendizaje suele detenerse cuando las iteraciones adicionales sobre el conjunto de entrenamiento no generan reducciones significativas en la función de costo. En la literatura, se ha reportado que encontrar la derivada parcial $\frac{\partial \mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}_k)}{\partial \theta_{i,k}}$ puede introducir problemas como el gradiente que explota o se desvanece en redes muy profundas [82, 83]. Por lo tanto, se han propuesto distintos enfoques y técnicas para mitigar este problema. Principalmente, destacan los enfoques para la inicialización de pesos en las redes, la correcta elección de funciones de activación, los métodos de optimización avanzados y el desarrollo de arquitecturas avanzadas como las redes residuales, que se abordarán brevemente en la siguiente sección [84, 85].

En resumen, las redes MLP se presentan como una opción atractiva para abordar problemas que demanden flexibilidad y habilidad para modelar relaciones complejas en los datos. Sin embargo, su aplicación en contextos donde se requiere aprovechar la estructura espacial de campos 2D, como en el caso de la pirometría de hollín abordada en este trabajo, puede generar discontinuidades en los campos inferidos al procesar información a nivel de perfiles horizontales.

En la siguiente sección, se describen brevemente las CNNs, las cuales son un tipo especializado de red *feed forward*. A su vez, estas redes han demostrado ser eficientes en la realización de tareas de análisis de imágenes y en problemas que requieren coherencia espacial. Además, tienen una amplia gama de aplicaciones en el reconocimiento de objetos, clasificación y segmentación de imágenes.

3.3.2. Redes Neuronales Convolucionales

Las CNNs consisten en múltiples capas que aplican una operación de convolución para extraer características de los datos de entrada. Esta estructura difiere de las redes *fully-connected feed forward* en cuanto a la operación realizada en cada capa. Las capas convolucionales sustituyen la operación de producto punto utilizado en las capas de las redes *feed forward* o MLP por un operador de convolución 2D entre un filtro aprendido o kernel $g(u, v)$ y la matriz 2D de entrada $h(u, v)$. El operador de convolución 2D obtenido entre $g(u, v)$ y $h(u, v)$ se define como [80]:

$$h(u, v) * g(u, v) = \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} h(n_1, n_2) g(u - n_1, v - n_2), \quad (3.5)$$

donde u y v corresponden a las coordenadas espaciales.

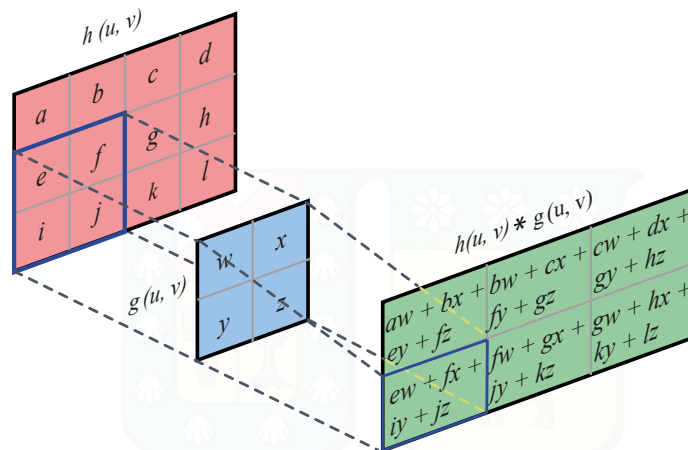


Figura 3.5: Ejemplo de una operación de convolución 2D.

La Figura 3.5 muestra un ejemplo de operación de convolución 2D, una representación adaptada de [79]. Las capas convolucionales, se aplica una operación de convolución en subregiones de $h(u, v)$ de acuerdo al tamaño de $g(u, v)$, el cual no excede las dimensiones de $h(u, v)$. Durante el entrenamiento, se utiliza un conjunto de datos para aprender los valores de $g(u, v)$ que sean adecuados para extraer características relevantes de los datos de entrada. La salida final se obtiene deslizando el kernel para cubrir toda la matriz de entrada. Cada capa convolucional suele contener más de un kernel con pesos aprendidos para extraer diferentes conjuntos de características útiles de la entrada, generando tantas salidas (denominadas *feature maps* o canales) como kernels haya en la capa convolucional. Los kernels son matrices que agrupan los pesos, los cuales, se aplican por medio de una operación de convolución.

Se considera que las CNNs son invariantes a la traslación, debido a la operación de convolución, que permite extraer características compartidas mediante el desplazamiento del kernel sobre $h(u, v)$. Este proceso facilita el compartir pesos entre características, lo que implica que cualquier patrón relevante identificado en una sección de la imagen o datos de entrada puede ser aprovechado nuevamente en otra sección de $h(u, v)$. Por consiguiente, la red puede identificar un patrón específico independientemente de su ubicación, ya sea en el borde o en el centro de una imagen.

Las capas convolucionales se suelen combinar con capas de *pooling*, las cuales realizan una operación de submuestreo para reducir la dimensionalidad de la entrada. Específicamente, las capas de *Max Pooling* son ampliamente utilizadas. Estas capas seleccionan el valor máximo dentro de una vecindad de píxeles, lo que permite que las CNN sean robustas ante cambios en la escala y tener una buena tolerancia al ruido [79].

Algunos estudios han señalado que al utilizar CNNs muy profundas, el riesgo de enfrentar problemas como el desvanecimiento o la explosión del gradiente aumenta a medida que aumenta la cantidad de capas [86]. Durante el entrenamiento de redes neuronales muy profundas, especialmente en la etapa de *backward pass*, pueden surgir dificultades en la actualización de los pesos, especialmente en las capas más profundas, donde los gradientes pueden decrecer o crecer exponencialmente. Para mitigar este problema, se han introducido las *skip connections* o conexiones residuales [87], las cuales añaden saltos entre capas para permitir el flujo de información durante el entrenamiento. En este sentido, arquitecturas clásicas basadas en CNNs como U-Net emplean este tipo de conexiones residuales.

Recientemente, en el ámbito del aprendizaje automático, se han introducido mecanismos de atención para abordar desafíos presentes en el procesamiento del lenguaje natural, trabajando en conjunto con redes recurrentes [88]. Posteriormente, se han incluido mecanismos de atención en las

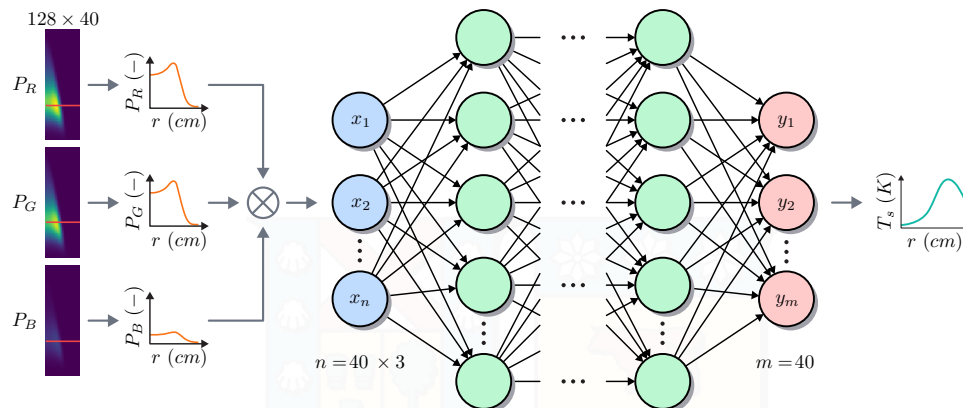


Figura 3.6: Arquitectura MLP para regresión lineal a línea de T_s . En este caso particular la entrada de datos es formada por la concatenación de las filas extraídas desde los campos $P_{\{R,G,B\}}$ a una altura de $z = z_0$. La MLP se conforma de una capa de entrada (círculos azules), múltiples capas ocultas (círculos verdes) y una capa de salida (círculos rojos).

CNNs con el fin de capturar detalles finos y permitirles enfocarse en regiones específicas de la entrada. La integración de mecanismos de atención en las arquitecturas CNNs se basa en el concepto de que ciertas partes de una imagen pueden ser más importantes que otras para resolver una tarea específica. Lograr que la red se enfoque en regiones específicas se lleva a cabo asignando pesos adaptativos a diferentes partes de la imagen. El mecanismo de atención pondera distintas partes de la imagen, asignando pesos mayores a las partes relevantes y pesos menores a las partes menos relevantes, y puede entrenarse utilizando el algoritmo de *back-propagation* [89].

Los resultados presentados en esta tesis en los capítulos siguientes se basan en el uso de dos arquitecturas de CNN y una arquitectura de red *fully-connected feed forward* (en el resto del documento llamada MLP). Se emplea una U-Net clásica y una U-Net que incorpora un mecanismo de atención, conocida como Attention U-Net.

3.4. Pirometría de hollín basada en señales BEMI y ANNs

Después de establecer la base teórica y proporcionar una visión general de las ANNs, esta sección presenta el diseño e implementación de diversas estructuras de ANNs desarrolladas para llevar a cabo la pirometría de hollín mediante el uso de llamas CLAD. Se presentan tres estructuras genéricas de ANN diseñadas e implementadas para la pirometría de hollín, con adaptaciones específicas para los datos de entrenamiento utilizados. Específicamente, se describen las arquitecturas MLP y U-Net, junto con la introducción de la arquitectura Attention U-Net para el diagnóstico de la combustión.

3.4.1. Pirometría de hollín usando MLP

La Figura 3.6 muestra una representación de una MLP conformada por una capa de entrada (círculos azules), capas ocultas (círculos verdes) y capa de salida (círculos rojos). El modelo MLP recibe como entrada un perfil radial de una sola línea de las proyecciones P_R , P_G y P_B a cierta altura sobre la salida del quemador (marcado con una línea horizontal en la Figura 3.6). Como se indica en la Sección 3.1, en nuestra configuración los perfiles radiales tienen 40 píxeles de ancho. Los tres perfiles se concatenan para formar un vector de 120 píxeles que se alimenta a la capa de entrada. La red propaga las entradas a través de varias capas ocultas completamente conectadas hasta llegar a la capa de salida que genera un vector de 40 píxeles que representa el perfil de temperatura correspondiente recuperado de las proyecciones integradas. Se puede construir un campo de temperatura 2D ensamblando los resultados para cada perfil horizontal en una imagen.

Los conjuntos de datos descritos en la Sección 3.2 están conformados por pares de campos de

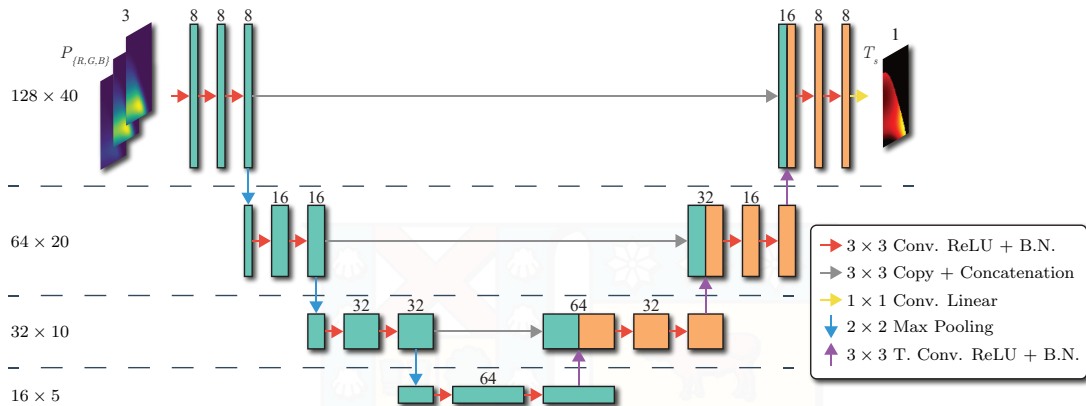


Figura 3.7: Arquitectura U-Net modificada. Las operaciones se representan como flechas y el resultado después de cada operación se representa como un cuadro con su número de mapas de características en la parte superior para la ruta de expansión (verde azulado) y la ruta de contracción (naranja). El ancho y la altura de los canales en cada etapa se muestran a la izquierda.

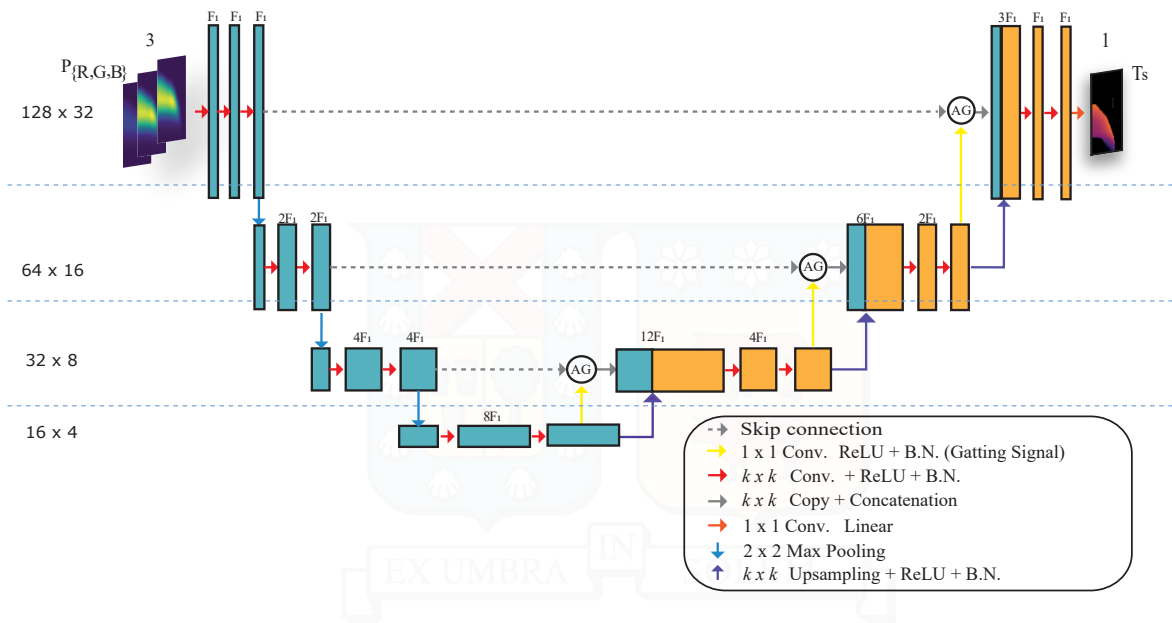
temperatura 2D de referencia, junto con sus correspondientes proyecciones ruidosas al plano de la cámara para una configuración experimental. Cada campo 2D se desmonta en filas para formar un conjunto de vectores 1D independientes (ver Figura 3.6). Se consideran solo los perfiles radiales que contienen información de la llama, descartándose las filas que contienen solo información de fondo. Esto da como resultado un conjunto de datos de alrededor de 245000 perfiles de una sola línea (el número puede variar según las variaciones estadísticas en la geometría de la llama entre las muestras), de los cuales extraemos 100 pares (aproximadamente 12500 perfiles de una sola línea) como conjunto de prueba y dividir el restante en 80 % para entrenamiento y 20 % para validación. Seguidamente, especificamos una configuración típica con todas las neuronas en las capas ocultas usando la misma función de activación $\text{ReLU}(x) = \max\{0, x\}$ [90], y la capa de salida usando una función de activación lineal.

3.4.2. Pirometría de hollín usando U-Net

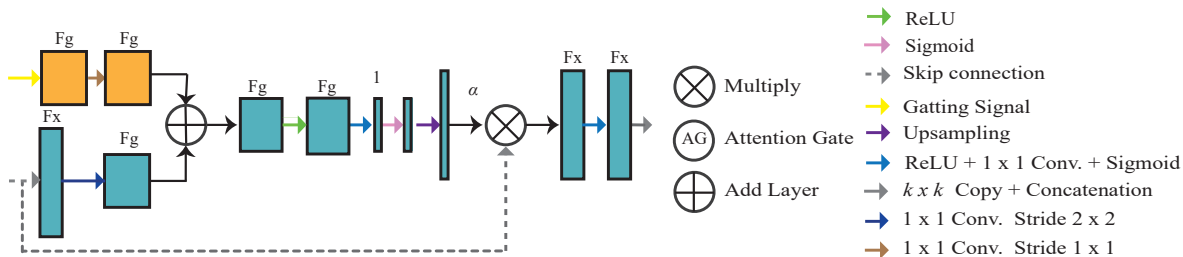
La Figura 3.7 muestra una representación de alto nivel de una CNN basada en la arquitectura U-Net [91] adaptada para realizar pirometría de hollín usando señales BEMI. La arquitectura U-Net recibe un solo tensor de dimensiones $128 \times 40 \times 3$ (correspondiente a la concatenación de las proyecciones $P_{\{R,G,B\}}$) y arroja como resultado directamente una imagen de 128×40 con los campos de temperatura correspondientes.

U-Net implementa una arquitectura de codificador/decodificador con una ruta de contracción y expansión que forma un gráfico simétrico en forma de U. La ruta de contracción filtra y reduce la dimensión (*downsampling*) progresivamente de los mapas de características extraídos de las imágenes de entrada. La ruta de contracción consta de múltiples etapas de *downsampling* que operan en versiones cada vez más pequeñas de los mapas de características extraídos. Después de una primera capa convolucional, cada etapa contiene dos capas convolucionales de tamaño de kernel 3×3 (flechas rojas) seguidas de un operador 2×2 *Max Pooling* (flechas azules) que reduce el tamaño de su entrada a la mitad. El número de filtros en la capa convolucional se duplica en cada etapa. Después de la última capa convolucional en la ruta de contracción, la información importante se integra y comprime desde la imagen de entrada para obtener características de alto nivel.

La ruta de expansión incrementa progresivamente la dimensión (*upsampling*) de los mapas de baja dimensión mientras integra características extraídas a diferentes escalas. Las flechas moradas representan operaciones de *upsampling* que duplican las dimensiones de los tensores de entrada. La ruta de expansión consta de varias etapas de *upsampling* formadas por una capa de convolución transpuesta (flechas moradas) que generan una versión muestreada de su entrada y reducen el número de filtros a la



(a) Arquitectura Attention U-Net.



(b) Compuerta de atención. F_g y F_x corresponden al número simbólico de filtros de la señal de control y la skip connection, respectivamente.

Figura 3.8: Arquitectura Attention U-Net propuesta para la pirometría de color de hollín óptico de banda ancha. Las flechas simbolizan operaciones y los recuadros representan la salida de cada operación. Los recuadros en tono verde azulado representan las salidas de la ruta de contracción, mientras que los recuadros naranjas representan las salidas de la ruta de expansión. F_i y k se refieren al número de filtros y al tamaño de los núcleos, respectivamente.

mitad. La salida de la operación de muestreo ascendente se concatena con los mapas de características correspondientes de la etapa de coincidencia en la ruta de contracción (flechas grises) y luego se filtra a través de dos capas convolucionales de tamaño de núcleo 3×3 (flechas rojas). Al final de la ruta de expansión, usamos una capa convolucional 1×1 de un filtro y una función de activación lineal para condensar la información de todos los filtros en la predicción final para T_s (flecha amarilla). El resto de las capas convolucionales utilizan la función de activación de ReLU con un paso adicional de *batch normalization*.

3.4.3. Pirometría de hollín usando Attention U-Net

Attention U-Net es una CNN que utiliza la estructura original de U-Net como base, integrando compuertas de atención para combinar niveles gruesos y finos de mapas de características extraídos a múltiples escalas. Se espera que las compuertas de atención mejoren la identificación de características relevantes del espacio de entrada durante el proceso de entrenamiento, lo que conduce a una mejor generalización y tolerancia al ruido del modelo entrenado [89].

La Figura 3.8a muestra la estructura de la Attention U-Net propuesta, adaptada de [89]. La

red recibe un tensor de dimensiones $128 \times 32 \times 3$ y genera secuencias de mapas de características (*feature maps*) a través de una ruta de contracción (mitad izquierda) y una ruta de expansión (mitad derecha) con múltiples etapas que forman un gráfico simétrico en forma de U. En la figura, los recuadros representan *feature maps* y las flechas representan operaciones sobre los mapas. Los números a la izquierda indican la dimensión de los mapas procesados en cada etapa. La altura y anchura de los recuadros representan la dimensión relativa de los mapas y el número de mapas, respectivamente. La red produce como salida el campo de temperatura de hollín predicho de 128×32 .

Las flechas rojas representan operaciones de convolución utilizando núcleos entrenables de dimensión $k \times k$ y activación ReLU. La primera etapa comienza aplicando una convolución a los campos de entrada, generando F_l mapas de características, que se procesan aún más a través de una secuencia de dos convoluciones seguidas de un operador de *Max Pooling* de 2×2 (flecha azul) que reduce a la mitad las dimensiones de los mapas. Los mapas obtenidos después del *downsampling* alimentan a la siguiente etapa, que también aplica una cadena de dos convoluciones y una etapa de *downsampling*, cada uno generando el doble de filtros utilizados en la etapa anterior. El proceso se repite hasta alcanzar una dimensión suficientemente pequeña para los *feature maps*.

Cada etapa de expansión comienza concatenando los mapas obtenidos después de la etapa de *upsampling* alimentados desde la etapa anterior con un tensor generado a partir de una Attention Gate que combina características de las etapas de contracción y expansión. El tensor concatenado se procesa aún más mediante dos convoluciones seguidas de una activación ReLU. Al final de la ruta de expansión, una convolución 1×1 con activación lineal condensa la información de todos los filtros para generar el campo final de T_s .

La Figura 3.8b muestra la estructura interna de los bloques AG (Attention Gate). El bloque AG recibe un mapa de características de la *skip connection* (flecha gris) y una señal de compuerta de la etapa de aumento de muestreo anterior (gating signal), y genera un nuevo mapa de características escalando la entrada con coeficientes $\alpha \in [0, 1]$ obtenidos a partir de una serie de convoluciones con parámetros entrenables y operaciones de cambio de tamaño (para más detalles, consultar [89]). Durante el entrenamiento, los coeficientes de atención se ajustan para resaltar y suprimir diferentes características con el objetivo de mantener solo las activaciones relevantes para una tarea específica. En este caso, la red se entrena para reducir el error al mapear las mediciones P_i a los campos correspondientes de T_s en un conjunto de datos de entrenamiento.

Los resultados reportados por los autores de Attention U-Net muestran que el modelo entrenado tiene la capacidad de enfocarse en estructuras de diferentes tamaños y formas, resaltando características significativas que son valiosas para una tarea particular. Por lo que se han realizado aplicaciones en diferentes ámbitos científicos. En este trabajo se evalúa Attention U-Net para recuperar campos de temperatura de hollín a partir de señales de emisión de banda ancha.

3.5. Entrenamiento de las ANNs

Las ANNs descritas en la Sección 3.4 se implementaron utilizando la API de Keras. La estructura óptima de la red suele determinarse a través de un proceso iterativo para explorar una configuración adecuada de hiperparámetros que dependerán del conjunto de datos de entrenamiento. Para cada ejecución de entrenamiento, utilizamos Raytune [35] para encontrar la mejor configuración de los hiperparámetros, considerando un espacio de búsqueda para el número de filtros F_l que va desde 8 hasta 32, y el tamaño del kernel k que varía de 3 a 8. Además, la tasa de *dropout* varía de 0.0 a 0.3, y la tasa de aprendizaje varía desde 10^{-5} hasta 10^{-3} . El tamaño de las operaciones de *pooling* y el número de etapas permanecen fijos. Para el entrenamiento, utilizamos el optimizador *adaptive moment estimation* (Adam) [92] y establecemos el error cuadrático medio (MSE) multidimensional como la función de costo. La Tabla 3.2 muestra un resumen del dominio de búsqueda de hiperparámetros para Att. U-Net, U-Net y MLP. El dominio de búsqueda de los hiperparámetros se estableció de manera arbitraria para abarcar un rango representativo que permitiera explorar diversas configuraciones. Específicamente, se consideraron los hiperparámetros utilizados en estudios anteriores como punto de

Tabla 3.2: Dominio de búsqueda de hiperparámetros para MLP, U-Net y Att. U-Net.

	Hiperparámetros	Dominio
U-Net y Att. U-Net	Número de filtros	$[8, 32] \in \mathbb{Z}$
	Tamaño de kernel	$[3, 8] \in \mathbb{Z}$
MLP	Cantidad de neuronas	$[100, 1000] \in \mathbb{Z}$
	Cantidad de capas Feed Forward	$[1, 5] \in \mathbb{Z}$
General	Dropout	$[0.0, 0.3] \in \mathbb{R}$
	Tasa de aprendizaje	$[0.00001, 0.001] \in \mathbb{R}$

partida [31]. Seguidamente, se llevó a cabo una búsqueda inicial mediante un enfoque basado en prueba y error de algunas combinaciones arbitrarias para establecer un dominio de búsqueda adecuado. Los hiperparámetros obtenidos para las distintas instancias de arquitecturas de ANNs se definen para cada conjunto de datos de entrenamiento. En el Apéndice C, se reportan los valores de hiperparámetros utilizados en los experimentos mostrados en los siguientes capítulos.

Los conjuntos de datos descritos en la Sección 3.2, tienen un total de 8000 pares de referencia para cada condición de llama descrita en la Tabla 3.1. En cuanto a la elección del tamaño del conjunto de entrenamiento para cada arquitectura de ANN empleada, se siguió un procedimiento basado en la heurística a fin de determinar un valor adecuado, como se muestra en el Apéndice B. En el caso de las instancias de MLP, se determinó utilizar 2500 pares de campos de temperatura 2D de referencia, junto con sus correspondientes proyecciones ruidosas al plano de la cámara. En el caso de las arquitecturas CNN, se determinó emplear, por condición de llama el total de ejemplos disponibles. Por consiguiente, para las instancias entrenadas con conjuntos de datos que requieran la integración de múltiples condiciones de llama, se añade el mismo número de ejemplos por condición. Antes de suministrar los datos para la etapa de entrenamiento, los campos P_i se normalizan a la intensidad más alta en el conjunto de datos, de modo que los valores oscilan entre 0 y 1.

Durante el entrenamiento de las redes, ya sea con un conjunto de datos específico para una condición de llama o con un conjunto conformado por múltiples condiciones, separamos 100 pares para pruebas y dividimos el resto en un 80-20% para entrenamiento y validación, respectivamente. A continuación, se detallan las características de cada partición:

- El conjunto de entrenamiento contiene los ejemplos utilizados en el proceso de entrenamiento iterativo que ajusta los parámetros internos de la red para una arquitectura de red fija. Este conjunto debe ser lo suficientemente extenso como para ser estadísticamente representativo de todo el espacio de entrada.
- El conjunto de validación se utiliza para evaluar el rendimiento de la red después de un ciclo de entrenamiento. La evaluación del conjunto de validación puede proporcionar información para ajustar los hiperparámetros de la red si es necesario. Después de realizar los ajustes en los hiperparámetros, se debe llevar a cabo una nueva pasada de entrenamiento.
- El conjunto de prueba contiene muestras que no se utilizaron durante el diseño ni el entrenamiento de la red. Este conjunto se emplea para evaluar el rendimiento una vez que ha finalizado el entrenamiento y el diseño de la arquitectura de la red.

4 | Validación numérica usando datos simulados

En este capítulo, se lleva a cabo una validación numérica de la metodología propuesta, comparando los resultados obtenidos mediante el uso de datos simulados para estimar la temperatura del hollín en llamas CLAD. La disponibilidad de datos simulados generados por el entorno numérico descrito en el capítulo anterior, que proporciona las señales proyectadas al plano de la cámara y su correspondiente groundtruth de T_s , permite realizar análisis cuantitativos detallados.

Se comparan los resultados de las metodologías ópticas clásicas con el método propuesto. Específicamente, se evalúa la capacidad de las ANNs para generalizar y predecir el campo T_s a partir de mediciones sintéticas de $P_{\{R,G,B\}}$, después de entrenar el modelo con distintos subconjuntos de datos aumentados de distintas condiciones experimentales. El propósito de las evaluaciones realizadas en este capítulo, empleando datos simulados, es establecer un punto de referencia para posteriormente evaluar el enfoque propuesto utilizando datos adquiridos en campañas experimentales. En cuanto a todos los experimentos descritos en este capítulo, recortamos la región en los campos T_s donde su correspondiente campo de f_s es superior a un umbral de 0.1 ppm.

4.1. Validación de la metodología mediante una sola llama canónica

Antes de evaluar la generalización del enfoque propuesto para realizar pirometría de hollín utilizando medidas BEMI, primero validamos la metodología siguiendo un procedimiento similar al presentado en [63], entrenando diferentes modelos de ANNs utilizando únicamente datos aumentados derivados de la llama canónica Yale-60 y evaluando después el error en T_s al procesar la llama original Yale-60 (no incluida en el subconjunto de entrenamiento) con los modelos entrenados.

La Figura 4.1 compara los errores de reconstrucción de T_s para la solución CoFlame Yale-60 utilizando diferentes técnicas, incluyendo MAE clásico y BEMI con OP y regularización de Tikhonov (en el resto del documento como BEMI-OP), y modelos ANN basados en MLP, U-Net, y la arquitectura Attention U-Net propuesta. Como métrica de referencia del error global para todo el campo 2D, el error cuadrático medio (*root mean squared error* o RMSE) obtenido de la comparación de píxel a píxel con el groundtruth se reporta en cada subgráfico. El campo de temperatura recuperado con la técnica MAE proporciona un punto de comparación para evaluar la precisión de los campos recuperados a partir de señales de solo emisión, en comparación con los obtenidos mediante configuraciones y procesamientos experimentales más complejos.

Aplicamos los procedimientos estándar para ajustar los parámetros necesarios para cada técnica, incluido el parámetro de regularización en las técnicas basadas en OP y los hiperparámetros en los modelos ANN (ver Apéndice C). Para las técnicas MAE y BEMI-OP, ajustamos el parámetro de regularización para lograr un equilibrio entre la suavidad y la precisión de los campos recuperados [31]. Para cada subgráfico, la mitad izquierda muestra la estimación cuando se utilizan mediciones proyectadas que no están sujetas a ruido y la mitad derecha cuando las proyecciones contienen ruido gaussiano.

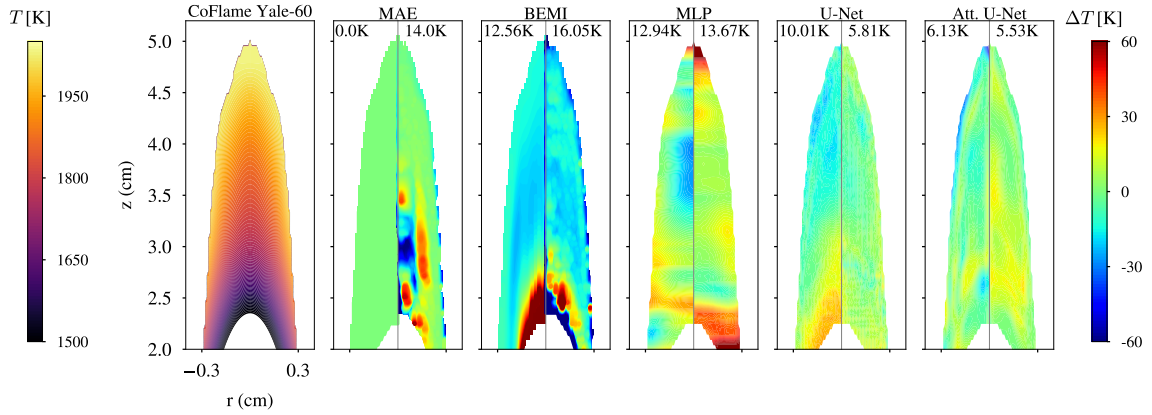
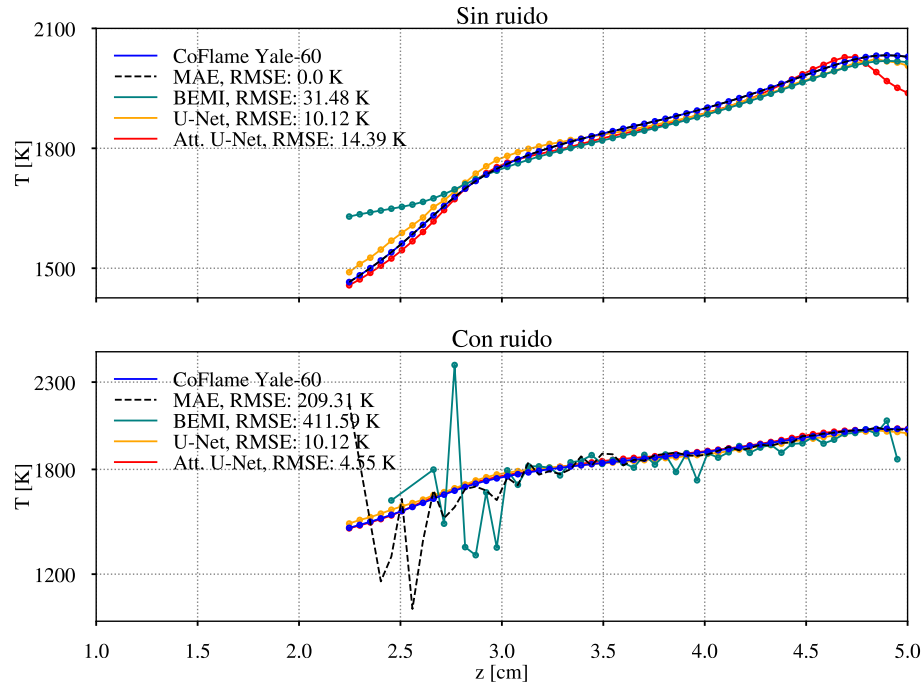


Figura 4.1: Yale-60 de referencia y sus correspondientes predicciones utilizando técnicas clásicas de pirometría de hollín y modelos de ANN. En cada caso se reporta el RMSE para todo el campo 2D obtenido de la comparación de píxel a píxel entre groundtruth y la estimación obtenida por los modelos ANN.

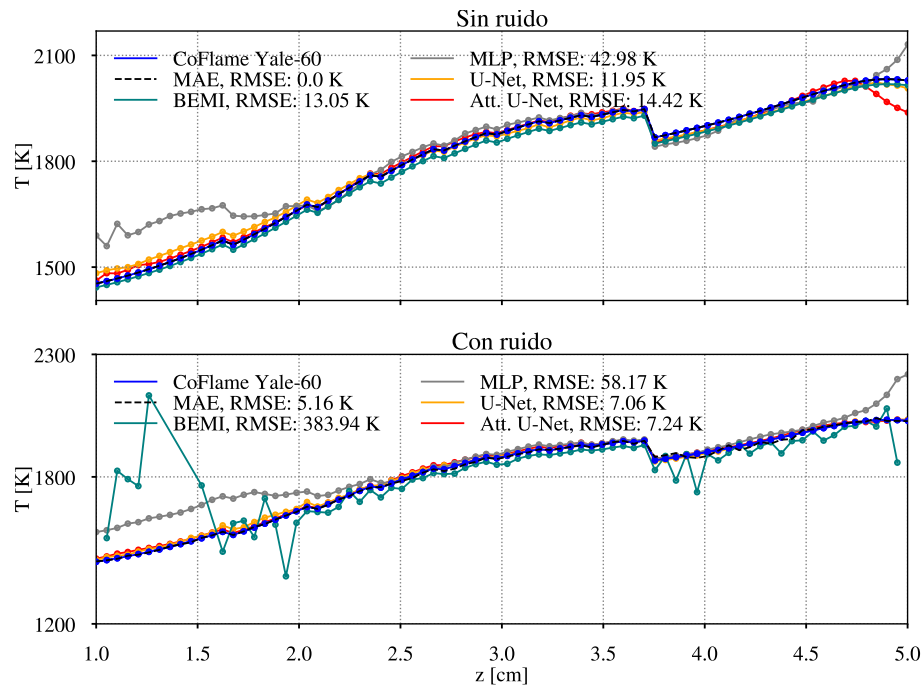
El ruido gaussiano se agrega en las señales proyectadas con el fin de emular la incertidumbre de las mediciones experimentales. La varianza del ruido para este ejemplo es 0.25 % de $\hat{P}_{B,\max}$ (ver Sección 3.2).

Para cada ANN se obtuvieron diferentes modelos entrenados con proyecciones limpias y con proyecciones ruidosas utilizando RayTune (ver Apéndice C). Como era de esperar, la técnica MAE-OP, la cual se basa en equipos adicionales para estimar el coeficiente de absorción e incorporarlo al modelo inverso, puede reconstruir perfectamente el campo de referencia. Por otro lado, el modelo clásico utilizado para BEMI-OP con deconvolución explícita presenta una subestimación de la temperatura asociada a la omisión del coeficiente de absorción en el camino óptico [19]. Tanto MAE-OP como BEMI-OP son sensibles al ruido y presentan mayores errores al procesar señales ruidosas, lo cual es un inconveniente bien conocido de los métodos numéricos iterativos para la resolución del problema inverso. En consecuencia, observamos una clara degradación en la suavidad y precisión de los T_s predichos con ambas técnicas. En particular, el ruido en el proceso numérico de MAE genera discontinuidades en el eje vertical de T_s , que están particularmente marcadas a lo largo de la línea central de la llama. BEMI-OP es menos sensible al ruido que MAE, y también es posible aumentar el factor de regularización para obtener un perfil más suave; sin embargo, esto suele tener el costo de una menor precisión [15]. Por el contrario, ambas ANN demuestran resiliencia al ruido y ofrecen estimaciones precisas y consistentes de T_s incluso en condiciones experimentales degradadas. El RMSE general cuando se procesan señales con ruido añadido para todo el campo 2D con respecto al groundtruth es de 14,0 K, 16,05 K, 13,67 K, 5,81 K y 5,53 K, para MAE, BEMI-OP, MLP, U-Net y Att. U-Net, respectivamente.

Por otra parte, las mediciones simuladas utilizadas para entrenar las ANN incluyen el efecto de la autoabsorción, por lo tanto, las redes pueden capturar implícitamente relaciones complejas entre las señales proyectadas y el groundtruth durante el proceso de entrenamiento sin requerir suposiciones explícitas sobre el modelo subyacente. En consecuencia, ambas ANN brindan reconstrucciones más precisas del campo de temperatura que BEMI-OP utilizando el mismo conjunto de datos sintéticos. Las Figuras 4.2a y 4.2b muestran los valores de T_s para diferentes alturas sobre el quemador (HAB , *height above burner*) a lo largo de la línea central y la ruta de máxima concentración de hollín (que está marcada con una línea verde sobre el groundtruth) corroboran las observaciones, con BEMI-OP tendiendo a subestimar la temperatura y las ANN recuperando valores más cercanos al groundtruth. En cuanto a los modelos de ANNs, el MLP muestra marcadas discontinuidades en el eje vertical de los campos reconstruidos, lo cual es un comportamiento esperado ya que procesa cada línea horizontal de forma independiente sin considerar la estructura 2D. Además, MLP es incapaz de recuperar temperaturas precisas alrededor de la punta y la base de la llama debido al reducido número de píxeles de la llama a



(a) Temperatura absoluta de los perfiles verticales a lo largo de la línea central de la llama con y sin ruido añadido.



(b) Temperatura absoluta en la ruta de máxima concentración de hollín con y sin ruido añadido.

Figura 4.2: Comparación de perfiles T_s para una solución CoFlame Yale-60 aplicando diferentes técnicas a las señales proyectadas $P_{\{R,G,B\}}$ sin ruido añadido y con ruido gaussiano añadido (con una varianza del 0,25% de $P_{B,max}$). Los gráficos superior e inferior muestran la temperatura absoluta de los perfiles verticales a lo largo de la línea central de la llama y la ruta de máxima concentración de hollín, respectivamente. En cada caso se reporta el RMSE entre los perfiles de referencia y sus correspondientes estimaciones.

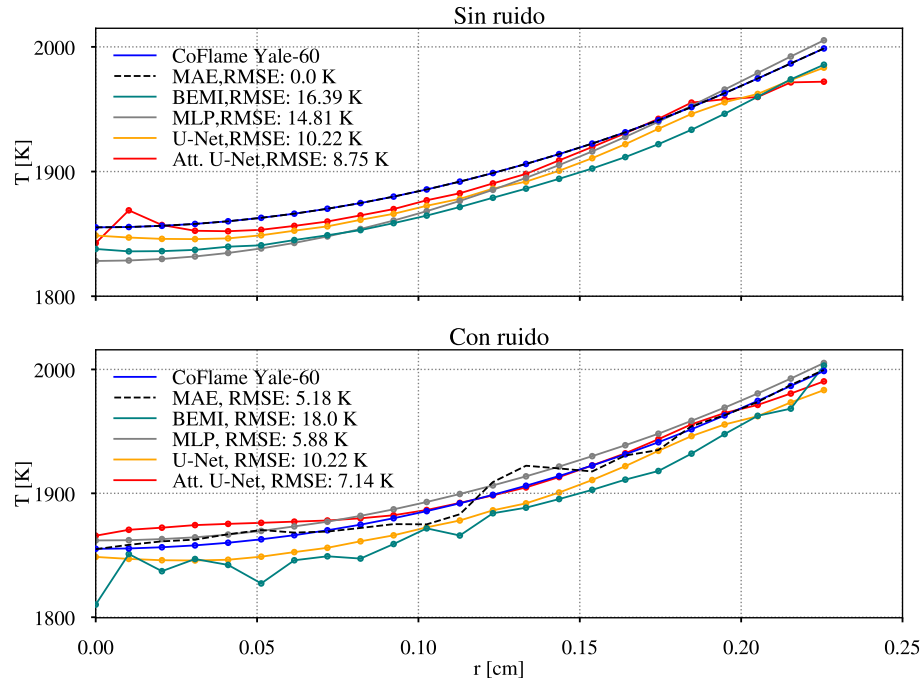


Figura 4.3: Comparación perfiles horizontales T_s a una HAB de 3.5 cm para una solución CoFlame Yale-60 aplicando diferentes técnicas a las señales proyectadas $P_{\{R,G,B\}}$ sin ruido añadido y con ruido gaussiano añadido. En cada caso se reporta el RMSE entre los perfiles de referencia y sus correspondientes estimaciones.

lo largo de estas regiones.

La Figura 4.3 muestra los perfiles de temperatura a una HAB de 3.5 cm obtenidos para la solución Yale-60 utilizando tanto técnicas clásicas como modelos de ANNs. Como se discutió previamente, la estimación con BEMI-OP presenta una leve subestimación de la temperatura. En algunos casos, tanto U-Net como MLP presentan desviaciones leves en el perfil horizontal recuperado, mientras que Attention U-Net, en las estimaciones obtenidas con y sin ruido, presenta el menor error con respecto a la referencia. En general, las evaluaciones sobre el conjunto de datos simulado muestran que las ANNs superan las técnicas tradicionales de deconvolución para recuperar perfiles T_s de señales BEMI capturadas con una cámara a color, lo que brinda estimaciones consistentes que son comparables a las obtenidas con MAE sin requerir mediciones de extinción de luz.

Los experimentos realizados en esta sección corresponden al método de validación habitualmente empleado para las metodologías basadas en ANNs en el estado del arte. En este enfoque, típicamente se lleva a cabo el entrenamiento y validación utilizando una única llama de referencia. Esto conlleva el requisito de entrenar un modelo de ANN diferente para cada configuración experimental, o bien, entrenar un modelo para estimar la temperatura de las partículas de hollín en un rango estrecho de condiciones experimentales. En este contexto, para validar la utilidad práctica del enfoque de este trabajo de tesis, es necesario primero establecer si una única ANN entrenada para una cámara determinada puede predecir la temperatura en un amplio rango de condiciones de llama, que también pueden estar sujetas a ruido experimental.

4.2. Análisis de la robustez y sensibilidad de los modelos de ANN respecto al conjunto de datos

En esta sección, se evalúa la robustez y sensibilidad de los modelos de ANN respecto al conjunto de datos de entrenamiento. Específicamente, se entrenaron múltiples instancias de los modelos MLP, U-Net y Attention U-Net con el subconjunto específico Yale-60, así como distintas combinaciones de

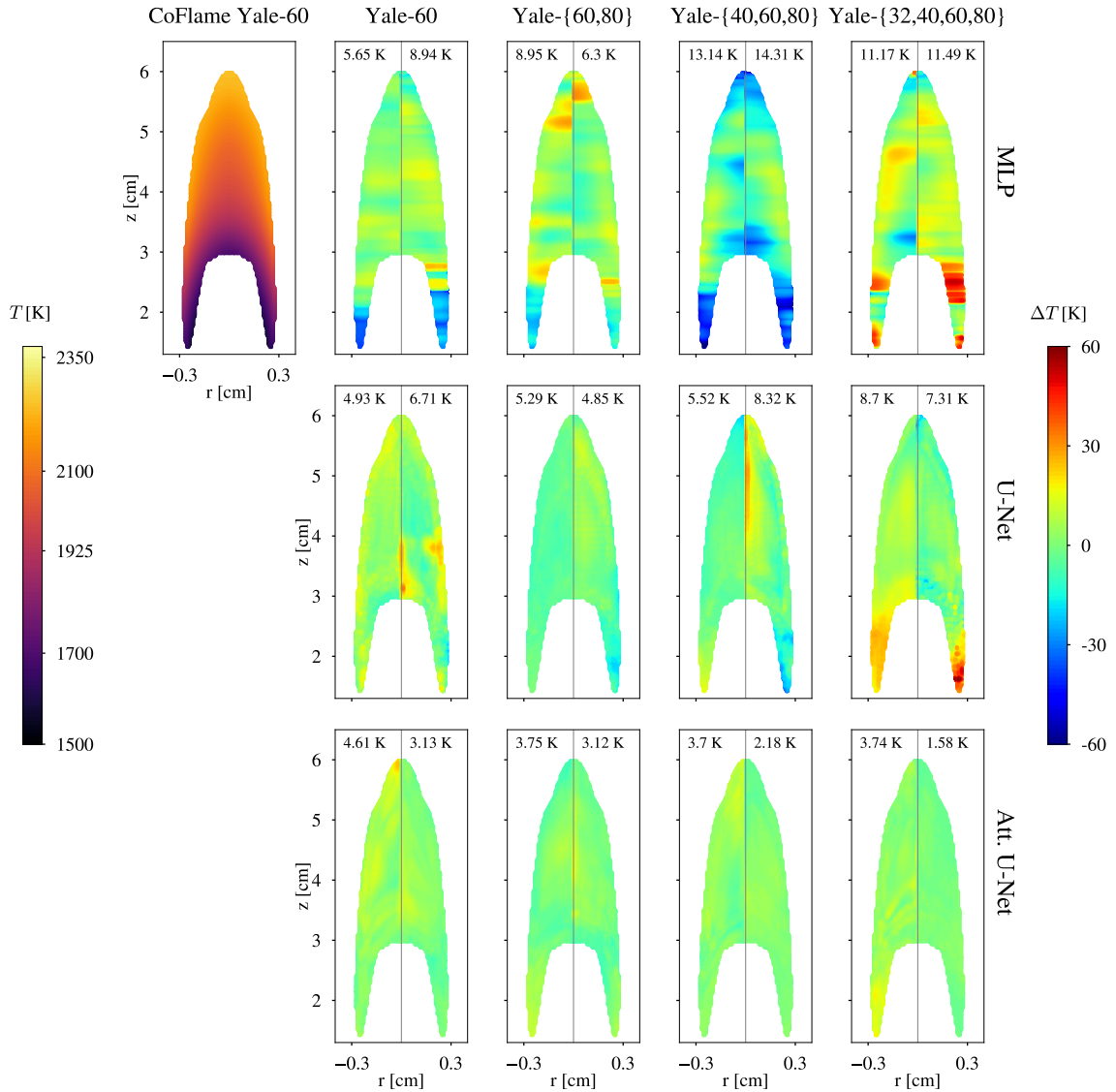


Figura 4.4: Se muestran los campos de referencia T_s para una imagen arbitraria en el conjunto de prueba y el error con respecto a este campo para las estimaciones obtenidas con los diferentes modelos de ANN. El número en la parte superior de cada campo corresponde al RMSE entre el campo 2D de la solución CoFlame y las estimaciones con ANN.

subconjuntos Yale- $\{X,Y\}$. Nos referiremos a estas configuraciones como ANNs entrenadas con conjuntos de datos generalizados. La notación Yale- $\{X,Y\}$, indica que los conjuntos aumentados de datos generados a partir de las condiciones Yale-X y Yale-Y, se utilizaron para el diseño y el entrenamiento de la red. Un aspecto común es que cada instancia de ANN incluye el subconjunto específico Yale-60. Por lo tanto, la evaluación reportada en esta sección se enfoca en analizar el efecto de reconstruir llamas simuladas de un subconjunto específico (Yale-60) cuando se entrena un único modelo que abarca distintas condiciones de llama simultáneamente.

La Figura 4.4 muestra el campo de referencia T_s para una imagen arbitraria de radiación de hollín en el conjunto de test para Yale-60, junto con el error con respecto a este campo de los obtenidos usando los modelos de ANNs previamente entrenados. El título de cada subgráfico indica el subconjunto específico o general usado para entrenar cada instancia de ANN. En cada subgráfico, la mitad izquierda

muestra las estimaciones cuando se utilizan mediciones proyectadas $P_{\{R,G,B\}}$ sin ruido, mientras que en la mitad derecha se muestran las estimaciones obtenidas al añadir un nivel de ruido añadido correspondiente al 0.25 % del valor máximo de P_B , con el fin de representar el ruido experimental encontrado en entornos de laboratorio. Los campos de error corresponden a la diferencia entre el campo de referencia y el campo reconstruido usando ANNs, representado como $\Delta T_s = T_{s,ANN} - T_{s,GT}$. Los hiperparámetros de los distintos modelos ANN fueron ajustados usando Raytune, los detalles se pueden observar en el Apéndice C.

En total, se entrenan cuatro modelos por arquitectura de ANN, usando los subconjuntos Yale-60, Yale-{60,80}, Yale-{40,60,80} y Yale-{32,40,60,80}. Cada subconjunto añade progresivamente ejemplos de entrenamiento (8000 para U-Net y Attention U-Net, y 2500 para MLP) de cada solución de referencia CoFlame. En el Apéndice B se presenta el enfoque empleado para determinar el número de ejemplos de entrenamiento suministrados a cada arquitectura de ANN por condición de llama.

Como se observó en la sección anterior, en el caso de MLP, se evidencian errores de reconstrucción en áreas con baja relación señal-ruido, como la punta y la base de la llama. En cambio, los modelos basados en CNNs procesan señales de nivel de campo 2D, aprovechando así la coherencia espacial de las señales de entrada. En términos generales, la evaluación indica que las CNNs presentan un mejor rendimiento en la reconstrucción. Además, en todos los casos, el uso de Attention U-Net resulta en un menor RMSE en la reconstrucción en comparación con U-Net. Esto sugiere que la incorporación del mecanismo de atención a la arquitectura U-Net permite identificar características relevantes, facilitando la posterior tarea de recuperar campos de T_s y, al mismo tiempo, generando estimaciones con cierta tolerancia al ruido.

A partir de las instancias de ANNs, previamente entrenadas con un conjunto de datos general Yale-{32,40,60,80}, se realizan inferencias para una imagen arbitraria en cada subconjunto de prueba, como se muestra en la Figura 4.5. Los resultados obtenidos con modelos basados en CNNs muestran exactitud y un bajo error de reconstrucción al usar un único modelo ANN para estimar campos T_s de los diferentes subconjuntos de entrenamiento. En particular, en todos los casos utilizando CNNs se obtiene un RMSE menor mientras que usando MLP se propagan las tendencias observadas en la Sección 4.1. En general, la evaluación muestra que ambos modelos basados en CNN se comportan mejor que las otras técnicas a la hora de procesar señales ruidosas.

Con el propósito de ofrecer una perspectiva global de los resultados, la Figura 4.6 muestra un gráfico de dispersión entre los valores de groundtruth y los valores estimados por los modelos de ANN a nivel de píxel para un total de 100 campos 2D evaluados del conjunto de prueba Yale-60. La línea diagonal negra representa el caso de estimación perfecta. En cada caso se reporta el RMSE entre los campos de groundtruth y la temperatura recuperada por las ANNs para cada caso. En el caso de las instancias de MLP entrenadas con subconjuntos generales, se observa que conforme se integran más ejemplos de entrenamiento de otras condiciones, aumenta el RMSE reportado y la dispersión para cada caso. Principalmente, los valores que presentan mayores desviaciones con respecto a los valores groundtruth se ubican en la base y la punta de la llama. En cuanto a U-Net y Att. U-Net, el uso de subconjuntos generales para el entrenamiento hace que las estimaciones de temperatura presenten, a medida que aumenta la integración de condiciones, valores ligeramente dispersos especialmente en la ruta de máxima concentración de hollín. Esto se puede observar en los campos ΔT obtenidos con los modelos basados en CNN para un caso individual, presentados en las Figuras 4.4 y 4.5. Tanto U-Net como Att. U-Net, aplicados a la pirometría del hollín, exhiben una buena tolerancia al ruido y baja sensibilidad ante la variabilidad presente en el conjunto de datos al entrenar un solo modelo con múltiples condiciones de llama. Sin embargo, en todos los casos, se observa un menor error y desviaciones de temperatura con la arquitectura Att. U-Net.

La Figura 4.7 muestra una evaluación exhaustiva de los errores obtenidos utilizando redes entrenadas con el subconjunto específico Yale-60 y el conjunto de datos general Yale-{32,40,60,80}. Para este caso, se realiza una comparación empleando tanto las CNNs como las instancias de MLP. Los resultados confirman la observación previa de que la ANN entrenada con el conjunto de datos general no aumenta significativamente el error de estimación al procesar muestras de prueba de subconjuntos específicos. Además, Attention U-Net obtiene mejores resultados que la U-Net original, lo que demuestra

que las puertas de atención (AGs o *attention gates*) son eficaces para mejorar la identificación de características estadísticas relevantes durante el entrenamiento. También, se observa que usando el modelo MLP se genera mayor dispersión en los valores estimados, comparado con las CNNs.

En las siguientes secciones y capítulos nos enfocaremos principalmente en las arquitecturas basadas en CNNs para realizar pirometría de hollín.

4.3. Evaluación de la generalización de los modelos basados en CNN

Para evaluar las capacidades de generalización tanto de U-Net como de Attention U-Net, ampliamos los experimentos anteriores generando múltiples instancias de las redes, cada una entrenada con conjuntos de subconjuntos generados a partir de diferentes condiciones canónicas considerando proyecciones ruidosas. Intuitivamente, podemos esperar que una red entrenada para procesar una amplia gama de condiciones de llama con variaciones en la geometría de la llama pierda especificidad al procesar una única imagen de una condición de llama concreta. Para evaluar este punto, comparamos los resultados presentados en la Figura 4.1 para las ANNs entrenadas con subconjuntos específicos con los obtenidos para las ANNs entrenadas con diferentes conjuntos de subconjuntos de diferentes condiciones de la llama.

En la Figura 4.8, la imagen de la izquierda muestra la solución Yale-60 CoFlame, seguida de los campos de error correspondientes a la reconstrucción obtenida con diferentes instancias de CNNs entrenadas con diferentes subconjuntos. La fila superior corresponde a los campos de error obtenidos con las estimaciones de U-Net, mientras que la fila inferior corresponde a las estimaciones de Attention U-Net. Para cada subconjunto se utiliza el mejor modelo obtenido con RayTune. Los subgráficos con la etiqueta Yale-60 indican que las instancias de CNNs fueron entrenadas con el subconjunto especializado. Estos resultados fueron previamente presentados en la Figura 4.1, pero se agregan para facilitar la comparación.

Se observa que el modelo entrenado con los subconjuntos Yale-32 y Yale-80 muestra los errores más altos, lo que es de esperar dado que la red aprendió características asociadas a las condiciones de llama extrema y contiene pocas características estadísticas sobre la llama objetivo intermedia. Los modelos entrenados con subconjuntos Yale- $\{40,80\}$ y Yale- $\{32,40,80\}$ tienden a proporcionar campos 2D más suaves, ya que los subconjuntos aumentados utilizados para el entrenamiento tienen más probabilidades de contener llamas con una geometría más similar a la llama canónica probada; sin embargo, en todos los casos todavía hay errores perceptibles alrededor de algunas regiones de la llama. Por último, la red entrenada con el conjunto de datos general Yale- $\{32,40,60,80\}$, que incorpora muestras derivadas de la llama canónica Yale-60 probada, proporciona el error de estimación más bajo entre los conjuntos de datos ampliados evaluados. Los resultados para la llama única probada Yale-60 proporcionan un indicador cualitativo preliminar de que entrenar las redes utilizando un conjunto de datos general, que contiene una amplia gama de condiciones de llamas, no necesariamente incrementa el error en comparación con las redes entrenadas para subconjuntos específicos.

El siguiente experimento evalúa la capacidad de generalización de las redes entrenadas con el conjunto de datos Yale- $\{32,40,60,80\}$, al estimar T_s a partir de proyecciones obtenidas para diferentes condiciones de llama. Se evalúa la precisión de los campos obtenidos a partir de las proyecciones ruidosas de todas las soluciones CoFlame convergentes, ninguna de estas se incluyó en el diseño y entrenamiento del modelo. Las Figuras 4.9a y 4.9b muestran el error para los campos de temperatura en condiciones ideales y con ruido añadido de todas las soluciones CoFlame convergentes, ninguna de las cuales se incluyó en el diseño y entrenamiento de la red. Para cada subgráfico la mitad izquierda y la mitad derecha corresponden a la estimación obtenida con U-Net y Attention U-Net, respectivamente. Tanto U-Net como Attention U-Net presentan errores perceptibles para algunas de las condiciones ilustradas, aunque conservan la mayor parte de la distribución espacial. En general, Attention U-Net presenta errores menores que U-Net para los casos ilustrados.

Las redes entrenadas se utilizaron para procesar las 100 imágenes del conjunto de prueba generadas a partir de la llama canónica Yale-60. La Figura 4.10 muestra una evaluación exhaustiva del error de estimación, considerando todos los píxeles que contienen información de llama en el conjunto de pruebas para todas las condiciones de llama. Se muestra en los gráficos de dispersión, la temperatura estimada y la temperatura real correspondiente para todos los píxeles individuales que contienen información sobre la llama en todo el conjunto de datos de prueba. El gráfico de la izquierda muestra el valor de temperatura estimado y el valor real correspondiente para todos los píxeles relevantes del conjunto de datos. Los demás gráficos desglosan la información, centrándose en los píxeles asociados a la línea central y a la trayectoria de máxima concentración de hollín a lo largo del eje z, que son zonas de interés para la llama y explican la coherencia de la distribución espacial de la temperatura.

Los modelos entrenados con los subconjuntos Yale- $\{40,80\}$ y Yale- $\{32,80\}$ presentan mayores errores en la reconstrucción, lo cual es esperable como se discutió anteriormente en esta sección. Los modelos entrenados con Yale- $\{32,40,80\}$ disminuyen el RMSE y son similares a los resultados obtenidos cuando se entrenan los modelos con Yale- $\{32,40,60,80\}$ (como se muestra en la Figura 4.6d), lo cual indica que a partir de un proceso de entrenamiento con subconjuntos de datos simulados que representan llamas con características estadísticas cercanas a una llama objetivo que no fue explícitamente considerada en el conjunto inicial, se pueden realizar estimaciones con un bajo error de reconstrucción.

En general, los resultados muestran que tanto U-Net como Attention U-Net entrenadas con un conjunto de datos generalizado son capaces de predecir la temperatura a partir de proyecciones ruidosas de una amplia gama de condiciones de llama con un error bajo, conservando la coherencia espacial de la distribución de la temperatura. Durante la evaluación de las arquitecturas U-Net y Attention U-Net, se ajustaron los hiperparámetros para obtener el modelo con el menor valor de función de pérdida en el conjunto de validación. Esto permite que la evaluación y el análisis de los resultados se realicen en un escenario centrado en el tipo de arquitectura en lugar de en la elección de hiperparámetros. En resumen, la arquitectura Attention U-Net ofrece mejores resultados que la U-Net original en términos de precisión en las estimaciones. En la siguiente sección, se evaluará la capacidad de generalización de la Attention U-Net entrenada con datos sintéticos mediante medidas experimentales.

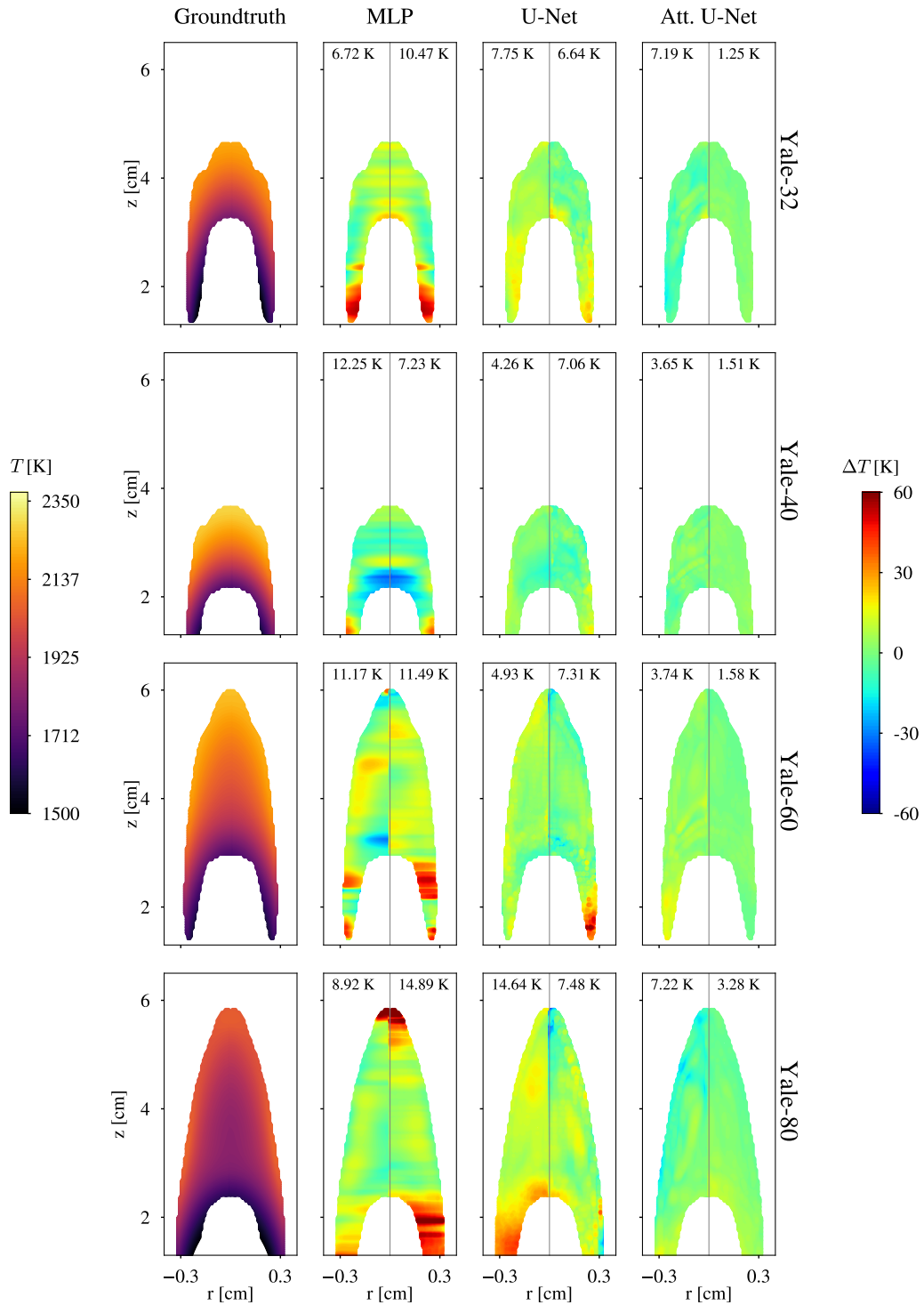
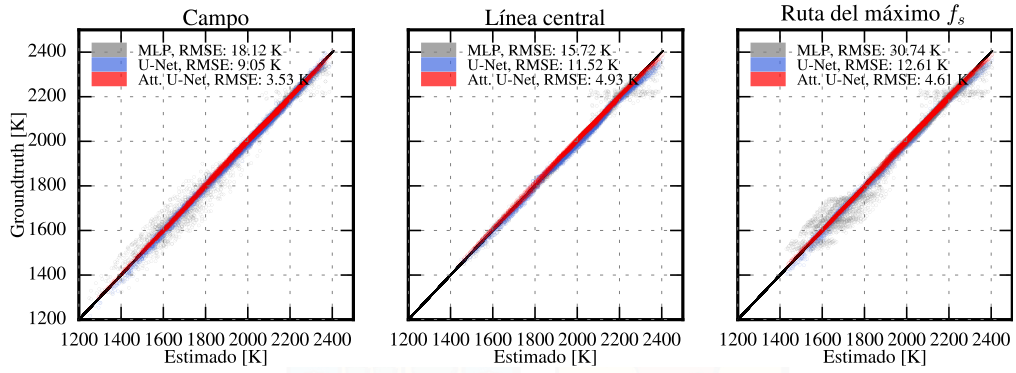
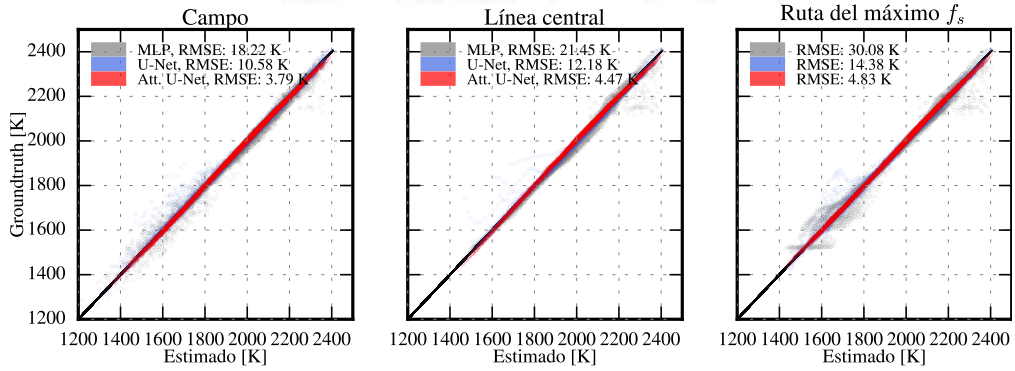


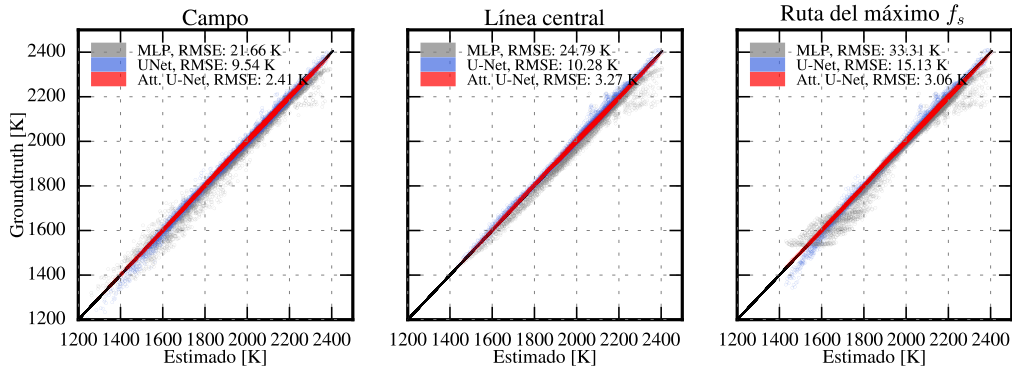
Figura 4.5: Inferencias sobre imágenes arbitrarias extraídas de cada subconjunto de prueba de las condiciones reportadas en la Tabla 3.1 usando los modelos previamente entrenados usando el conjunto de datos de entrenamiento Yale- $\{32,40,60,80\}$. La mitad izquierda muestra los campos estimados con las ANNs con condiciones ideales sin ruido, y la mitad derecha muestra la estimación obtenida por las ANNs cuando se añade ruido. El número en la parte superior de cada campo corresponde al RMSE entre el campo 2D de la solución CoFlame y las estimaciones con ANN.



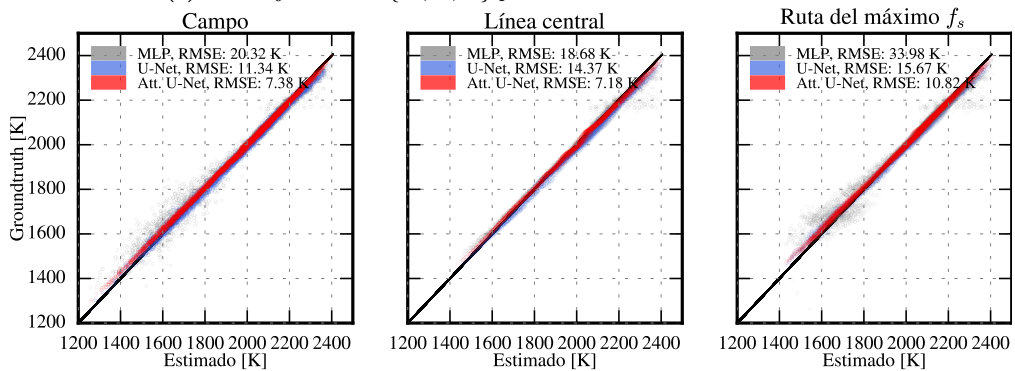
(a) Subconjunto Yale-60 para el entrenamiento de las ANNs.



(b) Subconjunto Yale-{60,80} para el entrenamiento de las ANNs.



(c) Subconjunto Yale-{40,60,80} para el entrenamiento de las ANNs.



(d) Subconjunto Yale-{32,40,60,80} para el entrenamiento de de las ANNs.

Figura 4.6: Gráfico de dispersión entre los valores de groundtruth y los valores estimados por los modelos ANN a nivel de píxel para un total de 100 campos 2D pertenecientes al subconjunto Yale-60. Se reporta el RMSE global para cada caso.

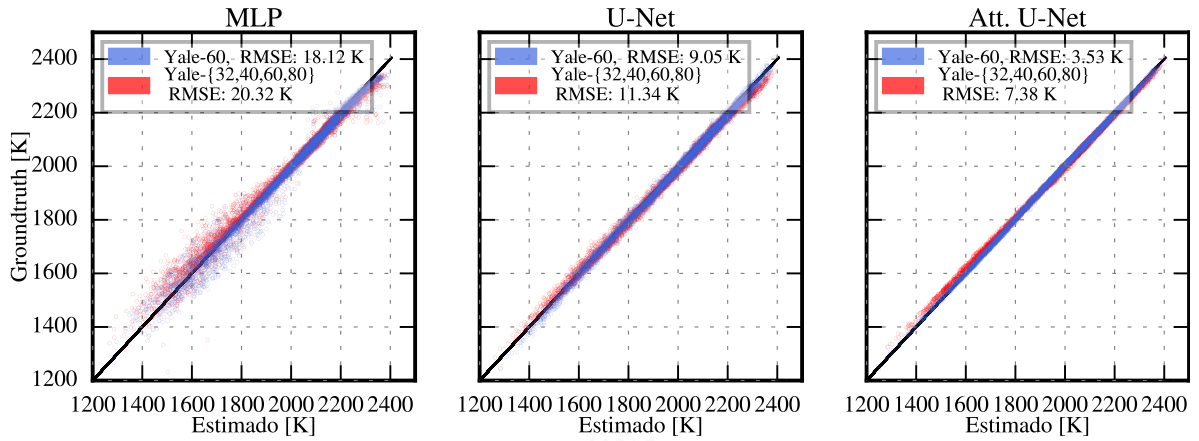


Figura 4.7: Gráfico de dispersión entre las ANNs y la temperatura de referencia correspondiente para todos los píxeles que contienen información sobre llamas en el conjunto de datos de prueba.

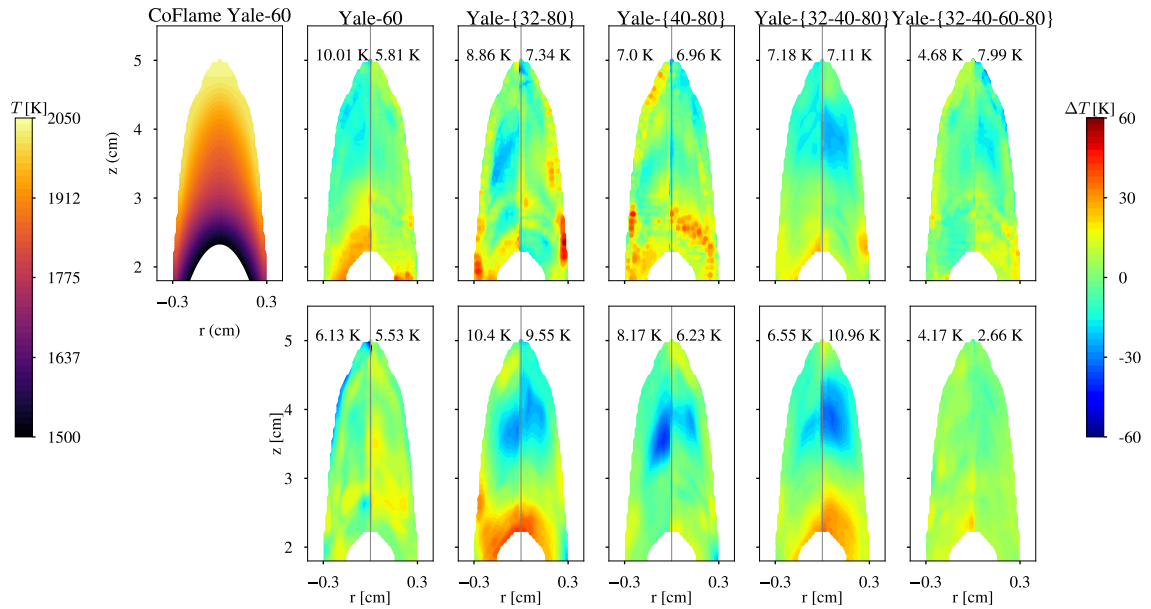
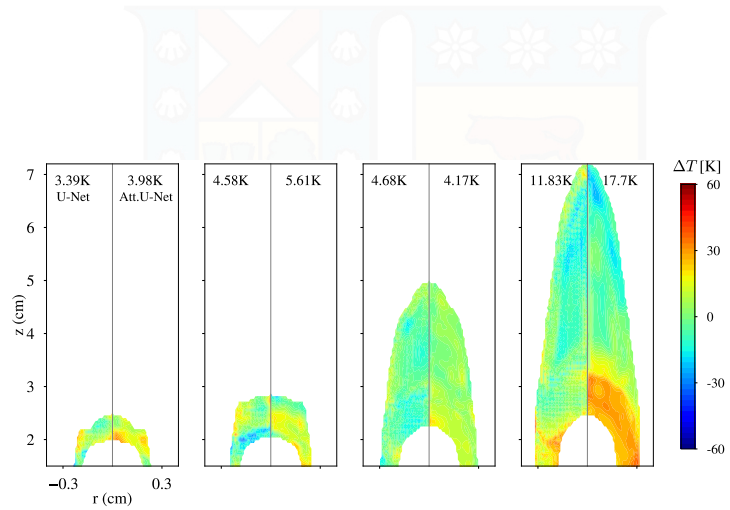
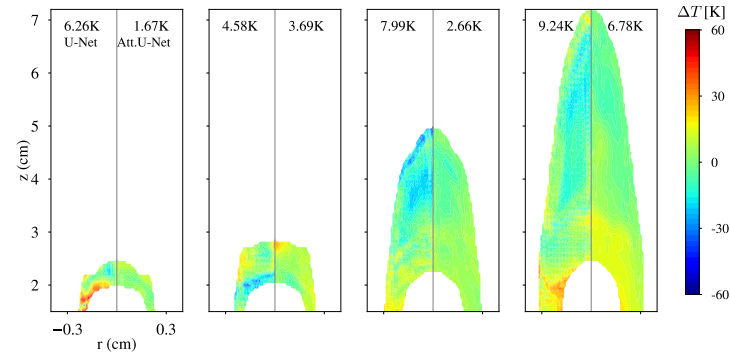


Figura 4.8: Soluciones de CoFlame de referencia de T_s y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de modelos ANN entrenados utilizando diferentes conjuntos de datos. El número en la parte superior de cada campo corresponde al RMSE entre el campo 2D de la solución CoFlame y las estimaciones con ANN.



(a) Error absoluto entre las soluciones de las referencias CoFlame y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de las ANNs sin ruido añadido.



(b) Error absoluto entre las soluciones de las referencias CoFlame y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de las ANNs con ruido añadido.

Figura 4.9: Soluciones de CoFlame de referencia de T_s y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo por U-Net y Attention U-Net entrenados con todos los datos generados para las cuatro condiciones de llama. El número indicado en cada mitad de los subgráficos corresponde al RMSE, que cuantifica el error entre el campo de referencia y las estimaciones obtenidas con los modelos de ANN.

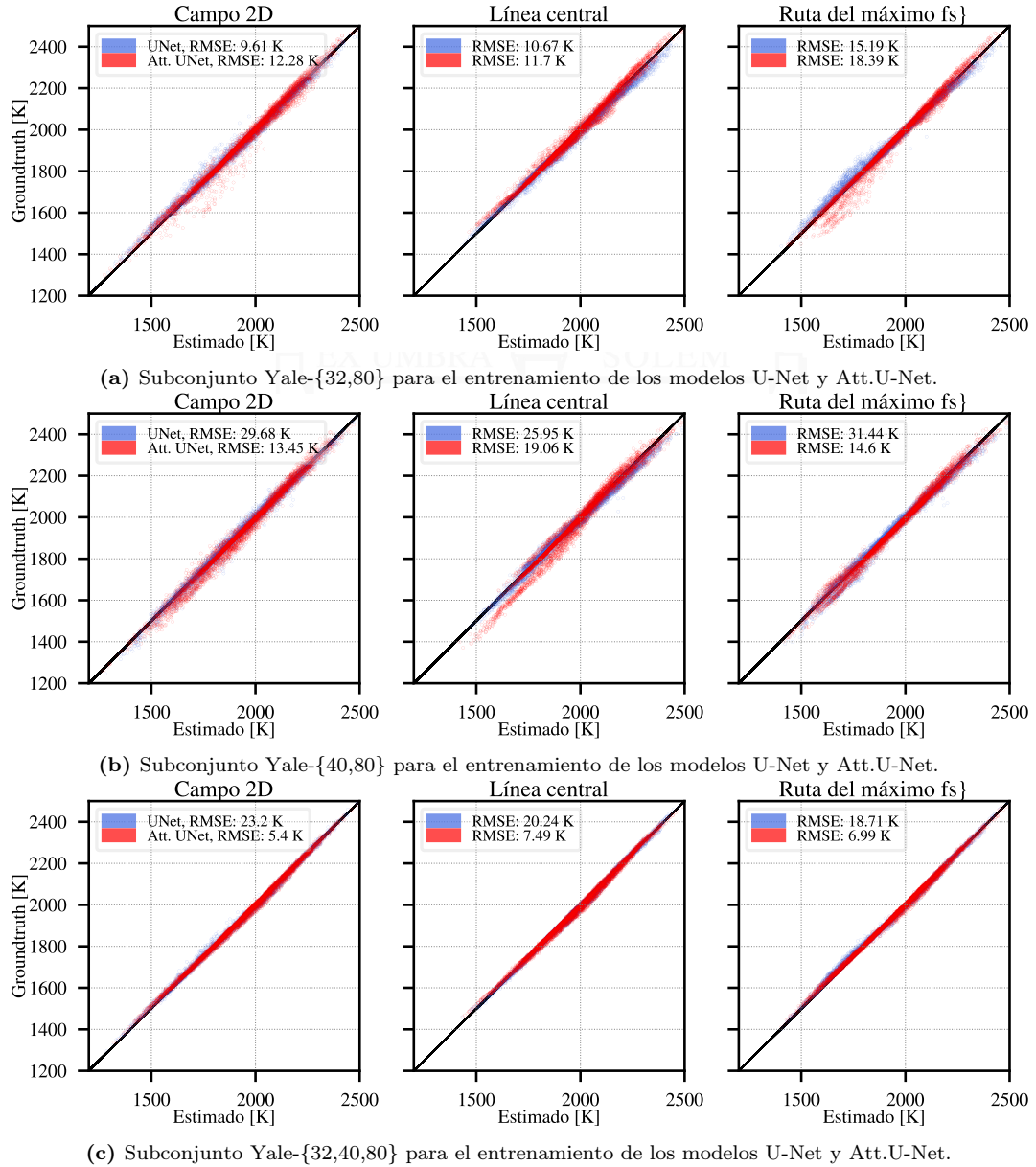


Figura 4.10: Gráfico de dispersión entre los valores groundtruth y valores estimados para todos los datos del conjunto de prueba. Evaluación empleando los modelos U-Net y Att.U-Net entrenados con diferentes conjuntos de llamas aumentadas.

5 | Validación con datos de campañas experimentales

Este capítulo presenta la validación de la metodología propuesta basada en ANNs para la pirometría de hollín a través de mediciones de llamas CLAD capturadas durante campañas experimentales en entornos de laboratorio. Con este propósito, se caracterizan las propiedades ópticas del arreglo experimental de BEMI, compuesto por una cámara RGB, lente y filtro de corte de infrarrojos. Se emplean las instancias de ANNs entrenadas con los conjuntos de datos simulados, descritas en el capítulo anterior, para luego recuperar campos de temperatura de llamas experimentales.

Este capítulo incluye una descripción de los montajes experimentales, con detalles sobre la recolección de las mediciones necesarias para llevar a cabo la pirometría de hollín utilizando la técnica clásica MAE, la cual proporciona un punto de referencia para evaluar el rendimiento de los métodos basados en ANNs. Además, se presenta la validación de la metodología propuesta mediante una sola condición de llama canónica, y la validación experimental de las capacidades de generalización de las técnicas basadas en ANNs para recuperar campos de temperatura de hollín en llamas generadas por múltiples condiciones experimentales.

5.1. Montaje experimental

La Figura 5.1 muestra el arreglo óptico para la técnica MAE, la cual se establece como técnica de referencia para evaluar la metodología propuesta. La configuración experimental de MAE empleada se basa en un trabajo previo [49]. Se genera un haz colimado de luz LED (diodo emisor de luz) utilizando una lente acromática y una esfera integradora. Después de atravesar la llama, la luz LED atenuada es capturada por cámara de alta velocidad equipada con una lente AF-S Micro Nikkor 105 mm. La técnica MAE implica mediciones simultáneas de emisión de llama (luz de fondo apagada) y extinción de la luz (luz de fondo encendida), las cuales, se llevan a cabo mediante una cámara Photron Mini AX50 para determinar la distribución espacial de la T_s y f_s , respectivamente. Se empleó un LED como luz de fondo, y las mediciones se capturaron utilizando un filtro monocromático y el LED con una longitud de onda nominal de 650 y 800 nm (paso de banda de 25 nm). Los filtros de paso de banda filtran espectralmente la señal. Las imágenes de llama se recolectaron, con la cámara operando a 10 fotogramas por segundo. Estas imágenes son capturadas por una cámara con resolución de 1024×1024 px² y guardadas con una profundidad de píxel de 12 bits.

Para la técnica BEMI, se utiliza la sensibilidad espectral de la configuración óptica empleada para generar los conjuntos de llamas aumentadas empleados para entrenar los modelos de ANNs (ver Sección 3.2). La configuración óptica de BEMI (sin la fuente de LED) para capturar las señales de radiación térmica necesarias para la pirometría de hollín se conforma de una cámara Basler acA2040-55uc de 12 bits y 3 megapíxeles con un sensor CMOS Sony IMX265 y en lente AF-S Nikkor 50 mm.

Para calcular T_s para las llamas objetivo usando MAE, se adquieren 100 imágenes de emisión y extinción, las cuales se promedian para obtener una sola imagen con el LED encendido/apagado. Asimismo, para calcular T_s empleando BEMI se promedian 100 imágenes de emisión con el fin de

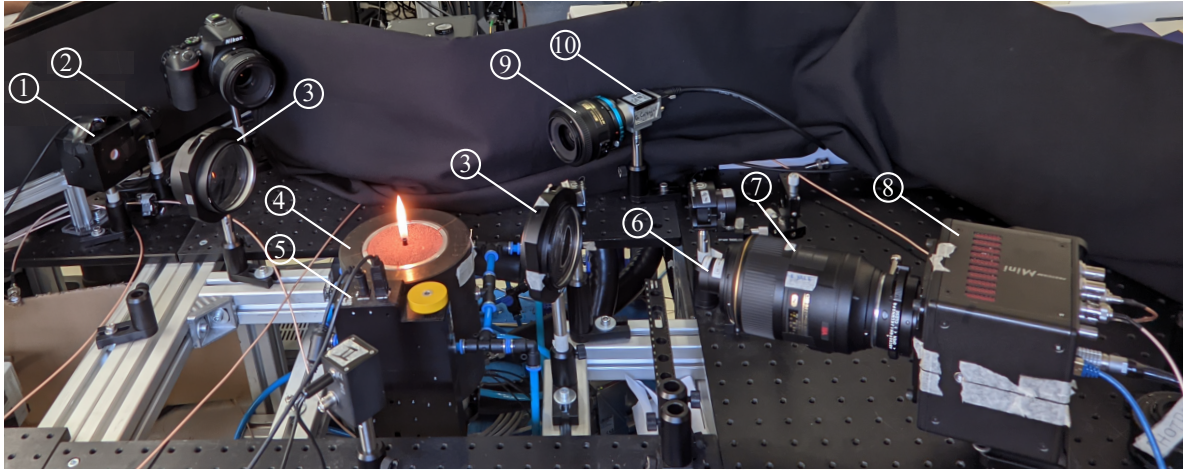


Figura 5.1: Imagen del arreglo óptico experimental de BEMI y MAE capturada en el laboratorio del *Energy Conversion and Combustion Group (EC2G)*. Los siguientes números entre paréntesis corresponden a los componentes mostrados en la imagen adjunta: (1) LED pulsado, (2) esfera integradora, (3) lente acromática, (4) quemador Yale, (5) plataforma de traslación motorizada, (6) filtro pasabanda, (7) lente AF-S Micro Nikkor 105mm, (8) Photron mini AX50 cámara, (9) lente AF-S Nikkor 50mm, (10) Basler acA2040-55uc.

mejorar la relación señal a ruido. En el Apéndice D se proporciona un análisis sobre el efecto del número de imágenes promediadas para estimar la temperatura de hollín utilizando la técnica BEMI.

A continuación, se describen las configuraciones experimentales usadas para adquirir las mediciones experimentales de las llamas adquiridas utilizando ambas configuraciones ópticas:

1. Las mediciones MAE tienen una resolución espacial de 22,5 px/mm y tiempos de exposición de 2,5, 1,25, 0,5 y 0,5 milisegundos para las condiciones Yale-32, Yale-40, Yale-60 y Yale-80.
2. Las mediciones adquiridas usando el arreglo óptico de BEMI tienen tiempos de exposición de 20, 9,9, 4,7 y 5,2 milisegundos para las condiciones Yale-32, Yale-40, Yale-60 y Yale-80, respectivamente. Las mediciones tienen una resolución de 18,6 px/mm después de aplicar un *pixel binning* de 2×2 .

Durante las campañas experimentales de recolección de imágenes de llama de MAE y BEMI, se ajustaron los tiempos de exposición para cada condición de llama, mediante un proceso de prueba y error con el objetivo de maximizar la detección de señal en cada longitud de onda.

En cuanto a las mediciones BEMI, las imágenes se tomaron en formato RAW. La η_λ del arreglo óptico se determinó multiplicando la respuesta espectral del sensor de la cámara SR_λ por la transmisividad del lente y el filtro IR incorporado en la cámara. Las transmisividades espectrales de cada disposición óptica se caracterizaron utilizando un sistema de calibración radiométrica Labsphere USLR-V08F compuesto por una bombilla de tungsteno acoplada a una esfera de integración (2'') y detectada por un espectrómetro calibrado por el NIST.

En el Apéndice A.1, se detalla el proceso empleado para calibrar las mediciones experimentales. Tanto para la técnica BEMI como para los modelos de ANNs, no es necesaria la calibración absoluta. En los dos casos, se utiliza la relación de señal de los canales de color capturados simultáneamente para recuperar la temperatura del hollín. Para BEMI, la relación entre los canales R, G y B se utiliza como se describe en la expresión (2.13). En el caso de las ANNs, las entradas se normalizan al valor máximo de los tres canales de color (ver la Sección 3.2). El SR_λ del sensor se obtuvo a partir de las hojas de datos del fabricante de las cámaras Basler. En el Apéndice A.2, se proporciona una descripción del proceso de caracterización de los elementos ópticos, como filtros infrarrojos y lentes, presentes en la técnica BEMI.

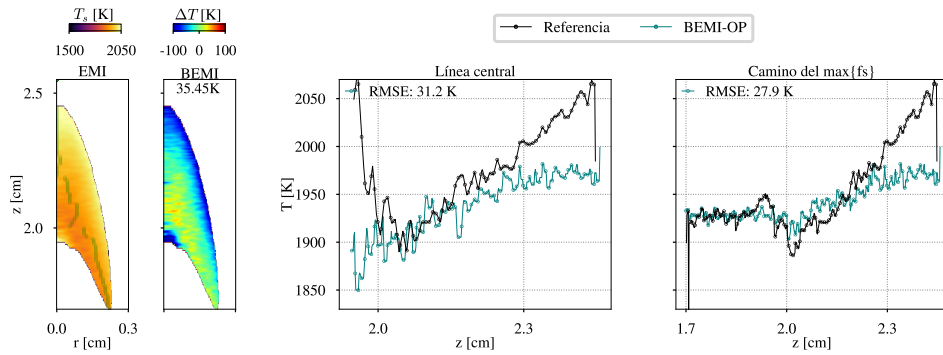
Es importante destacar que la caracterización del η_λ correspondiente al arreglo óptico BEMI es fundamental para llevar a cabo el proceso de generación de datos simulados. Además, una correcta caracterización del η_λ contribuye a una mayor exactitud en la estimación de la temperatura utilizando la técnica BEMI. Por lo tanto, utilizando los valores de η_λ , se calculan las proyecciones $P_{\{R,G,B\}}$ para 8000 campos T_s de referencia para cada condición de llama reportada en la Tabla 3.1. Como se describió previamente en la Sección 3.4, a partir de múltiples combinaciones de estos datos, se entrenan distintas instancias de ANNs especializadas en recuperar campos T_s , teniendo en cuenta las particularidades de la disposición óptica.

5.2. Validación de modelos ANN con datos experimentales para una única llama canónica

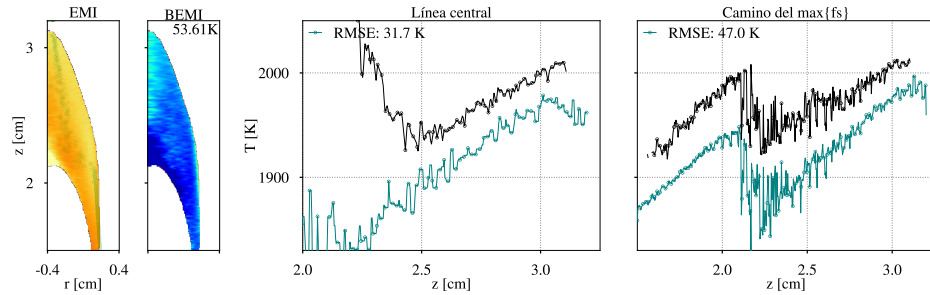
En la Figura 5.2 se muestran los campos T_s reconstruidos para las imágenes experimentales promedio de las distintas condiciones de llama. Se empleó la técnica MAE de banda estrecha de un color (800 ± 25 nm) para Yale-60 y Yale-80, y la técnica EMI de dos colores (610 ± 25 y 800 ± 25 nm) para Yale-32 y Yale-40, además de la BEMI clásica para todas las condiciones de llama. Para cada condición, los subgráficos a la izquierda muestran los campos de temperatura absoluta obtenidos por la estimación de referencia (MAE o EMI, según corresponda), seguidos del error relativo de la técnica BEMI clásica con respecto a la estimación de referencia. Para los campos T_s de referencia Yale-32 y Yale-40 empleados para comparar nuestros modelos, no consideramos el campo de κ_λ en la rutina para calcular el campo T_s , debido a que el campo de transmisividad calculado a partir de las mediciones clásicas de atenuación de la línea de visión tiene una baja fracción de luz transmitida a través de la llama. En este escenario, se puede suponer que los valores de temperatura estimados por las técnicas MAE y EMI se aproximan entre sí debido a la escasa influencia de los efectos de auto-absorción del hollín cuando la llama tiene una concentración de hollín baja. Tanto en el caso de Yale-32 como en Yale-40, f_s es inferior a 1 ppm [53, 93, 94].

La Figura 5.2 en el centro y derecha muestra los perfiles verticales de temperatura absoluta obtenida a lo largo de la línea central de la llama y la trayectoria de máxima concentración de hollín. La línea verde sobre la llama en el campo MAE indica la trayectoria radial del máximo f_s . Para cada condición de llama, se reporta el RMSE de temperatura para todo el perfil en comparación con la estimación de referencia. De forma similar a lo observado para los datos simulados, BEMI tiende a subestimar la temperatura en comparación con MAE. Los perfiles verticales de temperatura muestran una tendencia similar para todos los casos, de forma proporcional al aumento de la concentración de hollín contenida dentro de la llama, se incrementan las diferencias entre BEMI y MAE, con diferencias en el margen de 100 K que pueden asociarse al no considerar los efectos de la auto-absorción de la técnica BEMI, incertidumbres en la caracterización del montaje experimental y el procedimiento de deconvolución.

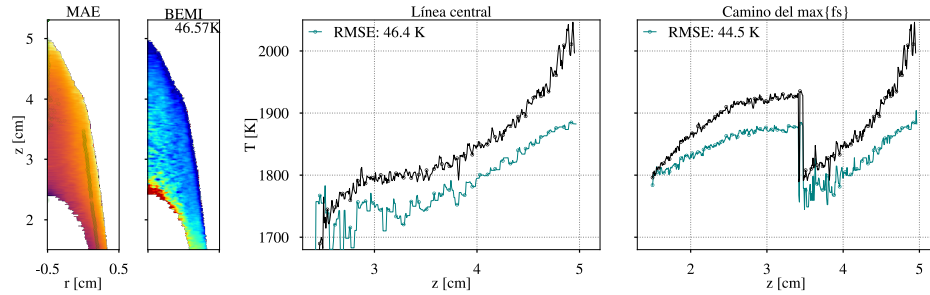
En la Figura 5.3 se presentan las estimaciones de T_s utilizando BEMI y los métodos basados en ANNs para la llama experimental Yale-60. Los subgráficos de la izquierda muestran los errores para todo el campo T_s en relación con el campo MAE de la Figura 5.2. En todos los casos, tanto los modelos MLP como CNN proporcionan temperaturas más cercanas a las obtenidas con MAE en comparación con BEMI. Por otro lado, los subgráficos a la derecha muestran que las ANNs proporcionan un perfil de temperatura suave a lo largo de la línea central vertical. Sin embargo, en regiones alrededor de la base y la punta de la llama, las temperaturas tienden a no coincidir con las estimaciones obtenidas con MAE. Este comportamiento es esperable, ya que el área alrededor de la base y la punta de la llama experimental contiene principalmente fondo y proporciona poca información espacial sobre la llama. Además, la base de la llama experimental contiene una discontinuidad que no se caracteriza adecuadamente en los datos simulados utilizados para el entrenamiento, lo que impide que las ANNs mapeen correctamente estas regiones. El perfil vertical a lo largo de la trayectoria del máximo f_s muestra un comportamiento similar, con los valores de temperatura estimados por las ANN siendo similares a las estimaciones obtenidas con MAE, excepto en las zonas alrededor de la base y la punta de la llama.



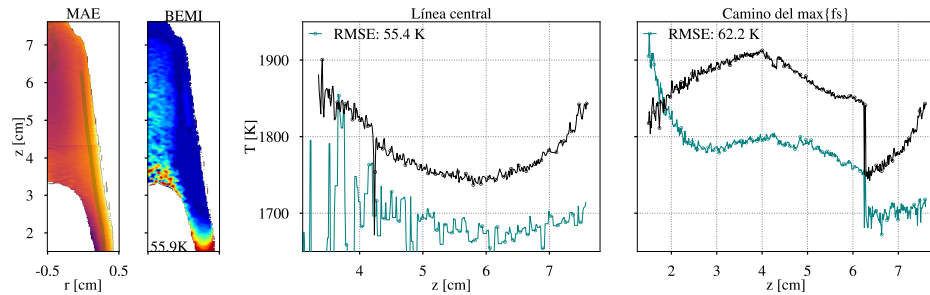
(a) Experimental Yale-32.



(b) Experimental Yale-40.



(c) Experimental Yale-60.



(d) Experimental Yale-80.

Figura 5.2: Estimación de T_s para las llamas Yale experimentales obtenida con las técnicas clásicas. Los subgráficos a la izquierda muestran los campos T_s absoluta obtenidos con EMI para las llamas Yale-32, Yale-40, MAE para las llamas Yale-60 y Yale-80, seguidos del error relativo al comparar el campo de referencia con la estimación de la técnica BEMI. La línea verde sobre el campo MAE indica la trayectoria de máximo f_s . Los gráficos del centro y de la derecha muestran la temperatura absoluta obtenida con cada cámara a lo largo de la línea central de la llama y la trayectoria de máximo f_s . En los campos 2D y los perfiles de temperatura se reporta el RMSE entre la referencia y la estimación obtenida con BEMI-OP.

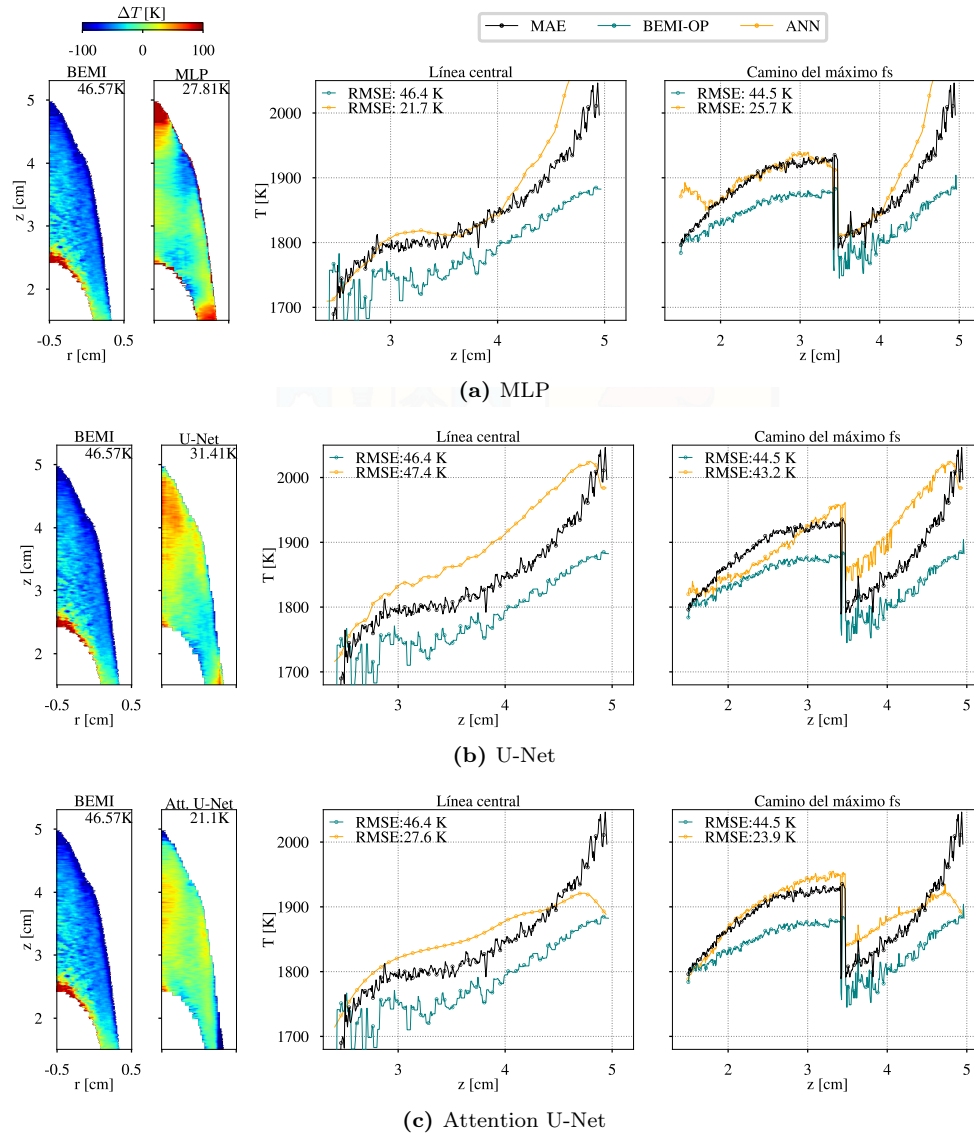


Figura 5.3: Validación de los modelos de ANN con datos experimentales para un única condición de llama Yale-60. Los subgráficos de la izquierda muestran el error relativo entre BEMI-OP y las ANNs con respecto al campo de T_s absoluta obtenido con MAE para la llama Yale-60. Tanto en los campos 2D como en los perfiles de temperatura se reporta el RMSE entre la referencia y la estimación obtenida con BEMI-OP y las ANNs.

Al igual que lo observado en el Capítulo 4, como se muestra en la Figura 5.3, se evidencia que las estimaciones obtenidas con métodos basados en ANN siguen una tendencia similar. Sin embargo, BEMI proporciona temperaturas con valores más irregulares y bajos a lo largo del eje radial, debido a que esta técnica desprecia los efectos de la auto-absorción de hollín a lo largo del camino óptico. Este comportamiento es consistente con los resultados obtenidos en el Capítulo 4 utilizando datos simulados. En general, los métodos basados en ANN proporcionan un perfil más suave en la línea central de la llama, la cual es una región de particular interés para comprender la formación de hollín.

Los resultados obtenidos en esta sección validan la metodología propuesta al utilizar una única condición de llama y un arreglo óptico BEMI. En las siguientes secciones de este capítulo, se hace un énfasis especial en realizar experimentos para evaluar las capacidades de generalización de los modelos basados en CNN.

5.3. Validación experimental de las capacidades de generalización de las CNNs

La metodología propuesta implica manipular una o más soluciones CoFlame para generar nuevas instancias de llamas con diferentes alturas y distribuciones de T_s y f_s . Este proceso es órdenes de magnitud más rápido que calcular una nueva solución convergente para cada condición. Los valores de los campos T_s y f_s aumentados conservan la correlación espacial de la solución CoFlame y están acotados para permanecer dentro de los rangos encontrados en las llamas de coflow canónicas típicas. Se espera que un conjunto de datos lo suficientemente grande de llamas aumentadas represente estadísticamente las condiciones de llama que pueden observarse en llamas laminares experimentales. La capacidad de generar esta representación estadística del espacio de diferentes llamas canónicas es el factor clave que permite utilizar las ANNs para realizar pirometría de hollín en campañas experimentales.

Como parte de la evaluación experimental de la metodología basada en ANNs y la validación de la aplicabilidad de modelos entrenados con simulaciones para inferir campos 2D de T_s en llamas experimentales, utilizamos el modelo Att. U-Net previamente entrenado con el conjunto generalizado Yale- $\{32,40,60,80\}$. Los experimentos se centran en predecir campos T_s para las condiciones experimentales registradas en la Tabla 3.1, con el propósito de determinar la viabilidad de estimar la temperatura del hollín en mediciones experimentales que abarquen las diversas condiciones de llama incluidas en los datos simulados. Posteriormente, utilizando el mismo modelo ANN, se realiza una evaluación en llamas no explícitamente consideradas en el entrenamiento.

5.3.1. Evaluación con llamas canónicas

La Figura 5.4 muestra los campos T_s reconstruidos para las imágenes experimentales promedio de las distintas condiciones de llama. Se emplean las estimaciones de MAE, EMI y BEMI para todas las condiciones de llama, tal como se detalló en la sección anterior. A la izquierda, se muestra el campo de referencia, seguido del error relativo de la técnica BEMI y las ANNs con respecto al campo de referencia. La línea verde sobre los campos de referencia indica la trayectoria de máximo hollín a lo largo de la altura sobre el quemador.

El centro y la derecha de la Figura 5.4 exponen la temperatura a lo largo de la línea central de la llama y la ruta del máximo f_s . Utilizando Att. U-Net, obtenemos campos T_s estimados más cercanos a los campos de referencia para todas las condiciones de llama. Como se observó en el Capítulo 4, las estimaciones BEMI tienen una subestimación de la temperatura con respecto al campo de referencia, y el error RMSE para todo el campo 2D y los perfiles aumenta en función de la concentración de hollín contenida dentro de la llama [53]. En general, el modelo Att. U-Net proporciona un campo T_s más preciso y suave en comparación con la técnica BEMI, además de corregir el efecto de no considerar medidas de extinción.

Con el fin de evaluar la resiliencia al ruido experimental de las diferentes técnicas, realizamos estimaciones de T_s utilizando BEMI y las ANNs sobre 20 imágenes individuales de llamas adquiridas para cada condición de llama en diferentes instantes de tiempo. En la Figura 5.5, las líneas continuas representan el valor medio de $\Delta T_s = |T_{ref} - T_s|$ obtenido a partir de las mediciones BEMI a lo largo de la trayectoria de máxima concentración de hollín para las diferentes imágenes. Donde T_{ref} corresponde a T_{MAE} o T_{EMI} según la condición de llama. Las bandas alrededor de las líneas continuas corresponden a la desviación estándar de ΔT_s para cada técnica, que es una medida de la variabilidad de los resultados cuando se procesan imágenes individuales de la misma llama por separado. El error medio obtenido con BEMI es sistemáticamente superior al del enfoque de Attention U-Net. Además, la variabilidad de estos errores aumenta con la altura, siendo notablemente mayor al acercarse a la punta de la llama, a partir del punto en que la concentración máxima de hollín se desplaza repentinamente desde el borde hacia el centro de la llama. La llama es más estrecha en esta región y, por tanto, hay menos información para el proceso de deconvolución. Asimismo, en la mayoría de los casos, la desviación estándar de ΔT_s es mayor en la región de la punta y la base de la llama. Estos resultados ponen de manifiesto que la deconvolución clásica utilizada en BEMI es sensible al ruido. Generalmente, ligeras variaciones en las

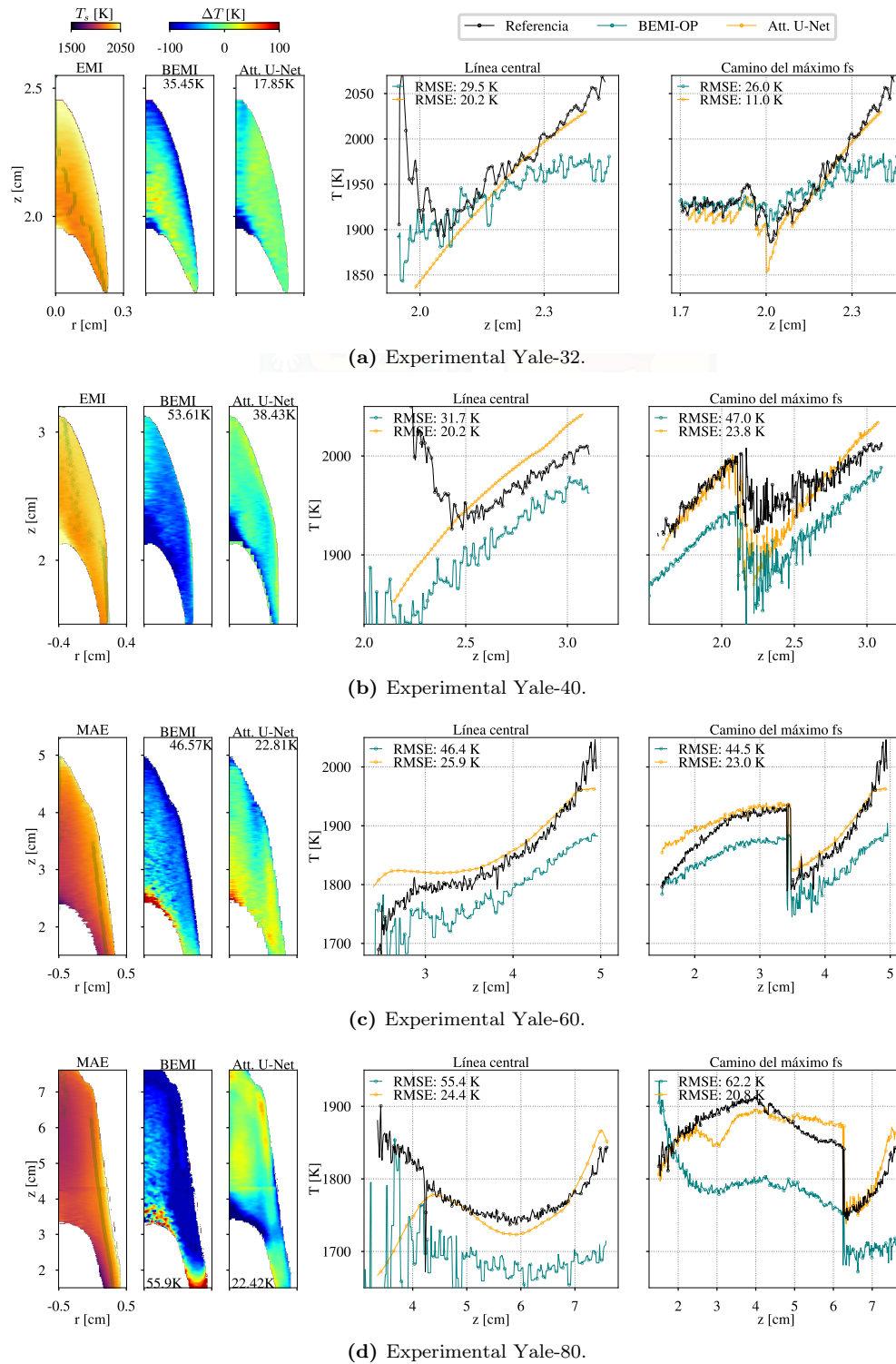


Figura 5.4: Campos T_s experimentales y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo Attention U-Net entrenado con los datos generados para las cuatro condiciones de llamas indicadas en la Tabla 3.1. Para cada subgráfico se muestran los perfiles verticales de temperatura absoluta a lo largo del camino central de la llama y la trayectoria de máxima concentración de hollín. En cada caso, se reporta el RMSE entre el campo y los perfiles de referencia (MAE o EMI) y las estimaciones obtenidas con BEMI y Attention U-Net.

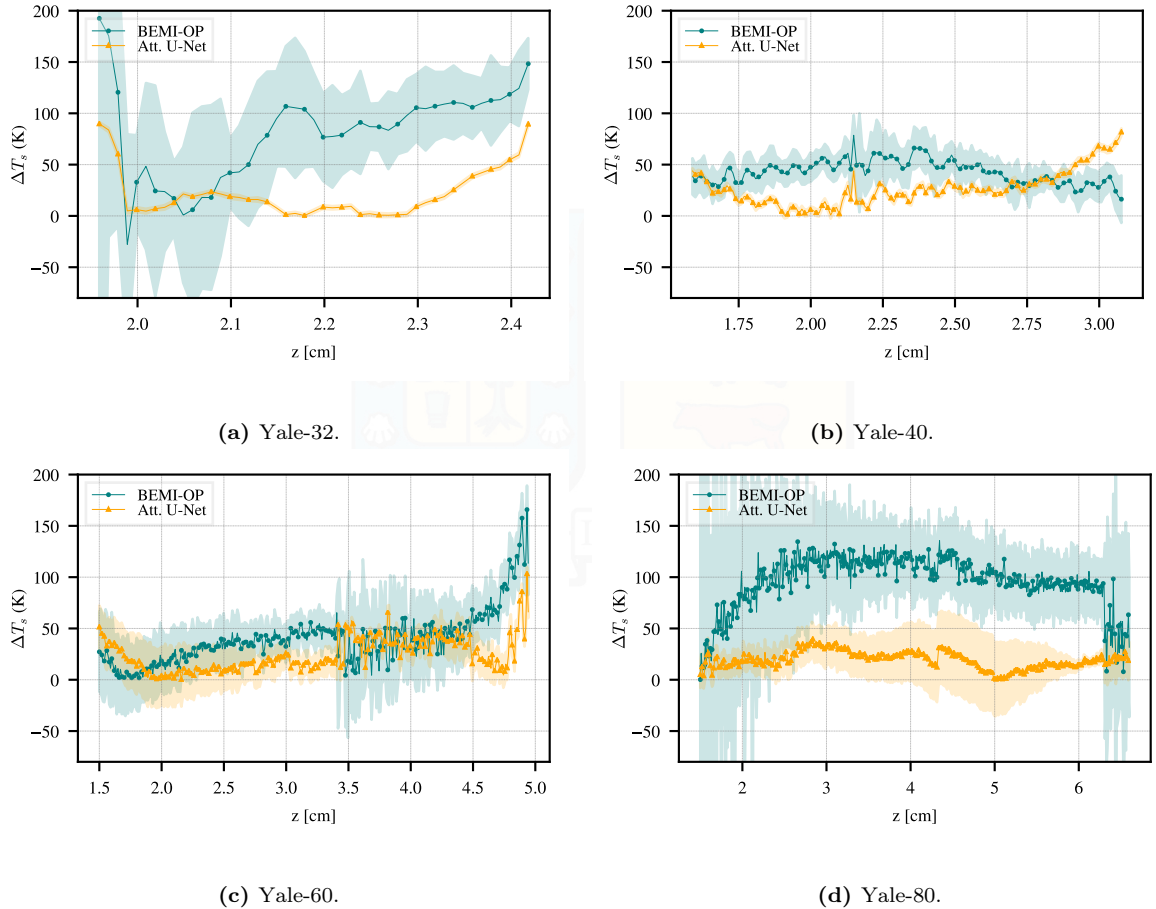


Figura 5.5: Error absoluto de T_s a lo largo del trayecto vertical de máx $\{f_s\}$ obtenido con señales BEMI utilizando OP y Attention U-Net en comparación con el obtenido con MAE/EMI para todos los casos. Las líneas continuas corresponden al error promedio obtenido a partir de 20 imágenes independientes de la llama experimental y las bandas de error representan la desviación estándar del error.

condiciones de captura (como alteraciones en la trayectoria óptica o ligeros movimientos de la llama) pueden afectar significativamente a las estimaciones de temperatura para una misma condición de llama, por lo que esta técnica se aplica habitualmente sobre una imagen media preprocesada obtenida a partir de varias capturas. Por otro lado, las ANN proporcionan sistemáticamente errores inferiores en comparación con BEMI, incluso cuando se procesa una única imagen de la llama.

La Figura 5.6 muestra la estimación de T_s para la llama experimental Yale-60 obtenida con la técnica MAE, junto con el error respecto a este campo de las predicciones realizadas por los modelos de CNN entrenados con diferentes subconjuntos de datos, según se indica en el título de cada subgráfico. En particular, se utilizan las mismas instancias de ANN empleadas en el capítulo previo, como se muestra en la Figura 4.8. En este caso, se generó el mismo gráfico pero utilizando datos experimentales. En cada campo 2D, la mitad izquierda muestra el error en la estimación de la temperatura cuando se utilizan medidas proyectadas que no están sujetas a ruido, y la mitad derecha muestra el error cuando las proyecciones contienen ruido gaussiano (ver Sección 3.2).

En la Figura 5.6, se incluyen los campos de T_s obtenidos por los modelos basados en CNNs entrenados con un subconjunto específico de Yale-60, reportados previamente en la Figura 5.3. Como se ha observado anteriormente en el Capítulo 4, las CNNs entrenadas con los subconjuntos Yale- $\{32,80\}$, Yale- $\{40,80\}$ y Yale- $\{32,40,80\}$ muestran errores notables alrededor de diferentes regiones de la llama.

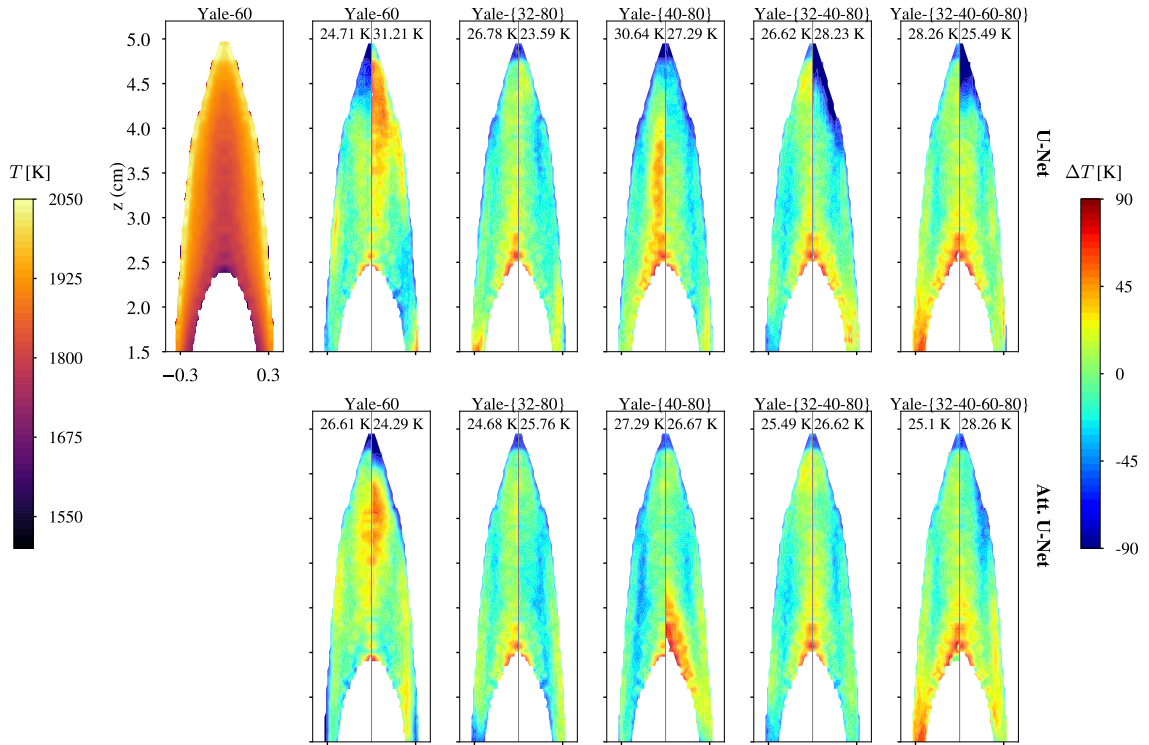


Figura 5.6: Estimación de T_s para la llama Yale-60 experimental obtenida con la técnica MAE y sus correspondientes predicciones obtenidas a partir de modelos CNN entrenados utilizando diferentes subconjuntos de datos. El número en la parte superior de cada campo corresponde al RMSE entre el campo 2D de MAE y las estimaciones con ANN.

Esto es esperable, dado que las llamas en el conjunto de entrenamiento presentan geometrías diferentes y no se consideran estadísticamente representativas, ya que no se incluyen los datos aumentados a partir de la solución Yale-60. Sin embargo, en la mayoría de las estimaciones de temperatura para la Yale-60 experimental, se reduce el error en las regiones cercanas a la punta de la llama en comparación con el campo obtenido con las CNNs entrenadas con el subconjunto específico de Yale-60. Estos resultados destacan la importancia de proporcionar un conjunto de datos con un cierto grado de variabilidad, lo que permite a las CNNs aprovechar sus capacidades y generalizar sobre ejemplos no proporcionados previamente. Los modelos CNN entrenados con los subconjuntos Yale-{32,40,60,80} pueden recuperar campos 2D de T_s para distintas condiciones de llama, al mismo tiempo que obtienen estimaciones de temperatura cercanas a las estimadas con la técnica MAE utilizando un único modelo (como se muestra en la Figura 5.4).

En general, independientemente del subconjunto de entrenamiento, se observa que las CNNs entrenadas con ruido gaussiano añadido a las proyecciones representan campos más cercanos a la técnica de referencia MAE. Estos resultados sugieren que es posible reconstruir un campo 2D de T_s con un bajo error, a pesar de no incluir explícitamente datos simulados con CoFlame durante la generación de conjuntos de datos para entrenar los modelos de ANNs. Por lo tanto, en la siguiente sección se evalúa el modelo entrenado con datos generalizados Yale-{32,40,60,80} utilizando condiciones de llama no incluidas en los datos de entrenamiento. Se espera que las variaciones tanto geométricas como cuantitativas en las soluciones CoFlame originales logren abarcar condiciones de llama que representen condiciones intermedias.

Tabla 5.1: Condiciones de llama para validar la metodología propuesta usando mediciones experimentales de llamas con condiciones no consideradas explícitamente en el entrenamiento de la ANN.

Flame ID	C_2H_4 (cm ³ /min)	N_2 (cm ³ /min)	Air (L/min)	Height (mm)
Yale-50	125.43	125.43	98.36	43.0
Yale-70	175.60	75.26	98.36	68.7

5.3.2. Evaluación de capacidad de interpolación a nuevos datos

En esta sección, se amplían los experimentos realizados en la sección anterior para evaluar las capacidades de generalización de las ANNs al procesar datos de llamas no explícitamente consideradas en los datos de entrenamiento. El objetivo consiste en determinar si durante la etapa de entrenamiento, las ANNs pueden capturar características representativas de los fenómenos observados y luego interpolar para llamas experimentales con condiciones no explícitamente suministradas durante el entrenamiento. Para llevar a cabo esta evaluación, se utiliza el modelo de Attention U-Net previamente entrenado con datos generalizados de Yale- $\{32,40,60,80\}$ para estimar campos de T_s correspondientes a las condiciones detalladas en la Tabla 5.1. Se espera que las llamas generadas mediante el aumento de datos a partir de las condiciones de referencia representen condiciones intermedias, creando conjuntos de datos que abarquen un amplio espacio de características para el entrenamiento de las ANNs y que permitan la generalización sobre nuevos datos de entrenamiento.

A continuación, se detallan las configuraciones experimentales empleadas tanto por MAE como por BEMI para adquirir las mediciones de las llamas, utilizando ambas configuraciones ópticas:

1. Las mediciones MAE tienen una resolución espacial de 22,3 px/mm y tiempo de exposición de 0.5 ms para las condiciones Yale-50 y Yale-70.
2. Las mediciones adquiridas usando el arreglo óptico de BEMI tienen tiempos de exposición de 5.2 y 4.9 ms para las condiciones Yale-50 y Yale-70, respectivamente. Las mediciones tienen una resolución de 18.6 px/mm después de aplicar un *pixel binning* de 2×2 .

La Figura 5.7 muestra los campos T_s estimados empleando pirometría MAE de un color (800 nm \pm 25 nm), BEMI-OP y Att. U-Net para las llamas experimentales Yale-50 y Yale-70. Para cada caso, lo subgráficos del centro y la derecha corresponden a la temperatura absoluta a lo largo de la línea central y temperatura en la ruta vertical de máximo f_s . Los resultados obtenidos tanto para las imágenes de llama de Yale-50 como de Yale-70 confirman las tendencias reportadas en secciones anteriores, donde se observa que BEMI-OP tiende a subestimar la temperatura, mientras que las predicciones obtenidas con las ANNs se acercan más a las técnicas clásicas que consideran medidas de extinción. A pesar de que las estimaciones de Att. U-Net presentan desviaciones y errores en algunas secciones de la llama, lo que es esperable al no suministrar datos que explícitamente representen estas condiciones de llamas, mantienen las tendencias en los perfiles y la estructura de los campos T_s en comparación con MAE. En general, los resultados obtenidos permiten verificar que la metodología propuesta puede realizar estimaciones de temperatura en llamas con características estadísticas similares a las llamas simuladas a partir de las cuales se generaron los datos aumentados.

En general, los resultados muestran que una ANN correctamente entrenada con un conjunto representativo de llamas simuladas puede generalizar al estimar la temperatura del hollín en un conjunto de datos que representa condiciones intermedias, incluso si estos datos no fueron incluidos en el conjunto de entrenamiento. Estos resultados resaltan la aplicabilidad práctica potencial de las ANNs en entornos de laboratorio, ya que permiten obtener estimaciones consistentes de T_s a partir de señales recopiladas en diversas condiciones de llama. Además, simplifican el proceso de recolección de datos al requerir configuraciones ópticas y experimentales menos complejas. Por último, una ANN entrenada adecuadamente utilizando señales de emisión de banda ancha puede inferir campos de temperatura del hollín que tienen en cuenta el efecto de auto-absorción, corrigiendo la subestimación de la temperatura típica en los métodos clásicos.

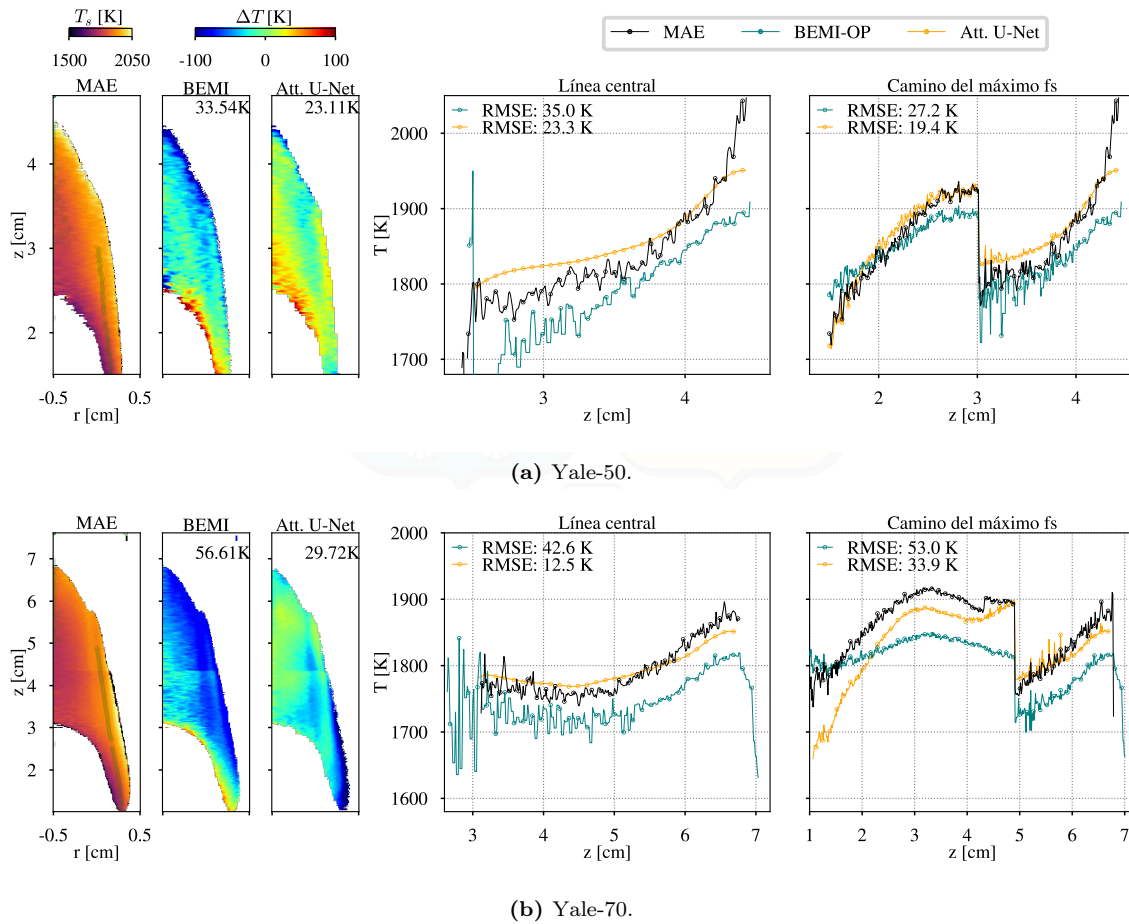


Figura 5.7: Campos T_s experimentales y sus correspondientes predicciones utilizando un único modelo Attention U-Net entrenado con datos generalizados Yale- $\{32,40,60,80\}$, se emplea para estimar campos de T_s correspondientes a las condiciones reportadas en la Tabla 5.1. Para cada subgráfico se muestran los perfiles verticales de temperatura absoluta a lo largo del camino central de la llama y la trayectoria de máximo f_s . En cada caso, se reporta el RMSE entre el campo y los perfiles de referencia MAE y las estimaciones obtenidas con BEMI-OP y Attention U-Net.

5.4. Evaluación de la robustez al ruido de las técnicas basadas en señales BEMI

En la pirometría de hollín con cámaras a color, es importante que las señales capturadas no sean alteradas durante el posprocesamiento realizado a las señales capturadas por el sensor interno de la cámara. Generalmente, las imágenes se guardan en formato RAW para evitar la corrección de la intensidad de píxeles, la corrección gamma y otros ajustes internos de la cámara. Esto se hace con el fin de preservar las intensidades de píxeles originales detectadas por el sensor de la cámara. Esta práctica es crucial en aplicaciones de pirometría, donde incluso pequeñas correcciones en las intensidades detectadas pueden afectar los valores estimados con desviaciones e incertidumbres.

Generalmente, las técnicas de pirometría de hollín requieren personal experto en sensores ópticos, por lo que la recolección de imágenes de llama por personal no experto puede conducir a errores durante la recolección y el posprocesamiento de señales experimentales. Debido a que no en todas las cámaras a color disponibles en el mercado es sencillo el procedimiento para extraer las imágenes en formato RAW, en algunos casos, las herramientas de software para la adquisición de imágenes son susceptibles

Tabla 5.2: Parámetros de ganancia y tiempos de exposición para capturar mediciones experimentales de la llama experimental Yale-60.

Parámetros para captura de datos	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Ganancia [dB]	0	5	10	15	20
Tiempo de exposición [ms]	4.7	2.4	1.4	0.79	0.45

a la elección de parámetros ajustables, lo que conduce a distintas intensidades detectadas. Además, los resultados presentados previamente muestran una sensibilidad al ruido de la técnica BEMI, la cual puede ser causada principalmente por leves movimientos en la llama o variaciones en las condiciones de captura (ver Figura 5.5).

En esta sección se evalúa la robustez al ruido de la metodología basada en ANNs y de la técnica clásica BEMI. En el siguiente experimento, se recolectan imágenes de llama utilizando el setup BEMI descrito en la Sección 5.1, variando el parámetro de ganancia interna de la cámara entre 0 y 20 dB. Esto introduce un cierto nivel de ruido en las señales experimentales capturadas, con el fin de representar perturbaciones encontradas en campañas experimentales. La Tabla 5.2 muestra las distintas configuraciones de parámetros de ganancia y tiempos de exposición para capturar señales experimentales. Asimismo, para cada caso específico se ajustó el tiempo de exposición con el fin de maximizar la detección de la señal sin saturar las imágenes.

La Figura 5.8 muestra la media (μP_i) y la desviación estándar (σP_i) de 100 imágenes de emisión de llama capturas para la configuración experimental Yale-60 usando distintas configuraciones de ganancia interna para la captura. A modo de referencia en la parte izquierda, se provee el campo 2D de las imágenes μP_i y σP_i para el Caso 5, sobre los cuales se marca una región de interés (ROI) marcada en rojo y azul para μP_i y σP_i , respectivamente. En la derecha, se muestran las secciones ROI recortadas de los campos μP_i y σP_i en cada caso, las cuales corresponden al fondo. Para cada subgráfico se reportan la desviación estándar de los píxeles que conforman el ROI.

Durante la captura de las imágenes experimentales, se espera que la región del fondo ROI de cada imagen corresponda a baja intensidad de píxeles. Sin embargo, se observa que la función de ganancia de la cámara permite aumentar el brillo de las imágenes emitidas, lo que a su vez genera distorsiones en algunas intensidades de píxeles. Del mismo modo, el valor medio y la desviación estándar reportados para los grupos de píxeles que conforman cada ROI en los subgráficos de la Figura 5.8 muestran cómo al aumentar el parámetro de ganancia se presentan distorsiones en los valores de píxeles capturados. Para el Caso 5, que representa el experimento con mayor ruido añadido, las distorsiones en los valores de píxeles capturados representan, en el peor de los casos, un 0.47% de la profundidad de píxel de la cámara (12 bits).

La Figura 5.9 muestra los campos de temperatura estimados por Att. U-Net, previamente entrenado con datos generalizados de Yale- $\{32,40,60,80\}$, y la técnica BEMI-OP para las cinco configuraciones de ganancia interna y tiempos de exposición. El título sobre cada subgráfico corresponde a la configuración empleada para capturar las señales. Los resultados evidencian la sensibilidad de la técnica BEMI-OP al desconvolucionar campos que presentan pequeñas distorsiones en los valores de píxeles capturados. En contraste, las estimaciones de temperatura obtenidas usando Att. U-Net muestran una estructura similar y un bajo error de reconstrucción en todos los casos.

En la Figura 5.9 se reportan dos estimaciones de temperatura del hollín para el Caso 1, las cuales fueron adquiridas en campañas experimentales realizadas en distintos meses. Estas medidas fueron adquiridas usando la misma configuración experimental y el mismo equipo de personas, por lo que, se repite el mismo procedimiento de medición para adquirir las señales a partir de las cuales se estiman los campos de T_s . Asimismo, se usó el mismo sistema de medición, bajo las mismas condiciones de operación, en la misma ubicación en dos ensayos. Por otra parte, se sintonizó un solo parámetro de regulación $\alpha = 10^{-6}$ para todas las estimaciones de BEMI-OP, a fin de establecer un escenario equitativo para realizar evaluación y obtener resultados medianamente repetibles.

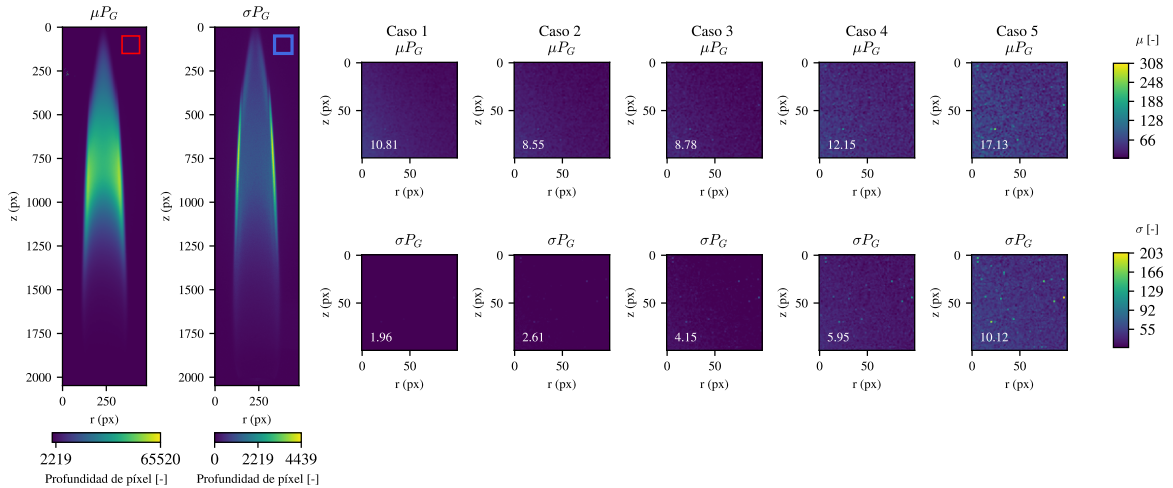


Figura 5.8: Proyecciones al plano de la cámara recolectadas bajo distintas configuraciones de captura para la llama experimental Yale-60.

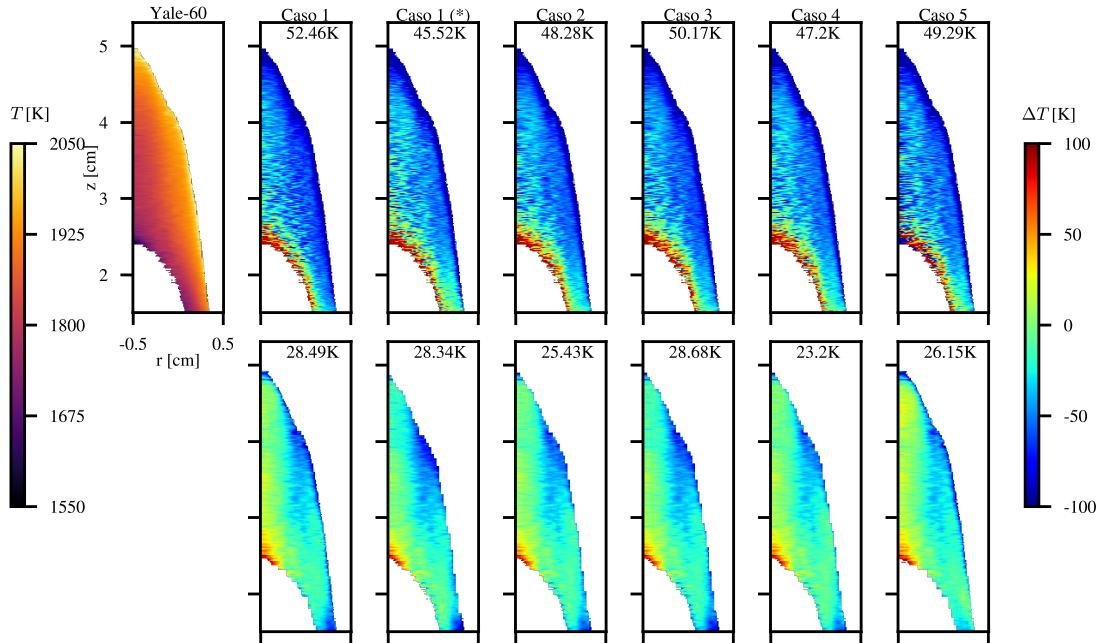
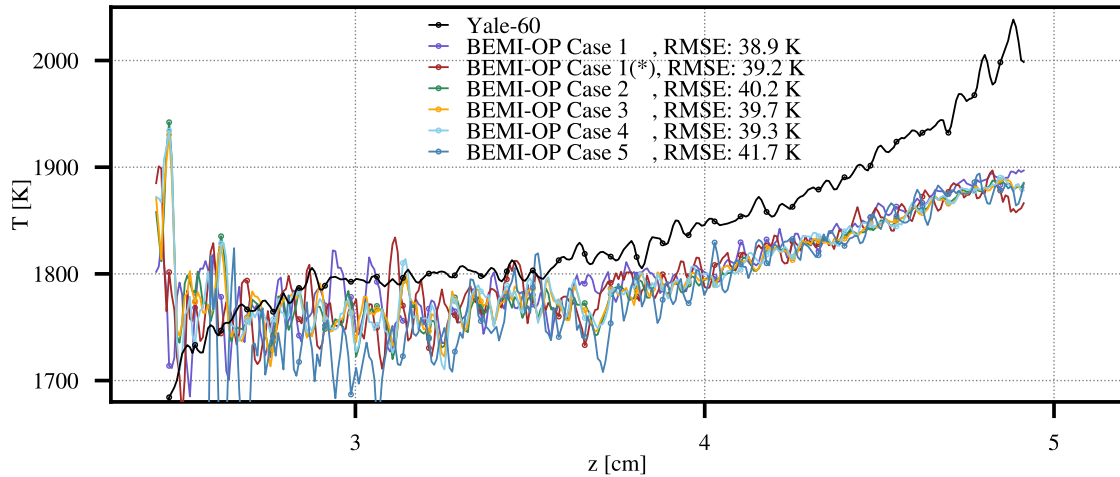


Figura 5.9: Campos de temperatura absoluta estimada para las distintas configuraciones de captura de datos. La fila superior corresponde a BEMI-OP y la fila inferior a las estimaciones de temperatura obtenidas usando Att. U-Net. El caso 1 marcado con (*) corresponde a mediciones del caso 1 realizadas en otra campaña experimental. El número en la parte superior de cada campo corresponde al RMSE entre el campo 2D obtenido con MAE y las estimaciones con ANN.

Las Figuras 5.10 y 5.11 muestran la temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y trayectoria de $\max\{f_s\}$. Los resultados obtenidos presentan pequeñas diferencias y desviaciones entre las estimaciones de los valores estimados y el error obtenido por BEMI-OP y Att. U-Net con respecto a la técnica MAE. Los campos estimados exponen tendencias similares para todos los casos, con diferencias tanto en el RMSE estimado a nivel de campo como en los perfiles de temperatura, que pueden asociarse a las incertidumbres en la caracterización de la configuración experimental y procedimiento de deconvolución.



(a) Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical.

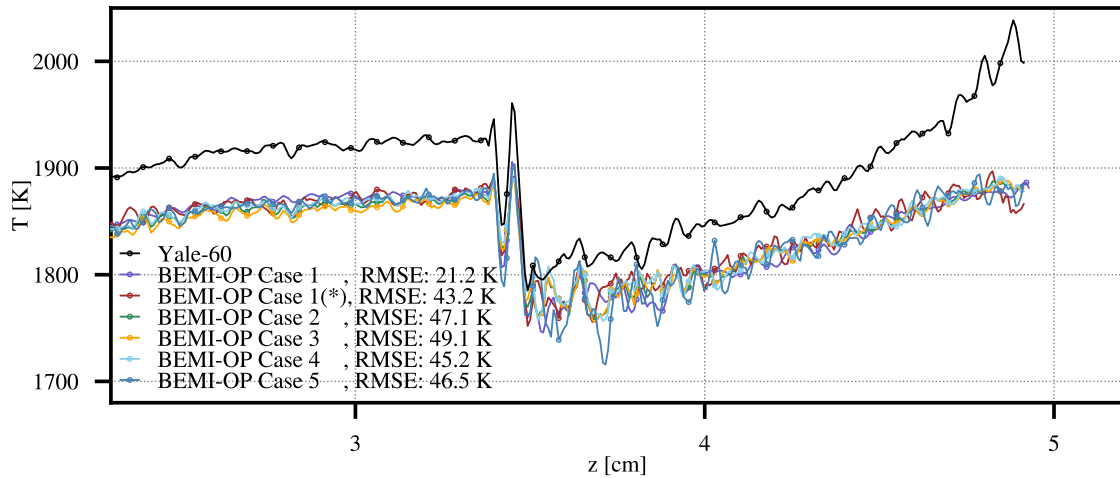
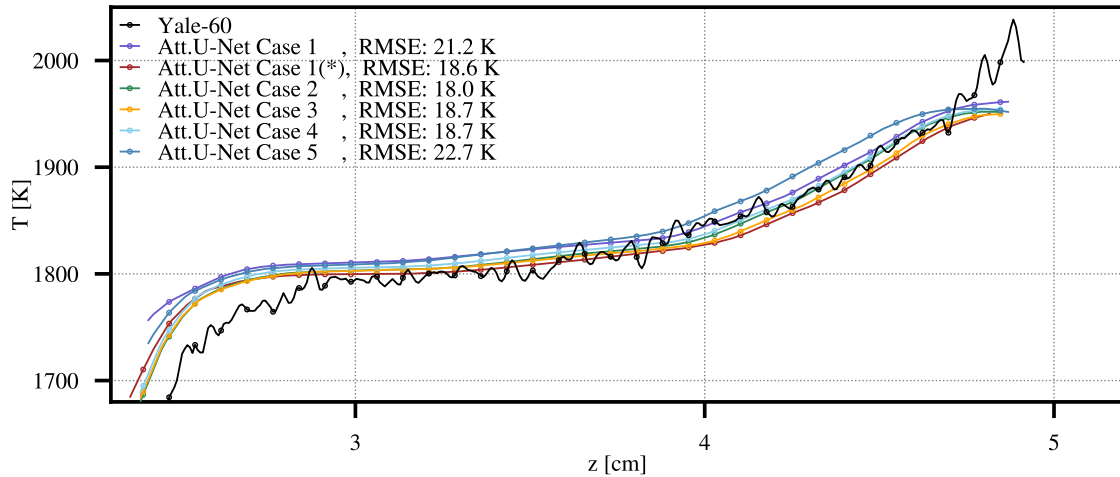

 (b) Temperatura absoluta a lo largo de la trayectoria de $\max\{f_s\}$.

Figura 5.10: Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y trayectoria de $\max\{f_s\}$ para todos los casos empleando BEMI-OP. En cada caso se reporta el RMSE entre los perfiles de referencia y las estimaciones de BEMI-OP.

En resumen, las estimaciones obtenidas con Attention U-Net evidencia una buena tolerancia al ruido y una baja sensibilidad a las perturbaciones generadas por la elección de parámetros para la captura de datos. Los resultados obtenidos hasta esta sección validan la utilidad práctica de los enfoques de pirometría de hollín usando ANNs, y se establece que a partir de una única ANN entrenada para un arreglo óptico determinado puede generalizar para predecir la temperatura en un amplio rango de condiciones de llama, las cuales también pueden estar sujetas a ruido experimental. Sin embargo, esta pendiente validar si esta metodología funciona para distintos arreglos ópticos conformados por elementos de distinto nivel de sofisticación.



(a) Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical.

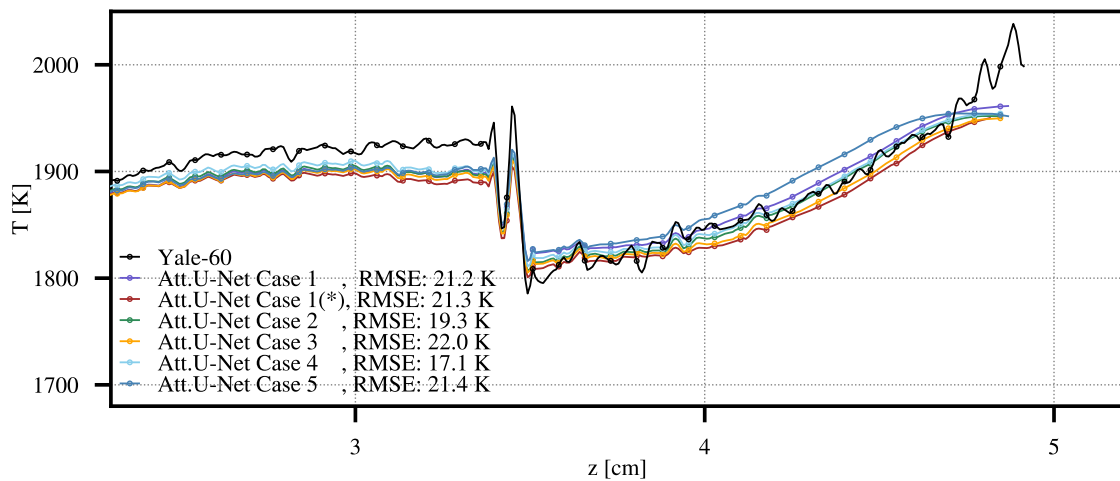
(b) Temperatura absoluta a lo largo de la trayectoria de $\max\{f_s\}$

Figura 5.11: Temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y trayectoria de $\max\{f_s\}$ para todos los casos de configuración de parámetros de captura de datos empleando Att. U-Net. En cada caso se reporta el RMSE entre los perfiles de referencia y las estimaciones de Attention U-Net.

5.5. Validación usando distintas cámaras RGB

En las secciones anteriores, se ha demostrado que una sola red puede realizar estimaciones eficientes de campos T_s en diversas condiciones de llama. Sin embargo, los datos simulados tienen en cuenta los efectos del equipo óptico para obtener el modelo inferido. Esto implica que se debe entrenar una ANN diferente para cada configuración óptica, lo que también requiere caracterizar el arreglo óptico utilizado. En esta sección, se propone llevar a cabo una validación general de la metodología para la pirometría de hollín utilizando ANNs con distintos equipos ópticos y otro quemador de referencia.

Las evaluaciones reportadas en esta sección se llevaron a cabo previamente de la implementación y validación de Attention U-Net. Por lo tanto, la evaluación del procedimiento en esta sección se realiza utilizando únicamente U-Net y MLP para la pirometría de hollín con señales BEMI, similar a la evaluación realizada en la Sección 5.2. Se prueba la metodología llevando a cabo la pirometría de hollín para una única llama CLAD de referencia utilizando diferentes cámaras. La llama experimental

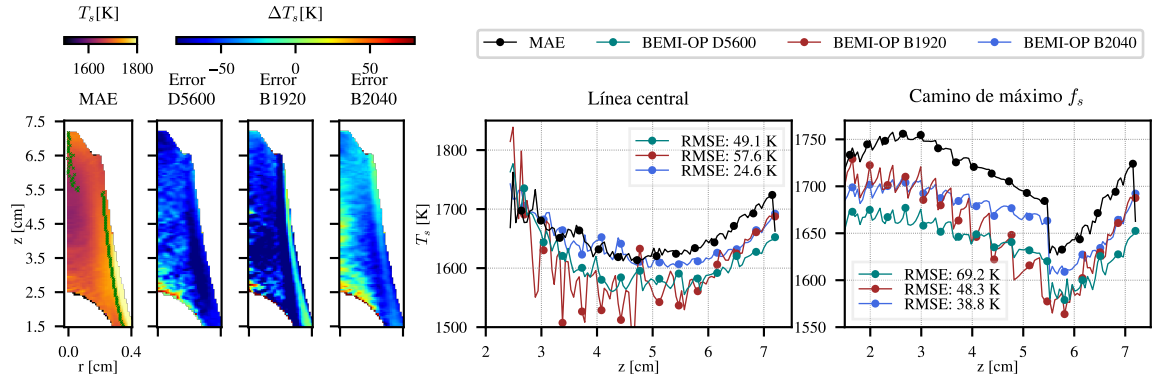


Figura 5.12: Estimación de T_s para la llama de Gülder experimental obtenida con MAE tradicional y BEMI-OP utilizando las diferentes cámaras. El panel izquierdo muestra el campo de temperatura absoluta obtenido con MAE, y los errores al comparar el campo MAE de referencia con los obtenidos con BEMI-OP. La línea verde sobre el campo MAE indica la trayectoria de máxima concentración de hollín. Los gráficos central y derecho muestran la temperatura absoluta obtenida con cada cámara a lo largo de la línea central de la llama y la trayectoria de máxima concentración de hollín. El RMSE representa el error de temperatura para todo el perfil en comparación con la estimación MAE.

utilizada para validar la metodología se generó utilizando un quemador Gülder [95], alimentado con 0,194 slpm de etileno puro a través del tubo central del quemador y 150 slpm de aire de coflow (21 °C, 1 bar) a través del tubo exterior anular.

Para recolectar las señales de radiación termal requeridas para la pirometría de hollín utilizando BEMI, se ensamblaron tres arreglos ópticos (sin la fuente LED):

1. Cámara Nikon D5600 de 14 bits (denominada D5600 en el resto de la sección) de 24 megapíxeles acoplada a una lente Nikkor de 105 mm.
2. Cámara Basler acA1920-50gc de 12 bits (B1920) de 2,3 megapíxeles con un sensor CMOS Sony IMX174 y una lente Nikon AF-S Nikkor 18-140 mm (distancia focal de $f = 80$ mm).
3. Cámara Basler acA2040-55uc de 12 bits (B2040) de 3 megapíxeles con un sensor CMOS Sony IMX265 y una lente Navitar NMV-50mm.

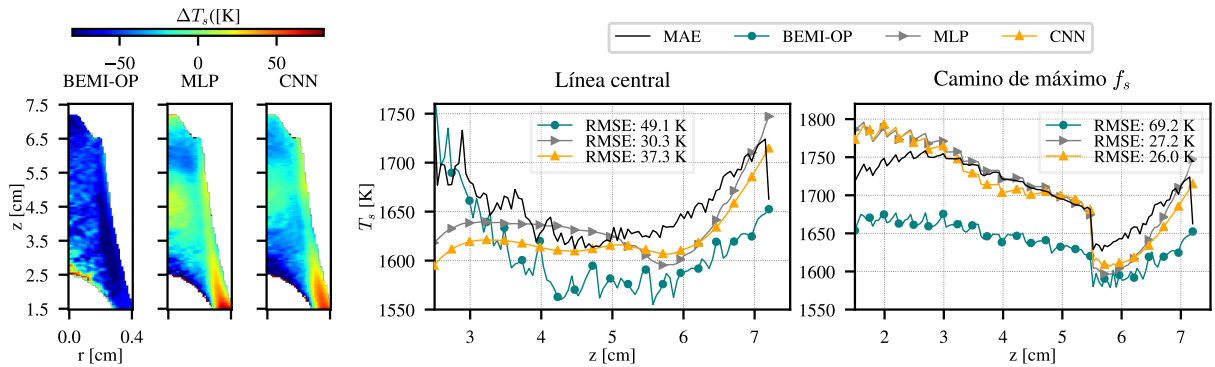
Utilizando los valores caracterizados de η_λ para cada arreglo óptico, se siguió el mismo procedimiento de generación de datos que se muestra en la Sección 3.1. En este caso, la solución de referencia CoFlame corresponde a una llama Gülder con condiciones similares a la llama experimental. Para obtener más detalles sobre la captura de los datos experimentales y el proceso de generación de datos simulados para el entrenamiento de las ANNs, consultar [76].

La Figura 5.12 muestra los campos T_s reconstruidos para la imagen promedio utilizando MAE de banda estrecha de dos colores (532 ± 5 y 660 ± 5 nm) y BEMI-OP clásico utilizando para las diferentes cámaras. El panel izquierdo muestra todo el campo T_s , incluyendo la temperatura absoluta obtenida por MAE y el error de BEMI-OP clásico relativo a MAE. La línea verde sobre la llama en el campo MAE indica la trayectoria radial del máximo f_s . Dado que las cámaras tienen diferente resolución espacial, la región de la llama se recortó y redimensionó a 128×40 píxeles (1,75 px/mm) mediante interpolación bicúbica para ajustarla al formato de entrada utilizado por las ANNs. Las imágenes de llama resultantes también se alinean con la forma de la obtenida con MAE. De forma similar a lo observado para los datos simulados y los datos experimentales en las secciones anteriores, BEMI tiende a subestimar la temperatura en comparación con MAE. Los gráficos del centro y de la derecha muestran la temperatura absoluta a lo largo de la línea central vertical y la trayectoria del máximo $\{f_s\}$, respectivamente.

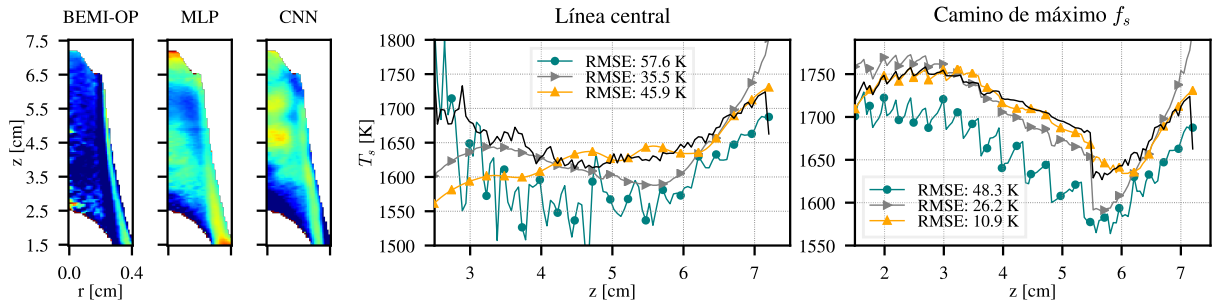
La Figura 5.13 muestra las estimaciones de T_s utilizando BEMI-OP y los métodos basados en ANN para todas las cámaras. Los paneles de la izquierda muestran los errores para todo el campo T_s en relación con el campo MAE de la Figura 5.12). En todos los casos, tanto los modelos MLP como U-Net (denominada CNN en el resto de la sección) proporcionan temperaturas más cercanas a las obtenidas con MAE en comparación con BEMI-OP. El gráfico del panel central muestra que ambas ANN proporcionan un perfil de temperatura suave a lo largo de la línea central vertical. Asimismo, el perfil vertical a lo largo de la trayectoria del máximo f_s muestra un comportamiento similar, con las ANN siguiendo las estimaciones obtenidas con MAE, excepto en las zonas alrededor de la base y la punta de la llama.

Para evaluar la resistencia al ruido experimental de las diferentes técnicas, se repite el procedimiento reportado previamente en la Sección 5.3.1, usando BEMI-OP y las ANNs sobre 20 imágenes individuales de llama adquiridas con cada uno de los tres arreglos ópticos BEMI establecidos. En la Figura 5.14, las líneas continuas representan el valor medio de $\Delta T_s = |T_{MAE} - T_s|$ obtenido a partir de las mediciones BEMI a lo largo de la trayectoria de máxima concentración de hollín para las distintas imágenes. Las bandas alrededor de las líneas continuas corresponden a la desviación estándar de ΔT_s para cada técnica, que es una medida de la variabilidad de los resultados cuando se procesan imágenes individuales de la misma llama objetivo por separado. Para todos los arreglos ópticos los errores obtenidos con las ANNs son menores que los obtenidos por BEMI-OP. Asimismo, como se ha reportado anteriormente, la variabilidad del error aumenta con la altura, siendo notablemente mayor en la región de la punta de la llama.

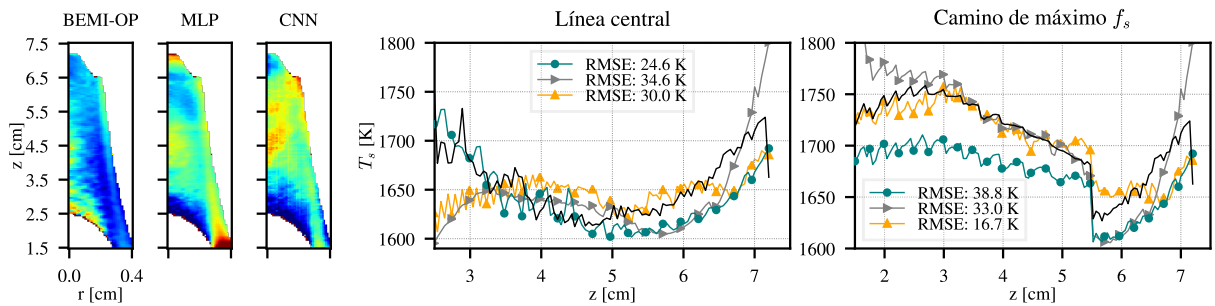
Los resultados evidencian la utilidad práctica de la metodología para realizar mediciones consistentes, así como su versatilidad para operar con cámaras a color de diferentes gamas. En términos generales, las estimaciones obtenidas por la metodología basada en ANN son similares a las obtenidas con la técnica MAE, aunque se considera un arreglo óptico simple.



(a) Nikon D5600, el RMSE entre los campos T_s obtenidos con la técnica MAE y BEMI, MLP y CNN son 162K, 155,9K, 156,5K, respectivamente.



(b) Basler aca1920-50gc, los RMSE entre los campos T_s obtenidos con la técnica MAE y BEMI, MLP y CNN son 153,9K, 155,2K, 151,1K, respectivamente.



(c) Basler acA2040-55uc, los RMSE entre los campos T_s obtenidos con la técnica MAE y BEMI, MLP y CNN son 156,4K, 157,2K, 155,8K, respectivamente.

Figura 5.13: Comparación de los campos T_s obtenidos con MAE y los obtenidos con señales BEMI utilizando OP, MLP y CNN para la llama experimental. El panel izquierdo muestra el error de los campos obtenidos con las tres técnicas utilizando señales BEMI cuando se comparan con MAE. Los gráficos central y derecho muestran la temperatura absoluta del hollín para los perfiles verticales a lo largo de la línea central y la trayectoria de máxima concentración de hollín, respectivamente. El RMSE representa el error de temperatura para todo el perfil cuando se compara con la estimación MAE.

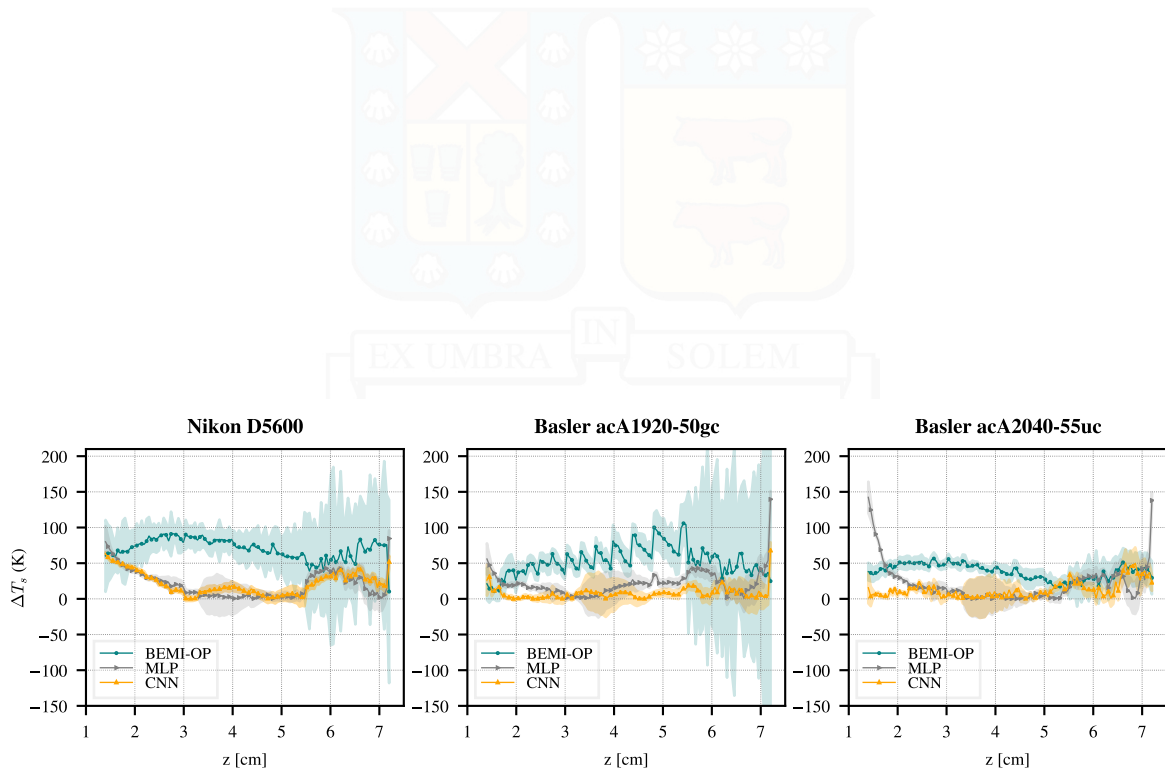


Figura 5.14: Error absoluto de T_s a lo largo de la trayectoria vertical de $\max\{f_s\}$ obtenido con señales BEMI utilizando OP y ANNs al compararlo con lo obtenido con MAE para todas las cámaras. Las líneas continuas corresponden al error medio obtenido a partir de 20 imágenes independientes de la llama experimental y las bandas de error representan la desviación estándar del error.

6 | Conclusiones y trabajo futuro

Este trabajo presentó una metodología para realizar pirometría de hollín en llamas CLAD utilizando imágenes de emisiones radiativas de banda ancha capturadas con cámaras a color. El método utiliza ANNs entrenadas con datos simulados numéricamente para resolver el problema inverso requerido para recuperar los campos de temperatura a partir de las proyecciones de emisión integradas en la línea vista del sensor. Las evaluaciones realizadas con datos simulados y experimentales muestran las siguientes ventajas del uso de las ANNs sobre la deconvolución numérica tradicional para la pirometría del hollín: (i) las ANNs son significativamente menos sensibles al ruido experimental y proporcionan estimaciones de temperatura consistentes a partir de señales obtenidas bajo diferentes condiciones experimentales; y (ii) una ANN adecuadamente entrenada usando señales BEMI puede inferir un modelo inverso que incorpora el efecto de la auto-absorción, corrigiendo la subestimación de temperatura que suele manifestarse al estimar la temperatura resolviendo el problema inverso mediante deconvolución numérica.

En relación con el entrenamiento de los algoritmos de ANNs, se presenta evidencia que demuestra la viabilidad de emplear datos generados mediante simulaciones numéricas con base física de llamas canónicas, a fin de entrenar ANNs capaces de predecir consistentemente la temperatura de hollín en llamas experimentales. La metodología para la generación de datos adoptada en este trabajo permite la generación de conjuntos de datos simulados suficientemente extensos para ser estadísticamente representativos de un amplio rango de condiciones de operación que pueden ocurrir en entornos experimentales. El uso de conjuntos de datos simulados utilizando modelos numéricos que ya han sido validados por la comunidad entrega una base para verificar la validez de las estimaciones teóricas con métricas cuantitativas, aumentando la confiabilidad de los resultados en comparación a otras metodologías que entrenan las redes basándose en mediciones experimentales previas que pueden contener errores en las estimaciones.

Se reporta además una evaluación de las capacidades de generalización de los modelos de ANNs, donde se establecen restricciones en los intervalos de operación para que un mismo modelo de ANN, entrenado con un conjunto de ejemplos representativos, pueda ser empleado para estimar la temperatura del hollín en llamas CLAD con distintas geometrías y distribuciones de temperatura generadas en un mismo quemador canónico. Los resultados obtenidos demuestran que es posible que un modelo de ANN debidamente entrenado pueda estimar valores de temperatura sobre múltiples condiciones de llama, incluso para llamas no contempladas previamente en el conjunto de datos de entrenamiento. Esto se logra con el requisito de que el conjunto de datos simulados represente llamas con características estadísticas cercanas a la llama objetivo. En relación con las evaluaciones sobre la aplicación de la metodología utilizando distintos quemadores de referencia y disposiciones de arreglos ópticos BEMI, se evidencia la utilidad práctica y la versatilidad de la metodología al permitir la integración de elementos ópticos de diferentes niveles de sofisticación. No obstante, se identifica que las características de transmisividad espectral de las componentes ópticas del montaje experimental tienen un efecto preponderante en las proyecciones capturadas para una misma llama, lo cual establece el requisito de implementar y diseñar una red para cada arreglo óptico.

Finalmente, en base al estudio realizado, es posible concluir que la metodología propuesta basada en ANNs para realizar pirometría de hollín utilizando señales BEMI, posibilita obtener estimaciones de

temperatura de hollín comparables a las obtenidas mediante la técnica MAE, pero requiriendo una configuración experimental mucho más simple. Por consiguiente, los resultados presentados permiten validar las principales hipótesis para este trabajo, demostrándose que las ANNs son herramientas efectivas para reducir los costos asociados a los experimentos de monitoreo de temperatura de hollín normalmente realizados en entornos científicos.

A partir del desarrollo del trabajo de investigación, se identificaron varias aristas que ameritan mayor investigación y se plantean como alternativas de trabajo futuro:

- La tarea de empaquetar los algoritmos desarrollados para caracterizar la temperatura del hollín en llamas CLAD en una plataforma computacional embebida con interfaces de uso enfocadas en la usabilidad. La disponibilidad de una plataforma computacional de bajo costo y fácil de usar incentivaría la utilización de las herramientas desarrolladas dentro de entornos de laboratorio por distintos grupos de investigación, fomentando a su vez la validación cruzada, escrutinio de los resultados, y retroalimentación por parte de otros investigadores. Un objetivo a mediano plazo es lograr validar la reproducibilidad, repetibilidad, y replicabilidad de las técnicas propuestas, con el fin de obtener estimaciones confiables que permitan reducir el trabajo asociado a las mediciones en llamas CLAD para así avanzar en la generación de modelos en regímenes más complejos.
- Se recomienda la evaluación de las redes neuronales informadas por la física (*Physics-informed Neural Networks* o PINNs) para integrarlas a la metodología propuesta orientada a caracterizar otras propiedades del hollín. Las PINNs incorporan ecuaciones diferenciales parciales asociadas con el proceso físico dentro del modelo de ANN, actuando como un término de regularización añadido a la función de costo.
- En cuanto al uso de técnicas basadas en aprendizaje automático en aplicaciones de llamas turbulentas y llamas pulsadas acústicamente, se recomienda enfocarse en la construcción de conjuntos de datos. Específicamente, se recomienda explorar el uso de *Generative Adversarial Networks* para la generación de conjuntos de datos sintéticos con base física.
- Se recomienda utilizar la metodología propuesta para la caracterización de los campos de temperatura del hollín en el estudio de su madurez. Además, esta misma metodología puede emplearse para estimar la concentración de CO₂ u otras propiedades del hollín, y así calcular posteriormente el flujo radiativo. Finalmente, utilizando únicamente los campos de temperatura obtenidos a partir de las señales de emisión y teniendo en cuenta que los modelos de ANNs son entrenados considerando los efectos de la auto-absorción, sería posible estimar la fracción en volumen de hollín a partir de las proyecciones en el plano de la cámara y la temperatura obtenida.

Bibliografía

- [1] P. Moriarty and D. Honnery, “Hydrogen’s role in an uncertain energy future,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, no. 1, pp. 31–39, 2009.
- [2] U. Lohmann, F. Friebel, Z. Kanji, F. Mahrt, A. Mensah, and D. Neubauer, “Future warming exacerbated by aged-soot effect on cloud formation,” *Nature Geoscience*, vol. 13, pp. 674–680, 10 2020.
- [3] R. Dobbins and H. Subramaniasivam, “Soot precursor particles in flames,” in *Soot formation in combustion*. Springer, 1994, pp. 290–301.
- [4] J. Xi and B.-J. Zhong, “Soot in diesel combustion systems,” *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*, vol. 29, no. 6, pp. 665–673, 2006.
- [5] T. Bond, S. Doherty, D. Fahey, P. Forster, T. Berntsen, B. DeAngelo, M. Flanner, S. Ghan, B. Kärcher, D. Koch *et al.*, “Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment,” *Journal of geophysical research: Atmospheres*, vol. 118, no. 11, pp. 5380–5552, 2013.
- [6] S. Baek, R. Field, M. Goldstone, P. Kirk, J. Lester, and R. Perry, “A review of atmospheric polycyclic aromatic hydrocarbons: sources, fate and behavior,” *Water, Air, and Soil Pollution*, vol. 60, no. 3, pp. 279–300, 1991.
- [7] A. Juárez-Facio, C. Castilla, C. Corbière, H. Lavanant, C. Afonso, C. Morin, N. Merlet-Machour, L. Chevalier, J.-M. Vaugeois, J. Yon, and C. Monteil, “Development of a standardized in vitro approach to evaluate microphysical, chemical, and toxicological properties of combustion-derived fine and ultrafine particles.” *Journal of Environmental Sciences*, vol. 113, pp. 104–117, 2022.
- [8] Z. Ristovski, B. Miljevic, N. Surawski, L. Morawska, K. Fong, F. Goh, and I. Yang, “Respiratory health effects of diesel particulate matter,” *Respirology*, vol. 17, no. 2, pp. 201–212, 2012.
- [9] C. Pope III and D. Dockery, “Health effects of fine particulate air pollution: lines that connect,” *Journal of the Air & Waste Management Association*, vol. 56, no. 6, pp. 709–742, 2006.
- [10] A. Seaton, D. Godden, W. MacNee, and K. Donaldson, “Particulate air pollution and acute health effects,” *The Lancet*, vol. 345, no. 8943, pp. 176–178, 1995.
- [11] W. Stöber and U. Abel, “Lung cancer due to diesel soot particles in ambient air?” *International Archives of Occupational and Environmental Health*, vol. 68, no. 1, pp. S3–S61, 1996.
- [12] L. Morawska, E. Jayaratne, L. Knibbs, and M. Megatmokhtar, “Regulations and policy measures related to the reduction of ambient particulate matter,” in *Urban Airborne Particulate Matter*. Springer, 2010, pp. 599–622.
- [13] H. Priemus and E. Schutte-Postma, “Notes on the particulate matter standards in the European Union and the Netherlands,” *International Journal of Environmental Research and Public Health*, vol. 6, no. 3, pp. 1155–1173, 2009.

- [14] G. Blanquart and H. Pitsch, “Analyzing the effects of temperature on soot formation with a joint volume-surface-hydrogen model,” *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 8, pp. 1614–1626, 2009.
- [15] J. Cruz, L. da Silva, F. Escudero, F. Cepeda, J. Elicer-Cortés, and A. Fuentes, “Soot Pyrometry by Emission Measurements at Different Wavelengths in Laminar Axisymmetric Flames,” *Combustion Science and Technology*, vol. 0, no. 0, pp. 1–18, 2020.
- [16] T. Jenkins and R. Hanson, “Soot pyrometry using modulated absorption/emission,” *Combustion and Flame*, vol. 126, no. 3, pp. 1669–1679, aug 2001.
- [17] J. López, J. Garcia-Oliver, A. Garcia, and D. Villalta, “Development of a soot radiation model for diesel flames,” *Applied Thermal Engineering*, vol. 157, p. 113710, 2019.
- [18] C. Schulz, B. Kock, M. Hofmann, H. Michelsen, S. Will, B. Bougie, R. Suntz, and G. Smallwood, “Laser-induced incandescence: recent trends and current questions,” *Applied Physics B*, vol. 83, no. 3, 2006.
- [19] F. Liu, K. Thomson, and G. Smallwood, “Soot temperature and volume fraction retrieval from spectrally resolved flame emission measurement in laminar axisymmetric coflow diffusion flames: Effect of self-absorption,” *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 9, pp. 1693–1705, 2013.
- [20] F. Liu, J. Yon, A. Fuentes, P. Lobo, G. Smallwood, and J. Corbin, “Review of recent literature on the light absorption properties of black carbon: Refractive index, mass absorption cross section, and absorption function,” *Aerosol Science and Technology*, vol. 54, no. 1, pp. 33–51, 2020.
- [21] Y. Huang, M. M. Hossain, X. Cao, B. Zhang, J. Li, and C. Xu, “A simultaneous measurement technique for soot temperature and volume fraction of sooting flames considering self-absorption through hyperspectral imaging,” *Optics and Lasers in Engineering*, vol. 160, pp. 107–285, 2023.
- [22] C. Ruan, F. Chen, W. Cai, Y. Qian, L. Yu, and X. Lu, “Principles of non-intrusive diagnostic techniques and their applications for fundamental studies of combustion instabilities in gas turbine combustors: A brief review,” *Aerospace Science and Technology*, vol. 84, pp. 585–603, 2019.
- [23] J. Densmore, M. Biss, K. McNesby, and B. Homan, “High-speed digital color imaging pyrometry,” *Applied Optics*, vol. 50, no. 17, pp. 2659–2665, 2011.
- [24] D. Snelling, K. Thomson, G. Smallwood, O. Guider, E. Weckman, and R. Fraser, “Spectrally resolved measurement of flame radiation to determine soot temperature and concentration,” *AIAA Journal*, vol. 40, no. 9, pp. 1789–1795, 2002.
- [25] J. Dreyer, R. Slavchov, E. Rees, J. Akroyd, M. Salamanca, S. Mosbach, and M. Kraft, “Improved methodology for performing the inverse Abel transform of flame images for color ratio pyrometry,” *Applied Optics*, vol. 58, no. 10, pp. 2662–2670, 2019.
- [26] Z. Li, L. Zhang, and C. Lou, “In-situ Measurement of Soot Volume Fraction and Temperature in Axisymmetric Soot-Laden Flames Using TR-GSVD Algorithm,” *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 70, pp. 1–12, 2021.
- [27] P. Hansen and D. P. O’Leary, “The use of the L-curve in the regularization of discrete ill-posed problems,” *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 14, no. 6, pp. 1487–1503, 1993.
- [28] A. Rodríguez, “Characterization of Soot Properties in Coflow Laminar Axisymmetric Diffusion Flames using Image Processing and Machine Learning,” Master’s thesis, Universidad Técnica Federico Santa María, 2022.
- [29] K. Muñoz-Feucht, A. Fuentes, and J. Consalvi, “Soot volume fraction measurements in a forest fuel layer,” *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 56, pp. 61–68, 2014.
- [30] T. Ren, M. Modest, A. Fateev, G. Sutton, W. Zhao, and F. Rusu, “Machine learning applied to retrieval of temperature and concentration distributions from infrared emission measurements,” *Applied Energy*, vol. 252, p. 113448, 2019.

- [31] A. Rodríguez, F. Escudero, J. Cruz, G. Carvajal, and A. Fuentes, "Retrieving soot volume fraction fields for laminar axisymmetric diffusion flames using convolutional neural networks," *Fuel*, vol. 285, p. 119011, 2021.
- [32] A. Rodríguez, J. Portilla, J. Cruz, F. Escudero, R. Demarco, A. Fuentes, and G. Carvajal, "Improving Broadband Emission-Based Soot Pyrometry Using Convolutional Neural Networks," in *IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC)*, 2021, pp. 1--6.
- [33] N. A. Eaves, Q. Zhang, F. Liu, H. Guo, S. B. Dworkin, and M. J. Thomson, "Coflame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames," *Computer Physics Communications*, vol. 207, pp. 464--477, 2016.
- [34] D. Snelling, K. A. Thomson, G. Smallwood, and Ö. Gülder, "Two-dimensional imaging of soot volume fraction in laminar diffusion flames," *Applied Optics*, vol. 38, no. 12, pp. 2478--2485, 1999.
- [35] R. Liaw, E. Liang, R. Nishihara, P. Moritz, J. Gonzalez, and I. Stoica, "Tune: A Research Platform for Distributed Model Selection and Training," *arXiv preprint arXiv:1807.05118*, 2018.
- [36] N. Peters, "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 10, no. 3, pp. 319--339, 1984.
- [37] A. Saysroy and S. Eiamsa-Ard, "Enhancing convective heat transfer in laminar and turbulent flow regions using multi-channel twisted tape inserts," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 121, pp. 55--74, 2017.
- [38] J. Gau, D. Das, C. McEnally, D. Giassi, N. Kempema, and M. Long, "Yale coflow diffusion flames steady flame burner," *URL: guilford.eng.yale.edu/yalecoflowflames/steady_burner.html*, 2014.
- [39] B. Franzelli, M. Roussillo, P. Scoufflaire, J. Bonnetty, R. Jalain, T. Dormieux, S. Candel, and G. Legros, "Multi-diagnostic soot measurements in a laminar diffusion flame to assess the ISF database consistency," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 2, pp. 1355 -- 1363, 2019.
- [40] H. Michelsen, "Probing soot formation, chemical and physical evolution, and oxidation: A review of in situ diagnostic techniques and needs," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 1, pp. 717--735, 2017.
- [41] R. Dobbins and C. Megaridis, "Absorption and scattering of light by polydisperse aggregates," *Applied Optics*, vol. 30, no. 33, pp. 4747--4754, Nov 1991.
- [42] F. Liu, K. Thomson, and G. Smallwood, "Numerical investigation of the effect of signal trapping on soot measurements using LII in laminar coflow diffusion flames," *Applied Physics B*, vol. 96, no. 4, pp. 671--682, 2009.
- [43] W. Yan, S. Zheng, and H. Zhou, "Experiments investigation on 2D distribution of soot temperature and volume fraction by image processing of visible radiation," *Applied Thermal Engineering*, vol. 124, pp. 1014--1022, 2017.
- [44] F. Escudero, A. Fuentes, R. Demarco, J. Consalvi, F. Liu, J. Elicer-Cortés, and C. Fernandez-Pello, "Effects of oxygen index on soot production and temperature in an ethylene inverse diffusion flame," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 73, pp. 101--108, 2016.
- [45] M. Modest, *Radiative heat transfer*. Academic press, 2013.
- [46] J. Yon, R. Lemaire, E. Therssen, P. Desgroux, A. Coppalle, and K. Ren, "Examination of wavelength dependent soot optical properties of diesel and diesel/rapeseed methyl ester mixture by extinction spectra analysis and LII measurements," *Applied Physics B*, vol. 104, no. 2, pp. 253--271, 2011.

- [47] H. Chang and T. Charalampopoulos, "Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, vol. 430, no. 1880, pp. 577--591, 1990.
- [48] K. Daun, K. Thomson, F. Liu, and G. Smallwood, "Deconvolution of axisymmetric flame properties using Tikhonov regularization," *Applied Optics*, vol. 45, no. 19, pp. 4638--4646, Jul 2006.
- [49] J. Yon, J. Cruz, F. Escudero, J. Morán, F. Liu, and A. Fuentes, "Revealing soot maturity based on multi-wavelength absorption/emission measurements in laminar axisymmetric coflow ethylene diffusion flames," *Combustion and Flame*, vol. 227, pp. 147--161, May 2021.
- [50] M. Khan, C. Allemand, and T. Eagar, "Noncontact temperature measurement. I. Interpolation based techniques," *Review of Scientific Instruments*, vol. 62, no. 2, pp. 392--402, 1991.
- [51] W. Yan, D. Chen, Z. Yang, E. Yan, and P. Zhao, "Measurement of Soot Volume Fraction and Temperature for Oxygen-Enriched Ethylene Combustion Based on Flame Image Processing," *Energies*, vol. 10, no. 6, 2017.
- [52] E. Åkesson and K. Daun, "Parameter selection methods for axisymmetric flame tomography through Tikhonov regularization," *Applied Optics*, vol. 47, no. 3, pp. 407--416, Jan 2008.
- [53] N. J. Kempema and M. B. Long, "Effect of soot self-absorption on color-ratio pyrometry in laminar coflow diffusion flames," *Optics Letters*, vol. 43, no. 5, pp. 1103--1106, 2018.
- [54] L. Ma, W. Du, D. Wen, and Y. Wang, "Infrared spectral soot emission for robust and high-fidelity flame thermometry," *Optics Letters*, vol. 48, no. 4, pp. 980--983, Feb 2023.
- [55] G. Legros, Q. Wang, J. Bonnetty, M. Kashif, C. Morin, J.-L. Consalvi, and F. Liu, "Simultaneous soot temperature and volume fraction measurements in axis-symmetric flames by a two-dimensional modulated absorption/emission technique," *Combustion and Flame*, vol. 162, no. 6, pp. 2705--2719, 2015.
- [56] C. Dasch, "One-dimensional tomography: a comparison of Abel, onion-peeling, and filtered backprojection methods," *Applied Optics*, vol. 31, no. 8, pp. 1146--1152, Mar 1992.
- [57] W. Vetterling, W. Press, S. Teukolsky, and B. Flannery, *Numerical recipes example book (c++): The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2002.
- [58] T. Blacha, M. Di Domenico, P. Gerlinger, and M. Aigner, "Soot predictions in premixed and non-premixed laminar flames using a sectional approach for PAHs and soot," *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 1, pp. 181--193, 2012.
- [59] Q. Wang, G. Legros, J. Bonnetty, and C. Morin, "Experimental characterization of the different nitrogen dilution effects on soot formation in ethylene diffusion flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 2, pp. 3227--3235, 2017.
- [60] T. Ren, Y. Zhou, Q. Wang, H. Liu, Z. Li, and C. Zhao, "Machine learning-assisted soot temperature and volume fraction fields predictions in the ethylene laminar diffusion flames," *Optics Express*, vol. 29, no. 2, pp. 1678--1693, 2021.
- [61] Y. Wu, Z. Li, Q. Wang, G. Legros, C. Li, and Z. Yan, "Predicting simultaneously fields of soot temperature and volume fraction in laminar sooting flames from soot radiation measurements—a convolutional neural networks approach," *Optics Express*, vol. 30, no. 12, pp. 21 230--21 240, 2022.
- [62] H. Li, T. Ren, X. Liu, and C. Zhao, "U-Net applied to retrieve two-dimensional temperature and CO₂ concentration fields of laminar diffusion flames," *Fuel*, vol. 324, p. 124447, 2022.
- [63] J. Liu, M. Kashif, Q. Wang, T. Li, H. Liu, and M. Yao, "BPNN model based AI for the estimation of soot data from flame luminosity emissions in H₂/N₂ diluted ethylene laminar diffusion flames," *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol. 151, p. 111072, 2024.

- [64] L. Rothman, I. Gordon, R. Barber, H. Dothe, R. Gamache, A. Goldman, V. Perevalov, S. Tashkun, and J. Tennyson, "HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 111, no. 15, pp. 2139–2150, 2010.
- [65] T. Blacha, M. Di Domenico, P. Gerlinger, and M. Aigner, "Soot predictions in premixed and non-premixed laminar flames using a sectional approach for PAHs and soot," *Combustion and Flame*, vol. 159, no. 1, pp. 181–193, 2012.
- [66] Q. Wang, G. Legros, J. Bonnetty, and C. Morin, "Experimental characterization of the different nitrogen dilution effects on soot formation in ethylene diffusion flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 2, pp. 3227–3235, 2017.
- [67] A. Cuoci, A. Frassoldati, T. Faravelli, and E. Ranzi, "A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: Application to C₂H₄/CH₄ coflow flames," *Combustion and Flame*, vol. 160, no. 5, pp. 870–886, 2013.
- [68] N. A. Slavinskaya and P. Frank, "A modelling study of aromatic soot precursors formation in laminar methane and ethene flames," *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 9, pp. 1705–1722, 2009.
- [69] J. Appel, H. Bockhorn, and M. Frenklach, "Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of c₂ hydrocarbons," *Combustion and Flame*, vol. 121, no. 1-2, pp. 122–136, 2000.
- [70] F. Liu, H. Guo, and G. Smallwood, "Effects of radiation model on the modeling of a laminar coflow methane/air diffusion flame," *Combustion and Flame*, vol. 138, no. 1-2, pp. 136–154, 2004.
- [71] F. Liu, G. Smallwood, and O. Gülder, "Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a narrowband model," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 14, no. 2, pp. 278–281, 2000.
- [72] S. B. Dworkin, Q. Zhang, M. J. Thomson, N. A. Slavinskaya, and U. Riedel, "Application of an enhanced PAH growth model to soot formation in a laminar coflow ethylene/air diffusion flame," *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 9, pp. 1682–1695, 2011.
- [73] F. A. Escudero Barros, "Experimental and numerical contributions to soot production in laminar axisymmetric diffusion flames," Ph.D. dissertation, Aix-Marseille, 2019.
- [74] B. Connelly, M. Long, M. Smooke, R. Hall, and M. Colket, "Computational and experimental investigation of the interaction of soot and NO in coflow diffusion flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no. 1, pp. 777–784, 2009.
- [75] R. Demarco, F. Nmira, and J. Consalvi, "Influence of thermal radiation on soot production in laminar axisymmetric diffusion flames," *Quant. Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 120, pp. 52 – 69, 2013.
- [76] J. Portilla, J. Cruz, F. Escudero, A. Rodríguez, R. Demarco, A. Fuentes, and G. Carvajal, "Towards low-cost soot pyrometry in laminar flames using broadband emission measurements and Artificial Neural Networks," *Journal of the Energy Institute*, vol. 109, p. 101258, 2023.
- [77] T. M. Mitchell, *Machine Learning*. McGraw-hill, 1997.
- [78] Y. LeCun, Y. Bengio, and G. Hinton, "Deep learning," *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436–444, 2015.
- [79] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, *Deep Learning*. MIT Press, 2016.
- [80] C. M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer-Verlag, 2006.
- [81] D. Rumelhart, G. Hinton, and R. Williams, "Learning representations by back-propagating errors," *Nature*, vol. 323, pp. 533–536, 1986.

- [82] M. Liu, L. Chen, X. Du, L. Jin, and M. Shang, “Activated Gradients for Deep Neural Networks,” *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, vol. 34, no. 4, pp. 2156–2168, 2023.
- [83] Y. Bengio, P. Y. Simard, and P. Frasconi, “Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult,” *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 5 2, pp. 157–66, 1994.
- [84] S. Ioffe and C. Szegedy, “Batch Normalization: Accelerating Deep Network training by Reducing Internal Covariate Shift,” in *International Conference on Machine Learning*, 2015, pp. 448–456.
- [85] X. Glorot and Y. Bengio, “Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks,” in *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, vol. 9, 13-15 May 2010, pp. 249–256.
- [86] F. Wang, M. Jiang, C. Qian, S. Yang, C. Li, H. Zhang, X. Wang, and X. Tang, “Residual attention network for image classification,” in *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, July 2017.
- [87] T. Tong, G. Li, X. Liu, and Q. Gao, “Image Super-Resolution Using Dense Skip Connections,” in *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, Oct 2017.
- [88] Z. Niu, G. Zhong, and H. Yu, “A review on the attention mechanism of deep learning,” *Neuro-computing*, vol. 452, pp. 48–62, 2021.
- [89] O. Oktay, J. Schlemper, L. Folgoc, M. Lee, M. Heinrich, K. Misawa, K. Mori, S. McDonagh, N. Y. Hammerla, B. Kainz *et al.*, “Attention U-Net: Learning Where to Look for the Pancreas,” *arXiv preprint arXiv:1804.03999*, 2018.
- [90] V. Nair and G. Hinton, “Rectified Linear Units Improve Restricted Boltzmann Machines,” in *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning*, 2010, p. 807–814.
- [91] O. Ronneberger, P. Fischer, and T. Brox, “U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation,” in *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention -- MICCAI 2015*, N. Navab, J. Hornegger, W. M. Wells, and A. F. Frangi, Eds. Cham: Springer International Publishing, 2015, pp. 234–241.
- [92] D. P. Kingma and J. L. Ba, “Adam: A method for stochastic optimization,” *3rd International Conference on Learning Representations, ICLR - Conference Track Proceedings*, 2015.
- [93] B. Connelly, B. Bennett, M. Smooke, and M. Long, “A paradigm shift in the interaction of experiments and computations in combustion research,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, no. 1, pp. 879–886, 2009.
- [94] Y. Huang, M. M. Hossain, X. Cao, B. Zhang, J. Li, and C. Xu, “A simultaneous measurement technique for soot temperature and volume fraction of sooting flames considering self-absorption through hyperspectral imaging,” *Optics and Lasers in Engineering*, vol. 160, 2023.
- [95] D. Snelling, K. Thomson, G. Smallwood, and Ömer Gülder, “Two-dimensional imaging of soot volume fraction in laminar diffusion flames,” *Applied Optics*, vol. 38, no. 12, pp. 2478–2485, Apr 1999.
- [96] P. Kuhn, B. Ma, B. Connelly, M. Smooke, and M. Long, “Soot and thin-filament pyrometry using a color digital camera,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, no. 1, pp. 743–750, 2011.
- [97] H. Guo, J. A. Castillo, and P. B. Sunderland, “Digital camera measurements of soot temperature and soot volume fraction in axisymmetric flames,” *Applied Optics*, vol. 52, no. 33, pp. 8040–8047, 2013.
- [98] J. Jiang, D. Liu, J. Gu, and S. Süssstrunk, “What is the space of spectral sensitivity functions for digital color cameras?” in *2013 IEEE Workshop on Applications of Computer Vision (WACV)*, 2013, pp. 168–179.

A | Calibración de instrumentos

En la literatura se ha reportado que las cámaras digitales deben ser calibradas usando una fuente de radiación conocida y se han propuesto distintos métodos [96,97]. El laboratorio de la USM cuenta con un sistema calibrado Labsphere USLR-V08F compuesto por una lámpara de tungsteno acoplado a una esfera de integración (2") y sentido por un espectrómetro calibrado con la norma NIST, con el cual, las mediciones experimentales para BEMI se realizarán en un entorno controlado con una cámara debidamente caracterizada y calibrada para reducir incertezas en la medición.

Con el fin, de entrenar un modelo de ANN para recuperar campos de T_s desde un arreglo óptico específico, un tipo de combustible y condición de llama, se requiere de un proceso iterativo entre la calibración de elementos ópticos, generación de datos sintéticos y entrenamiento de las ANNs. Por lo tanto, para generar datos representativos de los fenómenos observados para entrenar las ANNs se debe caracterizar la transmisividad espectral de los lentes y filtros de corte de infrarrojos embebidos en el sensor CMOS para los cuales los fabricantes no provean una curva de respuesta espectral. Además, la respuesta espectral del sensor se puede obtener a partir de estudios previos donde se ha caracterizado empleando un monocromador y un espectrómetro [98], o a partir de las hojas de datos del fabricante para las cámaras Basler.

Para caracterizar la transmisividad espectral del arreglo óptico se propone utilizar la metodología descrita en la siguiente sección.

A.1. Calibración de mediciones experimentales realizadas con cámaras RGB

La Figura 2.2 muestra el arreglo óptico para capturar señales de BEMI, donde J_λ representa la emisión local del hollín a una longitud de onda determinada λ , transmitida a lo largo del camino óptico hasta alcanzar los sensores de la cámara. Al usar una cámara RGB, J_λ es integrada sobre las longitudes de onda de detección y mapeadas a los campos P_R , P_G , y P_B , uno para cada canal de color. La cámara captura una proyección integrada 2D I_λ de la intensidad de radiación:

$$P = \Psi \theta_G \Delta_t \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_\lambda(y, z) d\lambda + B, \quad (\text{A.1})$$

donde la proyección capturada por la cámara RGB es dependiente del tiempo de exposición Δ_t , el factor geométrico θ_G , el ruido base de experimento B (imagen capturada sin llama), la sensibilidad ISO o ganancia de la electrónica interna de la cámara Ψ , y $\eta_\lambda = \Gamma_\lambda \times \text{IR}_\lambda \times \text{SR}_\lambda$ es la sensibilidad espectral global del arreglo óptico, donde Γ_λ es la transmisividad de la lente, IR_λ es la transmisividad del filtro de corte de infrarrojos, y SR_λ es la respuesta espectral del sensor de la cámara.

La esfera de integración proporciona una radiancia uniforme para testear cámaras que operan en un amplio rango espectral. Para calibrar la cámara RGB se deben capturar imágenes de la esfera de integración manteniendo los elementos ópticos como lentes, filtros IR y cámara RGB, los ajustes de la cámara RGB como el tiempo de exposición y la distancia original entre la cámara RGB y la llama. La

emisión capturada P_{cal} por la cámara RGB de la esfera de integración se puede expresar así:

$$P_{cal} = \Psi \theta_G \Delta t_{cal} \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_{\lambda,cal}(y, z) d\lambda + B_{cal}, \quad (\text{A.2})$$

donde B_{cal} es el ruido base del experimento (imágenes capturadas con la esfera de integración apagada) y Δt_{cal} es el tiempo de exposición. Las condiciones de captura de ambos procesos garantizan que los parámetros θ_G y Ψ sean iguales, por que se puede establecer una relación entre las expresiones A.1 y A.2. Reemplazando la expresión A.2 en A.1 se obtiene:

$$\int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_\lambda(y, z) d\lambda = \frac{\Delta t_{cal}}{\Delta t} \frac{(P - B)}{(P_{cal} - B_{cal})} \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_{\lambda,cal}(y, z) d\lambda, \quad (\text{A.3})$$

con $\lambda_i \in \{R, G, B\}$, $I_{\lambda,cal}$ corresponde a la radiancia de la esfera de integración medida con un espectrómetro, como se muestra en la Figura A.1. Finalmente, el lado izquierdo de la expresión A.3 corresponde a los campos calibrados.

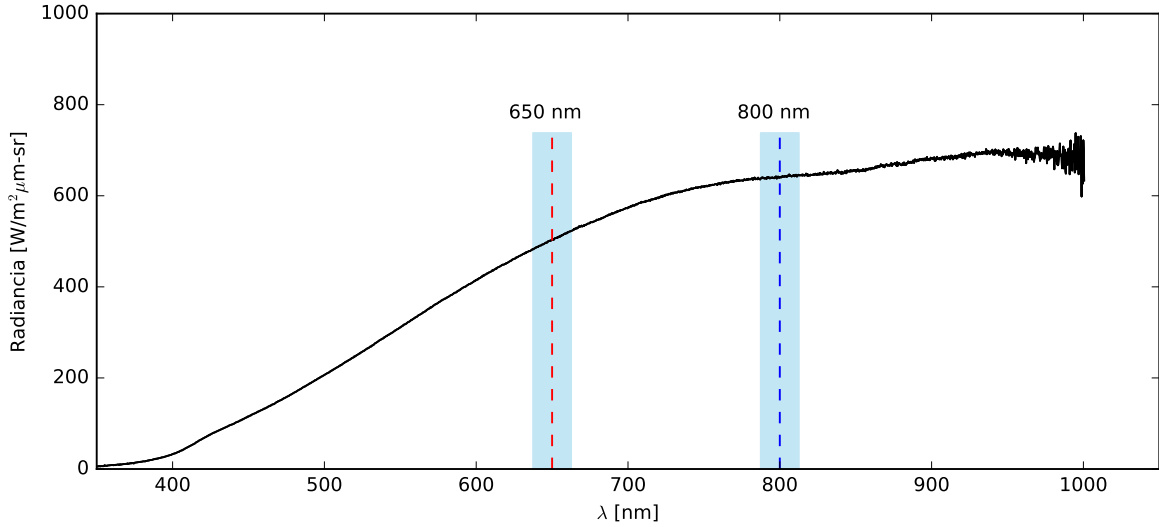


Figura A.1: Radiancia espectral de la fuente de luz de banda ancha utilizada para la calibración de los arreglos ópticos de BEMI y MAE. Para el caso de la técnica MAE, se muestran los filtros pasabanda centrados en 610 nm y 800 nm (con paso de banda de 25 nm).

A.2. Calibración de la respuesta espectral de filtros infrarrojos y lentes ópticos.

La Figura A.2 muestra el arreglo óptico para caracterizar la respuesta espectral de una lente óptica, el proceso para obtener la respuesta espectral de la lente requiere realizar mediciones con un espectrómetro Labsphere CDS-610 con y sin fuente de luz de banda ancha (lámpara de tungsteno alimentada con 12 VDC). Durante la captura de señales en el laboratorio, se capturaron señales con baja amplitud en la zona del canal azul, lo cual, representa ruido en la reconstrucción de la respuesta espectral de la lente, por lo tanto, se añadió un filtro de vidrio de color FGT165M para atenuar la intensidad de luz detectada en el extremo del espectro visible cercano al infrarrojo y potenciar la intensidad de luz detectada en la región del extremo azul. La respuesta espectral de la lente, se obtuvo de la siguiente forma:

$$\Gamma_\lambda = \frac{I - B_I}{I_0 - B_{I_0}}, \quad (\text{A.4})$$

donde:

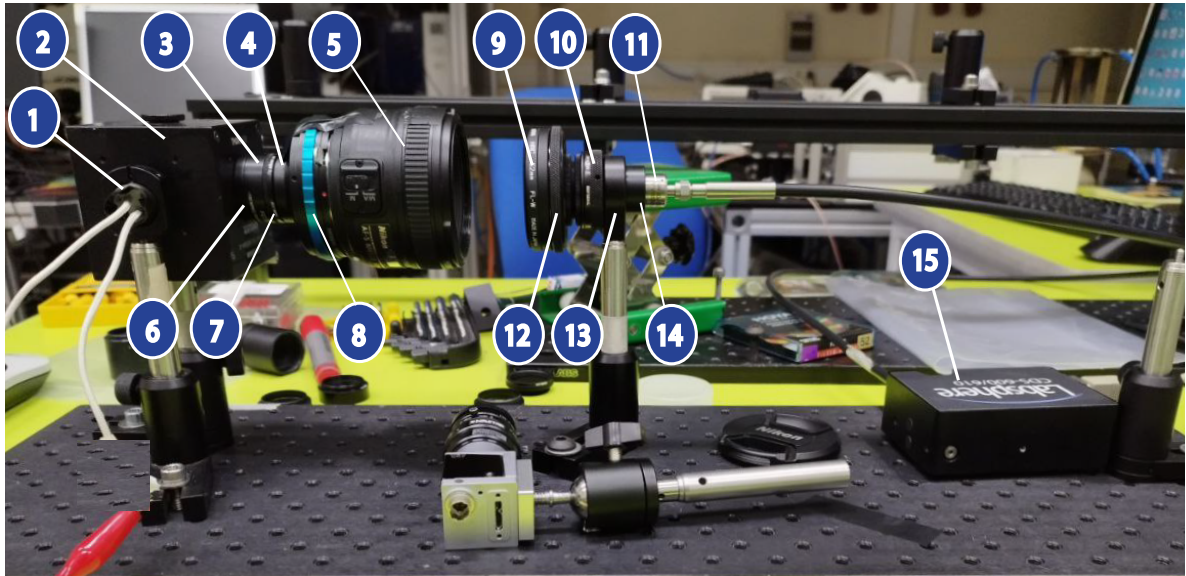
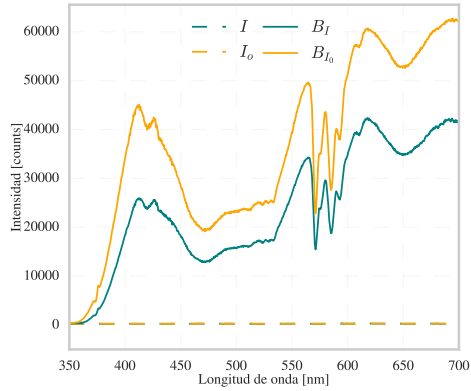


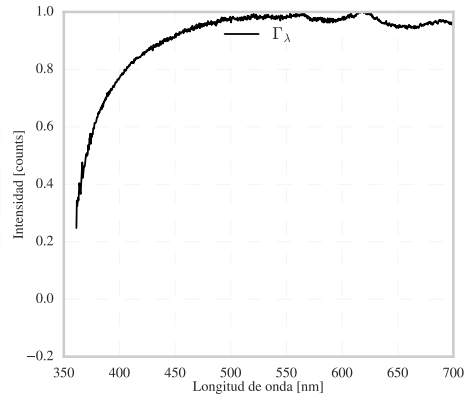
Figura A.2: Esquema del arreglo óptico para caracterizar la transmisividad espectral de la lente óptica. Los siguientes números entre paréntesis corresponden a los componentes mostrados en la imagen adjunta: (1) lámpara de tungsteno, (2) esfera de integración, (3) FGT165M - filtro termorregulador de $\text{Ø}25,0$ mm, (4) SM1L03 con SRF11 - filtro aplanador de respuesta para fotodiodos de silicio 400 - 1100 nm, (5) lente AF-S Nikkor 50mm, (6) SM1A1 - adaptador con rosca exterior SM05 y rosca interior SM1, (7) SM1A1 - adaptador con rosca exterior SM05 y rosca interior SM1, (8) FotodioX pro adaptador de montura de objetivo compatible con Nikon Nikkor, (9) filtro HOYA FL-W 52mm, (10) SM1D12C - diafragma de iris graduado con anillo SM1, (11) F950SMA-A 350-700mm, (12) SM2A6 - adaptador con rosca exterior SM2 y rosca interior SM1, seguido de tubos de unión con tuercas, (13) LMR1 - montura de lente con anillo de retención, (14) AD15F - adaptador roscado SM1, y (15) espectrómetro Labsphere CDS-610.

- I corresponde a las mediciones realizadas con lente y lámpara de tungsteno encendida.
- B_I corresponde a las mediciones efectuadas con lente y lámpara de tungsteno apagada.
- I_0 corresponde a las mediciones ejecutadas sin lente y lámpara de tungsteno encendida.
- B_{I_0} corresponde a las mediciones efectuadas sin lente y lámpara de tungsteno apagada.

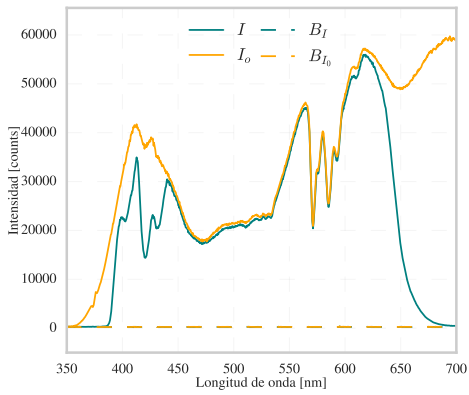
La Figura A.3 muestra las señales I , B_I , I_0 , y B_{I_0} capturadas en el laboratorio para la lente AF-S Nikkor 50 mm y el filtro infrarrojo embebido en la cámara Basler acA2040-55uc. Estos elementos ópticos conforman el arreglo óptico de BEMI utilizado para generar conjuntos de llamas aumentadas para el entrenamiento de las ANNs. Asimismo, este arreglo óptico se usó en las campañas experimentales para capturar señales de emisión de banda ancha.



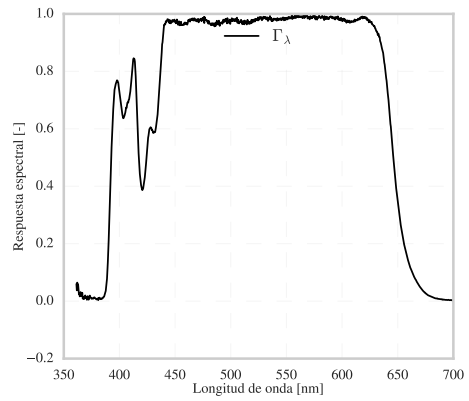
(a) Mediciones capturadas para la lente AF-S Nikkor 50mm.



(b) Respuesta espectral obtenida para la lente AF-S Nikkor 50mm.



(c) Mediciones capturadas para el filtro IR embebido en la cámara Basler acA2040-55uc.



(d) Respuesta espectral obtenida para el filtro IR embebido en la cámara Basler acA2040-55uc.

Figura A.3: Calibración de la respuesta espectral del filtro infrarrojo y lente óptico para un setup experimental de BEMI conformado por una cámara Basler acA2040-55uc equipada con una lente AF-S Nikkor 50mm.

B | Determinación del tamaño del conjunto de entrenamiento

Determinar el tamaño del conjunto de entrenamiento es un paso importante en el diseño de una ANN que establece un compromiso entre la aproximación del conjunto de entrenamiento, la capacidad de generalizar a nuevos datos pertenecientes al mismo espacio y el tiempo de ejecución necesario de la etapa de entrenamiento. El proceso para encontrar el tamaño adecuado del conjunto de entrenamiento se basa en la heurística, y el número apropiado de muestras dependerá de la variabilidad del conjunto de datos y de los hiperparámetros de la ANN.

En la metodología propuesta, primero se utiliza el entorno numérico descrito en la Sección 3.1, para generar un gran conjunto de datos con miles de pares simulados de campos de temperatura y sus proyecciones en el plano de la cámara. Se seleccionan subconjuntos aleatorios de diferentes tamaños de este gran conjunto de datos y los dividimos en un 80 % para el entrenamiento y un 20 % para la validación. El conjunto de datos de validación se utiliza para ajustar los hiperparámetros. También especificamos algunas muestras para un conjunto de prueba que se utiliza para realizar una evaluación sin sesgo del rendimiento una vez diseñada la red. Este es un procedimiento comúnmente aceptado para el diseño de ANNs.

La Figura B.1 muestra un ejemplo de la función de pérdida para subconjuntos de diferentes tamaños. Determinamos que un subconjunto de 8000 llamas era suficiente para entrenar y ajustar la U-Net, y que un subconjunto de 2.500 llamas era adecuado para la MLP (que corresponde a los números indicados en la Sección 3.2).

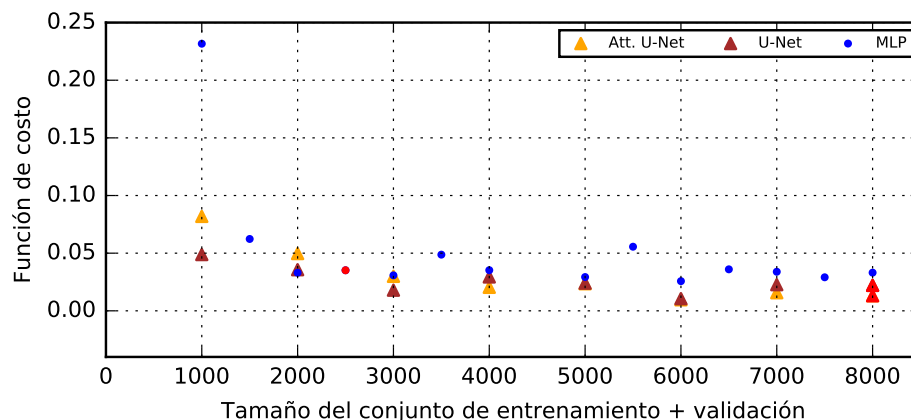


Figura B.1: Función de pérdida para un conjunto de prueba de 100 muestras para Attention U-Net, U-Net y MLP ajustado con subconjuntos de entrenamiento/validación de diferentes tamaños. El tamaño de los conjuntos de entrenamiento/validación indicados en este trabajo de tesis se muestra en rojo.

C | Resultados de sintonización de hiperparámetros de las ANNs

Las Tablas C.1 y C.2 muestran los hiperparámetros obtenidos usando Raytune para las distintas instancias de arquitecturas de ANN utilizadas en el trabajo. Según el tipo de estructura CNN o MLP, se reportan los valores de los principales hiperparámetros que caracterizan las configuraciones de ANNs.

Tabla C.1: Hiperparámetros seleccionados para U-Net y Att. U-Net.

Conjunto de datos de entrenamiento	Hiperparámetros	U-Net		Att. U-Net	
		sin ruido	con ruido	sin ruido	con ruido
Yale-60	Número de filtros	15	8	15	31
	Tamaño de kernel	5×5	4×4	4×4	5×5
	Dropout	0.105059	0.120000	0.041533	0.21697
	Tasa de aprendizaje	0.001979	0.002661	0.006310	0.006338
Yale-{32,80}	Número de filtros	20	26	20	22
	Tamaño de kernel	4×4	8×8	8×8	8×8
	Dropout	0.104624	0.20535	0.210000	0.280406
	Tasa de aprendizaje	0.000741	0.002397	0.002580	0.006387
Yale-{40,80}	Número de filtros	21	20	31	25
	Tamaño de kernel	6×6	8×8	8×8	5×5
	Dropout	0.008434	0.119698	0.100629	0.255421
	Tasa de aprendizaje	0.000962	0.006353	0.000378	0.003896
Yale-{60,80}	Número de filtros	16	30	20	15
	Tamaño de kernel	3×3	3×3	4×4	4×4
	Dropout	0.8867	0.123456	0.035702	0.205937
	Tasa de aprendizaje	0.007923	0.000934	0.006286	0.000398
Yale-{40,60,80}	Número de filtros	15	30	15	15
	Tamaño de kernel	3×3	3×3	8×8	6×6
	Dropout	0.08544	0.132486	0.0300000	0.041468
	Tasa de aprendizaje	0.000234	0.001350	0.000184	0.002272
Yale-{32,40,80}	Número de filtros	11	21	25	15
	Tamaño de kernel	6×6	6×6	6×6	6×6
	Dropout	0.159168	0.16000	0.205283	0.273256
	Tasa de aprendizaje	0.000190	0.002546	0.004437	0.006085
Yale-{32,40,60,80}	Número de filtros	30	10	9	25
	Tamaño de kernel	3×3	6×6	4×4	4×4
	Dropout	0.017937	0.119686	0.032888	0.0187471
	Tasa de aprendizaje	0.00100	0.000809	0.004635	0.001023



Tabla C.2: Hiperparámetros seleccionados para MLP.

Conjunto de datos de entrenamiento	Hiperparámetros	MLP	
		sin ruido	con ruido
Yale-60	Cantidad de neuronas	607	451
	Cantidad de capas Feed Forward	2	3
	Dropout	0.213032	0.129296
	Tasa de aprendizaje	0.000163	0.004439
Yale-{60,80}	Cantidad de neuronas	776	550
	Cantidad de capas Feed Forward	3	3
	Dropout	0.276304	0.123917
	Tasa de aprendizaje	0.000158	0.004439
Yale-{40,60,80}	Cantidad de neuronas	496	470
	Cantidad de capas Feed Forward	4	3
	Dropout	0.281773	0.124277
	Tasa de aprendizaje	0.000137	0.0000158
Yale-{32,40,60,80}	Cantidad de neuronas	450	649
	Cantidad de capas Feed Forward	4	4
	Dropout	0.107975	0.164038
	Tasa de aprendizaje	0.001495	0.006501

D | Análisis del número de imágenes requeridas para la técnica BEMI

Las técnicas de pirometría de hollín de banda ancha, como BEMI, requieren promediar un cierto número de imágenes al estimar campos T_s , debido a que los algoritmos de deconvolución clásica son sensibles al ruido y a las perturbaciones en las señales proyectadas a la cámara, que pueden ser producto de pequeñas desviaciones generadas por leves movimientos en la llama.

La Figura D.1 muestra las estimaciones de T_s para siete imágenes individuales de la llama experimental Yale-32. La fila superior corresponde a las estimaciones obtenidas con la técnica BEMI, y la fila inferior a las estimaciones obtenidas con Att. U-Net entrenada con los subconjuntos Yale-{32,40,60,80}. Los resultados muestran pequeñas variaciones en el RMSE reportado para cada caso. Sin embargo, para las estimaciones de la técnica BEMI, se aprecian desviaciones en la temperatura estimada cerca de la zona central de la llama, y los campos son ruidosos. Esto se debe a que la deconvolución clásica utilizada en la técnica BEMI es sensible al ruido, y ligeras variaciones en las condiciones de captura (como alteraciones en la trayectoria óptica o ligeros movimientos de la llama) pueden afectar significativamente a las estimaciones de temperatura para el mismo ajuste de llama. Por lo tanto, esta técnica se aplica habitualmente sobre una imagen media preprocesada obtenida a partir de varias capturas.

La Figura D.2 muestra las estimaciones de temperatura obtenidas por las mismas técnicas cuando se consideran distintos números de imágenes promediadas. En el caso de BEMI, se observa que los campos de error respecto a la estimación de EMI para la llama Yale-60 se estabilizan y las oscilaciones de temperatura disminuyen cuando se emplean 40 o más imágenes promediadas. Por su parte, Att. U-Net proporciona sistemáticamente errores inferiores en comparación con BEMI, incluso cuando se procesa una única imagen de la llama. Los resultados sugieren que eventualmente, la metodología basada en ANNs podría ser evaluada en aplicaciones de un solo disparo (*single-shot*).

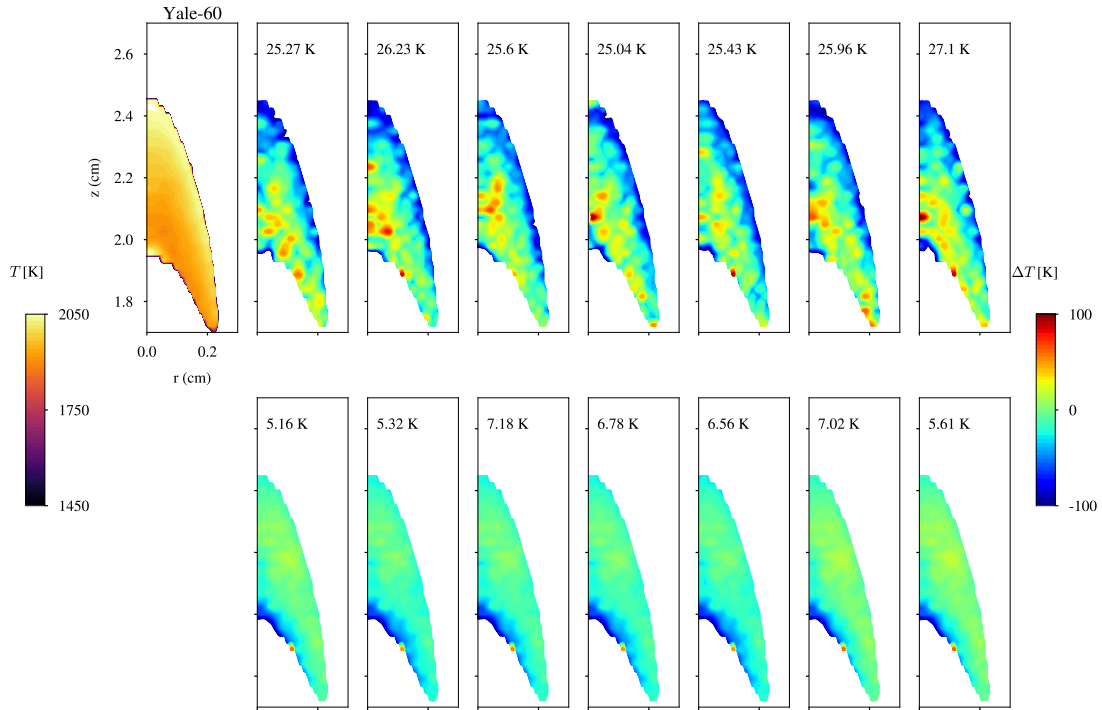


Figura D.1: Estimaciones de temperatura empleando BEMI-OP y Att.U-Net para distintas imágenes individuales. El RMSE reportado en cada subgráfico representa el error entre la estimación de Yale-60 obtenida con MAE y las estimaciones obtenidas con BEMI-OP y Attention U-Net.

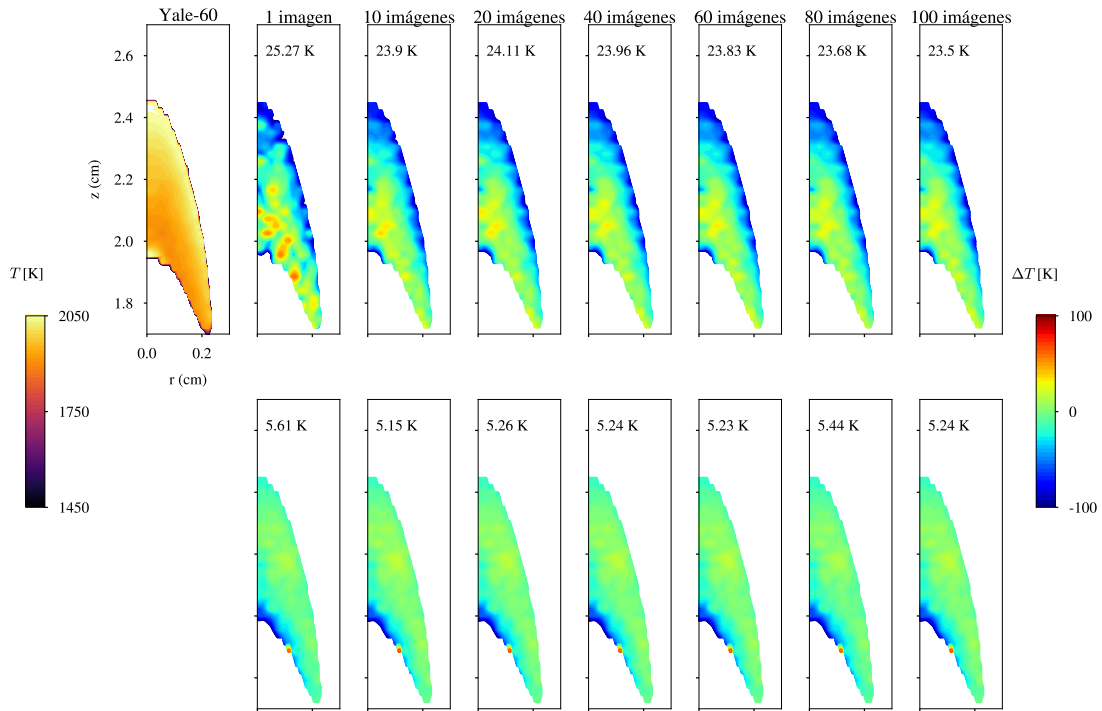


Figura D.2: Estimaciones de temperatura empleando BEMI-OP y Att.U-Net para distintos números de imágenes promediadas. El RMSE reportado en cada subgráfico representa el error entre la estimación de Yale-60 obtenida con MAE y las estimaciones obtenidas con BEMI-OP y Attention U-Net.