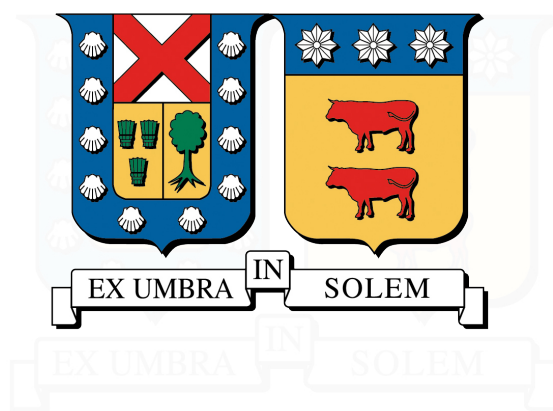


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INDUSTRIAS
VALPARAÍSO - CHILE



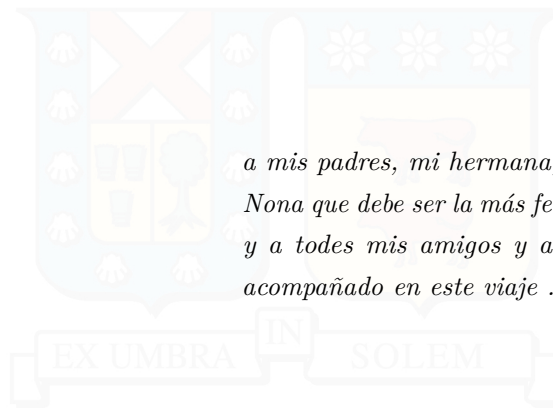
DISEÑO DE NUEVA METODOLOGÍA PARA MEDICIÓN DE TEMPERATURA DE HOLLÍN: APLICACIÓN Y VALIDACIÓN

EMILIO JOSÉ ANDRÉS ÁLVAREZ HERNANDO

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
Magíster en Ciencias de la Ingeniería Industrial

PROFESOR GUÍA	:	Dr. Andrés H. Fuentes Castillo - UTFSM
PROFESOR CORREFERENTE	:	Dr. Juan J. Cruz Villanueva - UTFSM
PROFESOR CORREFERENTE EXTERNO	:	Dr. Luis F. Figueira Da Silva - PUC RIO

MARZO 2021



*a mis padres, mi hermana, mi hermano, a la
Nona que debe ser la más feliz con mi titulación
y a todes mis amigos y amigas que me han
acompañado en este viaje . . .*

RESUMEN EJECUTIVO

La importancia de los procesos de combustión recae en su amplia utilización como fuente de energía, siendo un 90,5 % del total de la energía mundial. Como consecuencia de la quema de combustibles se emiten diferentes contaminantes que contribuyen al cambio climático y son dañinos para la salud humana. Dentro de estos contaminantes se encuentra el hollín, una partícula sólida nanométrica en la cual se centra este trabajo.

La temperatura es un parámetro clave para entender la combustión, la formación del hollín y la radiación térmica de las llamas. Generalmente se realizan mediciones de temperatura de hollín con técnicas de pirometría de banda espectral ancha basadas en emisión (BEMI) y absorción y emisión modulada (BMAE). Estas técnicas utilizan la información espectral a dos longitudes de onda (2 colores) para calcular la temperatura de hollín a partir de mediciones experimentales de la radiación de una llama. Con el objetivo de beneficiarse con una mayor información espectral para estimar la temperatura de hollín, este trabajo propone el uso de una razón de banda espectral ancha con tres longitudes de onda (3 colores: R, G y B) en una única expresión de temperatura. Se propone también la utilización de una cámara digital a color de bajo costo debido a sus tres canales RGB.

Las nuevas técnicas de pirometría propuestas, 3-BEMI y 3-BMAE, son testeadas midiendo la temperatura de hollín de una llama de etileno en un quemador del tipo Gülder y comparándolas con mediciones con las técnicas tradicionales BEMI y BMAE. En primer lugar se realizó una medición de extinción de luz para obtener el campo de la fracción volumétrica de hollín (f_v). Con esta información se aplicó la técnica BMAE tanto de 2 como de 3 colores, midiendo las 4 diferentes señales que se producen con el encendido y apagado de la llama y la luz de fondo. Para aplicar la técnica BEMI se asumió un modelo para la función de absorción del hollín (E_m).

Para el caso del método BEMI, resultados muestran que la utilización de tres bandas espectrales anchas redujo la variación de la temperatura ante pequeñas variaciones en la razón de las señales medidas, es decir, disminuye la sensibilidad ante mediciones experimentales. Con respecto a los campos de temperatura obtenidos con las 4 técnicas utilizadas se encontraron diferencias de máximo 55 K, por lo tanto, se validan preliminarmente las técnicas propuestas. El modelo BEMI entrega campos de temperatura más suaves que los del método BMAE, esto debido a la menor influencia del ruido experimental en el método BEMI.

Finalmente, se realizaron 3 análisis para testear la metodología. En primer lugar se compararon resultados de las técnicas de 3 colores con los entregados por el código CoFlame mostrando resultados con un error relativo medio de 0,5 % y 0,04 % para los casos de 3-BEMI y 3-BMAE respectivamente. Luego, un análisis de sensibilidad con respecto a las razones de las señales obtenidas experimentalmente arrojaron resultados de un 0,27 % en toda la llama para el caso de BEMI, valor que es más que pequeño que todos los valores de sensibilidad del método 3-BMAE, los cuales se mueven entre 0,28 % y 0,3 % y los valores más altos se encuentran en el centro de la llama. Por último, se realizó un análisis de error con un enfoque de Monte-Carlo. El método 3-BEMI posee valores de incerteza menores que el método 3-BMAE, con valores que van entre 0,1 % a 5 % ante variaciones de un 0,5 % de los parámetros. También se encontraron mayores incertezas en regiones cercanas al centro de la llama.

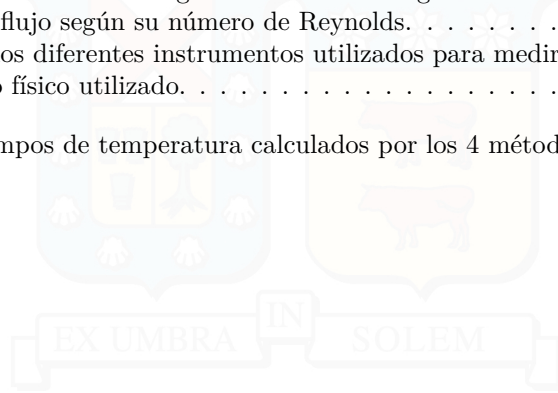


Índice de Contenidos

1. Introducción	1
2. Objetivos	4
2.1. Objetivo General	4
2.2. Objetivos Específicos	4
3. Marco Teórico	5
3.1. Combustión	5
3.1.1. Emisión de Contaminantes	6
3.2. Llama de difusión laminar	7
3.3. Hollín	9
3.3.1. Procesos de Formación y Oxidación del Hollín	9
3.3.2. Fracción Volumétrica del Hollín	11
3.3.2.1. Técnica de Extinción de Luz	12
3.4. Medición de Temperatura	16
3.4.1. Pirometría de 2 colores	17
3.4.1.1. Emisión (EMI)	18
3.4.1.2. Absorción Emisión Modulada (MAE)	19
3.4.1.3. Banda Espectral Ancha (BEMI y BMAE)	20
3.5. CoFlame Code	21
3.5.1. Modelo Numérico	21
3.5.1.1. Ecuaciones de Conservación	22
3.5.1.2. Resolución Computacional	23
3.6. Análisis Estadísticos	25
3.6.1. Error Relativo Medio	25
3.6.2. Suavidad (<i>Smoothness</i>)	25
3.6.3. Método de Monte-Carlo	26
4. Metodología Experimental	28
4.1. Nueva Metodología de 3 colores	28
4.1.1. Análisis de Sensibilidad	30
4.2. Configuración Experimental	31
4.2.1. Cámara Filtro Bayer	32
5. Resultados y Discusiones	34
5.1. Cálculo de Temperatura	34
5.2. Validaciones del Método	41
5.2.1. CoFlame	41
5.2.2. Análisis de Sensibilidad	42
5.2.3. Análisis de Incertezas	43
6. Conclusiones	46
6.1. Perspectiva	47
Bibliografía	48

Índice de Tablas

3.1. Porcentaje del Suministro de Energía Total Mundial según fuente de energía año 2018. .	5
3.2. Características del flujo según su número de Reynolds.	9
3.3. Tabla resumen de los diferentes instrumentos utilizados para medir temperatura, agrupados por principio físico utilizado.	17
5.1. Suavidad de los campos de temperatura calculados por los 4 métodos.	38



Índice de Figuras

3.1. Esquematación de la interacción de los GEI con la radiación. (Fuente: Asociación Celtaia).	7
3.2. Llama de difusión laminar en coflujo en un quemador Gülder. (Fuente: LiiScience.org).	8
3.3. Esquema de las fases del proceso de formación, crecimiento y oxidación del hollín en un proceso de combustión.	10
3.4. Evolución en la morfología del hollín observada en la línea central de una llama de difusión laminar de coflujo (izquierda). Ilustración gráfica de los procesos considerados en la formación, crecimiento y oxidación del hollín en una llama (derecha).	11
3.5. Esquema de los fenómenos que ocurren en una medición de LOSA.	12
3.6. Esquema de las intensidades de las señales en el proceso de absorción modulada.	14
3.7. Discretización por capas del método <i>Onion-Peeling</i> .	15
3.8. Esquema genérico del dominio computacional de una llama co-flow.	24
3.9. Esquema explicativo método de Monte Carlo.	27
4.1. Montaje experimental en laboratorio.	32
4.2. Patrón de sensores filtro Bayer (izquierda). Reconstrucción de imagen con un filtro de Bayer (derecha).	33
4.3. Curvas de sensibilidad de cámara Basler.	33
5.1. Curvas de sensibilidades de detección del sistema para R (Rojo), G (Verde) y B (Azul).	34
5.2. Tabla de búsqueda de temperatura para diferentes razones de H_i usados en el método BEMI (eje izquierdo) y sensibilidad relativa de la temperatura con respecto a las razones (R) (eje derecho).	35
5.3. Intensidad de las 4 señales captadas por cámara digital a color, además de las restas necesarias para calcular la transmisividad.	36
5.4. Resultados del método BMAE para transmisividad en la banda espectral ancha R.	36
5.5. Resultados del método BMAE para campo de f_v (izquierda); y camino vertical de $f_{v,max}$ (derecha).	37
5.6. (a) Ratio de intensidad radiativa proyectada para 2 (panel izquierdo) y 3 (panel derecho) colores. (b) Ratio de intensidad radiativa local deconvolucionada para 2 (panel izquierdo) y 3 (panel derecho) colores.	37
5.7. Campos de temperatura de hollín determinados usando los métodos BEMI (izquierda) y BMAE (derecha), usando dos (G/R) y tres (BG/R ²) colores.	39
5.8. Perfiles de temperatura de 3-BEMI y 3-BMAE en las alturas $z = 42$ mm (arriba) y $z = 28$ mm (abajo).	40
5.9. Temperatura máxima para cada altura de la llama (izquierda) y línea central de temperatura (derecha).	41
5.10. (a) Campos de temperatura generados numéricamente por CoFlame (paneles izquierdos) y campos de temperatura determinados usando 3-BEMI y 3BMAE (paneles derechos), y (b) Temperatura máxima para cada altura de la llama (izquierda) y línea central de temperatura (derecha).	42
5.11. Campos de sensibilidad relativa para métodos 3-BEMI y 3-BMAE.	43
5.12. Estimación del error con un enfoque de Monte-Carlo.	44
5.13. Perfiles de incertezas en las alturas $z = 42$ mm (arriba) y $z = 28$ mm (abajo), basados en el método de Monte-Carlo.	45

1 | Introducción

La combustión continuará siendo la fuente principal de calor y generación de energía en el futuro cercano. Aproximadamente el 90,5 % del suministro total de energía proviene de la quema de algún combustible [1], donde solo el 9,3 % del total proviene de bio-combustibles o desechos. Específicamente los combustibles fósiles (petróleo, carbón y gas natural) siguen y seguirán siendo las principales fuentes de energía del mundo. En un futuro con desarrollo sustentable también aparece la combustión como centro de atención, principalmente con la quema del hidrógeno, llamado combustible verde, ya que en su producción y utilización no genera contaminantes [2].

Como consecuencia de la quema de combustibles fósiles se emiten diferentes contaminantes tales como CO_2 , CO y NO_x gases que son conocidos por ser de efecto invernadero, causantes del cambio climático global. Otro contaminante producido por el proceso de combustión es el **hollín**, una partícula sólida nanométrica que también contribuye al cambio climático tanto global como local [3]. Además, estas partículas son dañinas para la salud humana causando daño pulmonar [4]. Esto hace que sea importante estudiar los mecanismos que controlan el proceso de producción de hollín en la combustión, con el objetivo de predecir y controlar el comportamiento y las emisiones de la quema de combustible.

La **temperatura** es uno de los parámetros clave que controla la cinética química en fase gaseosa, la producción de hollín y la tasa de liberación de calor de un proceso de combustión. Por ende, medir la temperatura es crucial para entender mejor los procesos de formación de hollín. En llamas cargadas de esta partícula, esta medición puede ser realizada por técnicas de pirometría. Técnicas ópticas de pirometría permiten inferir el campo de temperaturas de una llama al combinar mediciones de su emisión espectral a diferentes longitudes de onda [5]. Además, la característica no-intrusiva de la pirometría óptica permite estudiar llamas en diferentes condiciones sin perturbar significativamente el proceso de combustión.

Dentro de las variadas técnicas avanzadas de pirometría desarrolladas a la fecha, aquellas basadas solamente en la emisión de la llama aún son ampliamente utilizadas debido a su relativa simplicidad en comparación con otras técnicas. Esto es especialmente el caso cuando complejos *set-ups* ópticos no pueden ser instalados o el acceso óptico a la llama es limitado, lo cual ocurre en la mayoría de los quemadores industriales. Por lo tanto, el desarrollo de estas técnicas puede suponer un ahorro considerable de dinero por su instalación relativamente simple, con el fin de poder llevar el control de la temperatura de procesos industriales que incluyan combustión en su operación.

Las técnicas de pirometría de razón de dos colores están basadas en capturar la intensidad de la radiación de la llama ya sea mediante diferentes bandas espectrales estrechas usando filtros monocromáticos [6] o a bandas espectrales anchas de una imagen de una cámara digital a color [7, 8, 9]. En este enfoque, la razón de las señales medidas puede ser directamente relacionada con la temperatura del hollín mediante la utilización de diferentes supuestos clásicos. Sin embargo, para una medición de

temperatura precisa, información espectral debe ser adquirida simultáneamente a diferentes longitudes de onda, especialmente cuando las llamas presentan un comportamiento que varía con el tiempo [10]. Basado en estas consideraciones, una cámara digital a color podría ser usada como pirómetro debido a su capacidad de capturar simultáneamente la intensidad de la emisión espectral de una llama a diferentes bandas espectrales anchas caracterizadas por sus canales RGB (*Red*, *Green* y *Blue*).

Dentro de las técnicas de pirometría más utilizadas se encuentran aquellas basadas solamente en la emisión de la llama (EMI) [7, 9] y por otro lado las técnicas de absorción y emisión de luz modulada (MAE). Estas últimas usualmente son utilizadas para medir los campos de fracción de volumen de hollín (f_v) y temperatura (T) realizando mediciones simultáneas de la emisión y la extinción de la luz de la llama [11, 12]. Guibaud *et al.* [13] extendieron la técnica MAE de banda espectral estrecha a imágenes con bandas espectrales anchas (BMAE) usando una cámara tri-CCD como pirómetro en una llama. Capturar la señal emitida en una región de banda espectral ancha (ventana espectral > 10 nm) complejiza el proceso de deconvolución requerido para calcular la emisión local del hollín (y, por lo tanto, la temperatura), ya que se debe realizar una integración espectral. Además, la dependencia espectral de las propiedades del hollín en una amplia región espectral no está bien establecida por la comunidad científica.

La tradicional combinación de diferentes longitudes de onda ha sido extensivamente usada en pirometría de hollín. Sin embargo, diferentes estimaciones de temperatura se pueden obtener con la pirometría de razón de dos colores cuando diferentes combinaciones de longitudes de onda son usadas. De hecho, mediciones de emisión a tres diferentes longitudes de onda (y los pares correspondientes G/R, B/R y B/G) pueden entregar como resultado tres diferentes temperaturas, dos de las cuales son independientes [14, 15]. Por ende, pareciera no ser correcto del todo asumir que una medición confiable puede estar basada en un único par de longitudes de onda. De esta manera, usar solo dos mediciones espectrales puede significar un desperdicio de información espectral disponible cuando se utilizan cámaras digitales a color. En la literatura, estas discrepancias son usualmente evitadas al reportar el valor medio de las temperaturas calculadas con cada razón de dos colores [8]. Por otro lado, un enfoque diferente podría combinar estas tres mediciones espectrales distintas en una única expresión de temperatura usando una mayor cantidad de información espectral.

En esta tesis se presenta una nueva metodología para determinar la temperatura del hollín, la cual combina las tres bandas espectrales anchas de una cámara digital a color en una única expresión de temperatura. La temperatura del hollín de una llama de difusión laminar axisimétrica de etileno (C_2H_4) es estimada por ambas técnicas tradicionales de pirometría: emisión de banda espectral ancha (BEMI) y BMAE usando imágenes de una única cámara digital a color de bajo costo. Luego información espectral para el cálculo de temperatura es mejorada usando las tres bandas espectrales anchas R, G y B (3-BMAE y 3-BEMI) y luego los resultados son comparados con los métodos de medición clásico de razón de dos colores.

Finalmente, con el objetivo de validar la nueva metodología y estimar su precisión, se realizan tres análisis. En primer lugar el método es validado usando imágenes sintéticas obtenidas de una llama simulada numéricamente con el código CoFlame [16]. Luego, es realizado un análisis de sensibilidad de la metodología, derivado analíticamente, ante variaciones de parámetros obtenidos experimentalmente.

Por último, es realizado un análisis de incertezas con un enfoque de Monte-Carlo para ambos métodos de tres colores [17]. Este enfoque es necesario debido a la alta complejidad de los cálculos de las metodologías. No es posible obtener directamente la dependencia de los resultados con respecto a ciertos *input* experimentales de manera analítica, por lo tanto, se deben realizar simulaciones variando estos *input*, siguiendo una distribución Gaussiana y analizando la variabilidad de los resultados finales.



2 | Objetivos

2.1. Objetivo General

Desarrollar una nueva metodología experimental para la medición de temperatura de hollín en llamas axisimétricas, utilizando la información espectral de tres bandas espectrales anchas de diferentes longitudes de onda en una única expresión de temperatura.

2.2. Objetivos Específicos

- Investigar sobre el estado del arte en mediciones de pirometría óptica basadas en emisión.
- Modificar el aparato experimental del laboratorio para realizar las mediciones. Además, preparar todos los equipos.
- Medir la temperatura de hollín en una llama de difusión laminar axisimétrica de etileno con cuatro diferentes métodos de pirometría, dos tradicionales con dos colores (BMAE y BEMI) y con dos metodologías nuevas con tres colores (3-BMAE y 3-BEMI).
- Comparar los resultados de los campos de temperatura de las cuatro metodologías a utilizar.
- Realizar una validación de la metodología con los datos entregados por el código CoFlame.
- Calcular la sensibilidad y la incerteza de las dos nuevas metodologías introducidas mediante una derivación analítica y mediante un enfoque de método de Monte-Carlo respectivamente.

3 | Marco Teórico

3.1. Combustión

La humanidad desde sus inicios ha utilizado el fuego como una de sus principales herramientas de subsistencia, se estima el inicio de su uso hace aproximadamente un millón de años [18]. Hoy en día, sistemas complejos incluyen el fuego y la combustión dentro de sus procesos. La energía suministrada en el mundo se basa principalmente en la combustión de combustibles fósiles y de otros combustibles como bio-combustibles y desechos (Tabla 3.1) [1]. Esta energía suministrada incluye la generación de energía eléctrica, el transporte, la calefacción, incluso la quema de gas para poder cocinar en una casa en Chile o en cualquier parte del mundo.

Tabla 3.1: Porcentaje del Suministro de Energía Total Mundial según fuente de energía año 2018.

Fuente de Energía	Porcentaje del Suministro de Energía Total Mundial (%)
Combustibles Fósiles	81,2
Petróleo	31,5
Carbón	26,9
Gas Natural	22,8
Bio-Combustibles y Desechos	9,3
Hidráulica	2,5
Solar, Eólica, etc.	2,0

En el futuro se espera que los combustibles fósiles se vayan reemplazando por otras fuentes de energías más sustentables, aunque esto se prevee principalmente reemplazando la combustión para la generación de energía eléctrica. En el caso de otras industrias como el transporte la combustión seguirá siendo crucial, incluso desde un punto de vista sustentable, ya que se está trabajando hacia la incorporación del hidrógeno como combustible, el cual no genera contaminantes al ser quemado. También se espera que los combustibles fósiles se acaben definitivamente, ya que existen reservas finitas en el planeta. A pesar de estas consideraciones el estudio de la combustión sigue y seguirá siendo un área de investigación crucial para la humanidad, principalmente por su impacto en toda la economía mundial. Analizar su comportamiento, sus pros y contras, con el fin de mejorar la eficiencia de diferentes procesos, mantiene a toda una comunidad científica orientada a su estudio, tanto desde la academia como desde la industria.

Con el objetivo de profundizar en el entendimiento del proceso de combustión se requieren de la definición de conceptos clave. La combustión es una reacción química, donde su principal característica es que es exotérmica, solo necesita una condición inicial para luego liberar energía contenida en los

enlaces moleculares del combustible. La combustión ocurre cuando un combustible (por ejemplo etileno) está en contacto con un comburente (por ejemplo aire) y ocurre un evento detonante (por ejemplo una chispa), el combustible debe ser llevado a una temperatura por sobre su temperatura de ignición para iniciar la combustión. Se presenta un ejemplo de una ecuación de balance de la reacción de combustión del etileno:



Esta ecuación representa una situación idealizada de combustión completa, sin embargo en la realidad siempre existirán otros productos de la combustión en mayores o menores cantidades tales como CO , NO_x , entre otros. Los productos de la combustión son nocivos para la salud humana y se les ha atribuido ser causantes el cambio climático.

Los combustibles pueden ser clasificados según su estado en condiciones normales del ambiente. Representantes de combustibles gaseosos son el hidrógeno (H_2), el monóxido de carbono (CO), y los hidrocarburos ligeros (HC). Combustibles líquidos son usualmente los hidrocarburos más pesados y alcoholes, mientras que los combustibles sólidos incluyen carbón, madera, metales, etc. Un comburente, también llamado oxidante, es una sustancia que posee oxígeno (O_2) en su composición, ya que es un elemento esencial para que exista combustión.

La mayoría de los equipos y dispositivos que utilizan algún mecanismo de combustión para generar calor y potencia, usan como comburente simplemente el oxígeno en el aire. Esto parece de alguna forma obvio, debido a que el aire puede ser obtenido directamente del ambiente. El aire contiene aproximadamente un 21 % de concentración molar de oxígeno, y aproximadamente el restante 79 % corresponde a nitrógeno. Como la mayor parte del aire es nitrógeno, el cual es básicamente inerte químicamente, este solo se calienta durante la reacción, teniendo como resultado que el calor producido por la combustión y su temperatura se vean reducidos. Por esta razón, en algunas aplicaciones que lo requieran se utiliza aire con un mayor índice de oxígeno (OI) o en algunos casos oxígeno puro [19].

$$\text{OI} = \frac{\text{Moles de Oxígeno}}{\text{Moles de Aire}} \quad (3.2)$$

3.1.1. Emisión de Contaminantes

Los gases de efecto invernadero (GEI) son aquellos que aumentan la temperatura de la tierra con su presencia en la atmósfera. El fenómeno que ocurre con estos gases es que previenen que la radiación electromagnética de la tierra salga de la atmósfera quedándose en el planeta y, por consiguiente, aumentando la temperatura. Una parte de la radiación electromagnética proveniente del sol, atraviesa la atmósfera y aumenta la temperatura de la tierra, la tierra a su vez emite una cierta cantidad de radiación, sin embargo esta tiene una distribución espectral diferente (principalmente infrarroja) y una parte de ella queda atrapada en la atmósfera, principalmente debido a los gases de efecto invernadero. Estos gases tienen la característica de dejar pasar la radiación del sol y de reflejar la radiación de la

tierra [20]. Dentro de estos GEI los provenientes de la combustión, ya mencionados anteriormente, son CO_2 , CO y NO_x . Se presenta un esquema de la interacción de los GEI con la radiación:

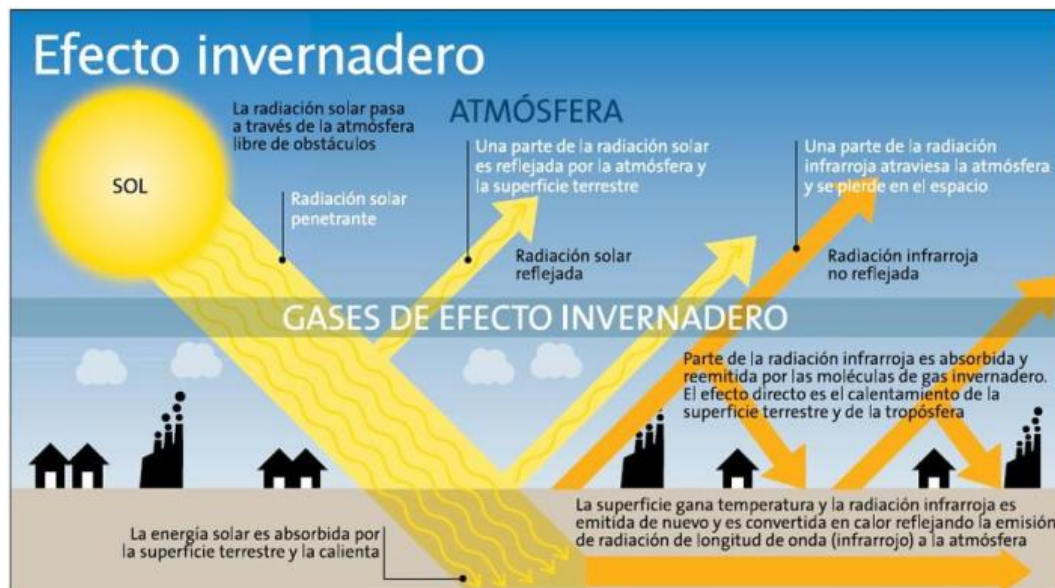


Figura 3.1: Esquematización de la interacción de los GEI con la radiación. (Fuente: Asociación Celtaia).

Otro producto de la combustión son las partículas sólidas de hollín las cuales también contribuyen al cambio climático de la misma forma que los gases [3], ya que también se encuentran en la atmósfera y poseen características similares con respecto a su interacción con la radiación. El hollín también está asociado a riesgos de la salud del ser humano, ya que este se considera como material particulado ultrafino, partículas de hollín pueden clasificarse en diferentes grupos de partículas perjudiciales para la salud tales como los famosos $\text{PM}_{2.5}$ y PM_{10} [21], los cuales son medidos en muchas ciudades y son un indicador de la calidad del aire. Existe una correlación estadísticamente significativa entre los niveles de partículas finas o nanométricas en el ambiente y diferentes efectos sobre la salud. Los resultados de diversos estudios han demostrado consistentemente un impacto negativo en la salud humana que es atribuible al material particulado presente en el aire. Además de los problemas respiratorios agudos ya conocidos, las partículas ambientales pueden exacerbar otros problemas de salud, como la insuficiencia cardíaca congestiva. El impacto en la salud de la exposición a $\text{PM}_{2.5}$ y partículas ultrafinas (menos de 100 nm) puede provocar una variedad de síntomas incluyendo reducción de la variabilidad del ritmo cardíaco. Dentro de los efectos a más largo plazo se puede incluir cáncer de pulmón. Existe una correlación significativa entre las muertes por cáncer de pulmón y por causas cardiopulmonares, con la exposición a $\text{PM}_{2.5}$ [22].

3.2. Llama de difusión laminar

Ya sea de manera natural o por diseño, la mayoría de los procesos de combustión el combustible y el comburente están inicialmente separados. Las llamas que tienen esta característica son las llamadas de

difusión, también pueden ser llamadas llamas no-premezcladas (contraste con las llamas premezcladas donde combustible y comburente provienen de una mezcla). Para que la combustión exista los reactantes se deben juntar, esto ocurre mediante algún mecanismo de transporte. El fenómeno de difusión corresponde al transporte de masa provocados por gradientes de concentración, y para el caso de este tipo de llamas controla gran parte del proceso de combustión, por sobre otros fenómenos de transporte como gradientes de temperatura o de momento. Debido a esta razón, este tipo de llama se les denomina convencionalmente de difusión. Los gradientes de concentración son grandes, porque inicialmente los reactantes se encuentran separados por lo que al consumirse rápidamente con la reacción química de la combustión se generan gradientes de oxidante desde fuera de la llama hacia su interior y de combustible desde dentro de la llama hacia el exterior de esta. Algunos ejemplos de llamas de difusión son: cocinas residenciales, un fósforo, la llama de una vela, los motores diésel o un quemador del tipo Gülder [23] como el cual se observa en la figura 3.2.



Figura 3.2: Llama de difusión laminar en coflujo en un quemador Gülder. (Fuente: LiiScience.org).

Por otro lado, las llamas pueden clasificarse según la velocidad de inyección de combustible, y por consiguiente, su estabilidad geométrica. La combustión al siempre ocurrir en el estado gaseoso, el entendimiento de la mecánica de fluidos es fundamental. Para clasificar los flujos laminares y los turbulentos se utiliza el número de Reynolds definido como:

$$Re = \frac{VL}{\nu}, \quad (3.3)$$

donde V es la velocidad del fluido, L representa el largo característico y ν la viscosidad cinemática del fluido. Según su número de Reynolds los flujos se clasifican de la siguiente forma (Tabla 3.2)[24]:

Tabla 3.2: Características del flujo según su número de Reynolds.

Reynolds entre	Características del flujo
0 - 1	Movimiento laminar lento, altamente viscoso
1 - 103	Laminar, fuerte dependencia del número de Reynolds
103 - 104	Transición a la turbulencia
104 - ∞	Turbulento, débil dependencia del número de Reynolds

3.3. Hollín

Como ya se ha mencionado anteriormente las partículas de hollín son una de las causas del calentamiento global, además de ser dañinos para la salud del ser humano. Estas importantes razones han llevado a la comunidad científica a interesarse en el estudio de sus características, morfología, su producción y los factores que la afectan con el fin de poder controlar y reducir sus emisiones. Como resultado de los procesos de combustión aparecen partículas de núcleo carbonoso, las cuales son llamadas hollín (*soot* en inglés) en la literatura científica. Es crucial para la industria poder entender de mejor manera los factores que influyen en las emisiones de contaminantes como el hollín con el fin de poder controlarlos de mejor manera y también tener la oportunidad de realizar innovación con base científica.

Otro importante avance científico como resultado del estudio del hollín ha sido lograr entender mejor sus nanoestructuras, las cuales han mostrado propiedades únicas que podrían ser útiles para la generación de materiales. Estos nanomateriales a base de carbono exhiben propiedades físicas y químicas excepcionales, por ejemplo: una densidad de corriente mayor al cobre, transparencia óptica, baja densidad y semi-absorción química [25]. Esto se puede atribuir a la presencia de niveles discretos de energía y disposición estructural características que son posibles a escala nanométrica. No obstante, el proceso de síntesis de estos nanomateriales es complejo y costoso. Por ende, los costos de su producción y posterior escalamiento aún deben ser más eficientes antes de que se puedan desarrollar productos competitivos en el mercado.

3.3.1. Procesos de Formación y Oxidación del Hollín

La formación de hollín es un proceso complejo, el cual se asume que comienza cuando la pirólisis de un combustible forma precursores del hollín como moléculas gaseosas de metano, benceno, etileno, propileno y acetileno [26]. Luego, se pasa a la fase de nucleación, que corresponde a la aparición de los primeros aglomerados de hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAH). Estos aglomerados forman partículas de carbono orgánico de nivel nanométrico que son las primeras formas de hollín. Estas partículas luego aumentan su tamaño mediante el crecimiento de superficie, ya que partículas gaseosas (principalmente acetileno) se adhieren a esta. Paralelamente también ocurre el proceso de coalescencia donde partículas de hollín de similar tamaño se unen. Debido a las altas temperaturas, estas partículas van perdiendo el hidrógeno, y se vuelven más carbonizadas. Al tener estas características las partículas

tienden a juntarse en cadenas de partículas primarias esféricas debido a su cinética, esto se conoce como la fase de aglomeración.

Los procesos de formación, crecimiento y oxidación de las partículas de hollín en las llamas de difusión involucran una interacción de diferentes procesos químico-físicos, los cuales pueden observarse en la figura 3.3 [27]. La oxidación es un proceso paralelo que ocurre durante todas las etapas y que supone una reducción de la cantidad de partículas de hollín. Además de la oxidación ocurren procesos de fragmentación del hollín debido a su cinética química. Estos procesos contribuyen a que se reduzcan las emisiones de hollín.

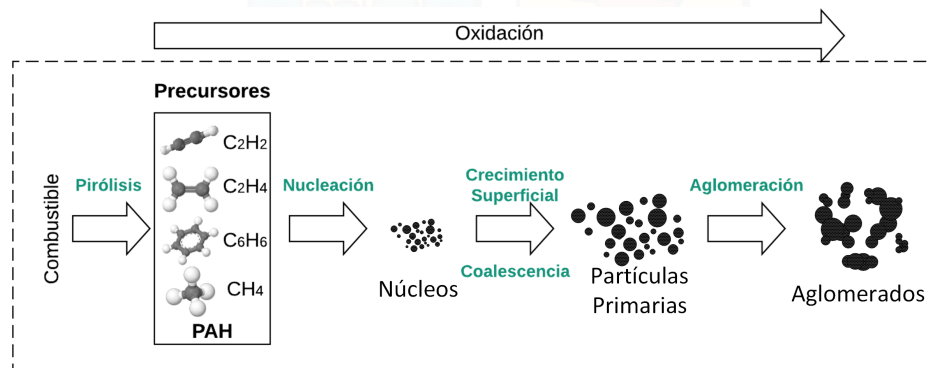


Figura 3.3: Esquema de las fases del proceso de formación, crecimiento y oxidación del hollín en un proceso de combustión.

La oxidación se define como el proceso de reacción de partículas carbonizadas con partículas oxigenadas, dando como resultado productos de la combustión. Es un proceso que ocurre en la superficie de las partículas y ocurre simultáneamente en las etapas de formación del hollín. Se considera como la especie oxidante más reactiva al radical OH [28].

Todos los procesos relacionados con la producción y destrucción del hollín tienen lugar en diferentes zonas en la llama, los cuales se pueden observar en la figura 3.4 [29].

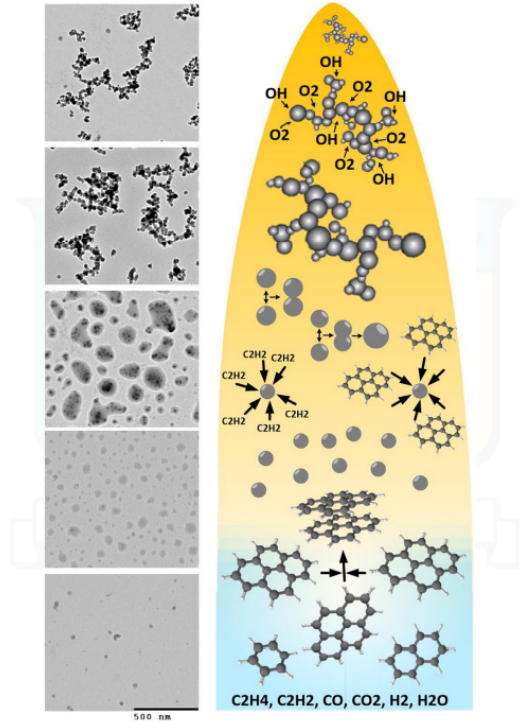


Figura 3.4: Evolución en la morfología del hollín observada en la línea central de una llama de difusión laminar de coflujo (izquierda). Ilustración gráfica de los procesos considerados en la formación, crecimiento y oxidación del hollín en una llama (derecha).

3.3.2. Fracción Volumétrica del Hollín

La fracción volumétrica del hollín (f_v) es una cantidad física, que representa la proporción de hollín existente en un volumen determinado en una llama, esta se puede expresar como [30]:

$$f_v = \frac{V_s}{V}, \quad (3.4)$$

donde V_s corresponde al volumen de las partículas de hollín presentes en un volumen de control V . Esta medida es de crucial importancia para entender los procesos de formación y oxidación del hollín, tanto de manera integrada, es decir, cuánto hollín existe en una llama; como de manera local, conocer en cada parte de la llama cuánto hollín existe y así conocer las zonas donde predominan las diferentes fases de producción o bien la oxidación.

Diversos métodos de medición no-intrusivos se utilizan para medir la fracción volumétrica del hollín, el más reciente y moderno es el de incandescencia inducida por láser (LII) donde en palabras simples un pulso láser impacta la llama aumentando la temperatura de las partículas de hollín, luego mediante la captura de la intensidad de la radiación del hollín con una cámara, se puede saber cuántas partículas de hollín existen además de su tamaño debido al tiempo que se éstas partículas se demoran en enfriarse [31]. Otro método no-intrusivo es el de extinción de luz o atenuación del camino óptico (LOSA) el cual se complementa con el método de medición de temperatura de absorción y emisión de

luz modulada (MAE) [32]. Para esta tesis es importante conocer las características y cómo se lleva a cabo la implementación de este último método.

3.3.2.1. Técnica de Extinción de Luz

Las partículas de hollín al interactuar con una fuente de luz (una onda electromagnética) de baja energía, generan un fenómeno de extinción de la luz, es decir, la intensidad de ésta se ve reducida. Esto ocurre principalmente por dos efectos: la absorción de la energía proveniente de la luz por parte de las partículas y la dispersión, donde se separan las ondas electromagnéticas en diferentes direcciones (ver figura 3.5 [33]). La técnica de extinción de luz o también llamada atenuación del camino óptico (LOSA por sus siglas en inglés) mide la intensidad de la fuente de luz antes y después de pasar por la llama, es decir, mide su atenuación.

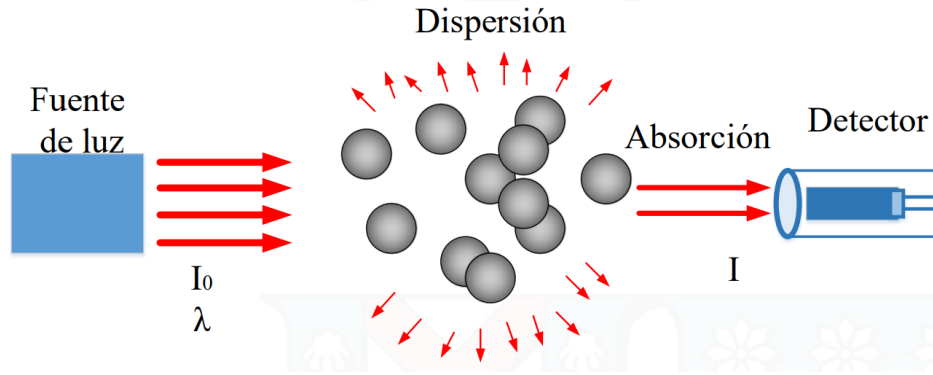


Figura 3.5: Esquema de los fenómenos que ocurren en una medición de LOSA.

Modelo

Según la Ley de Lambert-Beer [34], la intensidad incidente I_0 de una onda electromagnética monocromática, es decir, que posee una longitud de onda considerada única y constante, se ve atenuada por el medio que atraviesa siguiendo la siguiente ecuación:

$$I = I_0 \exp \left(- \int_0^L K_{ext} ds \right), \quad (3.5)$$

donde I corresponde a la intensidad de la onda detectada luego de atravesar un medio con camino óptico de longitud L , y K_{ext} es el coeficiente de extinción de las partículas. A partir de esta ley se puede calcular f_v siguiendo una serie de pasos descritos en [35]. Asumiendo que las partículas de hollín son las que atenúan la luz. En primer lugar se tiene que el coeficiente de extinción está definido por:

$$K_{ext} = \frac{\pi}{4} C_n \int_0^\infty Q_{ext}(D) N(D) D^3 dD, \quad (3.6)$$

donde C_n corresponde al número de densidad de partículas en el medio, D corresponde al

diámetro de partícula, $N(D)$ a la distribución de tamaño de partículas y $Q_{ext}(D)$ corresponde a la eficiencia de extinción de las partículas. Este último término corresponde a la suma de los términos de las eficiencias de absorción (Q_{abs}) y dispersión (Q_{disp}) definidos como:

$$Q_{ext} = Q_{abs} + Q_{disp} = 4x \operatorname{Im} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) + \frac{8}{3} x^4 \operatorname{Re} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right), \quad (3.7)$$

donde m corresponde al índice refractivo complejo de las partículas, y $x = \pi D / \lambda$ es el parámetro del tamaño de partícula. Considerando que para los casos de las partículas de hollín su tamaño es considerablemente más pequeño que las longitudes de onda se tiene que $x \ll 1$, por consiguiente, como Q_{disp} es proporcional a x^4 y Q_{abs} proporcional a x se desprecia el primero con respecto al segundo. Luego, reemplazando las ecuaciones 3.7 y 3.6 en 3.5 e integrando a lo largo del camino óptico, se obtiene:

$$I = I_0 \exp \left(-\pi^2 \frac{L}{\lambda} \operatorname{Im} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) C_n \int_0^\infty N(D) D^2 dD \right) \quad (3.8)$$

Por otro lado, la fracción volumétrica del hollín, f_v se relaciona con el número de partículas C_n mediante la siguiente ecuación:

$$f_v = \frac{\pi}{6} C_n \int_0^\infty N(D) D^3 dD \quad (3.9)$$

Finalmente, reemplazando la ecuación 3.9 en 3.8 se puede obtener la fracción volumétrica de hollín a partir de una medición experimental de I e I_0 :

$$f_v = -\frac{\lambda}{6\pi L E_m} \ln \left(\frac{I}{I_0} \right), \quad (3.10)$$

donde E_m es una función del índice refractivo complejo m del hollín y viene dado por:

$$E_m = \operatorname{Im} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) = \frac{6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + (2nk)^2}, \quad (3.11)$$

teniendo en cuenta que $m = n - ik$. Cabe destacar que la determinación de m es compleja y es un punto donde se están concentrando esfuerzos dentro de la comunidad científica [36].

Absorción Modulada

Para aprovechar el principio de atenuación de luz, Jenkins y Hanson [32] propusieron utilizar una técnica de extinción de luz en la cual se mide el cambio de intensidad entre la fuente de luz monocromática emitida y captada. Debido a que la señal de extinción de luz captada podría tener ruido asociado al medio y a la emisión espontánea de la misma llama, la imagen debe ser corregida con una técnica de modulación (encendido y apagado). La intensidad de la luz que es atenuada por la llama se puede calcular a partir de 4 señales descritas a continuación y esquematizadas en la figura 3.6:

- S : llama encendida y fuente de luz encendida.
- S' : llama encendida con la fuente de luz apagada.
- I_0 : llama apagada, fuente de luz encendida.
- I'_0 : llama apagada, fuente de luz apagada, es decir, la señal de ruido de fondo de la imagen.

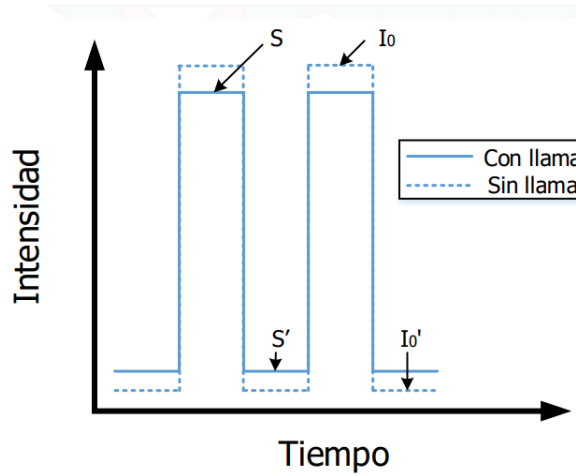


Figura 3.6: Esquema de las intensidades de las señales en el proceso de absorción modulada.

De esta manera la transmisividad τ dada anteriormente por I/I_0 en la ecuación 3.5, ahora se corrige y se define por:

$$\tau = \frac{S - S'}{I_0 - I'_0}, \quad (3.12)$$

Deconvolución

Reordenando la ecuación 3.5 podemos obtener:

$$-\ln(\tau_\lambda) = \int_0^L K_{ext} ds. \quad (3.13)$$

Para obtener el coeficiente de extinción de hollín (K_{ext}) desde la ecuación 3.13 se debe realizar un proceso de deconvolución. Esto se debe a que la señal capturada proviene es atenuada en su totalidad por la llama y es necesario conocer el coeficiente de extinción en cada punto de esta. Si la llama es considerada axisimétrica podemos reescribir la ecuación 3.13 en términos del radio r de la llama, a través de la ecuación de Abel [37]:

$$-\ln(\tau_\lambda) = 2 \int_y^R \frac{K_{ext}(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr, \quad (3.14)$$

donde R es el radio máximo de la llama e y corresponde a la una posición de referencia radial. Para deconvolucionar la señal se utiliza un método conocido como *Onion-Peeling* [37], en el cual se realiza una discretización de la ecuación 3.14, dividiendo la llama en capas como se muestra en la figura 3.7.

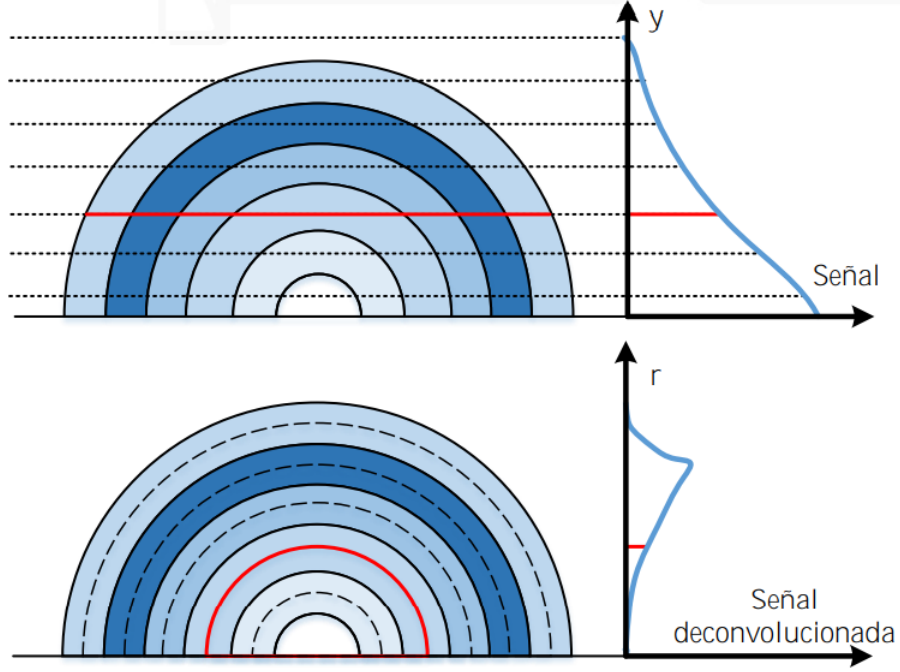


Figura 3.7: Discretización por capas del método *Onion-Peeling*

Al dividir la llama en N anillos concéntricos de ancho $\Delta r = R/(N - 1/2)$ y denotando P_i al valor que toma $-\ln(\tau_\lambda)$ a una distancia i desde el centro de la llama, se puede replantear la ecuación 3.14 en su forma discretizada:

$$P_i = 2 \sum_{j=i}^{N-1} K_{ext}(r_j) \int_{r_j - \Delta r/2, j > i}^{r_j + \Delta r/2, j = i} \frac{r}{\sqrt{r^2 - y_i^2}} dr, \quad (3.15)$$

donde $y_i = i\Delta r$, $r_j = j\Delta r$ $K_{ext}(r_j)$ es el coeficiente absorción del hollín en el anillo ubicado en r_j . Este problema se puede reescribir de forma matricial, y puede ser resuelto por sustitución hacia atrás, debido a que la matriz de coeficientes es una matriz triangular. Forma matricial:

$$\mathbf{A}_{OP} \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (3.16)$$

donde $\mathbf{x}$ corresponde a las incógnitas del problema, con $\mathbf{x}^T = \{K_{ext}(r_j), i = 0, 1, \dots, N - 1\}$. Mientras que $\mathbf{b}$ son los datos proyectados, es decir $\mathbf{b}^T = \{P_i, i = 0, 1, \dots, N - 1\}$. Por último, se tiene la matriz de coeficientes $\mathbf{A}_{OP}$, la cual tiene una naturaleza puramente geométrica, representando el largo de los anillos concéntricos, y por tanto viene dada por:

$$A_{OP, jj} = \begin{cases} 0, & j < i \\ 2\Delta r [(j + 1/2)^2 - i^2]^{1/2}, & j = i \\ 2\Delta r [(j + 1/2)^2 - i^2]^{1/2} - [(j - 1/2)^2 - i^2]^{1/2}, & j > i \end{cases} \quad (3.17)$$

3.4. Medición de Temperatura

Físicamente la temperatura se define como una magnitud utilizada para medir la energía cinética de un sistema termodinámico. Esta energía se genera con los movimientos de las partículas que son parte de este sistema. A mayor movimiento, mayor temperatura. Existen diferentes unidades de medida para la temperatura, las más utilizadas son: Fahrenheit ($^{\circ}\text{F}$), Celcius ($^{\circ}\text{C}$) y Kelvin (K).

La temperatura es uno de los parámetros clave que controla el proceso de combustión, participando directamente en la cinética química de fase gaseosa [19]. Las constantes de equilibrio de las reacciones químicas dependen directamente de la temperatura (T) mediante la ecuación 3.18, estas constantes determinan la cantidad de cada especie en el equilibrio.

$$K_p(T) = \exp \left(\frac{-\sum_{i=1}^N (\nu_i'' - \nu_i') \mu_i^{\circ}(T)}{R^{\circ}T} \right), \quad (3.18)$$

donde ν_i'' y ν_i' son los moles de la especie química i presente en los productos y en los reactantes de la ecuación estequiométrica respectivamente; μ_i° es la energía libre estándar molar de la especie i determinada a una temperatura T y a una presión de referencia, en la mayoría de los casos la atmosférica; y R° es la constante universal de los gases ideales.

La tasa de liberación de calor de un proceso de combustión también depende directamente de la temperatura alcanzada en el proceso. Además, las constantes de velocidad de reacción específicas también dependen de la temperatura. Por consiguiente, la temperatura también se hace presente en la producción de hollín y de todas las partículas y productos de combustión, incluyendo la formación de especies intermedias. Por ende, medir la temperatura es crucial para entender mejor los procesos que ocurren dentro de la combustión como la formación y oxidación del hollín.

El concepto de temperatura proviene del deseo del ser humano de cuantificar las sensaciones de frío y caliente. Las primeras referencias de una escala de temperatura datan del griego Galeno (130-200 DC), el cual identificó 8 niveles de 'temperamentum', los cuales usaba para evaluar el estado de salud de sus pacientes. Él también definió una temperatura neutra, que resultaba de la mezcla en parte iguales de agua caliente y hielo. Este científico antiguo no usaba ningún instrumento y, aparentemente, solo utilizaba sus manos para evaluar la temperatura de sus pacientes. Fernando II da Médici construyó en 1641 el primer instrumento que puede ser considerado como un termómetro. Era un instrumento sellado, lo cual permitía que las medidas de temperatura sean inmunes a variaciones de presión atmosférica y evitaba la evaporación del fluido, el cual era generalmente vino. El instrumento tenía grabado en el vidrio una escala para observar las variaciones de temperatura. Este termómetro se basaba en el principio físico de la expansión por temperatura.

Hoy en día existen diversos instrumentos capaces de medir temperatura, desde los tradicionales termómetros de mercurio a instrumentos más sofisticados basados en principios eléctricos. A continuación se presenta una tabla resumen de los instrumentos existentes:

Tabla 3.3: Tabla resumen de los diferentes instrumentos utilizados para medir temperatura, agrupados por principio físico utilizado.

Principio Físico	Instrumento	Descripción
Expansión por Temperatura	Laminas Bi-Metálicas	Dos láminas de metales diferentes coeficientes de expansión térmica son pegadas, causando una flexión en la lámina bi-metálica.
	Expansión de Fluido	Un fluido dentro de un tubo se expande según la temperatura (ejemplo: termómetros de mercurio).
Presión	Termómetro de Gas	Uno de los termómetros más económicos y versátiles. Consisten en un bulbo que contiene un gas, y un medidor de presión.
Efectos Eléctricos	Termómetro de Resistencia	La resistencia de ciertos materiales varía con la temperatura de una manera bastante reproducible.
	Termistor	Materiales semiconductores cuyas resistencias varían con la temperatura. Poseen una alta sensibilidad.
	Termopar	Basan su funcionamiento en la corriente eléctrica generada por una diferencia de temperatura en dos materiales.
Radiación	Diferentes metodologías experimentales	Metodologías basadas en captar la radiación electromagnética emitida por un cuerpo y asociarla con su temperatura.

3.4.1. Pirometría de 2 colores

Dentro de las técnicas de medición de temperatura basadas en radiación se encuentran las técnicas ópticas de pirometría. las cuales permiten inferir el campo de temperaturas de una llama al combinar mediciones de su emisión espectral a diferentes longitudes de onda [5]. La temperatura se obtiene en base a la relación entre el poder emisivo y la temperatura de un cuerpo. La característica no-intrusiva, de la pirometría óptica permite estudiar el proceso de combustión en llamas en diferentes condiciones sin perturbar significativamente el proceso de combustión, de esta manera se pueden conocer de mejor forma los efectos de las variables en un experimento en la temperatura.

Dentro de las variadas técnicas avanzadas de pirometría desarrolladas a la fecha, aquellas basadas solamente en la emisión de la llama son aún ampliamente utilizadas debido a su relativa simplicidad en comparación a otras técnicas. Esto es especialmente el caso cuando complejos *set-ups* ópticos no pueden ser instalados o el acceso óptico a la llama es limitado, esto ocurre en la gran mayoría de quemadores industriales. Por lo tanto, el desarrollo de estas técnicas puede suponer un ahorro considerable de dinero por su instalación relativamente simple, con el fin de poder llevar el control de la temperatura de procesos industriales que incluyan combustión en su operación.

Las técnicas de pirometría de razón de dos colores están basadas en capturar la intensidad de la radiación de la llama ya sea mediante diferentes bandas espectrales estrechas usando filtros monocromáticos [6] o a bandas espectrales anchas de una imagen de una cámara digital a color [7, 8, 9]. En este enfoque, la razón de las señales medidas puede ser directamente relacionada con la temperatura del hollín mediante la utilización de diferentes supuestos que se detallarán a continuación. Sin embargo, para una medición de temperatura precisa, la información espectral debe ser adquirida simultáneamente a diferentes longitudes de onda, especialmente cuando las llamas presentan un comportamiento que varía con el tiempo [10]. Basado en estas consideraciones, una cámara digital a color podría ser usada como pirómetro debido a su capacidad de capturar simultáneamente la intensidad de la emisión espectral de una llama a diferentes bandas espectrales anchas caracterizadas por sus canales rojo, verde y azul, RGB (*Red*, *Green* y *Blue*).

Dentro de las técnicas de pirometría más utilizadas se encuentran las basadas solamente en la emisión de la llama (EMI) y por otro lado las técnicas de absorción y emisión de luz modulada (MAE). Estas técnicas también fueron ampliadas para incluir bandas espectrales anchas (BEMI y BMAE). Cada una de estas técnicas son descritas a continuación.

3.4.1.1. Emisión (EMI)

Si las mediciones de la radiación de la llama son realizadas en regiones espectrales donde las emisiones del hollín son dominantes, la intensidad de la señal medida representa la emisión del hollín integrada. Sin embargo, la radiación emitida por el hollín es atenuada por partículas adyacentes mediante los efectos de absorción y dispersión antes de llegar al foto-detector. Dadas estas consideraciones, la llama se comporta como un medio emisor y absorbente. La emisión del hollín, I_λ , a lo largo del camino óptico l , a una longitud de onda λ , es modelada por la siguiente ecuación [38]:

$$\frac{dI_\lambda}{dl} = J_\lambda(l) - k_\lambda I_\lambda, \quad (3.19)$$

donde k_λ representa el coeficiente de absorción del hollín en una cierta longitud de onda y la emisión espectral del hollín es expresada como $J_\lambda = k_\lambda I_\lambda^{bb}$. La irradiancia monocromática de cuerpo negro a una temperatura T por unidad de área y unidad de ángulo sólido, I_λ^{bb} , viene dada por la ley de Planck:

$$I_\lambda^{bb} = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (\exp(hc/\lambda kT(l)) - 1)}, \quad (3.20)$$

donde c es la velocidad de la luz, h es la constante de Planck y k es la constante de Boltzmann. La solución integrada de la ecuación 3.19 a lo largo del camino óptico del foto-detector está dada por:

$$I_\lambda(y) = \int_{l_0(y)}^{l_f(y)} J_\lambda(l) \exp\left(-\int_l^{l_f(y)} k_\lambda(l') dl'\right) dl, \quad (3.21)$$

donde $l_0(y)$ y $l_f(y)$ representa los límites del camino óptico de la llama, y el término exponencial describe la auto-absorción del hollín. La auto-absorción puede ser importante para llamas con anchura óptica grande, y puede ser despreciada para anchuras ópticas menores a 0,3 cm [39]. Esto facilita el procedimiento de deconvolución matemática requerido para determinar la temperatura, pero puede causar incertezas de hasta ≈ 50 K en regiones de concentración máxima de hollín [8]. La atenuación de la radiación térmica de las partículas de hollín deben entonces ser consideradas si niveles más altos de precisión son requeridos.

La ecuación 3.21 debe ser deconvolucionada, mediante la técnica de *onion-peeling* descrita en la sección 3.3.2.1 para así obtener la intensidad de la emisión local del hollín como función de la coordenada radial r , $J_\lambda(r) = k_\lambda(r)I_\lambda^{bb}(r)$. Una vez los campos de intensidad locales son calculados, la razón de intensidades a dos longitudes de onda (2 colores) con $\lambda_1 < \lambda_2$, se define como:

$$R_{12} = \frac{J_{\lambda_1}(r)}{J_{\lambda_2}(r)} = \frac{k_{\lambda_1}(r) \frac{1}{\lambda_1^5} [\exp(c_2/\lambda_1 T) - 1]}{k_{\lambda_2}(r) \frac{1}{\lambda_2^5} [\exp(c_2/\lambda_2 T) - 1]}, \quad (3.22)$$

donde $c_2 = hc$. Finalmente, usando la aproximación de Wien para la ley de Planck [40], válida para $hc \gg kT$, el cual es el caso para los rangos de detección de este trabajo, se obtiene una expresión para la temperatura considerando la relación entre k_λ y E_m mediante la ecuación 4.2:

$$T_{12,EMI} = \frac{c_2 \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right)}{\ln \left(R_{12} \frac{E_m(\lambda_2)}{E_m(\lambda_1)} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^6 \right)}. \quad (3.23)$$

No obstante, conocimiento previo adicional de la función de absorción del hollín ($E_m(\lambda)$) es requerido para un análisis de puramente emisión. En este contexto, la dependencia espectral de E_m aún no es bien establecida, siendo un asunto actual de debate en la comunidad científica y existen variados acercamientos para estimar su valor [41, 36].

3.4.1.2. Absorción Emisión Modulada (MAE)

Por otro lado la técnica MAE es usualmente usada para medir los campos de fracción de volumen de hollín (f_v) y temperatura (T) realizando mediciones simultáneas de la emisión y la extinción de la luz de la llama. [11, 12], el cálculo de f_v y la modulación son descritos en la sección 3.3.2.1. Las señales de extinción capturadas a dos longitudes de onda permite determinar la distribución 2D del coeficiente de absorción del hollín (k_λ), el cual está directamente relacionado con f_v y luego es usado para evaluar la emisión local del hollín [32], lo cual a su vez puede ser usado para estimar la temperatura del hollín. La principal ventaja de este enfoque es evitar el supuesto de la variación de E_m con la longitud de onda (λ) en una banda espectral estrecha (< 10 nm). A partir de la ecuación 3.23 utilizando los coeficientes de absorción (k_λ) en lugar de la función de absorción (E_m) se obtiene una expresión

para la temperatura:

$$T_{12,MAE} = \frac{c_2 \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right)}{\ln \left(R_{12} \frac{k_{\lambda_2}}{k_{\lambda_1}} \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^5 \right)}. \quad (3.24)$$

3.4.1.3. Banda Espectral Ancha (BEMI y BMAE)

Guibaud *et al.* [13] extendieron la técnica MAE de banda espectral estrecha a imágenes con bandas espectrales anchas (BMAE) usando una cámara tri-CCD como pirómetro en una llama. Capturar la señal emitida en una región de banda espectral ancha (ventana espectral > 10 nm) complejiza el proceso de deconvolución requerido para calcular la emisión local del hollín (y, por lo tanto, la temperatura), ya que una integración espectral debe ser realizada. Además, la dependencia espectral de las propiedades del hollín como E_m , en una amplia región espectral no está bien establecida. También existe la técnica con una banda espectral ancha basada en emisión (BEMI). La ecuación necesaria para poder integrar espectralmente la intensidad de la radiación absoluta de la llama obtenida por la cámara se puede expresar como [42]:

$$S_i = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \eta_{\lambda} I_{\lambda} d\lambda = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \eta_{\lambda} \int_0^{l_f} k_{\lambda}(l) I_{\lambda}^{bb}(l) \exp \left(- \int_l^{l_f(y)} k_{\lambda}(l') dl' \right) dl d\lambda, \quad (3.25)$$

donde $i = (R, G, B)$, y η_{λ} es la eficiencia de respuesta espectral relativa de la cámara. A partir de esta ecuación despreciando el término exponencial asociado a la auto-absorción y aplicando teorema de Fubini para intercambiar las integrales (espectral y espacial) obtenemos:

$$S_i = \int_0^{l_f} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \eta_{\lambda} k_{\lambda}(l) I_{\lambda}^{bb} d\lambda dl, \quad (3.26)$$

esta ecuación también puede ser reescrita como:

$$S_i = \int_0^{l_f} H_i(l) dl, \quad (3.27)$$

donde $H_i(l) dl = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \eta_{\lambda} k_{\lambda}(l) I_{\lambda}^{bb} d\lambda$, es el término fuente de emisión. En este trabajo se utiliza una deconvolución del tipo *onion-peeling* acoplada con una regularización de Tikhonov para reconstruir $H_i(l)$. Cabe destacar que para cada canal R, G y B se obtienen estas cantidades integrando espectralmente dependiendo del valor de η_{λ} en cada canal. A modo de ejemplo se utilizan los canales G y R para mostrar las ecuaciones usadas para las razones de 2 colores para BEMI y BMAE. Para el caso de BEMI se debe asumir un modelo para E_m y se utilizan los términos fuentes de la emisión, la temperatura se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$\Theta_{2H} = \frac{H_G(l)}{H_R(l)} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_{\lambda} \frac{6\pi E_m}{\lambda} I_{\lambda}^{bb}(l) d\lambda}{\int_{\lambda_R} \eta_{\lambda} \frac{6\pi E_m}{\lambda} I_{\lambda}^{bb}(l) d\lambda}, \quad (3.28)$$

mientras que para el caso de BMAE se utiliza directamente la razón de las señales:

$$\Theta_{2S} = \frac{S_G}{S_R} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_{\lambda} I_{\lambda}(l) d\lambda}{\int_{\lambda_R} \eta_{\lambda} I_{\lambda}(l) d\lambda}, \quad (3.29)$$

en ambas ecuaciones la incógnita es la temperatura de hollín, la cual se busca de manera iterativa con un algoritmo de Newton. Haciendo variar el lado derecho de la ecuación hasta igualar el lado izquierdo, el cual fue medido experimentalmente.

3.5. CoFlame Code

Se necesitan diversas herramientas para que los ingenieros puedan lograr reducir las emisiones de hollín. Debido a la naturaleza altamente compleja de la formación del hollín se requieren modelos numéricos detallados para obtener información sobre los mecanismos involucrados en el proceso y las variables que afectan a cada uno.

CoFlame Code es un código escrito en el lenguaje de programación FORTRAN que modela llamas de difusión laminar con una alta concentración de hollín [16]. El código calcula los campos de velocidad radial y axial, temperatura, concentración de especies y agregados de hollín, y número de partículas primarias. El código se encuentra de manera pública para la comunidad científica y ha sido validado al compararlo con datos experimentales.

Los modelos de formación de hollín pueden ser divididos en 3 diferentes categorías generales: empíricos, semi-empíricos y detallados [43]. Los modelos empíricos son desarrollados en base a correlaciones fenomenológicas entre la formación de hollín y diferentes parámetros de la combustión como la presión y la temperatura, estas correlaciones son calculadas experimentalmente. El siguiente nivel de modelamiento de hollín, con modelos semi-empíricos, trata de incorporar algunos aspectos de la física y la química del fenómeno. Finalmente, los modelos detallados utilizan las ecuaciones de conservación y aquellas que describen la cinética química de las especies, además de ecuaciones que modelan los diferentes procesos de formación del hollín.

A medida que los recursos computacionales han ido mejorando considerablemente, el modelamiento de la formación del hollín para fines académicos se ha enfocado en usar modelos detallados. Problemas que no eran posibles de realizar computacionalmente, hoy en día son posibles.

3.5.1. Modelo Numérico

En la siguiente sección se presentan todas las ecuaciones de conservación que son parte del modelado de CoFlame code.

3.5.1.1. Ecuaciones de Conservación

Para la fase gaseosa se resuelven las ecuaciones de conservación de masa, momentum, energía y fracción de masa de las especies. CoFlame utiliza la naturaleza axisimétrica de las llamas, y se resuelven las ecuaciones en un sistema de coordenadas cilíndrico de dos dimensiones (z y r).

Conservación de la Masa

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho v) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho u) = 0 \quad (3.30)$$

Conservación del Momentum axial y radial

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial u}{\partial r} + \rho u \frac{\partial u}{\partial z} = & -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right] \\ & - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \rho g_z \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial v}{\partial r} + \rho u \frac{\partial v}{\partial z} = & -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[\mu \frac{\partial}{\partial r} (rv) \right] \\ & - \frac{2}{3} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{2\mu v}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (rv) \\ & + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} \frac{\partial u}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Conservación de la Fracción de Masa de las Especies

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial Y_k}{\partial r} + \rho u \frac{\partial Y_k}{\partial z} = & -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho Y_k V_{k,r}) - \frac{\partial}{\partial z} (\rho Y_k V_{k,z}) + W_k \dot{\omega}_k \\ & (k = 1, 2, \dots, KK) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Conservación de la Energía

$$\begin{aligned} C_p \left(\rho v \frac{\partial T}{\partial r} + \rho u \frac{\partial T}{\partial z} \right) = & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_{k=1}^{KK} h_k W_k \dot{\omega}_k \\ & - \sum_{k=1}^{KK} \left[\rho C_{p,k} Y_k \left(V_{k,r} \frac{\partial T}{\partial r} + V_{k,z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \right] \\ & - \rho C_{p,s} Y_s \left(V_{s,r} \frac{\partial T}{\partial r} + V_{s,z} \frac{\partial T}{\partial z} \right) \\ & - h_s W_s \dot{\omega}_s + Q_r \end{aligned} \quad (3.34)$$

En las ecuaciones anteriormente presentadas, u es la velocidad axial, v es la velocidad radial, ρ es la densidad de la mezcla, μ es la viscosidad, g_z es la aceleración de gravedad, Y_k es fracción de masa de la especie número k , $V_{k,r}$ y $V_{k,z}$ son las velocidades de difusión radial y axial de la especie k , W_k es el peso molecular de la especie k , $\dot{\omega}_k$ es la tasa de producción de la especie k debido a la reacción química en fase gaseosa y la interacción con hollín en fase sólida, C_p es la capacidad calorífica específica

de la mezcla a presión constante, T es la temperatura, λ es la conductividad térmica, h_k es la entalpía específica de la especie k , $C_{p,k}$ y Q_r es el calor radiativo transferido por el hollín, el agua, el dióxido y el monóxido de carbono, el modelo de radiación utilizado es el desarrollado en [44]. Además, cabe destacar que la especie $k = s$ hace referencia al hollín.

La dinámica de las partículas de hollín es descrita usando un método de secciones fijas, donde las partículas de hollín son divididas según su masa. 35 secciones discretas con distintos rangos de masa (separados logarítmicamente) agrupan las diferentes partículas de hollín. Se resuelven 2 ecuaciones de transporte para cada sección:

Conservación de la Densidad Numérica de Agregados de Hollín

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial N_i^a}{\partial r} + \rho u \frac{\partial N_i^a}{\partial z} = & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho D_i^a \frac{\partial N_i^a}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho D_i^a \frac{\partial N_i^a}{\partial z} \right) \\ & - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho N_i^a V_{T,s,r}) - \frac{\partial}{\partial z} (\rho N_i^a V_{T,s,z}) + \rho \left(\frac{\partial N_i^a}{\partial t} \Big|_{nu} \right. \\ & \left. + \frac{\partial N_i^a}{\partial t} \Big|_{co} + \frac{\partial N_i^a}{\partial t} \Big|_{sg} + \frac{\partial N_i^a}{\partial t} \Big|_{ox} + \frac{\partial N_i^a}{\partial t} \Big|_{fr} \right) \end{aligned} \quad (3.35)$$

$(i = 1, 2, \dots, 35)$

Conservación de la Densidad Numérica de Partículas Primarias de Hollín

$$\begin{aligned} \rho v \frac{\partial N_i^p}{\partial r} + \rho u \frac{\partial N_i^p}{\partial z} = & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \rho D_i^a \frac{\partial N_i^p}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\rho D_i^a \frac{\partial N_i^p}{\partial z} \right) \\ & - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho N_i^p V_{T,s,r}) - \frac{\partial}{\partial z} (\rho N_i^p V_{T,s,z}) + \rho \left(\frac{\partial N_i^p}{\partial t} \Big|_{nu} \right. \\ & \left. + \frac{\partial N_i^p}{\partial t} \Big|_{co} + \frac{\partial N_i^p}{\partial t} \Big|_{sg} + \frac{\partial N_i^p}{\partial t} \Big|_{ox} + \frac{\partial N_i^p}{\partial t} \Big|_{fr} \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

$(i = 1, 2, \dots, 35)$

Estas ecuaciones incluyen el modelado de varios procesos: nucleación (nu) [45], condensación de PAH y crecimiento superficial HACA (sg) [46, 47], oxidación de superficie (ox) [48], coagulación (co) [49], fragmentación (fr) [50], difusión de partícula (D_i^a) y termofóresis ($V_{T,s}$) [51]. Sus ecuaciones se explican y detallan en las referencias, además de en la referencia principal [16].z

3.5.1.2. Resolución Computacional

Técnicas de Discretización

El método de volumen finito es utilizado para discretizar las ecuaciones de conservación. Los términos difusivos son discretizados usando un esquema de ley de poder [52]. Al utilizar este esquema se debe tener una malla con espaciado lo suficientemente pequeño para evitar una falsa difusión. En CoFlame code se estima que la difusión es al menos un orden de magnitud menor que el tamaño de las cuadrículas empleadas en la malla. Las propiedades térmicas de las especies gaseosas y las

tasas de reacción químicas son obtenidas usando las subrutinas CHEMKIN [53]. Las propiedades de transporte que incluyen las viscosidades, conductividades y coeficientes de difusión, son calculados usando TPLIB [54].

Dominio Computacional

En la figura 3.8 se muestra un esquema genérico de un quemador co-flow y el dominio computacional utilizado por el código CoFlame, donde el combustible y el aire son inyectados a diferentes velocidades y de manera separada. Las condiciones de borde de este esquema son: *gradiente cero* en la zona posterior al flujo de la llama; *deslizamiento libre* en el límite externo, esta condición asegura que no existe interacción con el entorno; y *límite de simetría* en el eje central. La velocidad de entrada es usada con un perfil *top-hat*, ya que los resultados son insensibles al perfil utilizado, *top-hat* o parabólico [55].

Para resolver las ecuaciones se utiliza una estrategia de paralelización, donde la memoria RAM del computador se distribuye para resolver a distintos rangos de altura z , como se describe en [56].

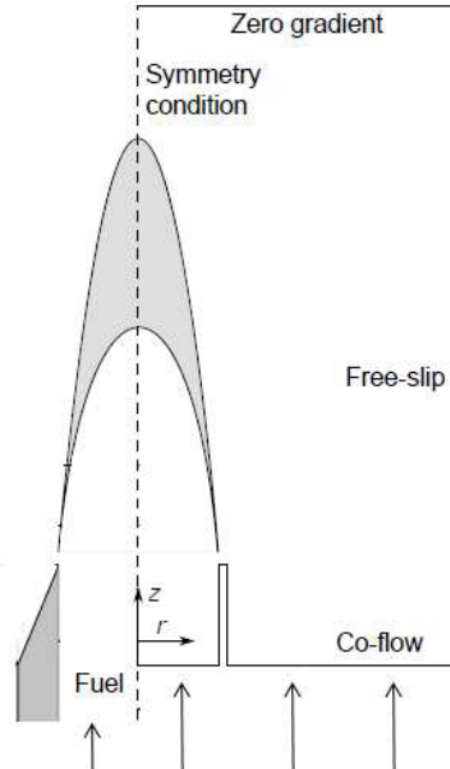


Figura 3.8: Esquema genérico del dominio computacional de una llama co-flow.

Algoritmo de Resolución

Para resolver el conjunto de ecuaciones se utiliza una continuación pseudo-transiente, que ayuda a la convergencia desde una estimación inicial arbitraria [46]. Luego de las correcciones de momentum y presión, las ecuaciones se resuelven globalmente a cada paso de pseudo-tiempo [52] por el algoritmo de la matriz tri-diagonal (TDMA) para matrices penta-diagonales, las ecuaciones de las especies gaseosas se

resuelven de manera acoplada para cada volumen de control. Luego de la iteración de las ecuaciones de conservación de las especies, las ecuaciones de transporte se resuelven simultáneamente de una manera similar. La ecuación de energía se resuelve utilizando TDMA para generar un campo de temperatura global, finalmente se realiza un chequeo de convergencia. El criterio de convergencia del algoritmo es que la tasa de cambio global de cada variable (o residuo) es menor a 0,001.

3.6. Análisis Estadísticos

En este trabajo se realizan diferentes análisis estadísticos para comparar las técnicas de medición de hollín, ya sean las originales o las tradicionales. En esta sección se describen de manera general estos análisis, presentando sus ecuaciones, procedimientos y sus distintas utilidades.

3.6.1. Error Relativo Medio

En primer lugar se define el error de un método en general, ya sea una medición, un algoritmo, una predicción, etc. El error es la diferencia entre el valor del estimado del método y el valor real. El error relativo divide esta diferencia con el valor real para que pueda ser comparado con otras cantidades físicas, de esta manera se puede expresar como porcentaje.

$$Error_{relativo} = \frac{Valor_{método} - Valor_{Real}}{Valor_{Real}} \quad (3.37)$$

El Error Relativo Medio (*MRE* por sus siglas en inglés) es la media de los valores absolutos de los errores relativos de un conjunto de datos. De esta manera se puede caracterizar con un solo valor el error de un método que calcula diferentes valores, como por ejemplo un campo de temperaturas. Mientras más pequeño el *MRE* mejor es el método en estimar los valores reales.

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Error_{relativo_i}|, \quad (3.38)$$

con n la cantidad de datos calculados por el método.

3.6.2. Suavidad (*Smoothness*)

La suavidad es una forma cualitativa de identificar los cambios de una variable con respecto a otra. En dos variables una curva suave, es una curva donde dy/dx es un valor pequeño a lo largo de su recorrido. Evidentemente, esto es una definición relativa, es decir, al comparar curvas se puede determinar si una es más suave que otra. Sin embargo, existe otra acepción para la suavidad de una curva, que tiene que ver con que las derivadas de la función que describe a la curva sean continuas. Para esta tesis se usará la primera acepción de suavidad, donde se describen los valores experimentales obtenidos, mediante su variación a lo largo de una coordenada espacial.

Para esta tesis se definió la suavidad (s) de un conjunto de datos de temperatura (T) como el promedio del valor absoluto de la derivada de la temperatura con respecto a la coordenada espacial z ($\frac{\partial T}{\partial z}$) multiplicada por una razón de referencia $(T/z)_{\text{ref}}$:

$$s = \frac{1}{n} \sum_{i=2}^n \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_i \times \left(\frac{T}{z} \right)_{\text{ref}}, \quad (3.39)$$

con n la cantidad de valores de T a lo largo del eje z . Para calcular las derivadas parciales en cada z_i (con $i = 1, \dots, n$) se realiza la aproximación más simple posible:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_i = \frac{T_{i+1} - T_i}{z_{i+1} - z_i} \quad (3.40)$$

El conjunto de datos con un menor valor de s se considera una curva más suave (*smoother*).

3.6.3. Método de Monte-Carlo

El método de Monte-Carlo es un enfoque estadístico usado para estudiar las sensibilidades con respecto a los parámetros de entrada de ecuaciones integro-diferenciales sin solución analítica o metodologías con estructuras más complejas [57]. El objetivo de este método es lograr cuantificar la variabilidad de los resultados o soluciones de un procedimiento ante la variabilidad de sus *input* o parámetros de entrada. En el estudio de la combustión se han realizado estudios usando este método para poder cuantificar la incerteza de las metodologías experimentales ante variaciones de las cantidades medidas por instrumentos [17]. Este enfoque es necesario debido a la alta complejidad de los cálculos de las metodologías, donde no es posible obtener directamente la dependencia de los resultados con respecto a los *input* experimentales de manera analítica, por lo tanto, se deben realizar simulaciones variando estos *input* de manera aleatoria.

Dado un sistema o una metodología o algoritmo definido, donde parámetros determinísticos actúan como *input* y se consiguen resultados también no aleatorios, para aplicar el método de Monte-Carlo en este sistema se deben seguir los siguientes pasos:

1. Identificar los parámetros de entrada de los cuales se quiere analizar su impacto en los resultados del sistema o algoritmo.
2. Asignar a cada uno de estos parámetros una distribución probabilística. Por ejemplo: Gaussiana, Binomial, Uniforme, etcétera.
3. Definir la cantidad de iteraciones que se realizarán, también se puede definir una tolerancia a partir de la cual la varianza de los resultados finales se considera que ya no varía.
4. Generar parámetros aleatorios de Monte-Carlo para cada iteración. Siguiendo las distribuciones asignadas a los parámetros, para cada iteración se debe generar un valor aleatorio. De esta manera cada parámetro varía de forma diferente para cada iteración.

5. Se resuelve el algoritmo a analizar con cada conjunto de parámetros de entrada para cada iteración, esto generará un conjunto de resultados con tamaño igual a la cantidad de iteraciones realizadas, en cada iteración se resuelve el algoritmo con parámetros diferentes.
6. Finalmente, con el conjunto de resultados obtenidos se puede calcular la media y varianza de cada uno de éstos. Esta variabilidad representa la variabilidad del método ante variaciones aleatorias de los parámetros de entrada o *input*.

Este método se esquematiza en la siguiente figura:



Figura 3.9: Esquema explicativo método de Monte Carlo.

4 | Metodología Experimental

4.1. Nueva Metodología de 3 colores

La tradicional combinación de diferentes longitudes de onda ha sido extensivamente usada en pirometría de hollín. Sin embargo, una serie de diferentes estimaciones de temperatura pueden ser obtenidas por la pirometría de razón de dos colores cuando diferentes combinaciones de longitudes de onda son usadas. De hecho, mediciones de emisión a tres diferentes longitudes de onda pueden entregar como resultado tres diferentes temperaturas, dos de las cuales son independientes [14, 15]. Por ende, pareciera no enteramente correcto asumir que una medición confiable puede estar basada en un único par de longitudes de onda. De esta manera, usar solo dos mediciones espectrales puede significar un desperdicio de información espectral disponible cuando cámaras digitales a color son utilizadas. En tal caso discrepancias son usualmente evitadas al reportar el valor medio de las temperaturas calculadas con cada razón de dos colores (G/R, B/R y B/G) [8]. Por otro lado, un diferente enfoque podría combinar estas tres mediciones espectrales diferentes en una única expresión de temperatura usando una mayor cantidad de información espectral. Lo cual es lo que se presenta en esta sección y es el objeto central de estudio de esta tesis.

Debido a su estructura de carbono, las partículas de hollín son fuertes emisores de radiación térmica en una banda espectral ancha a las típicas temperaturas de las llamas. Por otra parte, las partículas de hollín adyacentes absorben una fracción de esta emisión (auto-absorción), atenuando la radiación térmica emitida por la llama a el ambiente [39, 8, 58].

Se puede asumir que la interacción radiación/partícula se comporta según el límite de Rayleigh de la teoría de Mie, lo que permite despreciar el fenómeno de dispersión de la luz [41]. En este contexto, la región con hollín dentro de la llama se comporta como un medio absorbente y emisor. De esta manera, asumiendo que la emisión de la llama proviene principalmente de las partículas de hollín, la emisión de la llama (I_λ) en la longitud de onda λ representa la emisión local integrada del hollín ($J_\lambda = k_\lambda I_\lambda^{bb}$), a lo largo del camino óptico del foto-detector (l), la cual viene dada por la ecuación 3.21 [38].

En una cámara digital a color, la señal I_λ (Eq. 3.21) es ponderada por la sensibilidad del sistema de detección $\eta(\lambda)$, e integrada espectralmente en una banda espectral ancha ($i = R, G, B$), así:

$$S'_i = \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_\lambda(l) d\lambda, \quad (4.1)$$

es la emisión de la llama detectada a cada banda espectral ancha.

En el régimen de Rayleigh, el coeficiente de extinción el hollín k_λ es una propiedad espectral proporcional a f_v and E_m , dada por:

$$k_\lambda = f_v \frac{6\pi E_m}{\lambda}. \quad (4.2)$$

En la técnica BMAE, mediciones simultáneas de emisión y extinción deben ser realizadas modulando (encendiendo y apagado) una irradiación externa de luz de fondo. La emisión de la llama capturada con (S_i) y sin (S'_i) irradiación de luz de fondo permite determinar la transmisividad de un medio cargado de hollín, dado por [13]:

$$\left(\frac{S_i - S'_i}{I_i - I'_i} \right) = \frac{\int_{\lambda_i} \phi_\lambda \eta_\lambda \exp \left[- \int_l k_\lambda(l) dl \right] d\lambda}{\int_{\lambda_i} \phi_\lambda \eta_\lambda d\lambda}, \quad (4.3)$$

donde (I_i) y (I'_i) son imágenes de solo la irradiación de luz de fondo y el ruido de fondo de la cámara, respectivamente. El término ϕ_λ es la irradiancia espectral de la luz de fondo y debe ser conocida en conjunto con η_λ . Como f_v puede ser considerada como una propiedad física independiente de la longitud de onda, el lado derecho de la ecuación 4.3 es determinado mediante un proceso iterativo, i.e., variando f_v hasta llegar al lado izquierdo de la ecuación, el cual es medido experimentalmente.

El término exponencial en el numerador es determinado mediante la ecuación 4.3, asumiendo un modelo de E_m , el cual permite obtener una dependencia de E_m con respecto a la longitud de onda. Este modelo proviene de mediciones de laboratorio de coeficiente de extinción de hollín (k_{ext}) y la concentración de masa de las partículas de hollín a diferentes longitudes de onda [59]. Luego de eso k_λ puede ser obtenido de la ecuación 4.2. Típicamente, la razón de dos señales a diferentes longitudes de onda es usada para calcular la temperatura del hollín.

En esta tesis, la clásica pirometría de dos colores es mejorada usando 3 bandas espectrales anchas de una cámara digital a color, por lo tanto, usando una mayor cantidad de información espectral de la llama. Con este enfoque, una nueva razón de intensidades puede ser definida como:

$$\Theta_{3S} = \frac{S_G S_B}{S_R^2} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_\lambda I_\lambda(l) d\lambda \int_{\lambda_B} \eta_\lambda I_\lambda(l) d\lambda}{\left[\int_{\lambda_R} \eta_\lambda I_\lambda(l) d\lambda \right]^2}, \quad (4.4)$$

donde la única propiedad desconocida, luego del cálculo de f_v , es la temperatura. Para cada altura de la llama, la distribución radial de la temperatura es obtenida mediante la ecuación 4.10 siguiendo un proceso iterativo [13], hasta llegar a la medición experimental $S_G S_B / S_R^2$.

Existen variados problemas como que la dependencia espectral del término de la auto-absorción podría permitir diferentes valores de temperatura para la misma razón de señales [13]. Además, la temperatura calculada es susceptible a la influencia del ruido de f_v durante el proceso de deconvolución [60], lo cual puede perjudicar la reconstrucción de los campos de temperatura. Por consiguiente especial atención debe ser puesta en el proceso iterativo.

En la técnica BEMI [7], el requerimiento de previo conocimiento del k_λ es evitado asumiendo un medio ópticamente delgado (despreciando el término exponencial en la ecuación 3.21), y adoptando un modelo espectral para E_m . Ignorar el término de auto-absorción permite simplificar y reordenar la ecuación 4.1 [42], como resultado obteniendo una nueva expresión de pirometría de colores basada en la combinación de 3 bandas espectrales anchas. De esta manera la solución de la ecuación 4.10 puede ser

obtenida solamente de la emisión de la llama según:

$$\Theta_{3H} = \frac{H_G(l)H_B(l)}{H_R(l)^2} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_\lambda \frac{6\pi E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(l) d\lambda \int_{\lambda_B} \eta_\lambda \frac{6\pi E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(l) d\lambda}{\left[\int_{\lambda_R} \eta_\lambda \frac{6\pi E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(l) d\lambda \right]^2}, \quad (4.5)$$

donde la ecuación 4.2 fue usada para expresar k_λ . $H_i(l)$ representa el término de la emisión de la llama en un plano radial obtenido al invertir las imágenes de las cámaras en una banda espectral ancha: $S'_i = \int_l H_i(l) dl$. Una discretización del tipo *onion-peeling* y una regularización de Tikhonov (descrito en la siguiente sub-sección) han sido usadas para estabilizar el proceso de devonvolución. Las integrales de la ecuación 4.6 son evaluadas a diferentes temperaturas. Finalmente, la temperatura del hollín es determinada como el valor que más se aproxima al lado izquierdo de la ecuación 4.6.

Para cada banda espectral ancha, campos de la emisión integrada de la llama (S'_i) y la transmisividad del medio (ecuación 4.3) fueron obtenidos al promediar y filtrar 50 imágenes. Estas imágenes de colores fueron primero capturadas y guardadas en el formato *raw*. Luego, una reconstrucción de imagen fue realizada usando un algoritmo de código libre [61] para cada banda ancha R, G y B. Finalmente, todo el algoritmo y procedimiento de las metodologías experimentales fueron programadas en un código en Matlab.

4.1.1. Análisis de Sensibilidad

Se realiza un análisis de sensibilidad para las técnicas 3-BEMI y 3-BMAE con el objetivo de conocer la influencia en el cálculo de temperatura (T_s) ante variaciones de las razones Θ_S y Θ_H respectivamente.

En el método de emisión de banda ancha (3-BEMI), la temperatura del hollín puede ser obtenida de la ecuación:

$$\Theta_{3H} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_\lambda \frac{E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(T_s) d\lambda \int_{\lambda_B} \eta_\lambda \frac{E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(T_s) d\lambda}{\left[\int_{\lambda_R} \eta_\lambda \frac{E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(T_s) d\lambda \right]^2}, \quad (4.6)$$

y el error en la temperatura estimada del hollín, debido a pequeñas desviaciones en el ratio de emisión del hollín Θ_{3H} puede ser obtenido al calcular la derivada de T_s con respecto a Θ . Como la ecuación 4.6 es una forma implícita de T_s , primero se calcula la derivada de Θ_{3H} con respecto a T_s . Por consiguiente:

$$\frac{\partial T_s}{\partial \Theta_{3H}} = \left(\frac{\partial \Theta_{3H}}{\partial T_s} \right)^{-1} = \left(\frac{\Theta_{3H}}{\Omega_G} \frac{\partial \Omega_G}{\partial T_s} + \frac{\Theta_{3H}}{\Omega_B} \frac{\partial \Omega_B}{\partial T_s} - \frac{2 \Theta_{3H}}{\Omega_R} \frac{\partial \Omega_R}{\partial T_s} \right)^{-1}, \quad (4.7)$$

donde $\Omega_i = \int_{\lambda_i} \eta_\lambda \frac{E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(T_s) d\lambda$ con $i \in \{R, G, B\}$ y la derivada parcial de Ω_i con respecto a la temperatura se calcula como:

$$\frac{\partial \Omega_i}{\partial T_s} = \int_{\lambda_i} \eta_\lambda \frac{E_m}{\lambda} I_\lambda^{bb}(T_s) \frac{C_2}{\lambda T_s^2 [1 - \exp(-C_2/\lambda T_s)]} d\lambda, \quad (4.8)$$

donde C_2 es la constante de Planck's. Finalmente, la sensibilidad relativa es una forma de cuantificar el error relativo de la temperatura de hollín medida ($\Delta T_s/T_s$) ante un error relativo del ratio de emisión del hollín ($\Delta \Theta_{3H} / \Theta_{3H}$). La ecuación 4.7 puede ser transformada a:

$$\frac{\partial T_s/T}{\partial \Theta_{3H}/\Theta_{3H}} = \frac{\partial \ln T_s}{\partial \ln \Theta_{3H}} = \frac{1}{T_s} \left(\frac{1}{\Omega_G} \frac{\partial \Omega_G}{\partial T_s} + \frac{1}{\Omega_B} \frac{\partial \Omega_B}{\partial T_s} - \frac{2}{\Omega_R} \frac{\partial \Omega_R}{\partial T_s} \right)^{-1}. \quad (4.9)$$

De una manera similar para el método de absorción emisión modulada de banda ancha (3-BMAE) la temperatura de hollín puede ser obtenida de la ecuación:

$$\Theta_{3S} = \frac{\int_{\lambda_G} \eta_\lambda I_\lambda(l, T_s) d\lambda \int_{\lambda_B} \eta_\lambda I_\lambda(l, T_s) d\lambda}{\left[\int_{\lambda_R} \eta_\lambda I_\lambda(l, T_s) d\lambda \right]^2}, \quad (4.10)$$

donde $I_\lambda(l, T_s) = \int_l \kappa_\lambda(l) I_\lambda^{bb}(T_s) \exp \left[- \int_l' \kappa_\lambda(l') dl' \right] dl$. El error en la temperatura estimada de hollín T_s debido a pequeños errores en el ratio de emisión de hollín convolucionado Θ_{3S} puede ser obtenido al calcular la derivada de T_s con respecto a Θ_{3S} , dada por:

$$\frac{\partial T_s}{\partial \Theta_{3S}} = \left(\frac{\Theta_{3S}}{\Omega_G} \frac{\partial \Omega_G}{\partial T_s} + \frac{\Theta_{3S}}{\Omega_B} \frac{\partial \Omega_B}{\partial T_s} - \frac{2 \Theta_{3S}}{\Omega_R} \frac{\partial \Omega_R}{\partial T_s} \right)^{-1}, \quad (4.11)$$

donde $\Omega_i = \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_\lambda(l, T_s) d\lambda$ con $i \in \{R, G, B\}$ y la derivada parcial de Ω_i con respecto a la temperatura se calcula como:

$$\frac{\partial \Omega_i}{\partial T_s} = \int_{\lambda_i} \eta_\lambda I_\lambda(l, T_s) \frac{C_2}{\lambda T_s^2 [1 - \exp(-C_2/\lambda T_s)]} d\lambda. \quad (4.12)$$

Finalmente, la sensibilidad relativa de T_s ante el ratio de emisión del hollín convolucionada Θ_{3S} . La ecuación 4.11 puede ser reescrita como:

$$\frac{\partial \ln T_s}{\partial \ln \Theta_{3S}} = \frac{1}{T_s} \left(\frac{1}{\Omega_G} \frac{\partial \Omega_G}{\partial T_s} + \frac{1}{\Omega_B} \frac{\partial \Omega_B}{\partial T_s} - \frac{2}{\Omega_R} \frac{\partial \Omega_R}{\partial T_s} \right)^{-1}. \quad (4.13)$$

4.2. Configuración Experimental

Para probar la nueva metodología de 3 colores, imágenes experimentales fueron obtenidas de un llama de difusión laminar axisimétrica, estabilizada en quemador del tipo Gülder [62] (1) con tasas de flujos volumétricos constantes de etileno puro (0.194 slpm) y de aire (284 slpm) utilizando dos flujómetros (2).

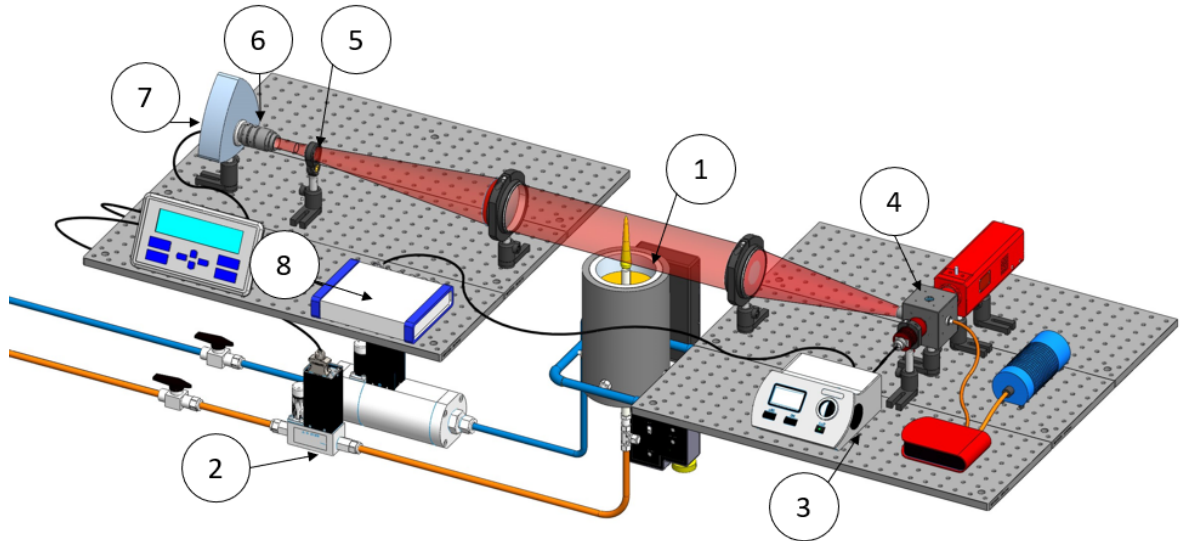


Figura 4.1: Montaje experimental en laboratorio.

Una emisión de luz de banda espectral ancha y una cámara digital a color fueron añadidas al aparato experimental existente en el laboratorio de EC^2G para MAE [60]. Dos lámparas halógenas marca tungsten (SLS202L/M y QTH10B Thorlabs) (3) fueron acopladas a una esfera de integración (4) con el fin de generar una luz de fondo difusa y uniforme, la cual es usada para realizar las mediciones de extinción.

Las mediciones de la emisión de la llama (en una banda espectral ancha) y de atenuación de luz (S_i , S'_i) fueron capturadas con un tiempo de exposición de 10 ms por un lente Navitar $f2.8/50$ mm (5) acoplado a una cámara digital a color de bajo costo (Basler acA3088-16gc (6)) de 12 bits y 6.4 MP. Un filtro de pasa banda en el rango visible y un filtro de paso bajo infrarrojo (7) fueron usados para bloquear espectralmente la radiación ultravioleta y la radiación infrarroja, respectivamente. La adquisición de imágenes fue sincronizada con el encendido y apagado de la iluminación de luz de fondo usando un controlador externo de generador de pulsos (8).

4.2.1. Cámara Filtro Bayer

El método más común para la reconstrucción de imágenes a color en cámaras digitales comerciales constan de un arreglo de sensores con filtros para ciertas longitudes de onda o colores. En la mayoría de los casos a 3 colores, rojo-verde-azul (RGB). Aunque también existen otras opciones de arreglos de sensores. El mosaico del filtro de Bayer, como se muestra en la figura 4.2 [63], representa el arreglo más común para filtros RGB en una malla cuadrada de foto-sensores. En el panel de derecho de la figura 4.2 se esquematiza cómo cada sensor deja pasar la luz con una cierta longitud de onda o color, rojo, verde o azul. Sin embargo, estos sensores no dejan pasar una longitud de onda única o estrecha, sino que dejan pasar un rango de longitudes de onda ancho. En la figura 4.3 se muestran las respuestas relativas de cada sensor de los canales R, G y B, ante la exposición de luz con diferentes longitudes de onda.

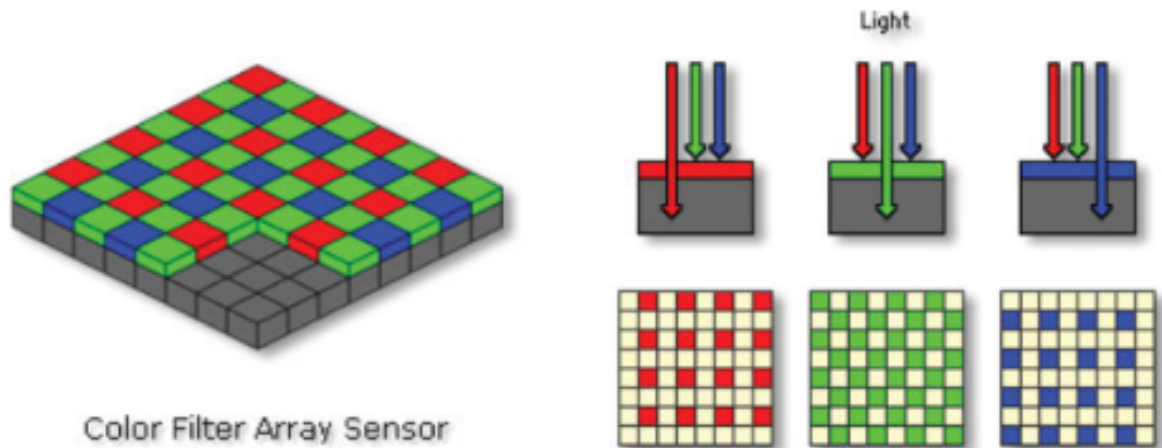


Figura 4.2: Patrón de sensores filtro Bayer (izquierda). Reconstrucción de imagen con un filtro de Bayer (derecha).

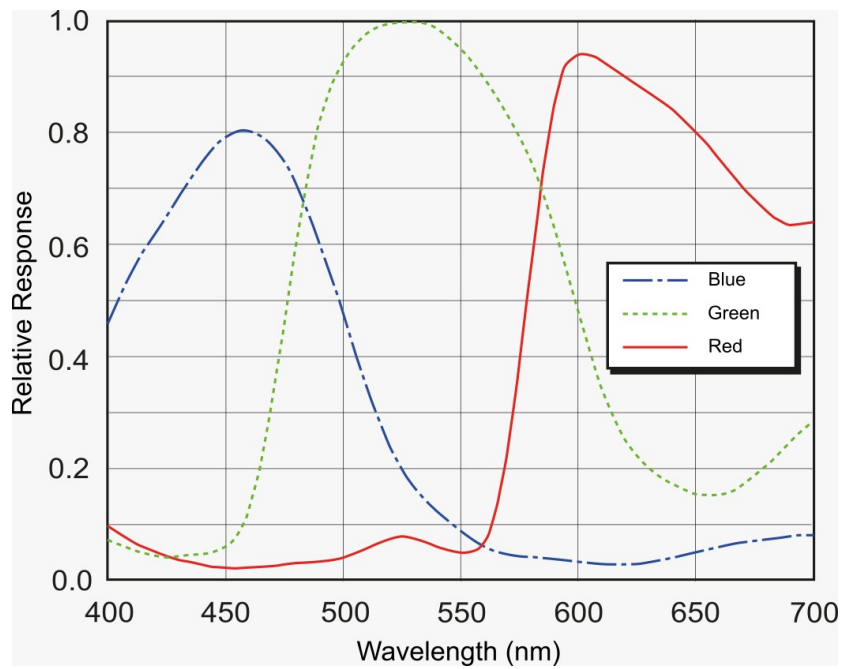


Figura 4.3: Curvas de sensibilidad de cámara Basler.

5 | Resultados y Discusiones

5.1. Cálculo de Temperatura

En primer lugar se calcularon las curvas de sensibilidad η_λ para cada canal RGB de la cámara digital utilizada. La figura 5.1 muestra las diferentes sensibilidades del sistema óptico en su totalidad para cada banda espectral ancha.

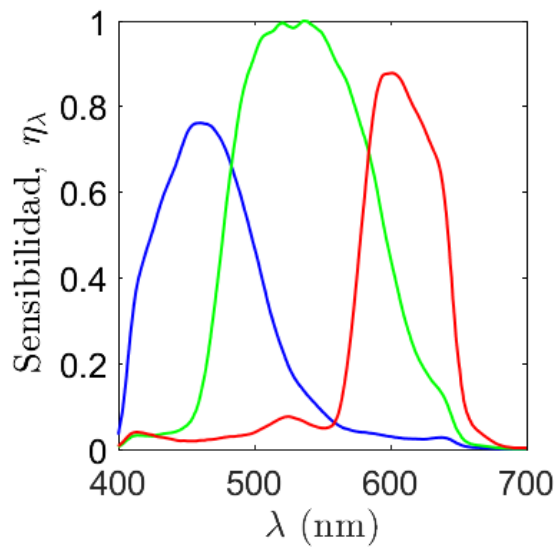


Figura 5.1: Curvas de sensibilidades de detección del sistema para R (Rojo), G (Verde) y B (Azul).

El uso de las curvas η_λ en la ecuación BEMI 4.6 permite determinar la razón de señales local como función de la temperatura, como se muestra en la figura 5.2. La relación uno a uno de las razones de banda espectral ancha de 2 o 3 colores asegura un único valor de temperatura en el método BEMI. De esta manera, la tabla de búsqueda es construida y usada para determinar la temperatura del hollín en el plano radial de la llama. Con el objetivo de resolver las integrales espectrales de las ecuaciones 3.6, 4.10 y 4.6, se utilizó un modelo establecido [64] para la dependencia espectral de E_m .

La figura 5.2 también muestra curvas de sensibilidad relativa (S_r) que corresponde al error relativo de la temperatura estimada ($\Delta T/T$), debido al error relativo de la razón de señales ($\Delta R/R$). Esto también se puede describir como el error porcentual en la temperatura ante cambios porcentuales en la razón de señales.

$$S_r = \frac{\Delta T/T}{\Delta R/R} \quad (5.1)$$

La razón G/R exhibe una sensibilidad relativa más grande que la razón GB/R². En efecto, el primero

con un error de 1 % en R lleva a errores en la temperatura de 0,8 % y 1 % a 1200 K y 2400 K, respectivamente. Además, errores máximos de temperatura de 0,5 % fueron obtenidos para la razón GB/R^2 en el mismo rango de temperaturas. Cabe destacar que este análisis de sensibilidad y error es dependiente de la sensibilidad espectral particular del sistema óptico (η_λ).

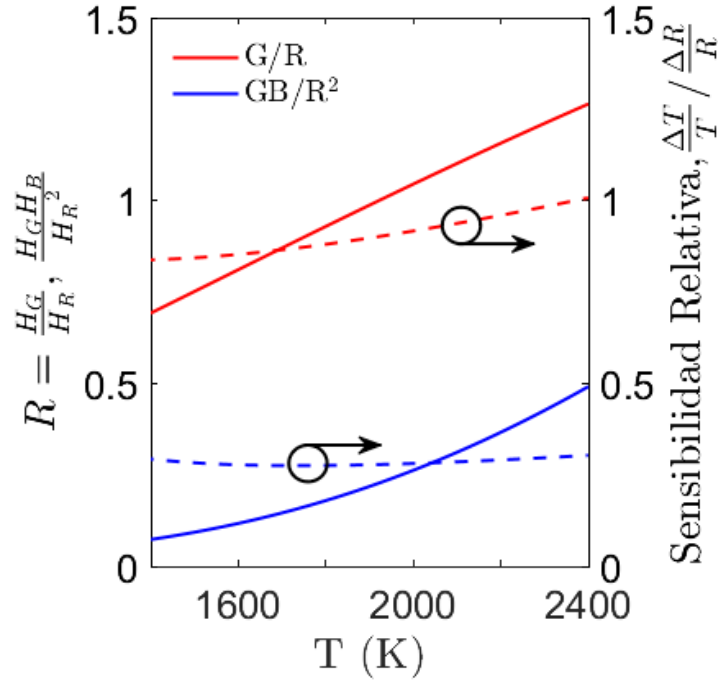


Figura 5.2: Tabla de búsqueda de temperatura para diferentes razones de H_i usados en el método BEMI (eje izquierdo) y sensibilidad relativa de la temperatura con respecto a las razones (R) (eje derecho).

Como el método BMAE requiere el conocimiento previo de la fracción en volumen de hollín (f_v), mediciones de extinción en la banda espectral ancha R fueron usados en la ecuación 4.3. De esta manera en primer lugar se obtuvo la transmisividad del medio (figura 5.4) utilizando la ecuación 3.12 y las 4 diferentes combinaciones de imágenes experimentales asociadas a la presencia de luz led y llama, las cuales se presentan en la figura 5.3.

Para esta llama, el campo f_v (ver figura 5.5) presenta la típica distribución anular de hollín con un valor máximo de aproximadamente $\approx 8,2$ ppm [62] en las alas de hollín de la llama. Observando el comportamiento de la línea de valores máximos de f_v , se observa que una distribución cónica se mantiene hasta la altura de $z \approx 47$ mm. Los puntos rojos en esta curva indican dos alturas 42 mm y 28 mm, que son usados para estudiar el efecto de la distribución de f_v en el cálculo de la temperatura.

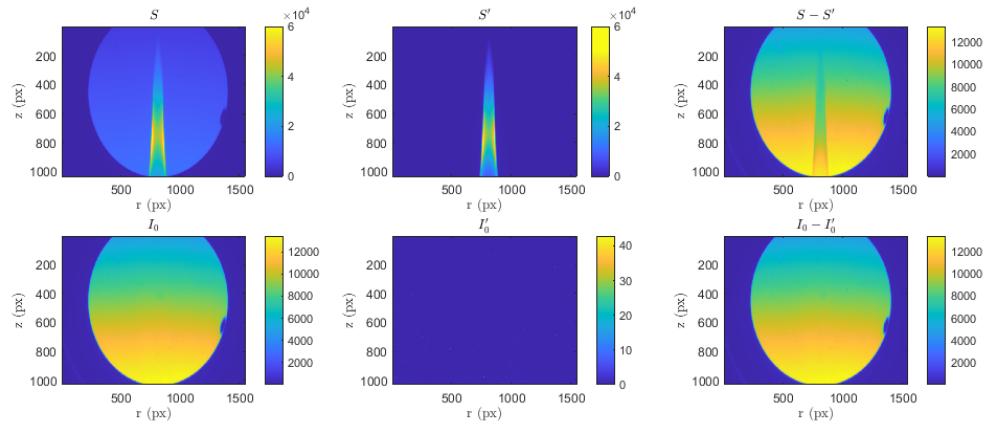


Figura 5.3: Intensidad de las 4 señales captadas por cámara digital a color, además de las restas necesarias para calcular la transmisividad.

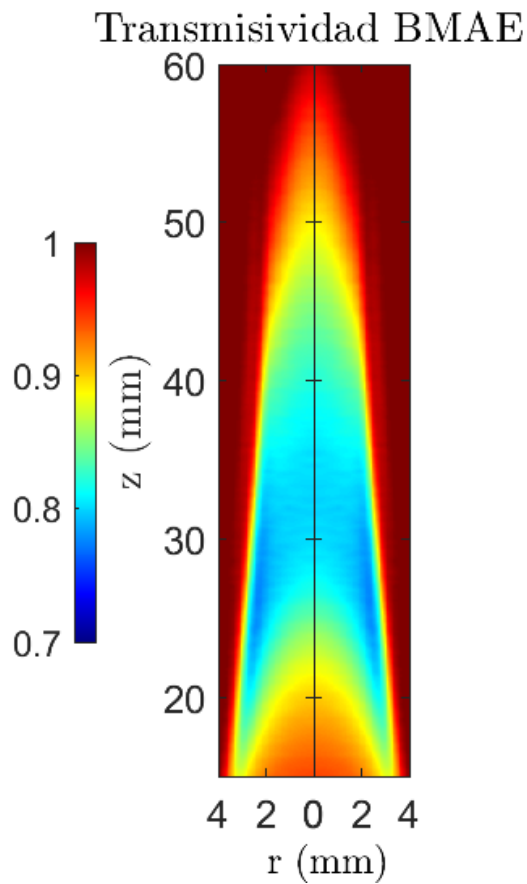


Figura 5.4: Resultados del método BMAE para transmisividad en la banda espectral ancha R.

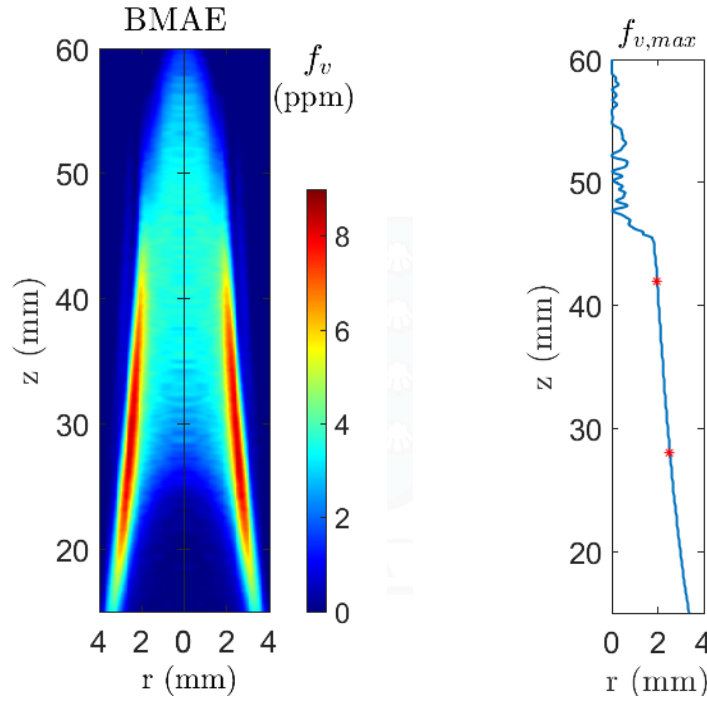


Figura 5.5: Resultados del método BMAE para campo de f_v (izquierda); y camino vertical de $f_{v,max}$ (derecha).

Antes de calcular la temperatura en los 4 métodos se calculan los ratios Θ_i correspondientes. Estos campos son presentados en la figura 5.6:

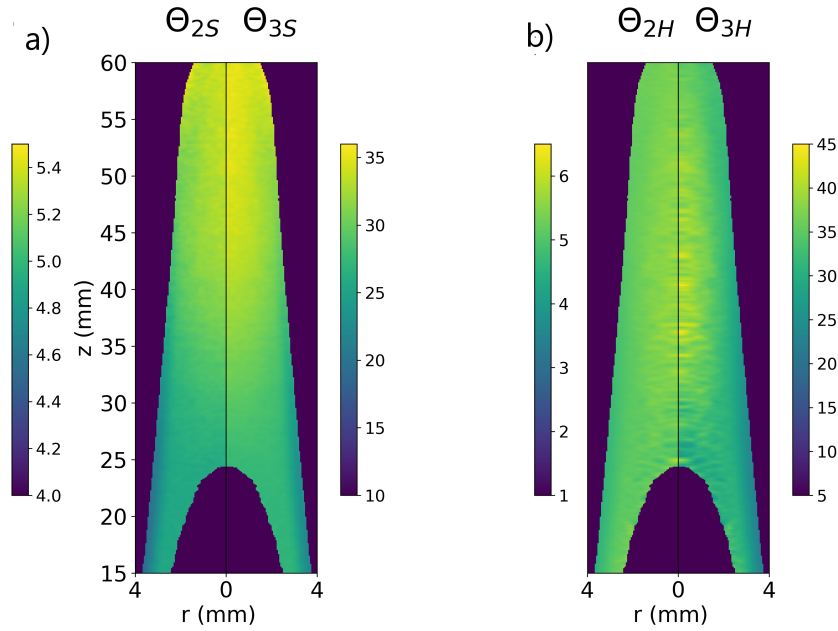


Figura 5.6: (a) Ratio de intensidad radiativa proyectada para 2 (panel izquierdo) y 3 (panel derecho) colores. (b) Ratio de intensidad radiativa local deconvolucionada para 2 (panel izquierdo) y 3 (panel derecho) colores.

En la figura 5.7 se muestra una comparación de los campos de temperatura obtenidos con los enfoques BEMI y BMAE. Para cada uno de estos enfoques, se utilizaron las razones de dos (G/R) y tres (GB/R²) colores (4.10). Se aprecian distribuciones 2D de temperatura similares para los 4 métodos utilizados, con los valores máximos en la región externa de la llama. BMAE entrega temperaturas ligeramente mayores en la región interna de la llama, esto se debe a la dependencia espectral del coeficiente de absorción del hollín [58], el cual atenúa cada señal de emisión de manera diferente. Abajo de la altura de 47 mm, la distribución de f_v es anular y exhibe valores máximos de ≈ 8 ppm (ver figura 5.5); y el efecto de la auto-absorción del hollín no es despreciable. Este efecto lleva a diferencias máximas de temperatura de 55 K entre BMAE y BEMI cuando 3 bandas espectrales anchas son usadas. Además, el ruido experimental de las mediciones de emisión, que son del orden de 5 %, obstaculizan el proceso de reconstrucción de campos de temperatura. Como consecuencia, el error se va acumulando a medida que el proceso de reconstrucción se mueve radialmente hacia el eje de la llama. El campo reconstruido de k_λ (y en consecuencia de f_v) es inherentemente ruidoso y puede afectar adversamente la reconstrucción de temperatura.

Por otro lado, se observa que el enfoque BEMI entrega campos más suaves que BMAE, esto se debe que BEMI subestima la atenuación de la señal (campo de k_λ), aunque la temperatura es menos precisa según la referencia [39]. Para evaluar la suavidad (*smoothness*) de los campos se utiliza la ecuación 3.39 aplicada en la *centerline*. Los resultados se presentan en la tabla 5.1, donde se confirma que los métodos BEMI presentan campos más suaves que los métodos BMAE. También los métodos de 3 colores presentan campos más suaves que los de 2 colores, lo cual se ve como una ventaja de la metodología presentada en esta tesis.

Tabla 5.1: Suavidad de los campos de temperatura calculados por los 4 métodos.

Suavidad (s)	2-Colores	3-Colores
BEMI	0,64	0,57
BMAE	1,00	0,95

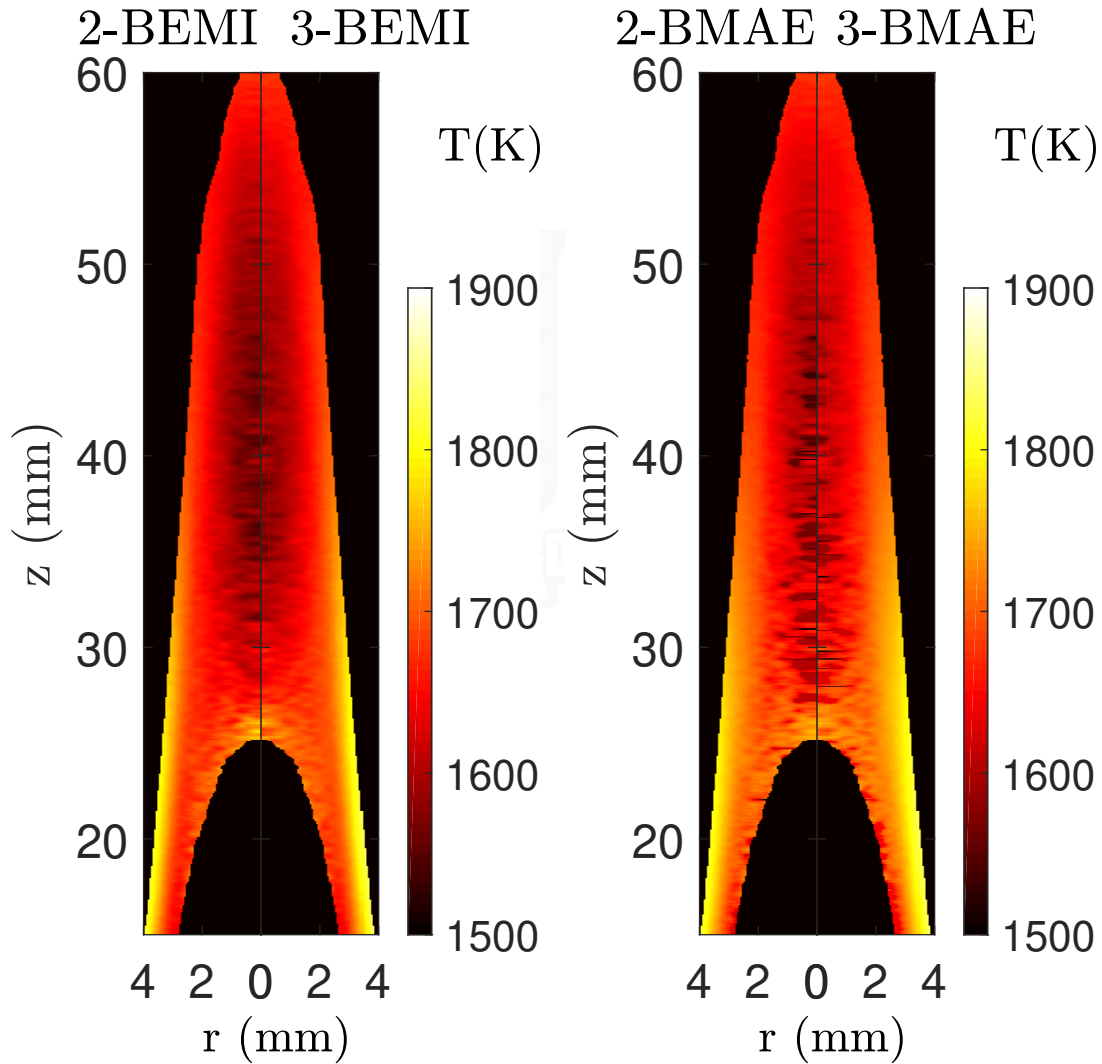


Figura 5.7: Campos de temperatura de hollín determinados usando los métodos BEMI (izquierda) y BMAE (derecha), usando dos (G/R) y tres (BG/R²) colores.

Como se muestra en la figura 5.8. Debido a la corrección de auto-absorción, 3-BMAE entrega temperaturas más altas que 3-BEMI en el centro de la llama donde la temperatura es 1613 K y 1584 K, respectivamente (altura $z = 42$ mm). 3-BEMI presenta perfiles de temperatura más suaves que 3-BMAE, lo cual es atribuido al ruido de k_λ que proviene de la distribución de f_v estimada (ecuación 3.6). Aunque 3-BMAE entrega una temperatura más precisa, es más susceptible al ruido experimental, lo cual complica el proceso de reconstrucción. Debajo de $z = 28$ mm, los altos gradientes de temperatura y el término de auto-absorción hacen difícil reconstruir la temperatura en las técnicas 3-BEMI y 3-BMAE, respectivamente. Se presentan perfiles de ambas alturas representativas:

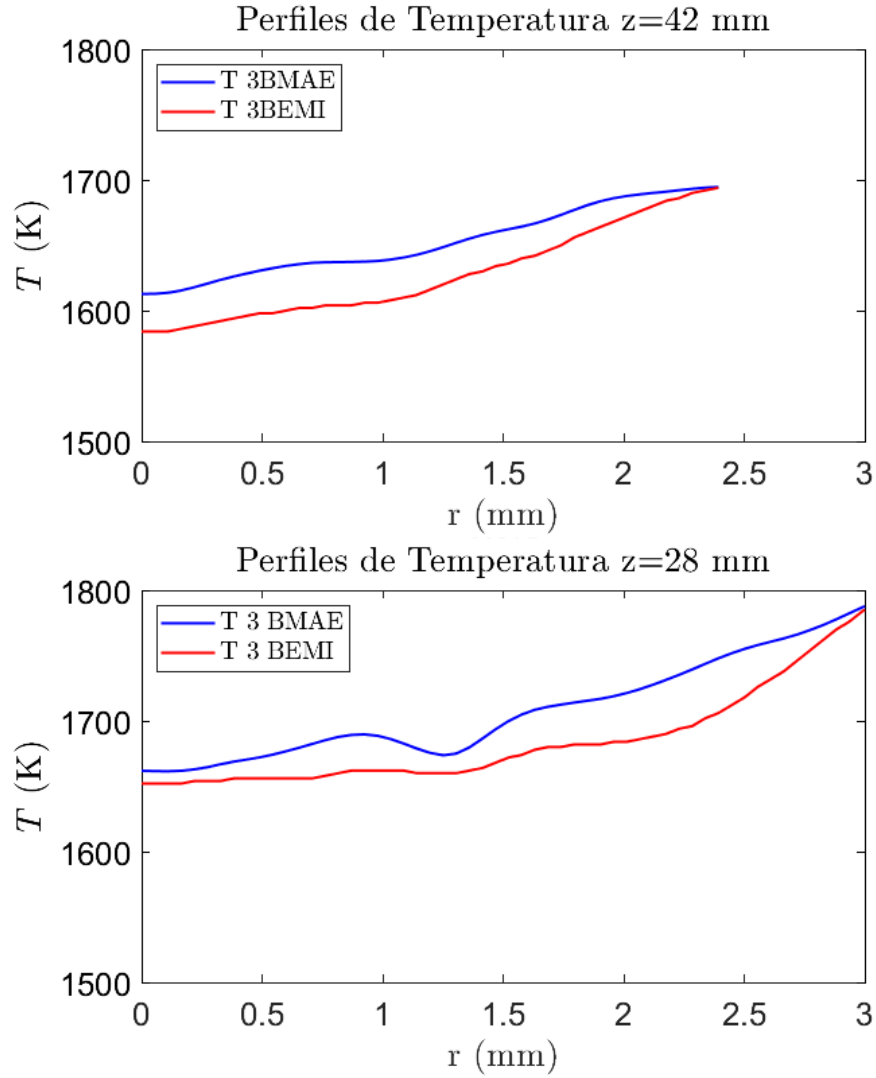


Figura 5.8: Perfiles de temperatura de 3-BEMI y 3-BMAE en las alturas $z = 42$ mm (arriba) y $z = 28$ mm (abajo).

Finalmente, se presenta otra forma de comparación entre los modelos. Para cada altura de la llama se toma el valor máximo de temperatura calculado por los 4 métodos (figura 5.9). Se observa que todos los métodos se comportan de manera similar, lo cual puede ser tomado como una validación del método propuesto de 3 colores al compararlo con los métodos tradicionales de 2 colores. También se muestran en la figura 5.9 los valores de temperatura en la línea central de la llama (*centerline*), se observan resultados menos suaves para los métodos BMAE comparado con los BEMI, como se había analizado anteriormente. Observarlo de manera gráfica entrega una mejor noción de esta variabilidad de la temperatura cuando se analiza la *centerline*.

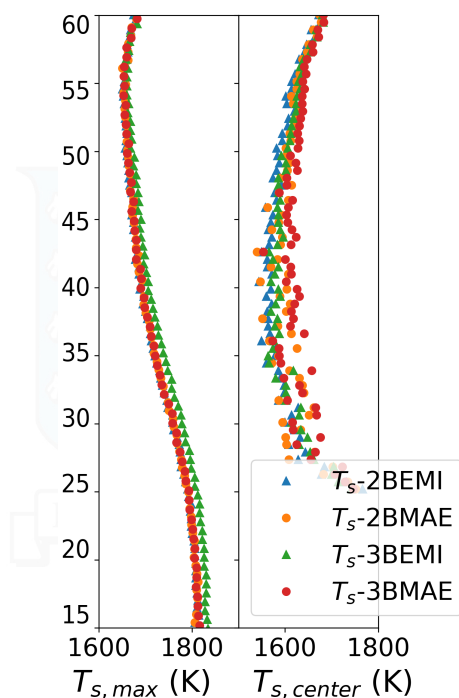


Figura 5.9: Temperatura máxima para cada altura de la llama (izquierda) y línea central de temperatura (derecha).

5.2. Validaciones del Método

Una de las comparaciones entre métodos de la sección anterior, sirvió de manera superficial como validación del modelo, ya que observamos que los 4 métodos poseen caminos verticales de temperatura máxima similares. Es decir, la nueva metodología propuesta de 3 colores presenta valores cercanos a las metodologías clásicas de 2 colores. En esta sección se presentan otras 3 validaciones de la metodología. La primera comparando los resultados con los resultados proporcionados por el código CoFlame; la segunda evaluando su sensibilidad relativa con respecto a los ratios, como se presentó en la sección 4.1.1; y la tercera realizando un análisis del error asociado a la metodología mediante un enfoque de Monte-Carlo.

5.2.1. CoFlame

Como se describió en la sección 3.5 el código CoFlame permite simular numéricamente propiedades de una llama. Se utilizaron como input las condiciones experimentales mencionadas en la sección 4.2 y como resultado se obtuvo un campo de temperaturas generado por CoFlame. También el código entrega campos de fracción volumétrica de hollín. Usando estos dos campos en conjunto con la sensibilidad espectral de la cámara usada en los experimentos (η_λ) se generaron campos de señales proyectadas S'_i [65, 66], estas señales al ser generadas numéricamente poseen un nivel de ruido mucho menor al

de los campos obtenidos experimentalmente. Finalmente, se aplican las técnicas 3-BEMI y 3-BMAE usando las señales generadas por el código CoFlame. El campo de temperaturas obtenido mediante estos métodos es comparado con el campo de temperaturas generado directamente desde CoFlame (Figura 5.10).

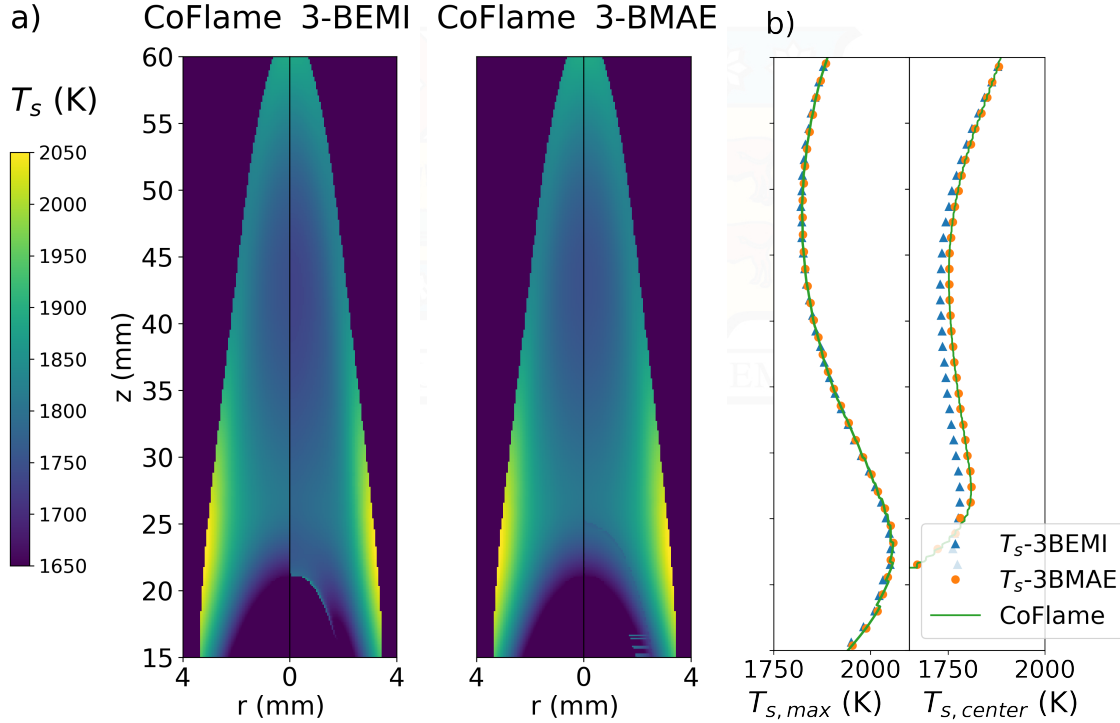


Figura 5.10: (a) Campos de temperatura generados numéricamente por CoFlame (paneles izquierdos) y campos de temperatura determinados usando 3-BEMI y 3BMAE (paneles derechos), y (b) Temperatura máxima para cada altura de la llama (izquierda) y línea central de temperatura (derecha).

El método 3-BEMI presenta pequeñas discrepancias con la solución de referencia dada por el código CoFlame, con un error relativo medio de $MRE = 0,5\%$. Esto se debe a que la contribución de la auto-absorción es despreciada en el método 3-BEMI, mientras que para el método 3-BMAE calcula de manera casi perfecta el campo de referencia con un $MRE = 0,04\%$. Se puede tener una mejor referencia de estos valores mediante la observación de los perfiles presentados en la figura 5.10b, donde los valores de temperatura del camino máximo (izquierda) y la *centerline* (derecha) son graficados para comparar la solución numérica de Coflame con ambas técnicas de 3 colores. Estos valores bajos de discrepancia se puede considerar como una validación de la metodología propuesta. Cabe destacar que los campos de temperatura calculados con datos experimentales son mucho más ruidosos que los presentados en esta sección.

5.2.2. Análisis de Sensibilidad

Con la derivación presentada en la sección 4.1.1 se realiza un análisis de sensibilidad para cada valor de temperatura calculado, es decir, se obtiene un campo de sensibilidades. En la figura 5.11 se

muestra que para el caso del método 3-BEMI la sensibilidad es la misma para toda la llama con un valor aproximado de 0,27, siendo más pequeño que la sensibilidad del método 3-BMAE en toda la llama. Para el método 3-BMAE se observan sensibilidades mucho más altas en regiones cercanas al centro de la llama. Estos resultados coinciden con la suavidad de los campos de temperatura calculados, ya que ante el ruido experimental, la sensibilidad del método 3-BMAE provoca que existan mayores variaciones en los resultados.

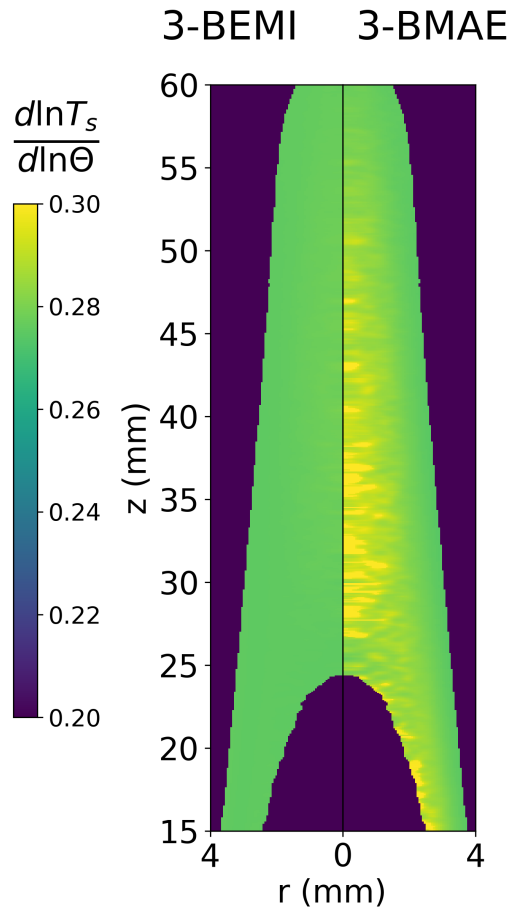


Figura 5.11: Campos de sensibilidad relativa para métodos 3-BEMI y 3-BMAE.

5.2.3. Análisis de Incertezas

Con el objetivo de testear el desempeño de la metodología desde un punto de vista experimental un análisis de Monte-Carlo fue realizado perturbando los datos experimentales y analizando la variabilidad de los resultados [17]. Un análisis de sensibilidad para los resultados de temperatura (3-BEMI y 3-BMAE) variando las intensidades de las imágenes experimentales R, G y B en cada pixel. Con este propósito, la propagación de incertezas es simulada considerando una dispersión Gaussiana para cada señal medida con un 0,5 % de desviación estándar correspondiente a cada señal de emisión local. Este valor corresponde al 10 % de la media de las razones entre la desviación estándar y el promedio de cada señal (S') en las 50 imágenes de la banda espectral B. Esta banda espectral fue elegida porque tiene

el ratio señal-ruido más pequeño, el cual es asociado con la detección más complicada. La desviación estándar obtenida es normalizada con la temperatura local de cada posición espacial. Los resultados de los campos de errores relativos son reportados en la figura 5.12 para los métodos 3-BMAE y 3-BEMI. Se puede observar que los valores del error relativo son menores para el método 3-BEMI. Además, ambos métodos poseen un comportamiento similar donde existen mayores errores hacia el regiones cercanas al centro de la llama.

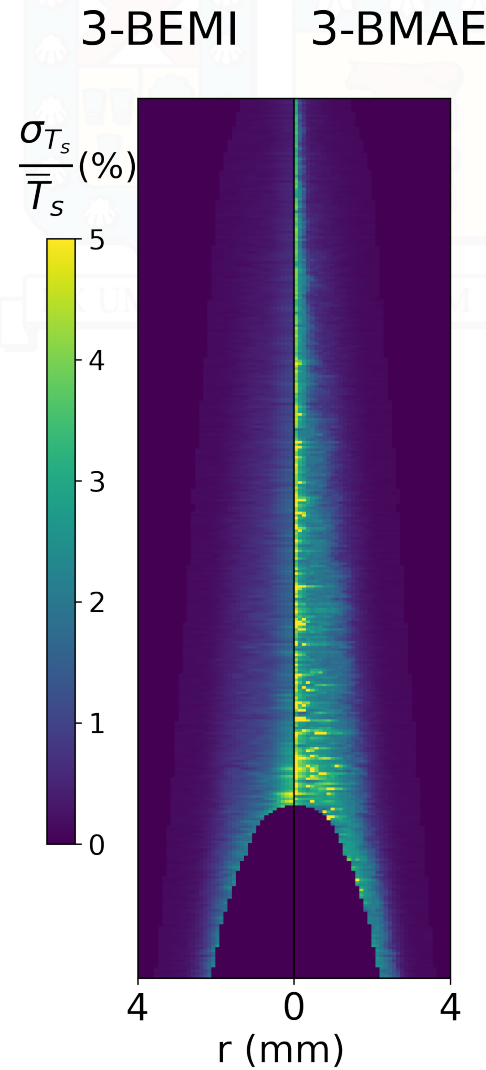


Figura 5.12: Estimación del error con un enfoque de Monte-Carlo.

Para un mejor análisis se muestran perfiles de los errores relativos en las alturas $z = 42$ mm y $z = 28$ mm. Ambos métodos muestran tendencias crecientes similares de incerteza en dirección del centro de la llama. 3-BMAE y 3-BEMI entregan, respectivamente, errores de 0,15 % y 0,32 % en el borde de la llama; y 1,23 % y 2,35 % en el centro de ésta. Las incertezas de la temperatura es mayor por un delta de 1,95 % en el centro de la llama usando el método 3-BMAE en regiones bajas de la llama, $z = 28$ mm.

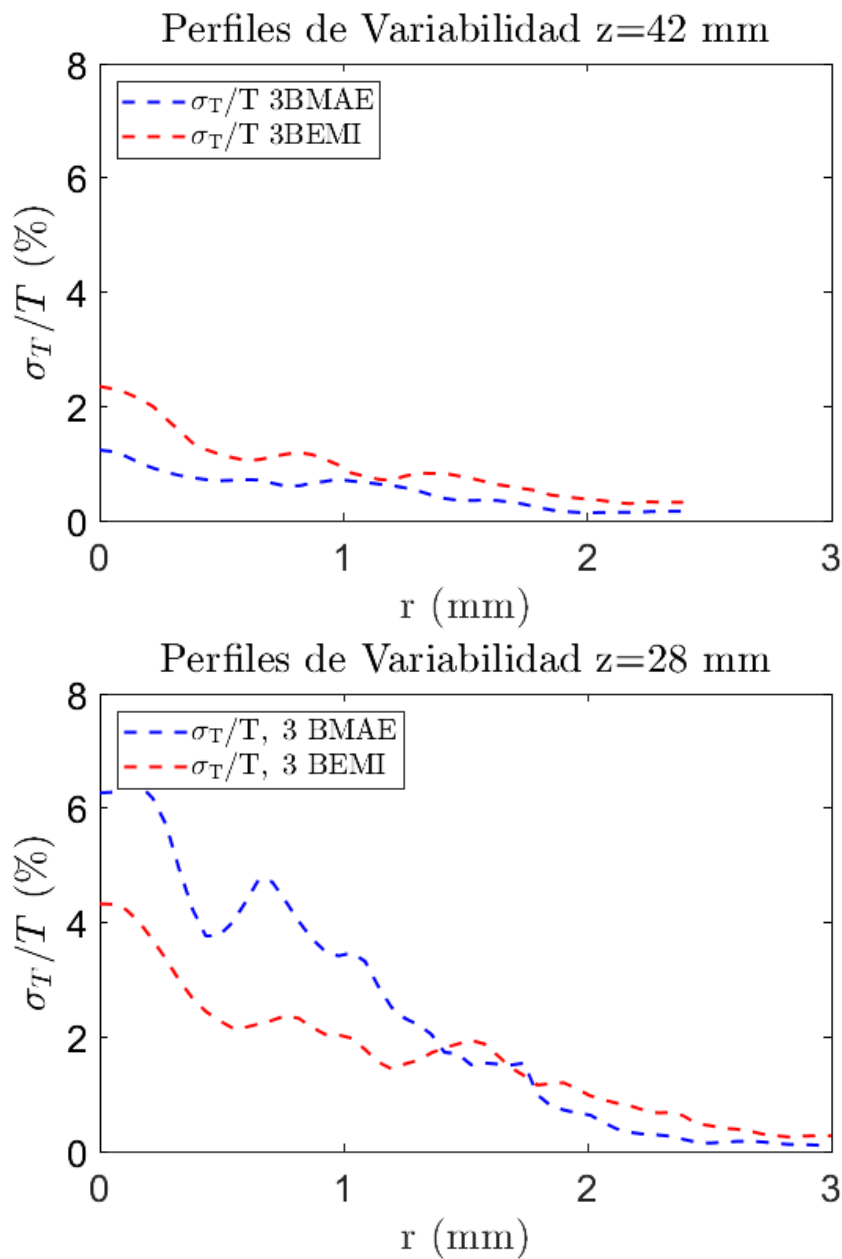


Figura 5.13: Perfiles de incertezas en las alturas $z = 42$ mm (arriba) y $z = 28$ mm (abajo), basados en el método de Monte-Carlo.

6 Conclusiones

Esta tesis presentó una nueva metodología de pirometría para la medición de temperatura de hollín en una llama laminar axisimétrica, basada en la utilización de tres longitudes de onda, es por esto que se le denomina de 3 colores. El objetivo de esto fue poder utilizar una mayor cantidad de información espectral. Las tres bandas espectrales anchas (R, G y B) de una cámara digital a color fueron combinadas en única expresión de temperatura. La técnica fue testeada en una llama de etileno en un quemador Gülder. Ésta técnica se combina con la utilización de las metodologías ya conocidas de BMAE y BEMI, las cuales utilizan razones de dos longitudes de onda, es decir, 2 colores.

Los resultados muestran que utilizando esta nueva técnica, en su versión 3-BEMI, la sensibilidad relativa de la temperatura debido a cambios relativos en la razón de las señales medida es reducida comparada con la utilización un modelo con solo dos bandas espectrales anchas. Por consiguiente, se puede concluir preliminarmente que las razones basadas en tres longitudes de onda son menos sensibles ante perturbaciones experimentales, esto considerando específicamente el *setup* óptico utilizado.

Las mediciones del campo transmisividad y posteriormente el cálculo del campo fracción volumétrica de hollín, realizadas mediante la técnica extinción, tuvieron resultados correctos acorde a la literatura. Lo cual validó la configuración experimental para luego aplicar la nueva metodología presentada.

Con respecto a los campos de temperatura calculados para las 4 metodologías: 2-BEMI, 2-BMAE, 3-BEMI y 3-BMAE, estos presentaron pequeñas discrepancias de no más de 55 K. El ruido en el campo de la fracción volumétrica de hollín (f_v) y la acumulación de error inherente en el proceso de deconvolución fueron encontrados causantes de empeorar la reconstrucción de los campos de temperatura al rededor del centro de la llama para los métodos BMAE, en regiones con una distribución anular de f_v . Por el contrario, el método BEMI muestra campos de temperatura más suaves en estas regiones. Incluso si la corrección de auto-absorción lleva a dificultades en la técnica BMAE debido a la integración de banda espectral ancha, la temperatura de hollín fue calculada con una precisión aceptable. Con respecto a la suavidad de los campos encontrados se obtuvo también como uno de los principales resultados, que los campos obtenidos por los métodos de 3 colores son más suaves que los de 2 colores.

Al comparar los campos de temperatura obtenidos por la metodología y por el código CoFlame se obtuvo una pequeña diferencia, lo cual se podría decir que valida el método. Con respecto a 3-BEMI el error relativo medio fue de 0,5 % y con respecto a 3-BMAE el error relativo medio fue de 0,04 %.

Para el método 3-BMAE se observan sensibilidades más altas que en el caso de 3-BEMI, esto se acrecenta en regiones cercanas al centro de la llama. Estos resultados coinciden con la suavidad de los campos de temperatura calculados, ya que ante el ruido experimental, la sensibilidad del método 3-BMAE provoca que existan mayores variaciones en los resultados.

Finalmente, el análisis de Monte-Carlo realizado mostró que para ambos métodos, 3-BMAE y

3-BEMI, sus sensibilidades ante perturbaciones experimentales de un 0,5 % variaron entre aproximadamente 0,1 % y 7 % y sus valores cambian a lo largo de la altura de la llama. Los valores de variabilidad de los métodos aumenta en regiones más cercanas al centro de la llama y va disminuyendo hacia el exterior de ésta.

6.1. Perspectiva

Para futuros trabajos se recomienda seguir testeando la nueva técnica con diferentes configuraciones experimentales, utilizando otros quemadores estándar como el usado en esta tesis, el quemador del tipo Gülder. También se pueden utilizar distintos combustibles con distintos flujos de aire.

Con respecto al método de Monte-Carlo se podrían utilizar otros parámetros de entrada generados aleatoriamente, en lugar de que sea cada intensidad en cada pixel de los 3 canales RGB de la cámara Basler. Ejemplos podrían ser: directamente en el ratio de señales, analizar cómo varían los resultados variando la función de absorción del hollín (E_m) o en la sensibilidad óptica del sistema (η_λ).

Debido a que los canales RGB capturan la luz simultáneamente, esta ventaja se podría aprovechar para analizar llamas en donde su estructura varía con el tiempo, como por ejemplo en quemadores pulsados acústicamente. También se plantea el desafío de lograr utilizar la base de estas técnicas para medir la temperatura en llamas turbulentas.

Bibliografía

- [1] IEA. Total Energy Supply by source, 2019. Descargado de <https://www.iea.org/data-and-statistics?country=WORLD&fuel=Energy%20supply&indicator=TPESbySource>. 1, 3.1
- [2] Ram B Gupta. *Hydrogen fuel: production, transport, and storage*. Crc Press, 2008. 1
- [3] David S Lee, David W Fahey, Piers M Forster, Peter J Newton, Ron CN Wit, Ling L Lim, Bethan Owen, and Robert Sausen. Aviation and global climate change in the 21st century. *Atmospheric Environment*, 43(22-23):3520–3537, 2009. 1, 3.1.1
- [4] Manabu Shiraiwa, Kathrin Selzle, and Ulrich Pöschl. Hazardous components and health effects of atmospheric aerosol particles: reactive oxygen species, soot, polycyclic aromatic compounds and allergenic proteins. *Free radical research*, 46(8):927–939, 2012. 1
- [5] António Araújo. Multi-spectral pyrometry—a review. *Measurement Science and Technology*, 28(8):082002, 2017. 1, 3.4.1
- [6] Weijie Yan, Shu Zheng, and Huaichun Zhou. Experiments investigation on 2d distribution of soot temperature and volume fraction by image processing of visible radiation. *Applied Thermal Engineering*, 124:1014 – 1022, 2017. 1, 3.4.1
- [7] Peter B Kuhn, Bin Ma, Blair C Connolly, Mitchell D Smooke, and Marshall B Long. Soot and thin-filament pyrometry using a color digital camera. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):743–750, 2011. 1, 3.4.1, 4.1
- [8] Nathan J. Kempema and Marshall B. Long. Effect of soot self-absorption on color-ratio pyrometry in laminar coflow diffusion flames. *Opt. Lett.*, 43:1103–1106, 2018. 1, 3.4.1, 3.4.1.1, 4.1
- [9] Jochen A. H. Dreyer, Radomir I. Slavchov, Eric J. Rees, Jethro Akroyd, Maurin Salamanca, Sebastian Mosbach, and Markus Kraft. Improved methodology for performing the inverse abel transform of flame images for color ratio pyrometry. *Appl. Opt.*, 58(10):2662–2670, Apr 2019. 1, 3.4.1
- [10] Markus Jakob, Peter Lehnen, Philipp Adomeit, and Stefan Pischinger. Development and application of a stereoscopic 3-color high-speed ratio-pyrometry. *Combustion and Flame*, 161(11):2825–2841, 2014. 1, 3.4.1
- [11] Guillaume Legros, Qianlong Wang, Jérôme Bonnet, Muhammad Kashif, Céline Morin, Jean-Louis Consalvi, and Fengshan Liu. Simultaneous soot temperature and volume fraction measurements in axis-symmetric flames by a two-dimensional modulated absorption/emission technique. *Combustion and Flame*, 162(6):2705–2719, 2015. 1, 3.4.1.2
- [12] F. Escudero, A. Fuentes, J.L. Consalvi, F. Liu, and R. Demarco. Unified behavior of soot production and radiative heat transfer in ethylene, propane and butane axisymmetric laminar diffusion flames at different oxygen indices. *Fuel*, 183:668–679, 2016. 1, 3.4.1.2
- [13] A. Guibaud, J.M. Citerne, J.M. Orlac’h, O. Fujita, J.-L. Consalvi, J.L. Torero, and G. Legros. Broadband modulated absorption/emission technique to probe sooting flames: Implementation, validation, and limitations. *Proc. Combust. Inst.*, 37:3959–3966, 2019. 1, 3.4.1.3, 4.1, 4.1
- [14] Thomai Panagiotou, Yiannis Levendis, and Michael Delichatsios. Measurements of particle flame temperatures using three-color optical pyrometry. *Combustion and Flame*, 104(3):272–287, 1996. 1, 4.1

- [15] Reza Khatami and Yiannis A. Levendis. On the deduction of single coal particle combustion temperature from three-color optical pyrometry. *Combustion and Flame*, 158(9):1822 – 1836, 2011. 1, 4.1
- [16] Nick A Eaves, Qingan Zhang, Fengshan Liu, Hongsheng Guo, Seth B Dworkin, and Murray J Thomson. Coflame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames. *Comput. Phys. Commun.*, 207:464–477, 2016. 1, 3.5, 3.5.1.1
- [17] A Bescond, J Yon, F-X Ouf, C Rozé, A Coppalle, P Parent, Daniel Ferry, and C Laffon. Soot optical properties determined by analyzing extinction spectra in the visible near-uv: Toward an optical speciation according to constituents and structure. *Journal of Aerosol Science*, 101:118–132, 2016. 1, 3.6.3, 5.2.3
- [18] Steven R. James. Hominid Use of Fire in the Lower and Middle Pleistocene: A Review of the Evidence. *Current Anthropology*, 30(1):1–26, 1989. 3.1
- [19] Chung K Law. *Combustion physics*. Cambridge university press, 2010. 3.1, 3.4
- [20] Asociación Celtaia. Efecto invernadero, cambio climático y calentamiento global, 2014. Descargado de <https://celtaiamadrid.wordpress.com/2014/05/13/efecto-invernadero-cambio-climatico-y-calentamiento-global/>. 3.1.1
- [21] Yuanyuan Shi, Yanfeng Ji, Hui Sun, Fei Hui, Jianchen Hu, Yaxi Wu, Jianlong Fang, Hao Lin, Jianxiang Wang, Huiling Duan, et al. Nanoscale characterization of pm 2.5 airborne pollutants reveals high adhesiveness and aggregation capability of soot particles. *Scientific reports*, 5:11232, 2015. 3.1.1
- [22] C. Arden Pope III and Douglas W. Dockery. Health effects of fine particulate air pollution: Lines that connect. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 56(6):709–742, 2006. 3.1.1
- [23] Lii Science. Gülder Burner, 2020. Descargado de http://liiscience.org/guelder_burner/. 3.2
- [24] Frank M White. *Fluid mechanics*. Tata McGraw-Hill Education, 1979. 3.2
- [25] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials*, 6(3):183–191, Mar 2007. 3.3
- [26] H. Gg. Wagner. *Soot Formation — An Overview*, pages 1–29. Springer US, Boston, MA, 1981. 3.3.1
- [27] Ignacio Andrés Verdugo Montecinos. Morfología del hollín en una llama de vela. 2020. 3.3.1
- [28] William Bartok and Adel F Sarofim. Fossil fuel combustion : a source book. *SERBIULA (sistema Librum 2.0)*, 2019. 3.3.1
- [29] Mohammad Reza Kholghy, Armin Veshkini, and Murray John Thomson. The core-shell internal nanostructure of soot—a criterion to model soot maturity. *Carbon*, 100:508–536, 2016. 3.3.1
- [30] Jurgen Warnatz, Ulrich Maas, Robert W Dibble, and J Warnatz. *Combustion*. Springer, 2006. 3.3.2
- [31] Lynn A Melton. Soot diagnostics based on laser heating. *Applied optics*, 23(13):2201–2208, 1984. 3.3.2
- [32] TP Jenkins and RK Hanson. Soot pyrometry using modulated absorption/emission. *Combustion and Flame*, 126(3):1669–1679, 2001. 3.3.2, 3.3.2.1, 3.4.1.2
- [33] Francisco Ignacio Cepeda Alfaro. Mediciones de temperatura de hollín en llamas forzadas de difusión laminar. 2017. 3.3.2.1

- [34] Craig F Bohren and Donald R Huffman. *Absorption and scattering of light by small particles*. John Wiley & Sons, 2008. 3.3.2.1
- [35] H. Zhao and N. Ladommatos. Optical diagnostics for soot and temperature measurement in diesel engines. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24(3):221 – 255, 1998. 3.3.2.1
- [36] Fengshan Liu, Jérôme Yon, Andrés Fuentes, Prem Lobo, Gregory J Smallwood, and Joel C 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*, 54(1):33–51, 2020. 3.3.2.1, 3.4.1.1
- [37] Kyle J Daun, Kevin A Thomson, Fengshan Liu, and Greg J Smallwood. Deconvolution of axisymmetric flame properties using tikhonov regularization. *Applied optics*, 45(19):4638–4646, 2006. 3.3.2.1, 3.3.2.1
- [38] R. Viskanta and M. P. Mengüç. Radiation heat transfer in combustion systems. *Prog. Energy. Combust. Sci.*, 13:97–160, 1987. 3.4.1.1, 4.1
- [39] Fengshan Liu, Kevin A. Thomson, and Gregory J. Smallwood. Soot temperature and volume fraction retrieval from spectrally resolved flame emission measurement in laminar axisymmetric coflow diffusion flames: Effect of self-absorption. *Combust. Flame*, 160:1693–1705, 2013. 3.4.1.1, 4.1, 5.1
- [40] S Di Stasio and P Massoli. Influence of the soot property uncertainties in temperature and volume-fraction measurements by two-colour pyrometry. *Meas. Sci. Technol.*, 5:1453, 1994. 3.4.1.1
- [41] Nathan J. Kempema, Bin Ma, and Marshall B. Long. Investigation of in-flame soot optical properties in laminar coflow diffusion flames using thermophoretic particle sampling and spectral light extinction. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 122(9), September 2016. 3.4.1.1, 4.1
- [42] Weijie Yan, Dongmei Chen, Zuomei Yang, Enyu Yan, and Peitao Zhao. Measurement of soot volume fraction and temperature for oxygen-enriched ethylene combustion based on flame image processing. *Energies*, 10:750, 05 2017. 3.4.1.3, 4.1
- [43] Ian M Kennedy. Models of soot formation and oxidation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 23(2):95–132, 1997. 3.5
- [44] Fengshan Liu, Gregory J Smallwood, and Omer L Gulder. Band lumping strategy for radiation heat transfer calculations using a narrowband model. *J. Thermophys. Heat Transf.*, 14(2):278–281, 2000. 3.5.1.1
- [45] Meghdad Saffaripour, Armin Veshkini, Mohammadreza Kholghy, and Murray J Thomson. Experimental investigation and detailed modeling of soot aggregate formation and size distribution in laminar coflow diffusion flames of Jet A-1, a synthetic kerosene, and n-decane. *Combust. Flame*, 161(3):848–863, 2014. 3.5.1.1
- [46] Qingan Zhang. *Detailed modeling of soot formation/oxidation in laminar coflow diffusion flames*. University of Toronto Toronto, 2009. 3.5.1.1, 3.5.1.2
- [47] Jörg Appel, Henning Bockhorn, and Michael Frenklach. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C2 hydrocarbons. *Combust. Flame*, 121(1):122–136, 2000. 3.5.1.1
- [48] SH Park and SN Rogak. A novel fixed-sectional model for the formation and growth of aerosol agglomerates. *Journal of Aerosol Science*, 35(11):1385–1404, 2004. 3.5.1.1
- [49] SH Park, SN Rogak, WK Bushe, JZ Wen, and MJ Thomson. An aerosol model to predict size and structure of soot particles. *Combustion Theory and Modelling*, 9(3):499–513, 2005. 3.5.1.1

- [50] Q Zhang, MJ Thomson, H Guo, F Liu, and GJ Smallwood. Modeling of oxidation-driven soot aggregate fragmentation in a laminar coflow diffusion flame. *Combustion science and technology*, 182(4-6):491–504, 2010. 3.5.1.1
- [51] ALESSANDRO GOMEZ and DANIEL E ROSNER. Thermophoretic effects on particles in counterflow laminar diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, 89(5-6):335–362, 1993. 3.5.1.1
- [52] BR Baliga and SV Patankar. A new finite-element formulation for convection-diffusion problems. *Numerical Heat Transfer*, 3(4):393–409, 1980. 3.5.1.2, 3.5.1.2
- [53] Robert J Kee, James A Miller, and Thomas H Jefferson. Chemkin: A general-purpose, problem-independent, transportable, fortran chemical kinetics code package. Technical report, Sandia Labs., 1980. 3.5.1.2
- [54] Robert J Kee, Jurgen Warnatz, and James A Miller. Fortran computer-code package for the evaluation of gas-phase viscosities, conductivities, and diffusion coefficients.[chemkin]. Technical report, Sandia National Labs., Livermore, CA (USA), 1983. 3.5.1.2
- [55] Seth B Dworkin, Qingan Zhang, Murray J Thomson, Nadezhda A Slavinskaya, and Uwe Riedel. Application of an enhanced pah growth model to soot formation in a laminar coflow ethylene/air diffusion flame. *Combustion and Flame*, 158(9):1682–1695, 2011. 3.5.1.2
- [56] SB Dworkin, JA Cooke, BAV Bennett, BC Connelly, MB Long, MD Smooke, RJ Hall, and MB Colket. Distributed-memory parallel computation of a forced, time-dependent, sooting, ethylene/air coflow diffusion flame. *Combustion Theory and Modelling*, 13(5):795–822, 2009. 3.5.1.2
- [57] Reuven Y Rubinstein and Dirk P Kroese. *Simulation and the Monte Carlo method*, volume 10. John Wiley & Sons, 2016. 3.6.3
- [58] Yu Wang and Suk Ho Chung. Soot formation in laminar counterflow flames. *Progress in Energy and Combustion Science*, 74:152 – 238, 2019. 4.1, 5.1
- [59] J Yon, R Lemaire, E Therssen, P Desgroux, A Coppalle, and KF 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*, 104(2):253–271, 2011. 4.1
- [60] A. Rodríguez, F. Escudero, J.J. Cruz, G. Carvajal, and A. Fuentes. Retrieving soot volume fraction fields for laminar axisymmetric diffusion flames using convolutional neural networks. *Fuel*, 285:119011, 2021. 4.1, 4.2
- [61] B. Matthew. PylonRawFileConverter. <https://github.com/MattsProjects/PylonRawFileConverter>. 4.1
- [62] David R. Snelling, Kevin A. Thomson, Gregory J. Smallwood, and Ömer L. Gülder. Two-dimensional imaging of soot volume fraction in laminar diffusion flames. *Appl. Opt.*, 38:2478–2485, Apr 1999. 4.2, 5.1
- [63] Hong Lu, Leong-Teng Ip, Andrew Mackrory, Luke Werrett, Justin Scott, Dale Tree, and Larry Baxter. Particle surface temperature measurements with multicolor band pyrometry. *AIChE journal*, 55(1):243–255, 2009. 4.2.1
- [64] Jérôme Yon, R. Lemaire, E. Therssen, Pascale Desgroux, A. Coppalle, and Kuan Ren. Examination of wavelength dependent soot optical properties of diesel and diesel/rapeseed methyl ester mixture by extinction spectra analysis and lii measurements. *Appl. Phys. B*, 104:253–271, 08 2011. 5.1
- [65] JJ Cruz, Luis Fernando Figueira da Silva, F Escudero, F Cepeda, JC Elicer-Cortés, and A Fuentes. Soot pyrometry by emission measurements at different wavelengths in laminar axisymmetric flames. *Combustion Science and Technology*, pages 1–18, 2020. 5.2.1

- [66] Francisco Cepeda, Alejandro Jerez, Rodrigo Demarco, Fengshan Liu, and Andrés Fuentes. Influence of water-vapor in oxidizer stream on the sooting behavior for laminar coflow ethylene diffusion flames. *Combustion and Flame*, 210:114–125, 2019. 5.2.1

