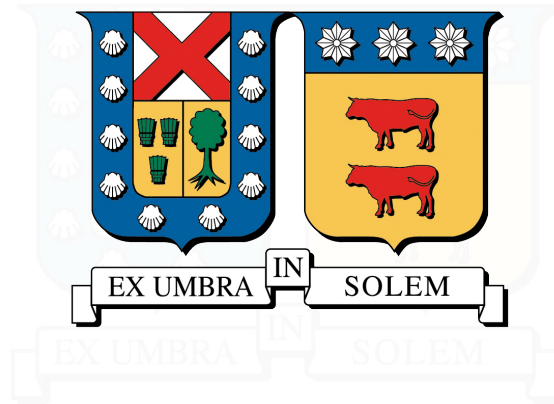


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INDUSTRIAS
VALPARAÍSO - CHILE



Análisis espectral de llamas laminares mediante detección infrarroja de la radiación emitida por gases de combustión y hollín

JAVIERA VALENTINA IGOR SOLÍS

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

PROFESOR GUÍA : Rodrigo Demarco Bull
PROFESOR CORREFERENTE : Felipe Escudero Barros
PROFESOR CORREFERENTE EXTERNO : Juan José Cruz Villanueva

Enero 2026



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

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

Título del trabajo: Análisis espectral de llamas laminares mediante detección infrarroja de la radiación emitida por gases de combustión y hollín.

Nombre del candidato(a): Javiera Valentina Igor Solís.

Carrera / Grado: Ingeniería Civil Industrial y Magíster en Ciencias de la Ingeniería Industrial.

Campus: Casa Central **Departamento:** Industrias

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

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

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

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

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

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

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

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

4.- FIRMAS

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

Fecha: 21 de enero del 2026. **Firma:**

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 21 de enero del 2026. **Firma:**

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

Índice de Contenidos

1. Resumen Ejecutivo	1
2. Agradecimientos	2
3. Introducción	3
3.1. Objetivos	4
3.1.1. Objetivo General	4
3.1.2. Objetivos Específicos	4
4. Marco Teórico	5
4.1. Combustión	5
4.1.1. Impacto ambiental y desafíos del diagnóstico	6
4.2. Clasificación de sistemas de combustión	7
4.2.1. Llamas de difusión	8
4.2.1.1. Llamas de difusión laminares	8
4.2.2. Química global y estructura de la llama	9
4.3. Hollín	10
4.3.1. Morfología y Estructura	10
4.3.2. Propiedades Ópticas y Coeficiente de Absorción (κ_λ)	11
4.4. Radiación Térmica	12
4.5. Ecuación de transferencia radiativa (RTE)	16
4.5.1. Derivación general de la RTE	17
4.6. Autoabsorción (Self-Absorption)	19
4.7. Modelado espectral línea por línea (LBL)	20
4.7.1. Coeficiente de absorción espectral	20
4.7.2. Dependencia de la Intensidad de Línea con la Temperatura	20
4.7.3. Mecanismos de Ensanchamiento de Línea	20
4.7.3.1. Ensanchamiento Doppler (Régimen Gaussiano)	21
4.7.3.2. Ensanchamiento Colisional (Régimen Lorentziano)	21
4.7.3.3. Perfil de Voigt	21
4.7.4. Implementación Computacional: HITRAN Application Programming Interface (HAPI)	22
5. Estado del Arte	24
5.1. Diagnóstico óptico en combustión	24
5.1.1. Espectroscopía de absorción	24
5.1.2. Espectroscopía de emisión en IR y visible	25
5.1.3. Técnicas basadas en láser: LIF, PLIF, Raman	26
5.1.4. Imagen multiespectral e hiperspectral	26
5.1.5. Sensores infrarrojos de banda estrecha y cámaras con filtros	27
5.2. Caracterización de las bandas espectrales de interés	28
5.2.1. Dióxido de Carbono (CO ₂)	28

5.2.2.	Vapor de Agua (H_2O)	28
5.2.3.	Monóxido de Carbono (CO)	29
5.2.4.	Interferencia espectral y dependencia térmica	29
5.3.	Modelado de Transferencia Radiativa y Simulación Computacional	29
5.3.1.	Método Línea por Línea (LBL)	30
5.3.2.	Parámetros espectroscópicos y bases de datos de alta temperatura	30
5.3.3.	Entorno de simulación espectroscópica y procesamiento computacional	31
5.4.	Interacción radiativa entre fase gaseosa y material particulado	31
5.4.1.	Propiedades ópticas del hollín: Régimen Rayleigh y función dispersiva	32
5.4.2.	Inversión radiométrica y separación de señales	32
5.5.	Brechas actuales y motivación de este trabajo	32
6.	Metodología	34
6.1.	Montaje Experimental	34
6.1.1.	Quemador y sistema de suministro	34
6.2.	Sistema de Adquisición y Caracterización Radiométrica	36
6.2.1.	Especificaciones de la cámara infrarroja	36
6.2.2.	Procesamiento de señal y calibración	37
6.2.2.1.	Adquisición y Normalización Temporal	37
6.2.2.2.	Corrección de No-Uniformidad (NUC)	37
6.2.2.3.	Conversión Radiométrica (LUT)	38
6.3.	Simulación Numérica de Referencia (CoFlame)	38
6.4.	Implementación del Modelo Radiativo Directo (Forward Problem)	38
6.4.1.	Generación de base de datos espectral	39
6.4.2.	Modelado del continuo de hollín	40
6.4.3.	Interpolación espacial y superposición de coeficientes	40
6.4.4.	Solución de la RTE y síntesis de la imagen	41
6.4.5.	Validación numérica y análisis de sensibilidad	42
7.	Resultados	43
7.1.	Condiciones de entrada: Campos simulados en CoFlame	43
7.2.	Comparación de imágenes sintéticas y experimentales	44
7.2.1.	Llama Yale 32	44
7.2.2.	Llama Yale 80	45
7.3.	Análisis de perfiles radiales y axiales	45
7.3.1.	Caso Yale 32	46
7.3.1.1.	Análisis en el punto de máxima fracción de hollín ($f_{v,max}$)	46
7.3.1.2.	Análisis en el punto de máxima concentración de CO_2 ($X_{CO_2,max}$)	46
7.3.2.	Caso Yale 80	47
7.3.2.1.	Análisis en el punto de máxima fracción de hollín ($f_{v,max}$)	47
7.3.2.2.	Análisis en el punto de máxima concentración de CO_2 ($X_{CO_2,max}$)	49
7.4.	Análisis detallado de la contribución por especies	50
7.4.1.	Análisis por variables en llama Yale 32	50
7.4.2.	Análisis por variables en llama Yale 80	52
7.5.	Análisis de Sensibilidad	54
7.5.1.	Llama Yale 32	55
7.5.2.	Llama Yale 80	55
8.	Conclusiones y discusiones	57
8.1.	Trabajos Futuros	58
	Bibliografía	59

Índice de Tablas

4.1. Clasificación general de los sistemas de combustión según su mezcla y régimen de flujo. . .	8
6.1. Resumen de diluciones de combustible y caudales volumétricos para las llamas experimentales.	36
6.2. Configuración de filtros espectrales utilizados en la cámara Telops.	37
6.3. Espacio de estados termodinámicos para la base de datos LBL pre-calculada ($\Delta\nu = 0,01 \text{ cm}^{-1}$).	40

Índice de Figuras

4.1. Suministro total de energía primaria a nivel mundial por fuente al año 2023. Se observa que los combustibles fósiles —petróleo (30.2 %), carbón (27.8 %) y gas natural (22.7 %)— representan en conjunto el 80.7 % de la matriz energética global, evidenciando la dependencia crítica de los procesos de combustión. Fuente: Adaptado de Agencia Internacional de Energía (IEA) [1].	5
4.2. Mecanismos de impacto climático del Carbono Negro. (a) Efecto directo: absorción de radiación solar en la atmósfera. (b) Efecto albedo: deposición sobre nieve y hielo, acelerando el derretimiento. Fuente: [2].	7
4.3. Comparación de la estructura de la llama de difusión laminar. (a) Representación esquemática basada en la teoría de Burke-Schumann, ilustrando el núcleo frío, la zona anular de hollín y el frente de reacción externo. (b) Fotografía de llama en quemador Yale, mostrando la coincidencia morfológica y la intensa incandescencia amarilla correspondiente a la zona de hollín predicha por el modelo.	9
4.4. Micrografía electrónica de transmisión (TEM) mostrando la morfología fractal de agregados de hollín en una llama de difusión. Se distinguen las partículas primarias esféricas fusionadas en cadenas.	11
4.5. Espectro de ondas electromagnéticas destacando las regiones de radiación térmica, luz visible e infrarrojo (para radiación propagándose en el vacío, $n = 1$). Fuente: [3].	13
4.6. Variación del poder de emisión de cuerpo negro con la longitud de onda para varias temperaturas. Fuente: [4]	15
4.7. Volumen de control diferencial para la derivación de la RTE. El esquema visualiza la interacción fotón-partícula, destacando los mecanismos de extinción (absorción y dispersión hacia afuera) que atenúan el haz incidente a lo largo de ds . Fuente: [5].	17
4.8. Comparación de funciones de forma de línea normalizadas. Se observa cómo el perfil de Voigt (negro) combina las características de los dos regímenes límite: preserva la anchura del núcleo dominado por el efecto Doppler (azul) y captura la caída lenta de las alas dominada por el efecto colisional o Lorentziano (rojo). Esta combinación es crítica para evitar subestimar la absorción en medios ópticamente gruesos.	22
6.1. Representación esquemática del montaje experimental. (1) Cámara científica multiespectral de onda media (MWIR) Telops MS-M1k. (2) Quemador tipo Yale generando una llama de difusión laminar de etileno/nitrógeno. El sistema se encuentra montado sobre una mesa óptica para garantizar la estabilidad y alineación precisa del eje óptico.	34
6.2. Esquema de corte transversal del quemador Yale. Componentes principales: (1) Carcasa de aluminio anodizado; (2) Placa base; (3) Tubo de combustible de acero inoxidable; (4) Estructuras de panal de abeja (honeycomb) para alineación de flujo; (5) Cámara (plenum) rellena con esferas de vidrio para homogeneización; (10) Puertos de entrada de aire. Adaptado de [6].	35

6.3. Diagrama de flujo del proceso de calibración radiométrica. El esquema ilustra la cadena de procesamiento desde la señal cruda del detector (RAW), pasando por la normalización temporal ($1/t_{exp}$) y la corrección de no-uniformidad (β, α), hasta la conversión final mediante tablas de búsqueda (LUT) en temperatura radiométrica (RT) o radiancia en banda (IBR). 36

6.4. Esquema del algoritmo del Modelo Directo. Las variables termodinámicas de entrada (T, P, X_{gas}) alimentan el cálculo espectral (HAPI), el cual se combina con la absorción del continuo de hollín para obtener el coeficiente de absorción total $\kappa_{abs,v}$. Posteriormente, se integra la RTE diferencial para obtener la radiancia espectral emergente. 39

7.1. Campos simulados utilizados como input para el modelo radiativo: fracción volumétrica de hollín (f_v), temperatura (T) y fracciones molares de CO_2 y H_2O . Izquierda: Llama Yale 32 (baja formación de hollín). Derecha: Llama Yale 80 (alta formación de hollín). 43

7.2. Comparación para Yale 32: Imágenes de intensidad de banda simuladas (izq.) vs. experimentales (der.). La radiancia se expresa en $W \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}$ 44

7.3. Comparación para Yale 80: Imágenes de intensidad de banda simuladas (izq.) vs. experimentales (der.). La radiancia se expresa en $W \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}$ 45

7.4. Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima formación de hollín ($z \approx 1,80$ cm). Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2, H_2O y hollín). 46

7.5. Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 32. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2, H_2O y hollín). 46

7.6. Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima concentración de CO_2 ($z \approx 2,90$ cm). Línea azul continua: Simulación. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas indican la contribución por especies. 47

7.7. Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 32. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2, H_2O y hollín). 47

7.8. Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima formación de hollín ($z \approx 3,88$ cm) para Yale 80. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2, H_2O y hollín). 48

7.9. Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 80. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. 48

7.10. Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima concentración de CO_2 ($z \approx 7,14$ cm). Línea azul continua: Simulación. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas indican la contribución por especies. 49

7.11. Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 80, destacando la evolución de la columna de gases calientes. 49

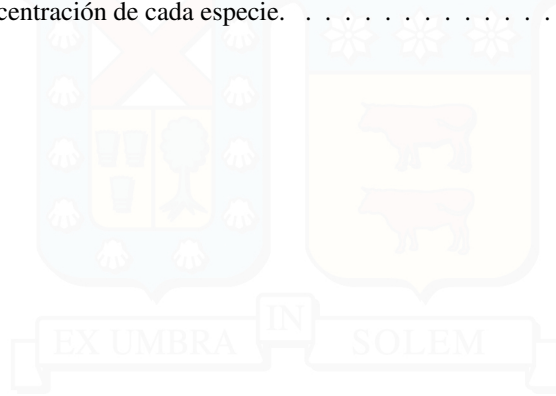
7.12. Desglose espacial de la radiancia espectral simulada para la llama Yale 32. Las filas representan la contribución aislada de cada especie ($CO_2, H_2O, Hollín$) y las columnas corresponden a los cuatro filtros de la cámara. 51

7.13. Contribución relativa porcentual de cada especie a la señal total integrada en cada filtro. El análisis se realiza en tres coordenadas distintas: (Izq.) Punto de máximo CO_2 ; (Centro) Punto de máximo H_2O ; (Der.) Punto de máximo Hollín. Código de colores: Azul (CO_2), Naranja (H_2O), Amarillo (Hollín). 51

7.14. Desglose espacial de la radiancia espectral simulada para la llama Yale 80. Las filas representan la contribución aislada de cada especie ($CO_2, H_2O, Hollín$) y las columnas corresponden a los cuatro filtros de la cámara. 53

7.15. Contribución relativa porcentual de cada especie a la señal total integrada en cada filtro. El análisis se realiza en tres coordenadas distintas: (Izq.) Punto de máximo CO_2 ; (Centro) Punto de máximo H_2O ; (Der.) Punto de máximo Hollín. Código de colores: Azul (CO_2), Naranja (H_2O), Amarillo (Hollín). 53

- 7.16. Análisis de elasticidad para la llama Yale 32. Las barras representan la respuesta de la intensidad en cada filtro (F1-F4) ante un aumento del 10 % en la variable indicada por el color: Rojo (T), Azul (X_{CO_2}), Verde (X_{H_2O}) y Gris (f_v). Los valores se evaluaron en las ubicaciones de máxima concentración de cada especie. 55
- 7.17. Análisis de elasticidad para la llama Yale 80. Las barras representan la respuesta de la intensidad en cada filtro (F1-F4) ante un aumento del 10 % en la variable indicada por el color: Rojo (T), Azul (X_{CO_2}), Verde (X_{H_2O}) y Gris (f_v). Los valores se evaluaron en las ubicaciones de máxima concentración de cada especie. 56



1 | Resumen Ejecutivo

La caracterización detallada de los procesos de combustión es clave para optimizar la eficiencia energética y comprender la formación de emisiones. En llamas de difusión de etileno, la radiación constituye el mecanismo de transferencia de calor predominante y, al mismo tiempo, aporta información diagnóstica sobre la estructura térmica y química del sistema. No obstante, su diagnóstico cuantitativo es desafiante, ya que la señal medida combina la emisión continua del hollín con la emisión espectral selectiva de gases como CO_2 y H_2O . Para abordar este problema, este trabajo propone una metodología de diagnóstico óptico que integra termografía infrarroja multiespectral con un modelo de transferencia radiativa hacia adelante (forward) de alta resolución, validada mediante el estudio de dos escenarios opuestos: la llama Yale 32, de baja carga de hollín, y la llama Yale 80, de alta carga de hollín. En particular, se incorpora explícitamente la autoabsorción mediante un enfoque línea por línea (LBL), lo que permite representar la atenuación de la radiación emitida en el núcleo al propagarse a través del propio medio antes de alcanzar el sensor, entregando una base radiativa físicamente consistente para el proceso de inversión. Finalmente, la intensidad resultante se combina con las funciones de respuesta de los filtros de la cámara para generar imágenes sintéticas, permitiendo una validación directa frente a los datos experimentales.

Los resultados demuestran que las imágenes sintéticas reproducen la morfología observada y la ubicación de los máximos de intensidad en todos los canales. El análisis de sensibilidad espectral confirma que la temperatura (T) es el factor más influyente sobre la radiancia en todas las bandas, mientras que la contribución del hollín (f_v) incrementa su dominancia hacia longitudes de onda más largas y bajo condiciones de alta carga de hollín. Un hallazgo clave es la capacidad de distinguir la firma espectral de las especies mediante la selectividad de los filtros: se observó predominio de CO_2 en los canales 1 y 2, lo que favorece su detección y monitoreo en esos rangos, en contraste, el H_2O se manifiesta de forma más tenue a lo largo del espectro, con mayor incidencia en los filtros 1 y 4, mientras que el hollín domina en los filtros 3 y 4.

A partir de estas observaciones, se concluye que la metodología logra un desacoplamiento efectivo de señales radiativas, y que la integración entre el modelado físico y las características específicas de la cámara habilita un diagnóstico térmico y químico robusto. En particular, se obtiene consistencia entre los campos simulados de T , CO_2 , H_2O y f_v , identificando a T como el principal determinante de la radiancia y al hollín como un contribuyente de importancia creciente a longitudes de onda más largas y para altas concentraciones. Asimismo, la diferenciación del rol de cada canal sustenta una estrategia de inversión escalonada: primero estimar los parámetros dominantes (T y f_v) y, posteriormente, refinar las fracciones molares gaseosas. Si bien el estudio reconoce limitaciones asociadas a las constantes ópticas, los resultados posicionan esta metodología como una herramienta viable para diagnósticos en escenarios industriales complejos. Como proyección, se propone abordar el problema inverso para desagregar cuantitativamente la contribución de las especies directamente desde la imagen experimental, y extender este marco metodológico a sistemas de combustión de mayor complejidad.

2 | Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi familia, en especial a mi mamá y a mis hermanos Victoria, Francisco y Catalina, por su paciencia y por brindarme un apoyo incondicional durante todos estos años. A mi papá, que sé que me acompañó desde el cielo en cada paso de este camino.

A mis mascotas Mika, Lazuli y León, quien hoy está en el cielo, por acompañarme en tantas noches de estudio y por darme calma y tranquilidad en momentos de estrés.

A mi pareja, José, por estar a mi lado durante estos años, sostenerme cuando lo necesité y acompañarme en cada etapa; por ser consuelo, abrazo y apoyo constante.

A las amistades que formé en este camino: a Andrea, Valeria y Alannise, por acompañarme en cada ramo que cursé; a Denise, por estar conmigo en los momentos más difíciles de la carrera; y a mis queridas amigas de la vida, Dany y Cata, porque, a pesar del paso del tiempo, siempre han estado presentes y apoyándome durante esta etapa universitaria. A Nico, por motivarme y convencerme de entrar al Magíster. También agradezco a mis amigos del EC2G y de Operaciones: Vale, Coni, Javier, Martín y Traicy; y a mis compañeros y amigos de ayudantía, Laura y Max, por hacer este recorrido mucho más ameno, por las risas y por tantos momentos memorables. A Cami, especialmente, porque este trabajo no habría sido posible sin ti. A mi exjefe y amigo Ricardo, por sus consejos laborales y por el apoyo constante. Por último, agradezco a todas las personas maravillosas que conocí en estos años y que, de una u otra forma, me acompañaron y apoyaron en este proceso; si bien es posible que no las haya mencionado a todas, cada una dejó una huella importante en este camino.

A mis profesores Rodrigo Demarco y Felipe Escudero, por su paciencia, dedicación y guía durante el desarrollo de este trabajo. Este trabajo fue financiado por el proyecto Fondecyt Regular N° 1252096, del investigador responsable Dr. Rodrigo Demarco Bull.

3 | Introducción

En Chile se trabaja constantemente para avanzar hacia una matriz energética basada en fuentes renovables. Actualmente, las energías renovables (incluyendo hidroelectricidad) superan el 50 % de la generación anual, y la Política Energética Nacional 2050 ha fijado la meta de alcanzar un 80 % de generación renovable al año 2030 [7]. Sin embargo, diversos sectores industriales continúan dependiendo de la combustión de combustibles fósiles para procesos térmicos esenciales, como la producción, el transporte, la minería y la calefacción. Esta dependencia es particularmente evidente en industrias intensivas en calor, donde no siempre es viable reemplazar la combustión por soluciones eléctricas o renovables, debido a limitaciones técnicas, económicas o de infraestructura.

Según la OECD, “a pesar de la rápida expansión de las energías renovables, Chile sigue dependiendo en gran medida de los combustibles fósiles” en sectores clave como la energía y el transporte, debido a su estructura industrial y a la infraestructura energética actual [8]. Además, el 43,5 % de la capacidad eléctrica instalada hasta 2022 correspondía a plantas térmicas (carbón, diésel y gas), lo cual evidencia la continuidad de la combustión tradicional como uno de los pilares de la generación eléctrica.

Esta situación tiene implicancias directas en las emisiones de gases de efecto invernadero y material particulado. Se acentúa, además, porque los sectores industrial, de transporte y manufactura representan fuentes significativas de emisiones de CO_2 y hollín, sustentadas principalmente en el uso de combustibles fósiles importados. A pesar del avance en energías renovables, estos procesos continuarán dependiendo de la combustión durante varios años, debido a la demanda de energía térmica, la falta de infraestructura para una electrificación masiva y diversas restricciones tecnológicas [9].

En este contexto, la combustión continúa siendo un proceso fundamental para la conversión de energía química en energía térmica y mecánica, con aplicaciones extendidas en sectores como la industria, la generación eléctrica, el transporte y la calefacción. A pesar de su uso prolongado desde la invención de los primeros motores térmicos, la comprensión detallada de los fenómenos que ocurren durante la combustión sigue siendo un desafío científico y tecnológico. Esto se debe a la complejidad de las reacciones químicas involucradas, la presencia simultánea de múltiples especies moleculares, y las rápidas escalas temporales y espaciales en las que se desarrollan los procesos.

Profundizar en el estudio de la combustión es clave para mejorar la eficiencia energética, reducir emisiones contaminantes y avanzar hacia tecnologías más limpias. En esta tarea, las técnicas de diagnóstico óptico han adquirido un rol central, al permitir el análisis no intrusivo de parámetros físico-químicos relevantes en tiempo real. Entre ellas, la espectroscopía de absorción se destaca por su capacidad para identificar y cuantificar especies moleculares a partir de la radiación absorbida por la mezcla gaseosa.

Dentro de este enfoque, el estudio de llamas laminares ofrece una plataforma experimental privilegiada para investigar los fenómenos fundamentales de la combustión. Su estabilidad y reproducibilidad permiten generar condiciones controladas que facilitan tanto la adquisición precisa de datos como la validación de modelos computacionales. Por estas razones, las llamas laminares constituyen un entorno de prueba ideal antes de trasladar las metodologías desarrolladas a contextos más complejos, como las llamas turbulentas o los sistemas industriales en operación.

Este trabajo propone evaluar la capacidad de detección espectral de una cámara equipada con filtros centrados en regiones específicas del espectro infrarrojo, utilizando como caso de estudio una llama laminar.

La metodología integra simulación computacional y análisis experimental. En la primera etapa, se utiliza la base de datos HITRAN [10], a través de la interfaz HAPI, para modelar la absorción espectral de mezclas gaseosas típicas de combustión, identificando bandas características de especies como CO_2 , H_2O y hollín bajo diferentes condiciones termodinámicas. En la segunda etapa, se emplea una cámara óptica con filtros espectrales, y se analiza la correspondencia entre las bandas simuladas y la señal registrada, evaluando así la efectividad del sistema en la detección de dichas especies.

Este enfoque busca establecer una metodología robusta y replicable para el diseño y validación de sistemas de diagnóstico óptico aplicables a condiciones reales. Su implementación permitirá mejorar el monitoreo de procesos de combustión, optimizar el uso de energía térmica y contribuir al control más preciso de emisiones contaminantes.

3.1. Objetivos

3.1.1. Objetivo General

El principal objetivo de este trabajo es evaluar la capacidad de detección de especies químicas presentes en llamas laminares, mediante una metodología que combine simulación espectral basada en la base de datos HITRAN y validación experimental, con el fin de establecer un sistema de diagnóstico óptico aplicable a contextos más complejos, como llamas turbulentas o entornos industriales.

3.1.2. Objetivos Específicos

- Modelar la absorción espectral de especies presentes en la combustión, tales como CO_2 , H_2O y hollín, utilizando la base de datos HITRAN mediante la interfaz HAPI.
- Determinar las bandas espectrales características de las especies analizadas y evaluar su coincidencia con las regiones cubiertas por los filtros espectrales de la cámara utilizada.
- Desarrollar un montaje experimental que permita registrar la señal óptica de una llama laminar utilizando la cámara equipada con los filtros mencionados.
- Comparar los resultados experimentales con los espectros simulados, con el fin de validar la capacidad del sistema óptico para detectar las especies objetivo.
- Establecer una metodología replicable que sirva como base para extender el diagnóstico espectral a llamas turbulentas o sistemas de combustión en entornos industriales.

4 | Marco Teórico

4.1. Combustión

Desde un punto de vista termodinámico, la combustión se define como un conjunto de reacciones químicas de oxidación rápida, altamente exotérmicas, mediante las cuales la energía química almacenada en los enlaces moleculares de un combustible se transforma en energía térmica sensible. A pesar del acelerado desarrollo de fuentes de energía renovable no convencional (ERNC), este proceso físico-químico continúa constituyendo el pilar fundamental de la civilización industrial moderna. Según los informes más recientes de la Agencia Internacional de Energía (IEA), los combustibles fósiles aún satisfacen más del 80 % de la demanda energética primaria a nivel mundial [11].

La persistencia de la combustión como fuente dominante no es fortuita, sino que responde a la alta densidad energética de los hidrocarburos líquidos y gaseosos, una característica que, hasta la fecha, es difícil de replicar técnica y económicamente con sistemas de almacenamiento electroquímico (baterías). Por esta razón, la combustión sigue siendo insustituible en sectores difíciles de electrificar, tales como el transporte marítimo y aéreo, la maquinaria pesada y los procesos industriales que requieren calor de alta entalpía (siderurgia, cemento y vidrio).

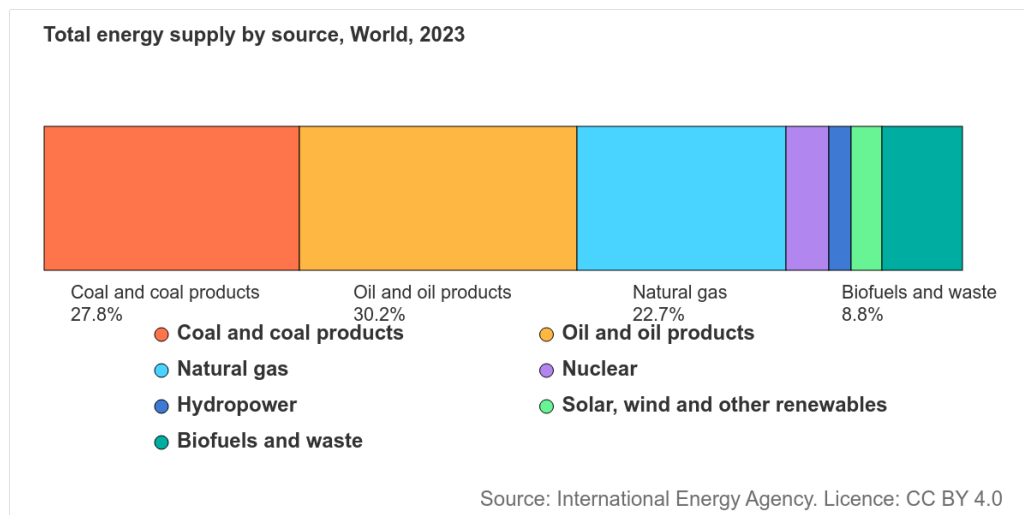


Figura 4.1: Suministro total de energía primaria a nivel mundial por fuente al año 2023. Se observa que los combustibles fósiles —petróleo (30.2 %), carbón (27.8 %) y gas natural (22.7 %)— representan en conjunto el 80.7 % de la matriz energética global, evidenciando la dependencia crítica de los procesos de combustión. Fuente: Adaptado de Agencia Internacional de Energía (IEA) [1].

En el contexto nacional, Chile enfrenta un escenario energético particular. Si bien el país ha avanzado de manera significativa hacia la energía solar y eólica, la infraestructura industrial —especialmente el

sector minero y el transporte de carga— mantiene una fuerte dependencia de los combustibles fósiles [8]. Además, las centrales térmicas continúan desempeñando un rol estratégico en la estabilidad de la red eléctrica, proporcionando inercia y respaldo ante la variabilidad de las fuentes renovables.

Esta realidad plantea el desafío dual delineado en la Política Energética 2050 [9]: garantizar la seguridad y continuidad del suministro energético mientras se avanza hacia la carbono neutralidad. En este escenario de transición, la optimización de los procesos de combustión se vuelve un imperativo tecnológico. No basta con reemplazar combustibles; es necesario comprender y controlar la física de la llama con un nivel de precisión sin precedentes para maximizar la eficiencia de conversión y minimizar la formación de contaminantes como el hollín y los óxidos de nitrógeno. Dado que los combustibles fósiles aún son fundamentales en la industria nacional, es necesario profundizar en el estudio de la radiación que emiten durante la combustión. Esta investigación implementa una metodología para analizar la respuesta espectral de especies como el CO_2 , el H_2O y el hollín, permitiendo la validación de modelos numéricos. De esta forma, el estudio detallado de estos gases se vuelve una herramienta fundamental para entender mejor el comportamiento de las emisiones en el marco de la actual transición energética.

4.1.1. Impacto ambiental y desafíos del diagnóstico

Las emisiones derivadas de la combustión generan consecuencias que operan en múltiples escalas temporales y espaciales. Mientras el dióxido de carbono (CO_2) actúa como el principal gas de efecto invernadero de larga duración, acumulándose en la atmósfera por siglos, el material particulado (hollín) presenta una dinámica distinta y crítica.

Conocido en la literatura climatológica como Carbono Negro (Black Carbon), el hollín es clasificado como un forzante climático de vida corta. En el estudio seminal de Bond et al., se determinó que el Carbono Negro es el segundo agente de calentamiento global más importante después del CO_2 , con un forzamiento radiativo directo estimado en $+0,71 \text{ Wm}^{-2}$ [2]. A diferencia de los aerosoles de sulfato que dispersan la luz y enfrían el planeta, el hollín absorbe intensamente la radiación solar, convirtiendo esa energía lumínica en calor sensible en la atmósfera.

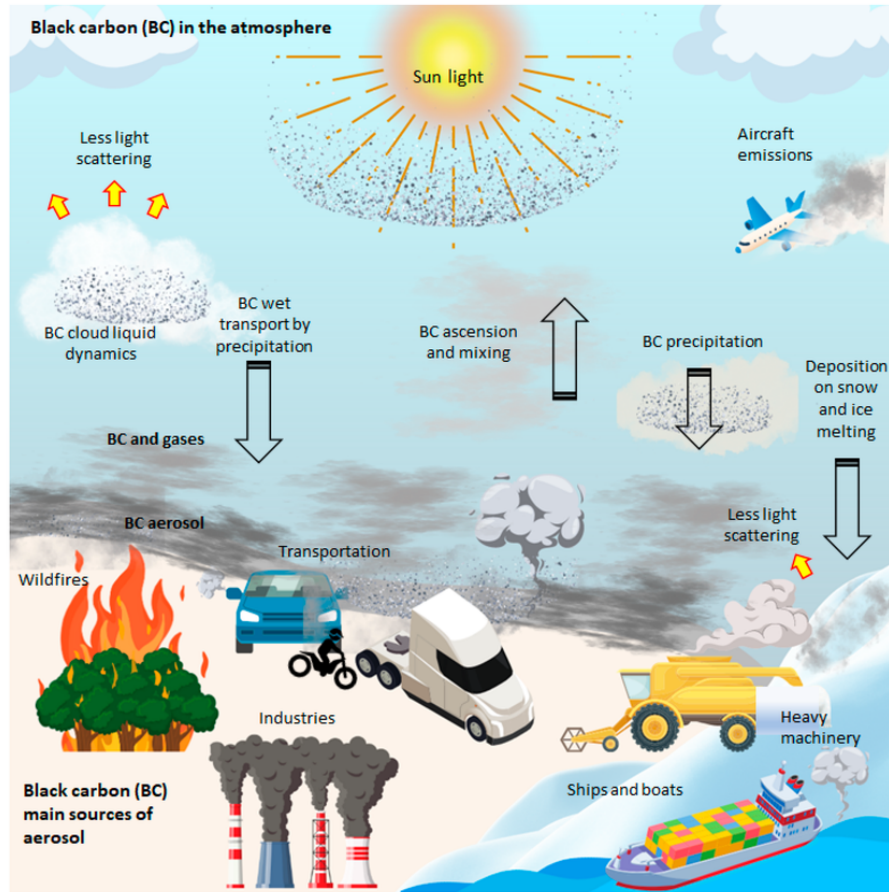


Figura 4.2: Mecanismos de impacto climático del Carbono Negro. (a) Efecto directo: absorción de radiación solar en la atmósfera. (b) Efecto albedo: deposición sobre nieve y hielo, acelerando el derretimiento. Fuente: [2].

Además del impacto climático, el hollín representa un severo riesgo para la salud pública. Debido a su tamaño nanométrico ($PM_{2,5}$), las partículas penetran profundamente en el sistema respiratorio. La Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) ha clasificado las emisiones de motores diésel (ricas en hollín) como cancerígenas del Grupo 1, debido a la capacidad de estas partículas para transportar hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) y metales pesados hacia el torrente sanguíneo [12, 13].

En el contexto de los desafíos ambientales actuales, la necesidad de cuantificar y mitigar la emisión de especies que contribuyen al calentamiento atmosférico plantea un desafío diagnóstico de gran complejidad. Mientras que la reducción del impacto ambiental del CO_2 y el Carbono Negro requiere una caracterización espacial y térmica extremadamente precisa, los métodos de medición tradicionales presentan limitaciones que comprometen la fiabilidad de los datos [14]. El uso de técnicas intrusivas, introduce perturbaciones físicas que alteran la hidrodinámica y el campo térmico de la llama, modificando precisamente el fenómeno que se pretende estudiar. Esta interferencia, sumada a la incapacidad de los sensores puntuales para capturar la estructura multidimensional de las emisiones, genera una brecha en la comprensión de la dinámica de formación de contaminantes.

4.2. Clasificación de sistemas de combustión

La clasificación fundamental de las llamas se basa en la configuración de mezcla entre el combustible y el oxidante. Dependiendo de si esta mezcla ocurre antes o durante el proceso de reacción, se distinguen dos

grandes categorías: llamas premezcladas y llamas de difusión (o no premezcladas). Esta distinción gobierna no solo la estabilidad y seguridad del proceso, sino también los mecanismos cinéticos dominantes en la formación de contaminantes [15].

Tabla 4.1: Clasificación general de los sistemas de combustión según su mezcla y régimen de flujo.

Tipo de mezcla	Régimen	Ejemplos típicos
Premezclada	Laminar	Quemador Bunsen, Llama plana de laboratorio
	Turbulento	Motores de encendido por chispa (Otto), Turbinas de gas estacionarias
No premezclada	Laminar	Vela, Quemador Co-flow (Yale Burner), Encendedor
	Turbulento	Motores Diésel, Motores de cohete (H_2/O_2), Calderas industriales

4.2.1. Llamas de difusión

En las llamas de difusión, el combustible y el oxidante ingresan a la cámara de combustión de forma separada. La reacción química ocurre únicamente en la interfaz donde la mezcla molecular alcanza condiciones estequiométricas debido a los procesos de transporte (difusión y convección). A diferencia de las llamas premezcladas, aquí no existe una velocidad de propagación característica; la tasa de combustión está limitada por la velocidad física del mezclado, la cual es temporalmente mucho más lenta que la cinética química [16].

4.2.1.1. Llamas de difusión laminares

Este régimen constituye el objeto de estudio experimental de la presente investigación. En una llama de difusión laminar típica, se establece una estructura espacial estable y bien definida. Si bien la hidrodinámica general sigue la teoría clásica de Burke y Schumann, la distribución de zonas de formación de partículas ha sido caracterizada detalladamente por Santoro et al. [17]. La estructura se caracteriza por la estratificación de zonas:

1. **Núcleo de combustible (Fuel Core):** En el eje central fluye el combustible puro ($\phi \rightarrow \infty$). A medida que asciende, recibe calor por radiación y conducción desde la zona de reacción, incrementando su temperatura sin oxidarse debido a la ausencia de oxígeno.
2. **Zona de Pirólisis y Hollín:** Al calentarse el núcleo rico, las moléculas de combustible sufren descomposición térmica. En esta región anular, ubicada justo al interior del frente de llama, ocurre la nucleación y crecimiento de partículas de hollín. Estas partículas, al alcanzar temperaturas cercanas a los 1700 K, emiten radiación continua de cuerpo gris, otorgando a la llama su luminosidad amarilla característica.
3. **Frente de Llama (Reaction Sheet):** Es una capa delgada donde el combustible que difunde desde el interior y el oxígeno que difunde desde el exterior se encuentran en proporción estequiométrica ($\phi \approx 1$). Aquí ocurren las reacciones de oxidación exotérmicas principales, liberando CO_2 y H_2O y alcanzando la temperatura máxima del sistema [18].

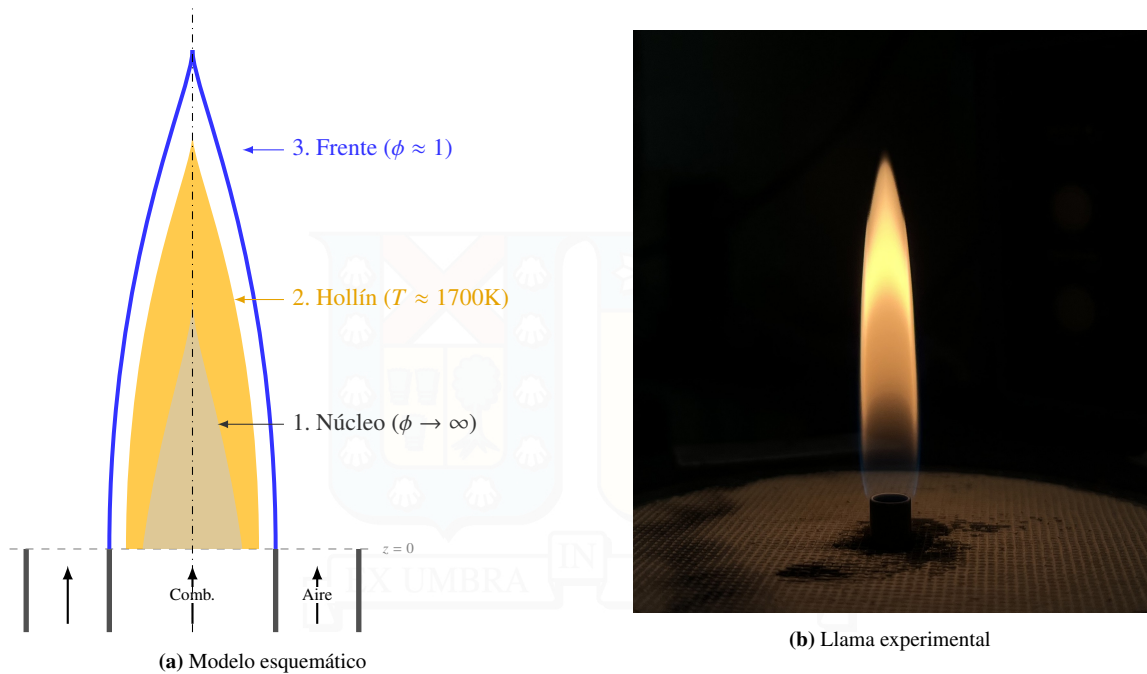


Figura 4.3: Comparación de la estructura de la llama de difusión laminar. (a) Representación esquemática basada en la teoría de Burke-Schumann, ilustrando el núcleo frío, la zona anular de hollín y el frente de reacción externo. (b) Fotografía de llama en quemador Yale, mostrando la coincidencia morfológica y la intensa incandescencia amarilla correspondiente a la zona de hollín predicha por el modelo.

Debido a su estabilidad temporal y ausencia de fluctuaciones turbulentas, las llamas laminares de difusión se consideran "llamas canónicas". Permiten aislar la interacción entre la cinética química, la formación de hollín y la transferencia radiativa, sirviendo como el estándar para la validación de técnicas de diagnóstico óptico y modelos computacionales detallados [19].

4.2.2. Química global y estructura de la llama

Desde una perspectiva termoquímica, la combustión se modela como la oxidación rápida de un combustible (C_xH_y) que libera energía térmica. La eficiencia de este proceso y la naturaleza de los productos generados dependen críticamente de la razón de equivalencia (ϕ), definida como la relación combustible-aire local normalizada respecto a la estequiometría:

$$\phi = \frac{(F/A)_{real}}{(F/A)_{esteq}} \quad (4.1)$$

Este parámetro gobierna la distribución espacial de las especies radiantes en la llama:

- **Zona Rica ($\phi > 1$):** Corresponde al núcleo de la llama de difusión. Aquí, el déficit de oxígeno favorece la pirólisis del combustible y la formación de precursores de hollín y monóxido de carbono (CO).
- **Zona Estequiométrica ($\phi \approx 1$):** Es la región donde el combustible y el oxidante se encuentran en proporción ideal. Termodinámicamente, aquí se alcanza la máxima temperatura de llama, y es la fuente principal de emisión de las especies gaseosas mayoritarias (CO_2 y H_2O).
- **Zona Pobre ($\phi < 1$):** Corresponde a la envoltura exterior de la llama, donde hay exceso de aire y la temperatura decae rápidamente.

En la configuración de difusión laminar utilizada en esta investigación (Quemador Yale), estas zonas no están mezcladas, sino distribuidas espacialmente. El combustible fluye por el centro y el aire por el exterior, creando un gradiente continuo de ϕ . Esta estratificación es lo que define la "firma espectral" que medirá la cámara: un núcleo central que emite radiación continua por hollín, rodeado de un manto caliente que emite radiación de banda por gases.

4.3. Hollín

El término "hollín" hace referencia a los agregados sólidos carbonosos formados durante la combustión incompleta o pirólisis de hidrocarburos. Aunque su estructura principal es carbono elemental, las partículas contienen cantidades variables de hidrógeno y oxígeno, dependiendo de su historial térmico y tiempo de residencia en la llama.

Desde una perspectiva ambiental, el hollín (clasificado como $PM_{2.5}$) representa un riesgo crítico. Su tamaño nanométrico le permite penetrar profundamente en el sistema respiratorio, transportando compuestos tóxicos adsorbidos, como hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), hacia el torrente sanguíneo. Asimismo, es un forzante climático de vida corta que absorbe intensamente la radiación solar, contribuyendo al calentamiento global [2]. Sin embargo, en el contexto de la transferencia de calor en hornos y motores, la radiación térmica emitida por el hollín incandescente es el mecanismo dominante de disipación de energía, siendo fundamental para la eficiencia del sistema.

4.3.1. Morfología y Estructura

Las partículas de hollín no son esferas perfectas ni materiales homogéneos. Su estructura jerárquica se organiza en dos niveles:

1. **Partículas Primarias:** Son esférulas casi elementales con diámetros (d_p) típicamente entre 10 nm y 50 nm. A nivel atómico, están compuestas por láminas de grafito desordenadas (turbostáticas) dispuestas en capas concéntricas, similar a una cebolla.
2. **Agregados Fractales:** Las partículas primarias colisionan y se fusionan formando cadenas o racimos con morfología fractal. El tamaño de estos agregados puede variar entre 100 nm y varios micrómetros.

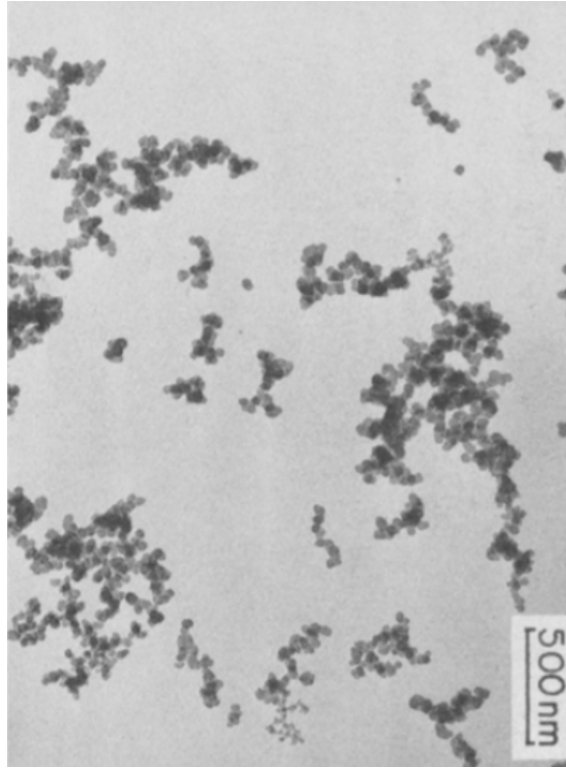


Figura 4.4: Micrografía electrónica de transmisión (TEM) mostrando la morfología fractal de agregados de hollín en una llama de difusión. Se distinguen las partículas primarias esféricas fusionadas en cadenas.

4.3.2. Propiedades Ópticas y Coeficiente de Absorción (κ_λ)

A diferencia de las especies gaseosas, el hollín se manifiesta como una fase sólida dispersa en forma de nanopartículas. Debido a su composición carbónica y su estructura amorfa, presenta un comportamiento radiativo similar al de un cuerpo gris, lo que le confiere la capacidad de emitir y absorber energía de manera continua en todo el espectro electromagnético. La propiedad fundamental que vincula la concentración de masa de estas partículas con su respuesta óptica es la fracción volumétrica de hollín (f_v), definida como el volumen de fase sólida por unidad de volumen de mezcla [15]. El estudio de este parámetro es crucial para comprender la dinámica de la llama, ya que permite identificar las regiones donde predominan los procesos de nucleación, crecimiento superficial y oxidación del hollín.

En el contexto de los diagnósticos ópticos, la importancia de f_v radica en su relación directa con el coeficiente de absorción espectral (κ_λ). Bajo el régimen de Rayleigh, comúnmente asumido para partículas primarias de hollín en el infrarrojo cuando su tamaño es pequeño en comparación con la longitud de onda, esta relación es lineal y permite describir la atenuación de la radiación a través de la Ley de Beer-Lambert. Esta ley establece que la intensidad radiativa (I_λ) decrece exponencialmente al atravesar una longitud de camino óptico L en un medio absorbente, según la expresión:

$$I_\lambda(L) = I_\lambda(0) \exp(-\kappa_\lambda L) \quad (4.2)$$

donde el coeficiente κ_λ es proporcional a la fracción volumétrica (f_v). Esta conexión permite que, mediante la medición de la extinción o la emisión radiativa, sea posible recuperar de forma no intrusiva la distribución de concentraciones de hollín dentro de la llama. De este modo, el hollín no solo actúa como un agente que puede incrementar significativamente la transferencia de calor radiativo, sino que también constituye un trazador relevante para el diagnóstico térmico del proceso de combustión [3].

Bajo el régimen de Rayleigh, el coeficiente de absorción espectral (κ_λ) se define como:

$$\kappa_\lambda = \frac{6\pi E(m)}{\lambda} f_v \quad (4.3)$$

En esta expresión, $E(m)$ es la función de absorción asociada al índice de refracción complejo, la cual encapsula la influencia de la composición química y la estructura interna de la partícula en su capacidad para interactuar con el campo electromagnético. De esta manera, el coeficiente de absorción no solo permite cuantificar la carga de hollín presente en la llama, sino que actúa como un parámetro central para resolver la transferencia de calor radiativo en sistemas de combustión.

Debido a su capacidad de absorción y emisión, el hollín puede ser determinado dentro de la llama mediante metodologías experimentales basadas en la extinción de luz. En este contexto, la respuesta óptica depende de la función del índice refractivo complejo $E(m)$ del hollín, la cual se define como:

$$E(m) = \text{Im} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) = \frac{6nk}{(n^2 - k^2 + 2)^2 + (2nk)^2} \quad (4.4)$$

donde $m = n - ik$ representa el índice de refracción complejo, compuesto por una parte real (n) y una imaginaria (k). La determinación de m presenta una complejidad significativa en la literatura técnica. Uno de los trabajos más referenciados para aproximar estos valores es el de Chang y Charalampopoulos [20], quienes proponen correlaciones empíricas en función de la longitud de onda λ para obtener n y k :

$$n_\lambda = 1,811 + 0,1263 \ln(\lambda) + 0,027(\ln(\lambda))^2 + 0,0417(\ln(\lambda))^3 \quad (4.5)$$

$$k_\lambda = 0,5821 + 0,1213 \ln(\lambda) + 0,2309(\ln(\lambda))^2 - 0,01(\ln(\lambda))^3 \quad (4.6)$$

Finalmente, el coeficiente de absorción en una longitud de onda determinada puede expresarse alternativamente como $C_\lambda = 6\pi E(m)$. Utilizando esta relación, la fracción en volumen de hollín se vincula directamente con el coeficiente de extinción K_λ mediante la siguiente expresión:

$$f_v = \frac{\lambda K_\lambda}{C_\lambda} \quad (4.7)$$

4.4. Radiación Térmica

A diferencia de la conducción y la convección, la radiación térmica es el único mecanismo de transferencia de calor que no requiere de un medio material para su propagación, ya que se transmite mediante ondas electromagnéticas o fotones. En el contexto de la combustión, este fenómeno adquiere una relevancia crítica debido a su fuerte dependencia con la temperatura, según se establece en la ley de Stefan-Boltzmann [3].

La radiación térmica puede describirse bajo una dualidad onda-partícula. Desde la perspectiva ondulatoria, la radiación se propaga a la velocidad de la luz en el medio (c), la cual se relaciona con la velocidad de la luz en el vacío ($c_0 \approx 2,998 \times 10^8$ m/s) y el índice de refracción del medio (n) mediante $c = c_0/n$. Las tres magnitudes fundamentales que caracterizan una onda electromagnética son:

- **Longitud de onda (λ):** Es la distancia entre dos crestas sucesivas de la onda, medida usualmente en micrómetros (μm) o nanómetros (nm).
- **Frecuencia (ν):** Representa el número de oscilaciones por unidad de tiempo, medida en Hertz (Hz o s^{-1}). Se relaciona con la longitud de onda mediante la expresión:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \quad (4.8)$$

- **Número de onda (η):** Es el recíproco de la longitud de onda, comúnmente expresado en cm^{-1} , y es de gran utilidad en la espectroscopía de gases.

Desde el enfoque de la mecánica cuántica, la radiación se considera como un flujo de partículas discretas llamadas fotones. Cada fotón transporta una cantidad de energía (e) que es directamente proporcional a su frecuencia:

$$e = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (4.9)$$

donde h es la constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34}$ J s). Esta relación es fundamental, ya que indica que los fotones de longitudes de onda más cortas poseen mayor energía que aquellos de longitudes de onda largas.

La radiación térmica ocupa un rango específico del espectro electromagnético que se extiende aproximadamente desde $0,1 \mu\text{m}$ hasta $100 \mu\text{m}$. Para el estudio de procesos de combustión y transferencia de calor, suele analizarse principalmente en dos regiones de interés, como se observa en la Figura 4.5:

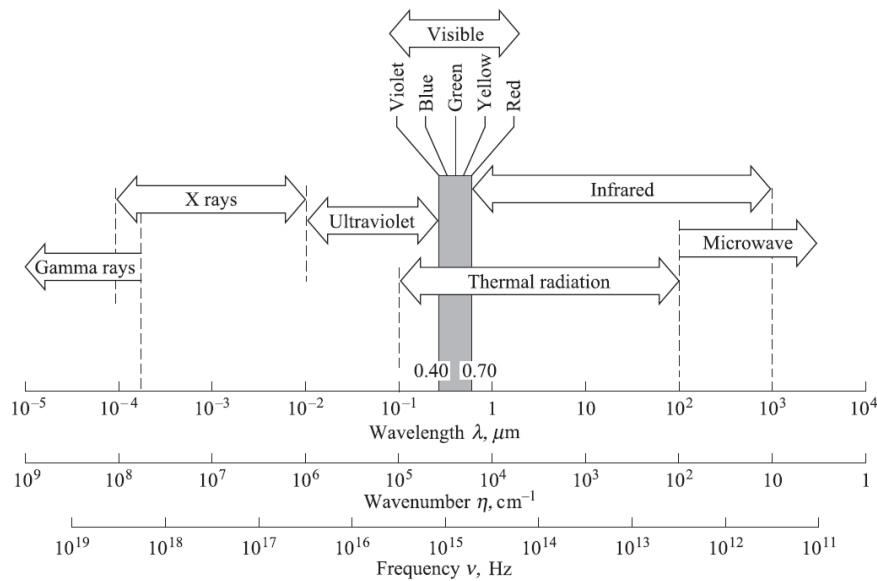


Figura 4.5: Espectro de ondas electromagnéticas destacando las regiones de radiación térmica, luz visible e infrarrojo (para radiación propagándose en el vacío, $n = 1$). Fuente: [3].

1. **Espectro Visible** ($0,40 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 0,70 \mu\text{m}$): Es la estrecha banda de longitudes de onda que el ojo humano es capaz de detectar. En una llama, la luminosidad observada en esta región es causada fundamentalmente por la incandescencia de las partículas de hollín, las cuales actúan como pequeños cuerpos negros emitiendo luz visible debido a sus altas temperaturas.
2. **Espectro Infrarrojo** ($0,70 \mu\text{m} \leq \lambda \leq 100 \mu\text{m}$): Es la región de mayor impacto térmico. Se subdivide en infrarrojo cercano, medio y lejano. En esta zona se localizan las bandas de emisión y absorción de los principales productos de la combustión gaseosa, tales como el dióxido de carbono (CO_2) y el vapor de agua (H_2O). Es en el infrarrojo donde ocurre la mayor parte del intercambio de energía radiativa entre la llama y su entorno.

El estudio de la transferencia de calor por radiación se fundamenta en el principio de intercambio de Prévost, el cual establece que todo medio con una temperatura superior al cero absoluto emite radiación electromagnética de forma continua y espontánea. Esta emisión ocurre en todas las direcciones y su intensidad depende intrínsecamente de la temperatura local y de las propiedades del material, independientemente de la naturaleza de los cuerpos circundantes [3].

Para cuantificar la energía transferida, se define el poder emisivo total (E , [W/m^2]) como la tasa de energía radiante emitida por unidad de superficie en todas las direcciones y a través de todas las longitudes de onda. Dado que la radiación térmica posee una distribución espectral, se define el poder emisivo espectral (E_λ ,

$[W/(m^2 \cdot \mu m)]$), el cual describe la energía emitida por unidad de intervalo de longitud de onda. La relación entre ambas magnitudes se obtiene mediante la integración de la distribución espectral sobre todo el espectro electromagnético:

$$E(T) = \int_0^{\infty} E_{\lambda}(T, \lambda) d\lambda \quad (4.10)$$

En la ciencia de la radiación, se utiliza el concepto de cuerpo negro como un estándar de comparación ideal. Un cuerpo negro es una superficie ficticia que absorbe la totalidad de la radiación incidente y, a una temperatura dada, actúa como el emisor perfecto. El comportamiento espectral de este emisor ideal está regido por la Ley de Planck, la cual describe la distribución espectral de la emisión en función de la temperatura y la longitud de onda:

$$E_{b\lambda}(T, \lambda) = \frac{2\pi hc_0^2}{n^2 \lambda^5 \left[\exp\left(\frac{hc_0}{n\lambda k_B T}\right) - 1 \right]} \quad (4.11)$$

donde h es la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmann y n el índice de refracción del medio. A partir de esta distribución, se derivan leyes fundamentales para el análisis radiativo en llamas.

La Ley de Planck establece la distribución espectral de la potencia emisiva de un cuerpo negro en equilibrio termodinámico. En este marco, el cuerpo negro se emplea como referencia para normalizar la emisión de medios reales (gases y partículas de hollín) mediante la propiedad de emisividad [3].

Para aplicaciones de transferencia de calor y diagnóstico en combustión, la intensidad espectral del cuerpo negro suele expresarse en función del número de onda η (típicamente en cm^{-1}):

$$I_{\eta}^{bb}(T) = \frac{C_1 \eta^3}{\pi \left(e^{\frac{C_2 \eta}{T}} - 1 \right)} \quad (4.12)$$

Donde las constantes se definen como:

- $C_1 = 2\pi hc_0^2 \approx 3,7418 \times 10^{-16} \text{ W} \cdot \text{m}^2$ (Primera constante de radiación).
- $C_2 = hc_0/k_B \approx 1,4388 \text{ cm} \cdot \text{K}$ (Segunda constante de radiación).

Dado que la energía debe conservarse independientemente de la variable espectral elegida ($I_{\lambda} d\lambda = -I_{\nu} d\nu$), la función de Planck adopta formas distintas según el dominio de análisis:

- **En longitud de onda (λ):** Utilizada frecuentemente en pirometría óptica de dos colores.

$$I_{\lambda}^{bb}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1 \right)} \quad (4.13)$$

- **En frecuencia (ν_f):** Común en física teórica, donde $\nu_f = c/\lambda$.

$$I_{\nu_f}^{bb}(T) = \frac{2h\nu_f^3}{c^2 \left(e^{\frac{h\nu_f}{k_B T}} - 1 \right)} \quad (4.14)$$

Una consecuencia directa de la distribución de Planck es que la longitud de onda donde ocurre la máxima emisión depende inversamente de la temperatura. Derivando la ecuación de Planck, se obtiene la Ley de Desplazamiento de Wien. Esta ley también explica que, a medida que aumenta la temperatura, el máximo de emisión se desplaza hacia longitudes de onda más cortas, lo que se asocia con el cambio cromático de la incandescencia desde tonos rojos hacia amarillos y blancos [15], tal como se ilustra en la Figura 4.6:

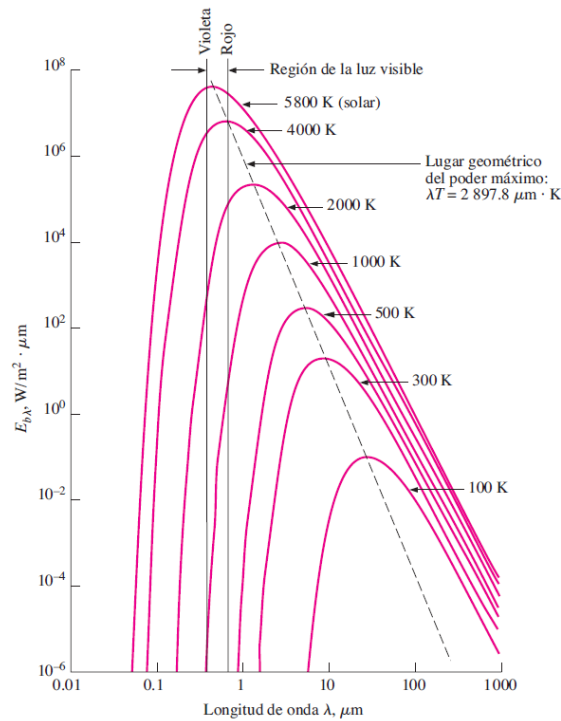


Figura 4.6: Variación del poder de emisión de cuerpo negro con la longitud de onda para varias temperaturas. Fuente: [4]

Finalmente, la integración total de la ley de Planck conduce a la Ley de Stefan-Boltzmann, que cuantifica el poder emisivo total de un cuerpo negro (E_b) como proporcional a la cuarta potencia de su temperatura:

$$E_b(T) = n^2 \sigma T^4 \quad (4.15)$$

donde $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$ representa la constante de Stefan-Boltzmann. Esta dependencia de cuarto orden explica por qué la radiación adquiere un rol predominante en sistemas de combustión a alta temperatura.

Las superficies y medios reales emiten menos energía que un cuerpo negro a la misma temperatura. La emisividad (ϵ) es la propiedad que cuantifica esta eficiencia, definiéndose como la relación entre el poder emisivo del cuerpo real y el del cuerpo negro.

En condiciones de equilibrio térmico, la ley de Kirchhoff establece que la emisividad espectral es igual a la absorptividad espectral ($\epsilon_\lambda = \alpha_\lambda$) [3]. Esto implica que un medio que es un buen emisor en una longitud de onda específica también será un buen absorbedor en esa misma banda.

Es fundamental destacar que, mientras los sólidos y partículas como el hollín suelen presentar una emisividad relativamente suave (aproximación de cuerpo gris), en los gases de combustión las propiedades radiativas varían de forma marcada con la longitud de onda. Esta naturaleza selectiva implica que el CO_2 y el H_2O emiten y absorben energía principalmente en bandas espectrales específicas, lo que añade complejidad a la resolución de la ecuación de transferencia radiativa en la llama.

Para describir con precisión cómo se distribuye la energía radiativa en el espacio tridimensional, es necesario extender el concepto de ángulo plano al espacio. Mientras que un ángulo plano describe la apertura entre dos líneas en un plano y se mide en radianes (rad), el ángulo sólido (Ω) describe la apertura de un cono en el espacio y se mide en estereorradianes (sr) [4].

Físicamente, un estereorradián se define como el ángulo sólido que, teniendo su vértice en el centro de una esfera de radio r , proyecta un área diferencial dA_n sobre la superficie de dicha esfera igual al cuadrado del

radio (r^2). Matemáticamente, el diferencial de ángulo sólido se expresa como:

$$d\Omega = \frac{dA_n}{r^2} \quad (4.16)$$

donde dA_n es el área de la superficie proyectada en una dirección normal al radio. Si consideramos una esfera completa, el área superficial total es $4\pi r^2$; por lo tanto, el ángulo sólido total que rodea un punto en el espacio es exactamente 4π sr [4].

La importancia de este concepto es que diferencia del poder emisivo, que es una cantidad global, la intensidad describe la energía que viaja en una dirección específica. Se define como la energía radiante por unidad de tiempo, por unidad de área normal a la dirección de propagación y por unidad de ángulo sólido. Sin el concepto de estereorradián, no sería posible cuantificar la radiación direccional. Este enfoque es la base de la ecuación de transferencia radiativa (RTE), la cual describe la evolución de la intensidad a lo largo de una trayectoria específica a través de un medio participante. Dado que cualquier punto dentro de la llama emite radiación de forma isotrópica en todas las direcciones (4π sr), la energía total capturada por un elemento sensor representa la integración de las intensidades que convergen desde diversos ángulos sólidos hacia dicho punto. Este balance de energía direccional es el que se desarrolla formalmente en la siguiente sección mediante la formulación de la RTE.

4.5. Ecuación de transferencia radiativa (RTE)

En sistemas de combustión a alta temperatura, la radiación térmica juega un doble rol fundamental. Por un lado, es el mecanismo dominante de transferencia de calor, determinando la eficiencia energética y la formación de contaminantes. Por otro lado, y crucial para esta investigación, la radiación emitida por la llama transporta información intrínseca sobre el estado termodinámico y químico del medio. Para poder decodificar esta señal lumínica capturada por los instrumentos de medición y transformarla en datos cuantitativos (como temperatura o fracción de volumen de hollín), es indispensable contar con un modelo físico riguroso que describa cómo viajan los fotones a través del gas y las partículas. A diferencia de la conducción o convección, que dependen del contacto físico, la transferencia radiativa es un fenómeno volumétrico, espectral y direccional que ocurre a la velocidad de la luz.

La RTE modela el balance energético asociado al transporte de radiación electromagnética en medios participativos, es decir, aquellos capaces de absorber, emitir y dispersar radiación. Esta formulación es fundamental para describir cómo la intensidad espectral de radiación, I_λ , varía a lo largo de una trayectoria diferencial ds en una dirección espacial específica \hat{s} . En el contexto del diagnóstico óptico, la RTE constituye la base teórica para cuantificar la interacción entre los fotones y la materia (gases y partículas), permitiendo discriminar el aporte de los distintos mecanismos físicos al transporte de energía y validar las mediciones experimentales [21]. Los mecanismos físicos que alteran la intensidad a lo largo del camino óptico son:

1. **Emisión** (j_λ): Incremento de la intensidad debido a la generación local de radiación térmica. En equilibrio termodinámico, está regida por la temperatura local y las propiedades de las especies emisoras.
2. **Absorción** ($\kappa_\lambda I_\lambda$): Atenuación proporcional a la intensidad incidente. Representa la energía que es interceptada y convertida en energía interna (térmica) del gas o las partículas.
3. **Dispersión (Out-scattering, $\sigma_{s\lambda} I_\lambda$)**: Corresponde a la radiación que es desviada de su trayectoria original \hat{s} hacia otras direcciones debido a colisiones elásticas con partículas (como hollín) o inhomogeneidades ópticas. Representa una pérdida para el haz analizado.
4. **In-scattering**: Ganancia de intensidad proveniente de radiación que viajaba originalmente en otras direcciones \hat{s}_i y es dispersada hacia la dirección de interés \hat{s} . Este término acopla todas las direcciones del espacio.

Considerando un volumen de control diferencial (cilíndrico, como se muestra en la Figura 4.7) en la dirección \hat{s} , se establece el balance de energía entre estos términos.

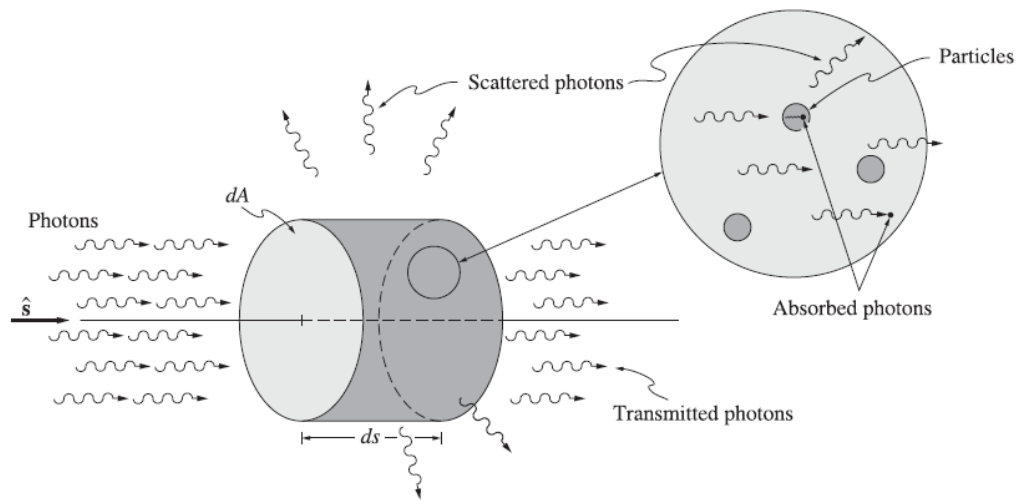


Figura 4.7: Volumen de control diferencial para la derivación de la RTE. El esquema visualiza la interacción fotón-partícula, destacando los mecanismos de extinción (absorción y dispersión hacia afuera) que atenúan el haz incidente a lo largo de ds . Fuente: [5].

Para la derivación de la forma estándar de la RTE utilizada en combustión, se consideran los siguientes supuestos fundamentales:

1. **Estado estacionario:** Las escalas de tiempo del transporte de radiación (velocidad de la luz) son mucho menores que las escalas de flujo, por lo que el término transitorio $\partial I_\lambda / \partial t$ se desprecia.
2. **Óptica geométrica:** La radiación se propaga en línea recta (se desprecia la difracción), válido dado que las longitudes de onda térmicas son muy pequeñas comparadas con las escalas del quemador.
3. **Medio no polarizado:** Se asume que la radiación es aleatoria en su polarización.
4. **Equilibrio Termodinámico Local (LTE):** Se asume que, localmente, las poblaciones de los niveles de energía molecular siguen una distribución de Boltzmann definida por una única temperatura T .
5. **Índice de refracción unitario ($n \approx 1$):** Dado que el medio es gaseoso, se asume que los rayos no sufren refracción significativa.

4.5.1. Derivación general de la RTE

Para obtener la expresión matemática que gobierna el transporte de radiación, se aplica el principio de conservación de la energía sobre un volumen de control diferencial de longitud ds a lo largo de una dirección de propagación \hat{s} . Este enfoque, conocido como Euleriano-Lagrangiano, considera un paquete de fotones que viaja a la velocidad de la luz c en el medio.

La variación de la intensidad espectral I_λ en un intervalo de tiempo dt y espacio ds es el resultado neto de las fuentes (ganancias) y sumideros (pérdidas) de energía dentro del volumen de control [5]:

$$\underbrace{I_\lambda(s + ds, \hat{s}, t + dt) - I_\lambda(s, \hat{s}, t)}_{\text{Cambio total de intensidad}} = \underbrace{(\text{Fuentes}) ds}_{\text{Ganancias}} - \underbrace{(\text{Sumideros}) ds}_{\text{Pérdidas}} \quad (4.17)$$

Los términos físicos que componen este balance son:

- **Ganancia por Emisión (j_λ):** Es la energía generada espontáneamente por la materia dentro del volumen ds debido a su temperatura. Se define mediante el coeficiente de emisión volumétrico.
- **Ganancia por In-scattering:** Representa la radiación que, proviniendo de todas las direcciones del espacio sólido 4π , es desviada (dispersada) para alinearse con la dirección de estudio \hat{s} .
- **Pérdida por Extinción ($\beta_\lambda I_\lambda$):** Es la suma de la absorción (conversión a energía interna) y la dispersión hacia otras direcciones (out-scattering). El coeficiente de extinción se define como $\beta_\lambda = \kappa_\lambda + \sigma_{s\lambda}$.

Matemáticamente, sustituyendo estos términos, el balance se escribe como:

$$I_\lambda(s + ds, \hat{s}, t + dt) - I_\lambda(s, \hat{s}, t) = \underbrace{j_\lambda(s, t)ds + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i}_{\text{Fuentes}} ds - \underbrace{\beta_\lambda I_\lambda(s, \hat{s}, t)ds}_{\text{Sumideros}} \quad (4.18)$$

donde $\Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s})$ es la función de fase, que describe la probabilidad de que un fotón incidente desde \hat{s}_i sea dispersado hacia \hat{s} .

Para relacionar el cambio espacial y temporal, se aplica una expansión en serie de Taylor de primer orden. Dado que $dt = ds/c$, obtenemos la forma transitoria general de la RTE:

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = j_\lambda - \beta_\lambda I_\lambda + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (4.19)$$

Para la aplicación específica en llamas laminares estacionarias, se realizan dos simplificaciones fundamentales basadas en la física del problema:

1. Aproximación Cuasi-Estacionaria: Dado que la velocidad de la luz ($c \approx 3 \times 10^8$ m/s) es órdenes de magnitud superior a las escalas de tiempo del flujo y la química, el campo de radiación se adapta instantáneamente a las condiciones locales. Por tanto, el término temporal se desprecia ($\frac{1}{c} \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} \approx 0$).

2. Equilibrio Termodinámico Local (LTE) y Ley de Kirchhoff:

Si bien una llama es un sistema reactivo que no se encuentra en equilibrio químico global, la tasa de colisiones moleculares es suficientemente alta para termalizar los estados energéticos de las especies. Esto permite asumir la existencia de un equilibrio termodinámico local. Bajo esta condición, para diagnósticos en combustión, es posible aplicar la Ley de Kirchhoff punto a punto, igualando la emisividad espectral con la absorptividad espectral local [22].

$$j_\lambda(T) = \kappa_\lambda I_\lambda^{bb}(T) \quad (4.20)$$

Esta relación es crucial, ya que permite expresar el término fuente en función de una propiedad termodinámica conocida (la temperatura) y una propiedad óptica intrínseca (el coeficiente de absorción).

Sustituyendo estas condiciones en la Ec. 4.19, obtenemos la RTE estacionaria estándar:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \kappa_\lambda I_\lambda^{bb}(T) - \beta_\lambda I_\lambda(s) + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_i) \Phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) d\Omega_i \quad (4.21)$$

Para facilitar la solución numérica, es conveniente introducir la profundidad óptica espectral (τ_λ), una variable adimensional que cuantifica la opacidad acumulada del medio a lo largo de la trayectoria:

$$d\tau_\lambda = \beta_\lambda ds \quad \Rightarrow \quad \tau_\lambda(s) = \int_0^s \beta_\lambda(s') ds' \quad (4.22)$$

Reescribiendo la Ec. 4.21 en términos de τ_λ y agrupando los términos de ganancia en una función fuente S_λ :

$$\frac{dI_\lambda}{d\tau_\lambda} + I_\lambda = S_\lambda(\tau_\lambda, \hat{s}) \quad (4.23)$$

En aplicaciones de diagnóstico por absorción (como la medición de hollín con láser de extinción), se suele emplear una fuente de luz externa de alta intensidad que atraviesa el medio. Si la intensidad del láser es mucho mayor que la emisión propia de la llama y la dispersión hacia el detector es despreciable, la RTE se reduce a un balance simple de atenuación:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = -\kappa_\lambda I_\lambda \quad (4.24)$$

Integrando esta ecuación diferencial a lo largo de una longitud de paso L , se recupera la clásica Ley de Beer-Lambert:

$$\mathcal{T}_\lambda = \frac{I_\lambda(L)}{I_\lambda(0)} = \exp\left(-\int_0^L \kappa_\lambda(s) ds\right) \quad (4.25)$$

Donde \mathcal{T}_λ es la transmisividad medida. Esta ecuación permite relacionar directamente la atenuación de la luz con la concentración de especies absorbentes (como la fracción de volumen de hollín) contenidas en el coeficiente κ_λ .

4.6. Autoabsorción (Self-Absorption)

La autoabsorción es un fenómeno de transferencia de energía radiativa donde los fotones emitidos por una especie excitada en una región de la llama son reabsorbidos por moléculas de la misma especie antes de escapar del medio y ser detectados. Este proceso es especialmente crítico en especies gaseosas como el CO_2 y el H_2O , ya que, según la ley de Kirchhoff, las longitudes de onda donde una molécula es eficiente para emitir son exactamente las mismas donde es eficiente para absorber [5].

En una llama de difusión, la temperatura y la concentración de las especies no son uniformes. La mayor parte de la energía se emite en el núcleo caliente de la llama. Sin embargo, para que esta radiación llegue al sensor, debe atravesar las capas externas de la llama, que suelen estar a temperaturas significativamente menores. En este trayecto, las moléculas "frías" de la periferia, que se encuentran en estados de menor energía, capturan los fotones provenientes del centro, reduciendo la intensidad total medida y alterando la información térmica original del núcleo. El fenómeno se describe formalmente mediante la solución integral de la ecuación de transferencia radiativa para un medio no dispersor. Para una línea de visión de longitud L , la intensidad radiativa espectral emergente $I_\lambda(L)$ se expresa como:

$$I_\lambda(L) = \int_0^L \kappa_\lambda(s) I_{b,\lambda}(T(s)) \exp\left(-\int_s^L \kappa_\lambda(s') ds'\right) ds \quad (4.26)$$

En esta ecuación, el término $\exp(-\int_s^L \kappa_\lambda(s') ds')$ representa físicamente el factor de autoabsorción. Este término actúa como una función de atenuación que reduce la contribución de cada elemento diferencial de volumen ds en función de la opacidad del medio que tiene por delante. Para facilitar el diagnóstico, este efecto se cuantifica a menudo mediante el factor de corrección por autoabsorción (SA_λ), definido como la relación entre la intensidad observada y la intensidad que se mediría en ausencia de absorción ($I_{\lambda,0}$):

$$SA_\lambda = \frac{I_\lambda(L)}{I_{\lambda,0}} = \frac{\int_0^L \kappa_\lambda(s) I_{b,\lambda}(T(s)) e^{-\tau_\lambda(s \rightarrow L)} ds}{\int_0^L \kappa_\lambda(s) I_{b,\lambda}(T(s)) ds} \quad (4.27)$$

Cuando $SA_\lambda \approx 1$, el medio es transparente y la señal recibida es fiel a la emisión total. Cuando $SA_\lambda < 1$, la autoabsorción está escondiendo parte de la energía, lo que generalmente conduce a una subestimación de la temperatura máxima o de la concentración de especies si no se aplica una inversión matemática de la RTE.

4.7. Modelado espectral línea por línea (LBL)

El método de simulación línea por línea (LBL, por sus siglas en inglés) constituye la técnica de referencia para el cálculo de propiedades radiativas en gases de combustión. A diferencia de los modelos de banda, que promedian el comportamiento espectral en intervalos amplios, el LBL resuelve explícitamente la contribución individual de cada transición cuántica rotovibracional permitida.

Este enfoque utiliza bases de datos espectroscópicas fundamentales, como HITRAN o HITEMP, para extraer los parámetros intrínsecos de cada transición (frecuencia central, intensidad de línea, coeficientes de ensanchamiento, etc.). Mediante un mado espectral de alta resolución (típicamente $< 0,01 \text{ cm}^{-1}$), el modelo reconstruye el coeficiente de absorción espectral total sumando las contribuciones de cientos de miles de líneas individuales. Aunque su costo computacional es elevado, el LBL es indispensable para aplicaciones que requieren alta fidelidad espectral, como el diseño de filtros ópticos, la calibración de diagnósticos láser y la validación de modelos simplificados [21].

4.7.1. Coeficiente de absorción espectral

En el enfoque LBL, el coeficiente de absorción espectral κ_ν del gas a una presión p y temperatura T se calcula mediante el principio de superposición. Dado que las líneas espectrales pueden solaparse, el coeficiente total en un número de onda ν es la suma de las contribuciones de todas las líneas espectrales i de todas las especies moleculares m presentes en la mezcla:

$$\kappa_\nu(p, T) = \sum_m \chi_m p \sum_i S_{m,i}(T) \Phi_{m,i}(\nu - \nu_{0,i}) \quad (4.28)$$

Donde:

- χ_m : fracción molar de la especie en m .
- $S_{m,i}(T)$: intensidad de línea integrada (Line Strength) en $\text{cm}^{-1}(\text{atm} \cdot \text{cm})$.
- $\Phi_{m,i}$: función de forma de línea normalizada (Line Shape Function) en cm .
- $\nu_{0,i}$: posición central de la transición i en cm^{-1} .

4.7.2. Dependencia de la Intensidad de Línea con la Temperatura

La intensidad de una transición $S(T)$ depende fuertemente de la temperatura, gobernada por la distribución de Boltzmann. Para extrapolar los datos de referencia ($T_{ref} = 296 \text{ K}$) a las condiciones de llama, se emplea la relación [23]:

$$S(T) = S(T_{ref}) \frac{Q(T_{ref})}{Q(T)} \exp \left[-c_2 E'' \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \left[\frac{1 - e^{-c_2 \nu_0 / T}}{1 - e^{-c_2 \nu_0 / T_{ref}}} \right] \quad (4.29)$$

Donde $Q(T)$ es la función de partición total, E'' la energía del estado inferior y el último término corrige la emisión estimulada.

4.7.3. Mecanismos de Ensanchamiento de Línea

Las transiciones espectrales no son monocromáticas, sino que presentan una distribución de energía alrededor de ν_0 descrita por la función de forma $\Phi(\nu)$, cuya integral sobre todo el espectro es unitaria ($\int \Phi d\nu = 1$). En llama a presión atmosférica, compiten dos mecanismos fundamentales:

4.7.3.1. Ensanchamiento Doppler (Régimen Gaussiano)

Originado por el movimiento térmico aleatorio de las moléculas con respecto al observador. A altas temperaturas, este efecto domina el núcleo de la línea. Su perfil sigue una distribución Gaussiana:

$$\Phi_D(\nu) = \frac{1}{\alpha_D \sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\frac{\nu - \nu_0}{\alpha_D} \right)^2 \right], \quad \text{con } \alpha_D = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad (4.30)$$

4.7.3.2. Ensanchamiento Colisional (Régimen Lorentziano)

Originado por las perturbaciones de los niveles de energía debido a colisiones inelásticas. Es proporcional a la presión y domina las alas de la línea. Su perfil es una distribución de Lorentz:

$$\Phi_L(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2} \quad (4.31)$$

4.7.3.3. Perfil de Voigt

En las condiciones operativas de esta investigación (llama de difusión a presión atmosférica y altas temperaturas), el régimen de ensanchamiento es mixto. Ni el perfil Gaussiano ni el Lorentziano por sí solos son capaces de describir correctamente la física del problema: el núcleo de la línea está controlado principalmente por el efecto Doppler, mientras que las alas decaen lentamente debido al efecto colisional.

Para capturar ambos comportamientos con precisión, en este trabajo se ha seleccionado el perfil de Voigt, definido como la convolución matemática de ambos mecanismos:

$$\Phi_V(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_D(\nu') \Phi_L(\nu - \nu') d\nu' \quad (4.32)$$

La selección del Perfil de Voigt para esta investigación no es arbitraria, sino que está dictada estrictamente por las condiciones termodinámicas de la llama de difusión estudiada. El régimen de ensanchamiento dominante depende de la relación entre la presión y la temperatura, cuantificada mediante el parámetro de Voigt a :

$$a = \sqrt{\ln 2} \frac{\Delta\nu_C}{\Delta\nu_D} \propto \frac{P}{T} \cdot \frac{1}{\sqrt{T}} \quad (4.33)$$

En las condiciones operativas de este trabajo, caracterizadas por presión atmosférica ($P = 1 \text{ atm}$) y altas temperaturas ($T \approx 2000 \text{ K}$), el gas se encuentra en un régimen de ensanchamiento mixto.

- La presión de 1 atm asegura una frecuencia de colisiones suficiente para que el ensanchamiento Lorentziano sea significativo en las alas de la línea.
- Simultáneamente, las altas temperaturas inducen velocidades moleculares elevadas, haciendo que el ensanchamiento Doppler en el núcleo de la línea sea comparable en magnitud al colisional.

Dado que ninguno de los dos mecanismos es despreciable frente al otro, el perfil de Voigt es la única representación física correcta para modelar la absorción espectral en este entorno. Utilizar aproximaciones simples (solo Gauss o solo Lorentz) contradiría el estado termodinámico del sistema, como se ilustra en la diferencia de formas de la Figura 4.8.

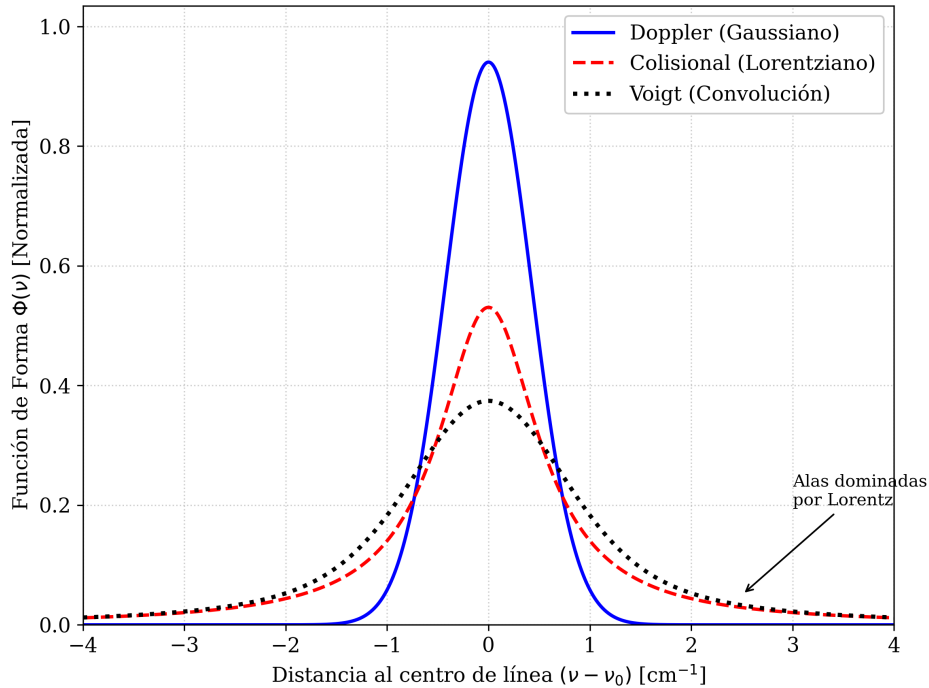


Figura 4.8: Comparación de funciones de forma de línea normalizadas. Se observa cómo el perfil de Voigt (negro) combina las características de los dos regímenes límite: preserva la anchura del núcleo dominado por el efecto Doppler (azul) y captura la caída lenta de las alas dominada por el efecto colisional o Lorentziano (rojo). Esta combinación es crítica para evitar subestimar la absorción en medios ópticamente gruesos.

4.7.4. Implementación Computacional: HITRAN Application Programming Interface (HAPI)

La implementación práctica del modelo LBL se lleva a cabo mediante la librería HAPI [24]. Esta herramienta, desarrollada en lenguaje Python, actúa como una capa de abstracción que automatiza la descarga de datos espectroscópicos y el cálculo de propiedades radiativas, permitiendo integrar la base de datos HITRAN directamente en flujos de trabajo de simulación numérica.

El funcionamiento de HAPI se estructura en un flujo de trabajo secuencial de tres etapas: gestión de datos, cálculo de secciones eficaces y generación del coeficiente de absorción.

A diferencia de los enfoques tradicionales que leen archivos de texto estáticos, HAPI descarga las transiciones moleculares directamente desde los servidores de HITRANonline mediante la función `fetch`. Estos datos se almacenan localmente en una base de datos relacional (SQLite), lo que permite realizar consultas filtradas tipo SQL.

Esto permite seleccionar transiciones específicas basadas en criterios como el rango de número de onda (ν), la intensidad mínima de línea o los isótopos de interés, optimizando el uso de memoria antes de iniciar cualquier cálculo radiativo. Por ejemplo, para el CO_2 , se filtran y cargan en memoria solo las bandas activas en el infrarrojo medio relevantes para la llama estudiada.

El núcleo del procesamiento radiativo en HAPI es la función `absorptionCoefficient`. Esta rutina de Python encapsula la complejidad matemática descrita en la sección anterior, realizando las siguientes operaciones de manera automatizada para cada punto de la malla espectral:

1. **Cálculo del Coeficiente de Absorción Espectral (κ_ν):** La función central `absorptionCoefficient` procesa los parámetros de línea para obtener directamente la capacidad de absorción del gas por unidad

de longitud. Este proceso integra dos efectos físicos simultáneamente:

- a) *Corrección Termodinámica*: Ajusta la intensidad de cada línea espectral $S(T)$ a la temperatura local utilizando la función de partición total $Q(T)$ interpolada desde la base de datos TIPS.
- b) *Ensamblamiento y Densidad*: Distribuye esta intensidad espectralmente aplicando el perfil de Voigt $\Phi_V(\nu)$ y escala el resultado proporcionalmente a la presión parcial y fracción molar del gas.

El resultado final entregado por HAPI es el coeficiente de absorción lineal κ_ν [cm^{-1}], listo para ser utilizado en la Ecuación de Transferencia Radiativa. El resultado es el producto: $\sigma_\nu = S(T) \cdot \Phi_V(\nu)$.

2. **Escalamiento por Densidad**: Una vez obtenida la sección eficaz, la función aplica la ley de los gases ideales para transformar σ_ν en el coeficiente de absorción lineal κ_ν [cm^{-1}], tomando como argumentos de entrada la temperatura, la presión y la fracción molar del gas.

La llamada típica a la función en el código de simulación sigue la estructura:

$$\nu, \kappa_\nu = \text{absorptionCoefficient}(\text{Components}, \text{SourceTables}, \text{Environment} = \{p, T\}) \quad (4.34)$$

donde `SourceTables` referencia a los datos SQL descargados y el diccionario `Environment` define las condiciones termodinámicas locales de la llama.

Dado que llamar a la función `absorptionCoefficient` para cada celda de la simulación CFD (miles de puntos) es computacionalmente costoso, en este trabajo se utiliza HAPI para generar previamente tablas de búsqueda de alta resolución. Se pre-calculan los coeficientes κ_ν barriendo el rango de temperaturas (300 K – 2500 K) y concentraciones esperadas en la llama. Posteriormente, el modelo de transferencia radiativa (RTE) obtiene el valor local mediante interpolación bilineal de estos datos generados por HAPI, reduciendo drásticamente el tiempo de ejecución sin sacrificar la precisión espectral LBL.

5 | Estado del Arte

El estudio experimental de los procesos de combustión ha evolucionado sustancialmente en las últimas décadas, transitando desde mediciones puntuales e intrusivas hacia técnicas ópticas avanzadas que preservan la dinámica del flujo. Este progreso se sustenta en dos pilares fundamentales: por un lado, la maduración de sensores de alta sensibilidad y sistemas de imagen rápida, que permiten resolver escalas temporales y espaciales críticas en la llama [25]; y por otro, la consolidación de bases de datos espectroscópicas de alta fidelidad indispensables para modelar la absorción molecular en entornos de alta temperatura [10].

De manera complementaria, la mejora en los modelos de transferencia radiativa ha sido fundamental para interpretar correctamente la señal óptica en gases de combustión, donde la radiación interactúa con múltiples especies y partículas [21]. La integración de estas herramientas ha permitido no solo identificar especies mayoritarias y trazas con gran precisión, sino también profundizar en el entendimiento de fenómenos complejos como la formación de hollín y la interacción turbulencia-química, superando las limitaciones de observación tradicionales.

En este capítulo se revisan los principales avances experimentales relacionados con técnicas ópticas aplicadas al estudio de llamas, con énfasis en aquellas que emplean espectroscopía infrarroja y análisis multibanda, fundamentos esenciales para la metodología utilizada en este trabajo.

5.1. Diagnóstico óptico en combustión

El diagnóstico óptico se ha establecido como la herramienta fundamental para el estudio experimental de la combustión, permitiendo obtener información detallada sobre temperatura, composición de especies y formación de partículas con alta resolución espacial y temporal. Su principal ventaja radica en su carácter no intrusivo. A diferencia de los métodos de contacto tradicionales, tales como el uso de termopares o sondas de succión, que inevitablemente perturban el campo de flujo y alteran el equilibrio térmico local, las técnicas ópticas se basan en la interacción remota entre la radiación y la materia. Esto permite preservar la hidrodinámica y la química de la llama durante la medición [26].

Durante las últimas décadas, la implementación de técnicas ópticas avanzadas ha permitido caracterizar los procesos de combustión con niveles de precisión sin precedentes. Metodologías como la espectroscopía de absorción, la emisión en el infrarrojo y la imagen multiespectral se han convertido en herramientas indispensables para la obtención de datos cuantitativos en entornos reactivos complejos [27]. La aplicación de estas tecnologías trasciende la investigación fundamental, siendo clave para el diseño de sistemas de mayor eficiencia energética y menor impacto ambiental. En virtud de esta relevancia, el diagnóstico óptico conforma el núcleo metodológico de la presente investigación, cuyos principios rectores se describen a continuación.

5.1.1. Espectroscopía de absorción

La espectroscopía de absorción constituye una de las técnicas más robustas para la medición no intrusiva de propiedades termodinámicas y composicionales en llamas. Su principio fundamental radica en la ley de

Beer-Lambert, la cual cuantifica la atenuación de un haz de radiación al atravesar un medio reactivo. En este proceso, especies moleculares como H_2O , CO_2 , CO y OH absorben energía en bandas rotovibracionales específicas, generando una huella digital espectral [28]. Esta selectividad permite no solo identificar la presencia de dichas moléculas, sino también cuantificar su fracción molar e inferir la temperatura del gas a partir de la relación de intensidades entre líneas de distinta energía de excitación.

La selección de la configuración experimental viene dictada por la sensibilidad requerida y la concentración esperada de las especies, siguiendo los criterios de diseño derivados de la Ley de Beer-Lambert. Dado que en este estudio se trabaja con altas concentraciones de productos principales, se optó por una arquitectura de paso simple. Esta configuración es la más común en estudios de llamas de laboratorio, ya que permite realizar mediciones directas a lo largo de una línea de visión (LOS) con una resolución espacial definida, sin requerir la complejidad óptica necesaria para detectar especies traza.

Sobre estas plataformas geométricas se implementan técnicas de alta resolución espectral, consolidando a la espectroscopía de diodo láser sintonizable (TDLAS) como el estándar actual. Esta técnica sintoniza la longitud de onda de la fuente de luz para barrer el perfil completo de una línea de absorción, lo que permite determinar simultáneamente la concentración, la temperatura y la presión del gas. La elección de la fuente láser es un factor crítico: mientras que los diodos láser convencionales son una opción económica y eficiente para trabajar en el infrarrojo cercano (NIR), el acceso al infrarrojo medio (MIR) suele requerir fuentes más complejas, como los láseres de cascada cuántica (QCLs). Sin embargo, es en el MIR donde las especies de combustión presentan sus bandas fundamentales de absorción, las cuales son órdenes de magnitud más intensas que en el NIR [29].

No obstante, la aplicación de esta técnica en llamas reales presenta desafíos significativos, tales como el solapamiento espectral de múltiples especies, la emisión térmica de fondo y la atenuación no selectiva causada por partículas de hollín. Para desacoplar estos efectos, la espectroscopía moderna se apoya en bases de datos de alta fidelidad, y en modelos de transferencia radiativa línea por línea (LBL) [5, 10]. Estos modelos permiten simular con precisión los perfiles de absorción considerando los efectos de ensanchamiento Doppler y colisional propios de los entornos de alta temperatura.

En el contexto de esta investigación, los fundamentos de la espectroscopía de absorción son críticos, aunque el enfoque experimental sea pasivo. Esto se debe a que las bandas de absorción del H_2O y CO_2 en el infrarrojo medio (MWIR) coinciden con las regiones de emisión térmica capturadas por los filtros de la cámara utilizada. Por consiguiente, la comprensión detallada de los coeficientes de absorción espectral, es indispensable para validar el modelo radiativo y correlacionar la señal integrada de la cámara con las especies presentes en la llama laminar.

5.1.2. Espectroscopía de emisión en IR y visible

La espectroscopía de emisión se ha consolidado como una técnica pasiva fundamental para el monitoreo de llamas, aprovechando la radiación inherente que emiten las especies excitadas en la zona de reacción. Su principal ventaja radica en la capacidad de correlacionar la intensidad radiante con parámetros macroscópicos, como la tasa de liberación de calor y la equivalencia aire-combustible, sin requerir fuentes de iluminación externas [30]. Esta característica la convierte en una herramienta idónea para estudios en cámaras de combustión confinadas o entornos industriales.

En el espectro visible y ultravioleta cercano, la investigación se ha centrado históricamente en la quimioluminiscencia de radicales de vida corta. Estudios fundamentales han establecido que la emisión de (aprox. 430 nm) es un marcador preciso de la posición del frente de llama y de la dinámica de reacción local [31]. Sin embargo, la señal en esta región sufre de una interpretación cuantitativa compleja, dado que la población de estados excitados depende fuertemente de la cinética química y no siempre obedece al equilibrio termodinámico local.

Por el contrario, el estado del arte actual ha focalizado la investigación hacia el uso en región del infrarrojo medio (MIR), donde la radiación proviene fundamentalmente de transiciones rotovibracionales de especies estables. Bajo condiciones de equilibrio termodinámico local (LTE), la intensidad emitida por estas especies

sigue la Ley de Kirchhoff, igualando su emisividad espectral a la absorptividad del gas [21]. Esto implica que las mismas "huellas digitales" espectrales calculadas en absorción se manifiestan como picos de emisión intensa, permitiendo recuperar campos de temperatura y concentración mediante la inversión de la ecuación de transferencia radiativa, tal como lo demuestran trabajos recientes en tomografía infrarroja [32, 33].

Asimismo, en llamas de difusión caracterizadas por una fuerte presencia de material particulado, la espectroscopía de emisión enfrenta un escenario dual. Además de las bandas moleculares, predomina la radiación continua del hollín incandescente, la cual se comporta similar a un cuerpo gris cuya intensidad escala exponencialmente con la temperatura [34]. Si bien esta señal continua puede interferir con la detección de gases, técnicas avanzadas como la pirometría de dos colores aprovechan esta radiación para determinar simultáneamente la fracción volumétrica y la temperatura de las partículas [35, 36].

La señal registrada por un sensor de banda ancha es la integración de ambas contribuciones (gas y hollín), dificultando la discriminación directa de especies. En el contexto de este trabajo, esta fenomenología es crítica para la selección de los filtros espectrales. Al centrar la detección en las bandas fundamentales del CO_2 y H_2O en el MIR, y emplear modelos radiativos línea por línea (LBL), es posible desacoplar mediante simulación la contribución del gas de la del hollín. Por ello, la validación experimental contra espectros sintéticos constituye el núcleo metodológico para interpretar la señal capturada por la cámara.

5.1.3. Técnicas basadas en láser: LIF, PLIF, Raman

A diferencia de la espectroscopía de emisión, que depende de la radiación natural de la llama, las técnicas de diagnóstico activo emplean fuentes de luz externa, generalmente láseres de alta potencia, para caracterizar las propiedades del medio reactivo. Estas metodologías permiten acceder a variables que los métodos pasivos no pueden resolver con facilidad, tales como la concentración de radicales en estado fundamental y la estructura detallada del flujo reactivo con alta resolución temporal [37].

Entre las técnicas ópticas más consolidadas destaca también la Fluorescencia Inducida por Láser (LIF) y su variante bidimensional (PLIF). Este método se basa en sintonizar un láser a una longitud de onda resonante para excitar electrónicamente especies específicas, lo que permite visualizar la distribución espacial de los radicales intermedios que definen el frente de reacción. Debido a esta capacidad, el PLIF se considera un estándar experimental para estudiar la topología de llamas complejas, aunque su implementación requiere sistemas de detección y excitación de mayor complejidad instrumental en comparación con las técnicas de absorción.

Por otro lado, la espectroscopía Raman aprovecha la dispersión inelástica de la luz para identificar múltiples especies mayoritarias y medir la temperatura simultáneamente en un solo punto. A diferencia de otras técnicas, la señal Raman es no resonante y extremadamente débil, lo que requiere láseres de alta energía y detectores avanzados para diferenciarla de la intensa luminosidad de la llama [38]. Para entornos donde la radiación de fondo es demasiado alta, se emplean técnicas no lineales como CARS (Coherent Anti-Stokes Raman Scattering), que ofrece una precisión térmica superior a pesar de su alta complejidad óptica [14].

Si bien estas técnicas láser ofrecen una resolución excepcional, su implementación conlleva altos costos de equipamiento y una complejidad experimental que dificulta su aplicación en entornos industriales o de monitoreo continuo. En contraste, las técnicas de visión pasiva propuestas en este trabajo buscan obtener información termoquímica relevante con una arquitectura significativamente más robusta y accesible.

5.1.4. Imagen multiespectral e hiperspectral

Mientras que las técnicas espectroscópicas convencionales suelen limitarse a mediciones puntuales o integradas a lo largo de una línea de visión, la necesidad de caracterizar la topología térmica y composicional de la llama ha impulsado el desarrollo de técnicas de imagen espectral. Estas metodologías permiten capturar simultáneamente información espacial (mapas 2D) y espectral, generando un "cubo de datos" que describe la radiancia en función de las coordenadas (x, y) y la longitud de onda (λ) .

Dentro de este dominio, se distingue la imagen hiperespectral, la cual adquiere cientos de bandas contiguas con alta resolución espectral, típicamente utilizando espectrómetros de transformada de Fourier (IFTS) de barrido rápido. Aunque esta técnica proporciona una huella espectral detallada para cada píxel, ideal para resolver líneas individuales, su implementación suele estar limitada por bajas tasas de adquisición temporal y la generación de volúmenes masivos de datos, lo que dificulta su aplicación en fenómenos transitorios rápidos.

Dentro de este dominio, se distingue la imagen hiperespectral, la cual adquiere cientos de bandas contiguas con alta resolución utilizando espectrómetros de transformada de Fourier (IFTS). Aunque esta técnica proporciona gran detalle espectral, su aplicación en llamas turbulentas es limitada debido a sus tiempos de adquisición. Dado que la llama se mueve más rápido de lo que el instrumento tarda en capturar el espectro completo, se generan distorsiones en la imagen que dificultan el análisis cuantitativo [39].

Como alternativa más eficiente para el monitoreo dinámico, surge la imagen multiespectral. Este enfoque reduce la complejidad del sistema al adquirir un número discreto de bandas anchas, seleccionadas estratégicamente mediante filtros ópticos de interferencia. Al centrar la detección exclusivamente en las regiones de emisión térmica de las especies de interés y en zonas de referencia, se maximiza la relación señal-ruido y se permite la captura de "instantáneas" del estado de la llama con alta resolución temporal [27].

Sin embargo, la reducción en la resolución espectral introduce un desafío metodológico: la pérdida de detalle en el perfil de línea impide el uso de técnicas directas de ajuste espectral. Por consiguiente, la interpretación cuantitativa de imágenes multiespectrales requiere necesariamente de modelos de transferencia radiativa inversa. Estos modelos utilizan bases de datos espectroscópicas de alta fidelidad para simular la radiancia integrada que debería recibir cada filtro bajo diversas condiciones de temperatura y concentración, buscando la combinación de parámetros que minimice el error entre la simulación y la medición experimental.

5.1.5. Sensores infrarrojos de banda estrecha y cámaras con filtros

La evolución de los diagnósticos por imagen en procesos de combustión se ha orientado recientemente hacia el infrarrojo medio (MIR), con el fin de capturar con mayor precisión la radiación térmica emitida por las especies gaseosas. Los sensores convencionales basados en silicio (CCD/CMOS) presentan una limitación relevante: su respuesta espectral disminuye drásticamente al superar el umbral de los $1.1 \mu\text{m}$, lo que impide la detección de la mayor parte de la energía emitida por la llama. Por consiguiente, para realizar una termometría cuantitativa fiable, se requiere instrumentación avanzada capaz de operar en el rango de 3 a $5 \mu\text{m}$. Es en esta región donde la firma térmica de los gases de combustión es más intensa, permitiendo la observación y el análisis de fenómenos que resultan imperceptibles para los sensores ópticos estándar [40].

La implementación práctica de esta tecnología se basa en materiales de brecha energética estrecha, siendo el Antimonio de Indio (InSb) y el Mercurio-Cadmio-Teluro (MCT/HgCdTe) los estándares actuales para instrumentación científica debido a su alta eficiencia cuántica y respuesta lineal. Sin embargo, la física de estos semiconductores impone desafíos sustanciales: su reducida banda prohibida los hace susceptibles a la excitación térmica espontánea de portadores de carga a temperatura ambiente, generando una corriente oscura que degrada la relación señal-ruido. Para mitigar este fenómeno y operar en el régimen limitado por ruido de fotones, es imperativo integrar sistemas de enfriamiento criogénico que mantienen el arreglo de plano focal (FPA) a temperaturas cercanas a 77 K . Esta supresión del ruido térmico instrumental es el factor crítico que maximiza la detectividad específica (D^*) del sensor, permitiendo la discriminación radiométrica precisa de las bandas de gas frente al fondo térmico [41].

Para dotar de selectividad espectral a estos sensores de banda ancha, se acoplan filtros ópticos de interferencia [27]. Estos componentes se caracterizan por una longitud de onda central (λ_c) alineada con la transición molecular de interés y un ancho de banda (FWHM) optimizado, diseño que busca equilibrar la recolección de señal frente al rechazo de interferencias espectrales o del fondo térmico.

Desde una perspectiva metodológica, la combinación del sensor refrigerado y el filtro espectral define la función de transferencia del sistema. A diferencia de un espectrómetro ideal, la cámara registra una intensidad integrada ponderada por la curva de transmisión del filtro y la respuesta espectral del detector.

Por consiguiente, el uso cuantitativo de estos sistemas exige una caracterización radiométrica rigurosa que vincule las cuentas digitales (ADU) con unidades físicas de radiancia ($W \cdot sr^{-1} \cdot m^{-2}$), un paso indispensable para la validación contra modelos de transferencia radiativa [3].

5.2. Caracterización de las bandas espectrales de interés

Basándose en los fundamentos físicos de emisión térmica descritos anteriormente, este apartado profundiza en la topología espectral específica de las especies mayoritarias en la región del infrarrojo medio (MIR). La identificación precisa de la posición y la intensidad relativa de estas bandas es crítica para el diseño de la configuración experimental, ya que dicta la selección de los filtros ópticos necesarios para discriminar entre la emisión del dióxido de carbono, el vapor de agua y el monóxido de carbono.

5.2.1. Dióxido de Carbono (CO_2)

La huella espectral del CO_2 en combustión está dominada por su banda fundamental asimétrica, la cual presenta su máxima intensidad de emisión en el rango de 4.2 a 4.4 μm . Estudios de emisividad han establecido que esta banda es el marcador termodinámico más robusto de la llama [42].

Si bien en aplicaciones industriales de gran escala esta región puede presentar opacidad óptica debido a las altas densidades columnares, en el contexto de llamas laminares de laboratorio esta banda se mantiene en el régimen lineal o de transición. Esto ofrece una ventaja crítica: proporciona la máxima relación señal-ruido disponible en el espectro infrarrojo, superando en varios órdenes de magnitud a las bandas de sobretono en el NIR. Por esta razón, la configuración experimental prioriza el uso de un filtro de banda estrecha centrado en 4,3 μm . Esta elección permite capturar la estructura térmica con alta sensibilidad, discriminándola eficazmente del fondo. Para garantizar la precisión cuantitativa, la interpretación de los datos se apoya en modelos de transferencia radiativa que permiten corregir el fenómeno de autoabsorción, donde las capas externas más frías de la pluma de gas o el CO_2 atmosférico atenúan la señal emitida por el núcleo de la llama [3].

5.2.2. Vapor de Agua (H_2O)

A diferencia de la estructura definida del CO_2 , el vapor de agua presenta un espectro complejo que se extiende por gran parte del infrarrojo debido a su geometría asimétrica. Si bien su banda fundamental de estiramiento se centra teóricamente en 2.7 μm , las altas temperaturas de combustión inducen un fenómeno de ensanchamiento térmico significativo hacia longitudes de onda mayores [43].

En consecuencia, las estrategias de diagnóstico más robustas evitan el centro de la banda fundamental del H_2O debido a la fuerte atenuación que ejerce la humedad atmosférica en el camino óptico. En su lugar, se prioriza la detección en el denominado 'hombro rojo' del espectro (longitudes de onda superiores a 2,9 μm), región que permite capturar de forma selectiva las transiciones de alta energía excitadas en la llama, minimizando la interferencia del aire circundante. No obstante, en condiciones de alta temperatura, la densa superposición de miles de líneas rotacionales del agua genera un fenómeno conocido como cuasi-continuo. En este régimen, las líneas individuales se ensanchan y se solapan de tal forma que la señal deja de percibirse como picos discretos, manifestándose como una emisión de fondo persistente que eleva la línea base del espectro. Para una interpretación cuantitativa precisa, resulta imperativo el uso de bases de datos espectroscópicas de alta resolución como HITEMP, las cuales permiten modelar este efecto acumulativo y desacoplarlo de otras posibles interferencias, tales como la emisión de hidrocarburos no quemados en la región de 3,4 μm , garantizando así la pureza radiométrica de la medición [44].

5.2.3. Monóxido de Carbono (CO)

La detección espectral del CO representa el mayor desafío en sistemas de imagen de baja resolución espectral. Su banda fundamental vibracional-rotacional se centra en $4.6 \mu\text{m}$, ubicándose inmediatamente adyacente al hombro rojo de la intensa banda del CO_2 ($4.3 \mu\text{m}$). Esta proximidad provoca una interferencia cruzada severa, donde la señal del CO suele verse enmascarada por la emisión térmica dominante del dióxido de carbono [45].

En la práctica experimental, la detección suele abordarse mediante filtros que cubren la rama R del CO (típicamente entre 4.5 y $4.8 \mu\text{m}$). Sin embargo, dado que esta ventana espectral sigue capturando una fracción significativa de la emisión del CO_2 caliente, no es posible atribuir la radiancia medida exclusivamente al monóxido de carbono. Por consiguiente, la cuantificación de esta especie requiere indispensablemente el uso de técnicas de deconvolución espectral basadas en modelos radiativos (LBL) para sustraer la contribución calculada del CO_2 y aislar la señal residual del CO [46].

5.2.4. Interferencia espectral y dependencia térmica

La coexistencia de múltiples especies radiantes en la zona de reacción da lugar a la interferencia cruzada, un desafío de los diagnósticos ópticos en medios reactivos. Este fenómeno es altamente dependiente de la temperatura local: según la distribución de Boltzmann, el incremento de la energía térmica provoca el poblamiento de niveles rotovibracionales superiores, dando lugar a millones de transiciones adicionales conocidas como líneas calientes. Este proceso no solo aumenta la complejidad del espectro, sino que provoca un ensanchamiento de las bandas que invade las ventanas de transmisión de especies adyacentes [47]. En la literatura especializada, se identifican dos regiones donde este conflicto es particularmente crítico:

- Región de $2.7 \mu\text{m}$: En este rango, las bandas fundamentales de estiramiento del H_2O se solapan con las bandas combinadas del CO_2 . A temperaturas de combustión, el ensanchamiento térmico de ambas especies crea una amalgama radiativa donde las firmas moleculares individuales se vuelven prácticamente indistinguibles para sensores de banda ancha.
- Región de $4,4$ a $4,8 \mu\text{m}$: Esta ventana es esencial para la detección de CO. Sin embargo, su señal suele quedar oculta por el ensanchamiento térmico de la banda principal del CO_2 (centrada en $4,3 \mu\text{m}$). A altas temperaturas, la emisión del dióxido de carbono se expande hacia longitudes de onda más largas, generando un fondo radiativo tan intenso que 'eclipsa' la señal del monóxido de carbono. Dado que la concentración de CO_2 en la llama es significativamente mayor, la pequeña contribución del CO queda sepultada bajo esta radiación dominante, dificultando su medición aislada.

Debido a esta superposición, la señal capturada por el sensor no tiene un vínculo exclusivo con una sola especie. En realidad, el equipo registra una intensidad total que combina las emisiones de todos los gases presentes en la línea de visión, según lo que permita pasar el filtro óptico. Para resolver esta confusión, la comunidad científica utiliza técnicas de desmezclado espectral. Estos métodos emplean modelos matemáticos (radiativos inversos) que comparan la señal real con simulaciones teóricas basadas en bases de datos como HITEMP. Al ajustar los valores de temperatura y concentración en el modelo hasta que coincidan con lo medido, es posible identificar y separar cuánto aporta cada gas a la señal final [3].

5.3. Modelado de Transferencia Radiativa y Simulación Computacional

Tras identificar la complejidad espectral y los fenómenos de interferencia, el siguiente paso lógico es establecer el vínculo formal entre la señal radiométrica capturada por el sensor y las variables de estado del gas. Este puente se construye sobre la Ecuación de Transferencia Radiativa (RTE), la cual, en su forma diferencial para un medio no dispersivo en equilibrio termodinámico local (LTE), describe la evolución de la intensidad espectral I_λ a lo largo de una trayectoria óptica s [5]:

$$\frac{dI_\lambda}{ds} = \kappa_\lambda(I_{b,\lambda}(T) - I_\lambda) \quad (5.1)$$

Esta expresión matemática revela el núcleo del desafío diagnóstico: la señal registrada depende de la competencia entre la emisión de cuerpo negro $I_{b,\lambda}(T)$ y la absorción local regida por el coeficiente κ_λ . Dado que este coeficiente varía drásticamente con la longitud de onda debido a la naturaleza discreta de las transiciones cuánticas, la resolución precisa de la RTE exige modelos de alta fidelidad que no promedien esta estructura fina.

5.3.1. Método Línea por Línea (LBL)

A diferencia de los modelos de ingeniería simplificados (como banda estrecha o WSGG) que promedian las propiedades ópticas sobre grandes intervalos, el diagnóstico espectroscópico de alta fidelidad exige el uso del método Línea por Línea (LBL). Este enfoque constituye la solución numérica más rigurosa de la física radiativa, ya que calcula el coeficiente de absorción espectral monocromático κ_η sumando la contribución individual de cada transición cuántica i presente en la mezcla gaseosa [5]:

$$\kappa_\eta(T, P) = N \sum_i S_i(T) \cdot \Phi_i(\eta - \eta_{0,i}, T, P) \quad (5.2)$$

donde N es la densidad molar de la especie absorbente, $S_i(T)$ es la intensidad de la línea (dependiente de la temperatura a través de la función de partición) y $\eta_{0,i}$ es la posición central de la transición. El término crítico en esta formulación es la función de perfil de línea Φ , la cual describe como la energía de la transición se distribuye espectralmente debido a mecanismos de ensanchamiento físico. En entornos de combustión, es indispensable utilizar el perfil de Voigt, una convolución matemática que integra simultáneamente el ensanchamiento Doppler (causado por la velocidad térmica de las moléculas) y el ensanchamiento colisional (inducido por la presión) [48].

Si bien la implementación numérica de este método demanda recursos computacionales significativos, su aplicación resulta imperativa para los objetivos de este estudio. La capacidad de resolver la topología espectral completa permite caracterizar con precisión el comportamiento asintótico de las alas de línea, región donde se originan las principales interferencias cruzadas a alta temperatura. En consecuencia, el modelado LBL proporciona la base teórica necesaria para cuantificar y desacoplar las contribuciones radiativas de distintas especies en mezclas reactivas complejas, superando las limitaciones de los modelos de banda tradicionales.

5.3.2. Parámetros espectroscópicos y bases de datos de alta temperatura

La precisión de cualquier simulación radiativa LBL depende intrínsecamente de la calidad de los parámetros espectroscópicos de entrada (intensidad de línea, coeficiente de ensanchamiento, energía del estado basal). Durante décadas, la base de datos HITRAN (High-resolution Transmission molecular absorption database) ha constituido el estándar internacional para la teledetección atmosférica. Sin embargo, su diseño está optimizado para condiciones terrestres ($T < 300$ K), lo que resulta en una cobertura insuficiente para las condiciones extremas de una llama [10].

El límite fundamental de HITRAN radica en la estadística de Boltzmann. A temperaturas de combustión ($T > 1000$ K), se pueblan significativamente niveles de energía vibracional y rotacional altos (E'') que permanecen vacíos a temperatura ambiente. Las transiciones que se originan desde estos estados excitados, conocidas como "líneas calientes", son despreciables en la atmósfera pero se convierten en fuentes dominantes de radiación en el infrarrojo medio dentro de un reactor. Ignorar estas transiciones conlleva a una subestimación sistemática de los coeficientes de absorción y, por ende, a errores graves en la termometría óptica [23].

Para subsanar esta deficiencia, es imperativo utilizar la base de datos HITEMP (High-temperature molecular spectroscopic database). A diferencia de HITRAN, que prioriza líneas validadas experimentalmente, HITEMP

incorpora cálculos teóricos masivos basados en hamiltonianos efectivos y métodos variacionales para predecir millones de transiciones débiles y calientes que son difíciles de medir en laboratorio. En el caso específico del CO_2 y el H_2O , HITEMP aumenta el número de líneas catalogadas en varios órdenes de magnitud, capturando la estructura del cuasi-continuo espectral y el ensanchamiento de bandas necesario para modelar fielmente la radiación de fondo en el entorno de la llama.

5.3.3. Entorno de simulación espectroscópica y procesamiento computacional

La gestión de las masivas bases de datos moleculares y la ejecución de los algoritmos LBL requieren una arquitectura de software eficiente y validada. Para este fin, se emplea la interfaz HAPI (HITRAN Application Programming Interface), una librería de código abierto diseñada para unificar la descarga de datos, el preprocesamiento cuántico y el cálculo radiativo en un entorno Python. Esta elección metodológica no es trivial; el uso de estructuras de datos vectorizadas (basadas en arreglos de NumPy) permite procesar millones de líneas espectrales con una eficiencia computacional comparable a lenguajes compilados como Fortran o C++, facilitando la iteración rápida de parámetros en simulaciones complejas [49].

Desde una perspectiva termodinámica, HAPI actúa como el motor físico de la simulación. Su función crítica es calcular la sección eficaz de absorción (σ_ν) dependiente de la temperatura. Para ello, el software computa internamente la dependencia térmica de la intensidad de línea mediante el cálculo de las sumas de partición total $Q(T)$, interpoladas a partir de tablas TIPS (Total Internal Partition Sums), y aplica el perfil de Voigt a cada transición. Este nivel de automatización asegura que la física fundamental del ensanchamiento y la población de niveles de energía se maneje con el rigor de los estándares internacionales definidos por el comité HITRAN [50].

Finalmente, HAPI proporciona la funcionalidad esencial para vincular la teoría con el experimento: la convolución instrumental. A diferencia de simuladores genéricos, esta herramienta permite importar las curvas de transmisión reales de los filtros ópticos utilizados en el laboratorio (descritos en la sección experimental) y aplicarlas como una máscara sobre el espectro de alta resolución calculado. Esta operación matemática simula la respuesta integrada del sensor, generando observables sintéticos (radiancia en banda) que son directamente comparables con las mediciones radiométricas de la cámara, estableciendo así el puente definitivo para la validación del modelo [24].

5.4. Interacción radiativa entre fase gaseosa y material particulado

En el análisis de llamas de difusión no premezcladas, la presencia de agregados carbonosos (hollín) introduce una topología espectral radicalmente distinta a la de los productos gaseosos de la combustión. Esta dicotomía tiene su origen en la naturaleza física de la emisión: mientras que las especies moleculares (CO_2 , H_2O) confinan su radiación a bandas discretas gobernadas por reglas de selección cuántica (vibración-rotación), el hollín se comporta termodinámicamente como un emisor de cuerpo gris en fase condensada. Debido a la agitación térmica de los electrones libres en su estructura gráfica amorfa, las partículas generan un espectro continuo de incandescencia que barre todo el rango infrarrojo sin interrupciones [3].

La coexistencia de estos dos regímenes radiativos crea un escenario de "interferencia aditiva". En las regiones de detección crítica, como la banda del CO_2 en $4.3 \mu\text{m}$ o del H_2O en $2.7 \mu\text{m}$, la señal registrada por la cámara (S_{total}) no proviene únicamente de la especie química de interés. Por el contrario, la emisión molecular se encuentra "montada" sobre un pedestal de radiación de fondo generado por el hollín. En consecuencia, la intensidad medida se convierte en una magnitud híbrida que integra la contribución volumétrica del gas y la luminosidad de las partículas a lo largo de la línea de visión. Esta superposición impide la aplicación directa de modelos de gas puro y exige el desarrollo de estrategias de desacople espectral para aislar la quimioluminiscencia molecular de la incandescencia del particulado, un paso indispensable para la especiación cuantitativa rigurosa [35].

5.4.1. Propiedades ópticas del hollín: Régimen Rayleigh y función dispersiva

El tratamiento radiativo de la fase dispersa en llamas se fundamenta en la teoría de Mie. Sin embargo, para aplicaciones en el infrarrojo medio, es válido asumir la aproximación de Rayleigh. Esta simplificación se justifica físicamente comparando el tamaño característico de las partículas primarias de hollín ($d_p \approx 10 - 50$ nm) con la longitud de onda de detección ($\lambda \approx 3 - 5 \mu\text{m}$). Dado que el parámetro de tamaño es muy pequeño ($\pi d_p / \lambda \ll 1$), la dispersión (scattering) se vuelve despreciable frente a la absorción, permitiendo modelar el hollín puramente como un absorbedor volumétrico [5].

Bajo esta hipótesis, la emisividad espectral ($\varepsilon_{\lambda,s}$) de una nube de partículas deja de comportarse como un cuerpo gris constante y adopta una dependencia espectral inversa, descrita analíticamente por:

$$\varepsilon_{\lambda,s} = 1 - \exp\left(-\frac{6\pi E(m) f_v L}{\lambda}\right) \quad (5.3)$$

donde f_v representa la fracción volumétrica de hollín, L la longitud de camino óptico y $E(m) = \text{Im}((m^2 - 1)/(m^2 + 2))$ es la función de absorción del índice de refracción complejo $m = n - ik$.

La determinación precisa de $E(m)$ constituye la mayor fuente de incertidumbre en la pirometría de hollín. El valor de m no es universal, sino que evoluciona con la "madurez" química de la partícula (relación H/C). Mientras que el hollín incipiente presenta propiedades más cercanas a precursores orgánicos, los agregados maduros se asemejan al grafito policristalino. Aunque existen discrepancias significativas en la literatura, las correlaciones espectrales de Chang y Charalampopoulos son ampliamente aceptadas para predecir la dispersión en el infrarrojo, a pesar de que revisiones críticas sugieren que podrían sobreestimar la absorción en comparación con los valores consensuados más recientes [20].

5.4.2. Inversión radiométrica y separación de señales

La resolución del problema inverso —determinar la temperatura (T_s) y la fracción volumétrica (f_v) del hollín a partir de imágenes proyectadas— se aborda mediante la técnica de pirometría multibanda de canales de referencia. Esta metodología se fundamenta en la selección estratégica de ventanas espectrales donde la absorción de las especies gaseosas es despreciable (transmitancia $\tau_{gas} \approx 1$), permitiendo capturar exclusivamente la incandescencia del particulado.

Matemáticamente, el proceso se plantea como un problema de optimización. Para cada píxel, se busca el par de parámetros (T_s, f_v) que minimice la discrepancia entre la radiancia experimental medida en los canales de referencia y la predicción teórica del modelo de Planck modificado por la emisividad espectral (Ec. 5.3). Generalmente, esto se resuelve mediante algoritmos de mínimos cuadrados no lineales, lo que asegura una determinación robusta del campo térmico del hollín independiente de la química del gas [51].

Una vez caracterizadas las propiedades del hollín, el modelo permite realizar una extrapolación analítica de su curva de emisión hacia las regiones espectrales dominadas por los gases. Esta señal sintética de hollín actúa como una línea base calculada que se sustrae, píxel a píxel, de la radiancia total registrada en los filtros de gas. Este paso de deconvolución es crítico: sin él, la luminosidad del hollín introduciría errores sistemáticos severos en la estimación de la temperatura del gas, especialmente en las zonas de alta carga de partículas características de las llamas de difusión [52].

5.5. Brechas actuales y motivación de este trabajo

La revisión crítica del estado del arte evidencia que el diagnóstico óptico de la combustión ha alcanzado un alto grado de madurez, estableciendo a las técnicas activas basadas en láser (LIF, TDLAS, CARS) como el estándar de referencia ("Gold Standard") debido a su excepcional resolución espacial y especificidad química. Sin embargo, la implementación de estos sistemas conlleva una complejidad óptica inherente y un

costo instrumental prohibitivo que limitan severamente su escalabilidad y transferibilidad hacia entornos industriales o sistemas de monitoreo continuo fuera de laboratorios especializados [25].

En contrapartida, las técnicas de imagen espectral pasiva han emergido como una alternativa disruptiva para capturar la topología térmica completa de la llama de manera no intrusiva. Dentro de este dominio, si bien los sistemas hiperespectrales (IFTS) proporcionan la resolución necesaria para la identificación inequívoca de especies, sus bajas tasas de adquisición temporal restringen su aplicación en fenómenos transitorios o turbulentos. Ante este compromiso, la imagen multiespectral basada en filtros de banda estrecha se posiciona como la solución óptima en términos de velocidad, robustez y costo-efectividad para aplicaciones dinámicas [27].

No obstante, la adopción generalizada de esta tecnología enfrenta una brecha metodológica crítica: la reducción de la dimensionalidad espectral convierte la recuperación de temperaturas y concentraciones en un problema inverso mal condicionado. La señal registrada por cada filtro es una integración compleja de múltiples contribuciones radiativas (emisión de CO_2 , H_2O y el continuo de hollín), donde el uso de correlaciones empíricas simples o asunciones de cuerpo gris suele introducir incertidumbres sistemáticas inaceptables, especialmente en regiones de fuerte solapamiento espectral y autoabsorción [53].

En respuesta a este desafío, el presente trabajo propone el desarrollo y validación de una metodología híbrida que integra la versatilidad experimental de la imagen multiespectral con el rigor teórico de las simulaciones radiativas línea por línea (LBL). Utilizando una llama laminar como plataforma de validación controlada y la interfaz HAPI como motor de cálculo físico, esta investigación busca demostrar la factibilidad de desacoplar con precisión las contribuciones de la fase gaseosa y dispersa mediante un conjunto optimizado de filtros ópticos. La validación exitosa de este enfoque sentará las bases para una nueva generación de diagnósticos portátiles y accesibles, capaces de democratizar el monitoreo avanzado de procesos de combustión con impacto directo en la eficiencia energética y el control de emisiones.

6 | Metodología

6.1. Montaje Experimental

La validación de la metodología propuesta se llevó a cabo utilizando una llama de difusión laminar de coflujo, una configuración estándar en la literatura de combustión debido a su estabilidad aerodinámica y simetría axial. La disposición física de los instrumentos y la geometría de adquisición se ilustran en la Figura 6.1.

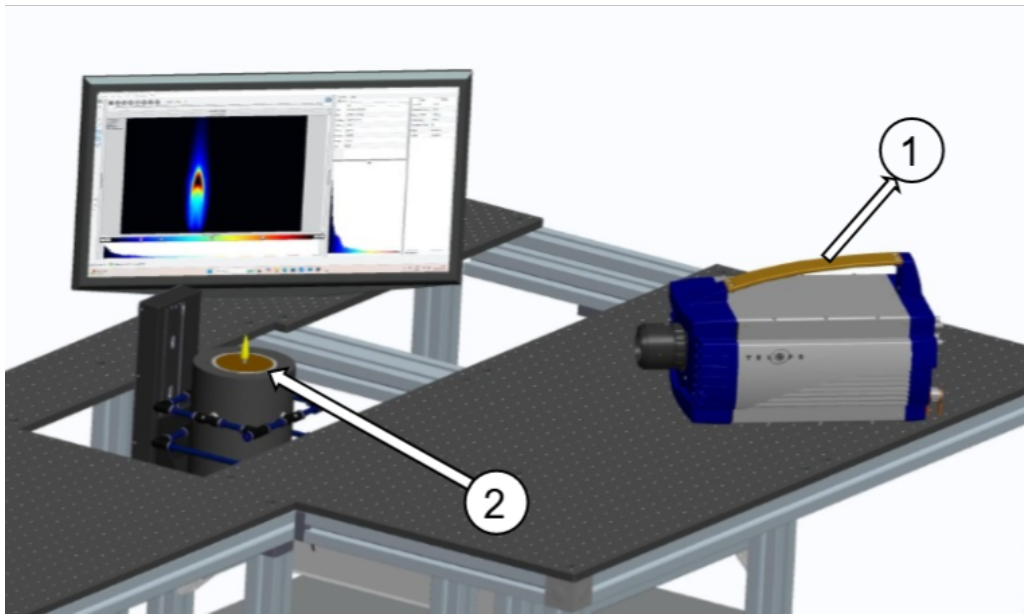


Figura 6.1: Representación esquemática del montaje experimental. (1) Cámara científica multispectral de onda media (MWIR) Telops MS-M1k. (2) Quemador tipo Yale generando una llama de difusión laminar de etileno/nitrógeno. El sistema se encuentra montado sobre una mesa óptica para garantizar la estabilidad y alineación precisa del eje óptico.

6.1.1. Quemador y sistema de suministro

El dispositivo experimental utilizado es el quemador coanular Yale (Yale Coflow Burner), diseñado para generar llamas de difusión laminares estacionarias con condiciones de borde controladas. La Figura 6.2 presenta un esquema en corte transversal de sus componentes internos.

El sistema opera bajo un esquema de coflujo concéntrico. El combustible es inyectado a través de un tubo central de acero inoxidable (Ítem 3) con un diámetro externo de 4.76 mm y un diámetro interno de 3.9 mm. Tal como se discute en la referencia seminal de McEnally et al. [19], la pared del tubo en la salida presenta

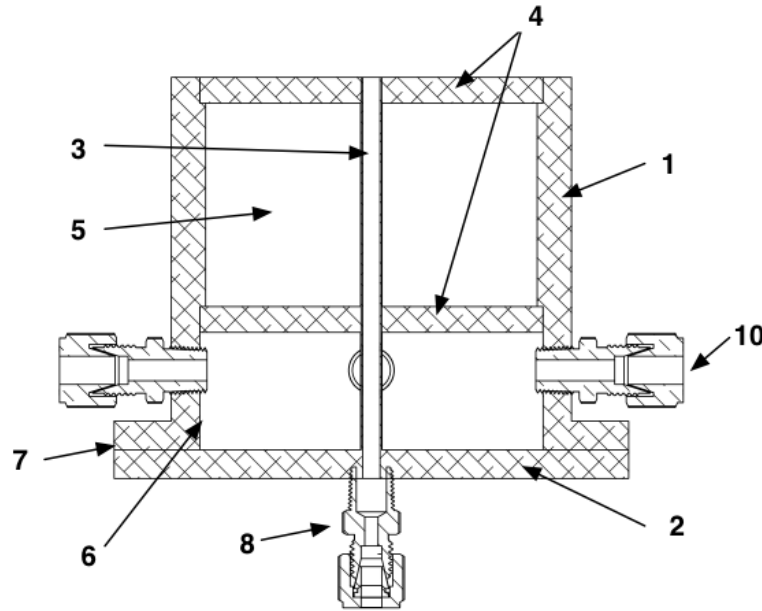


Figura 6.2: Esquema de corte transversal del quemador Yale. Componentes principales: (1) Carcasa de aluminio anodizado; (2) Placa base; (3) Tubo de combustible de acero inoxidable; (4) Estructuras de panal de abeja (honeycomb) para alineación de flujo; (5) Cámara (plenum) rellena con esferas de vidrio para homogeneización; (10) Puertos de entrada de aire. Adaptado de [6].

un perfil afilado con un espesor de solo 0.038 mm, característica geométrica esencial para anclar la llama y suprimir inestabilidades en la base.

El aire oxidante ingresa por los puertos laterales (Ítem 10) hacia una cámara (Ítem 5). Este volumen está relleno de esferas de vidrio de sosa-cal de 3 mm de diámetro, cuya función es romper las estructuras turbulentas de entrada y distribuir el flujo uniformemente. Finalmente, el aire atraviesa un honeycomb cerámico (Ítem 4) situado a 10 mm antes de la salida, el cual rectifica las líneas de corriente para entregar un perfil de velocidad plano a la zona de reacción.

La configuración mecánica descrita garantiza que las llamas producidas se mantengan en estado estacionario, libres de perturbaciones acústicas o fluctuaciones hidrodinámicas, validando así la comparación con simulaciones numéricas de estado estable.

Para este estudio, se seleccionaron dos condiciones de llama estandarizadas conocidas internacionalmente como "Target Flames" del International Sooting Flame (ISF) Workshop. Estas llamas, denominadas Yale 32 y Yale 80, fueron elegidas para evaluar la robustez de la metodología en dos regímenes de radiación contrastantes: una llama de carga de hollín moderada (Yale 32) y otra con alta producción de hollín (Yale 80).

El combustible consiste en una mezcla de etileno (C_2H_4) diluido con nitrógeno (N_2). El coflujo oxidante se mantuvo constante para ambos casos, utilizando aire seco filtrado. Los caudales máscicos fueron regulados mediante controladores digitales (Bronkhorst) con una precisión de fondo de escala del $\pm 0,5\%$. Los parámetros operacionales exactos utilizados en la campaña experimental se resumen en la Tabla 6.1.

La selección de estos caudales asegura que ambas llamas permanezcan en régimen laminar y estable, ancladas firmemente a la boca del quemador sin presentar desprendimiento ni inestabilidades hidrodinámicas.

Tabla 6.1: Resumen de diluciones de combustible y caudales volumétricos para las llamas experimentales.

Parámetro	Yale 32	Yale 80
Composición Etileno (%)	32	80
Composición Nitrógeno (%)	68	20
Caudal Etileno (L/min)	0.1242	0.3106
Caudal Nitrógeno (L/min)	0.1584	0.0466
Caudal Aire Coflujo (L/min)	91.3	91.3

6.2. Sistema de Adquisición y Caracterización Radiométrica

En esta sección se detallan las especificaciones técnicas del sistema de imagen infrarroja utilizado y la metodología de calibración implementada. El objetivo fundamental es describir la cadena de medición que permite transformar la señal digital del detector en mapas cuantitativos de radiancia espectral, asegurando la trazabilidad física de los datos experimentales. A continuación, la Figura 6.3 esquematiza el flujo de procesamiento de señal aplicado a cada imagen adquirida.

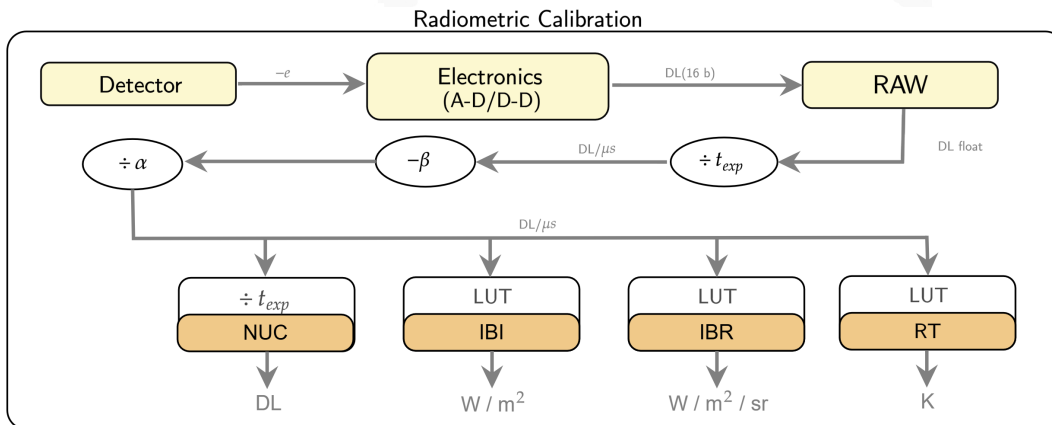


Figura 6.3: Diagrama de flujo del proceso de calibración radiométrica. El esquema ilustra la cadena de procesamiento desde la señal cruda del detector (RAW), pasando por la normalización temporal ($1/t_{exp}$) y la corrección de no-uniformidad (β, α), hasta la conversión final mediante tablas de búsqueda (LUT) en temperatura radiométrica (RT) o radiancia en banda (IBR).

6.2.1. Especificaciones de la cámara infrarroja

La captura de la firma térmica de la llama se realizó mediante una cámara multispectral Telops MS-M1k, operando en el infrarrojo medio (MWIR). El corazón del instrumento es un detector fotónico de Antimonio de Indio (InSb) con una matriz de plano focal (FPA) de 640×512 píxeles y un tamaño de píxel de $15 \mu\text{m}$, sensible en el rango espectral de 1.5 a $5.4 \mu\text{m}$.

Para maximizar la detectividad (D^*) y minimizar el ruido térmico, el sensor es enfriado criogénicamente. El sistema óptico empleó una lente de 50 mm ($f/2,5$) posicionada a 51 cm del eje del quemador, proporcionando una resolución espacial de 0.025 cm/píxel . La adquisición se configuró a una frecuencia de 10 Hz por canal, utilizando una rueda de filtros motorizada de rotación rápida detallada en la Tabla 6.2.

Tabla 6.2: Configuración de filtros espectrales utilizados en la cámara Telops.

ID	Rango (μm)	Especie Objetivo
F1	4.47 – 4.79	CO ₂ / CO
F2	4.23 – 4.37	CO ₂
F3	3.59 – 4.12	Hollín (Continuo)
F4	2.89 – 3.47	H ₂ O / Hollín / HC

6.2.2. Procesamiento de señal y calibración

La cámara Telops MS-M1k implementa una cadena de procesamiento de señal en tiempo real diseñada para transformar la respuesta cuántica del detector en magnitudes radiométricas calibradas. La Figura 6.3 esquematiza el flujo de operaciones que el software del instrumento aplica a cada píxel de la matriz FPA.

El proceso se estructura en tres etapas secuenciales: adquisición, corrección lineal y conversión radiométrica.

6.2.2.1. Adquisición y Normalización Temporal

En la primera etapa (bloques amarillos de la Fig. 6.3), los fotones incidentes generan pares electrón-hueco en el detector de InSb. Estos fotoelectrones son integrados y posteriormente digitalizados por la electrónica de lectura (A-D) en palabras de 16 bits, produciendo una imagen cruda (RAW). La magnitud de esta señal (S_{RAW}) es función lineal del flujo de fotones y del tiempo de integración configurado.

Dado que las bandas de gas (CO₂) y hollín presentan intensidades muy dispares, se utilizaron tiempos de exposición distintos para cada filtro. Para desacoplar la medición de esta configuración temporal, el sistema realiza una normalización, dividiendo la señal cruda por el tiempo de exposición (t_{exp}). Esta operación transforma la unidad de medida de cuentas totales.^a una tasa de flujo digital ($DL/\mu s$), permitiendo comparar directamente la respuesta del detector independientemente de la velocidad de obturación utilizada.

6.2.2.2. Corrección de No-Uniformidad (NUC)

Los detectores matriciales infrarrojos presentan variaciones inherentes de fabricación píxel a píxel. La señal normalizada ingresa a la etapa de corrección lineal para compensar estas heterogeneidades mediante una ecuación de dos puntos:

$$S_{corr} = \left(\frac{S_{RAW}}{t_{exp}} - \beta \right) \times \frac{1}{\alpha} \quad (6.1)$$

Los parámetros de esta ecuación tienen un significado físico estricto:

- β (Offset Map): Representa la señal generada en ausencia de luz externa. Incluye la corriente oscura (dark current) del detector y la radiación térmica emitida por la propia carcasa interna de la cámara. Se determina experimentalmente obturando la lente (referencia fría).
- $1/\alpha$ (Gain Map): Normaliza la eficiencia cuántica de cada píxel. Dado que no todos los píxeles convierten fotones a electrones con la misma eficiencia, este factor (obtenido frente a una referencia caliente).^aplana"la respuesta espacial del sensor, corrigiendo también efectos de viñeteo óptico.

El resultado (S_{corr}) es una señal lineal espacialmente uniforme y proporcional a la irradiancia incidente en el plano focal.

6.2.2.3. Conversión Radiométrica (LUT)

Finalmente, el flujo de datos se bifurca para generar las magnitudes físicas de salida. A diferencia de la etapa NUC que es lineal, la relación entre la señal digital y la energía radiativa es compleja y depende de la respuesta espectral del sistema. Por ello, se utilizan tablas de búsqueda (LUT) generadas mediante la calibración frente a cuerpos negros de laboratorio. Estas tablas actúan como la función de transferencia del sistema:

- **NUC (DL):** Se divide la señal corregida por t_{exp} para entregar una imagen digital limpia, útil para inspección visual de la calidad de señal.
- **RT (K):** Convierte la señal a Temperatura Radiométrica. Esta salida asume implícitamente que la fuente es un cuerpo negro ($\varepsilon = 1$).
- **IBR ($W/m^2/sr$):** Genera la Radiancia de Banda (In-Band Radiance). Esta es la variable seleccionada para esta investigación. La IBR representa la integral de la curva de Planck ponderada por la transmitancia del filtro específico. Al trabajar con IBR, se evita la asunción de emisividad unitaria inherente a la temperatura RT, permitiendo una validación directa y rigurosa contra la integral de la Ecuación de Transferencia Radiativa (RTE) modelada en el problema directo.

6.3. Simulación Numérica de Referencia (CoFlame)

Para generar los datos de referencia teóricos que permitirán validar la metodología óptica, se simuló las llamas Yale 32 y Yale 80 utilizando el código computacional CoFlame [54]. Este software está especializado en modelar llamas de difusión laminares, resolviendo de manera acoplada la física del flujo, la liberación de calor y la química detallada de la combustión. Para ello, utiliza un mecanismo químico extenso que permite predecir no solo las especies gaseosas principales, sino también los complejos procesos de formación y crecimiento de las partículas de hollín [55].

El espacio de simulación reproduce la geometría del quemador experimental en un dominio bidimensional axisimétrico (simétrico respecto al eje central). Este dominio abarca dimensiones físicas de 3.4 cm en dirección radial y 17 cm en altura, lo cual es suficiente para contener la totalidad de la llama visible y su pluma térmica. Para capturar con precisión los cambios de temperatura y composición, el espacio se dividió en una malla estructurada de 157×402 volúmenes de control, verificándose que esta resolución fuera suficiente para obtener resultados independientes de la grilla [54].

Como resultado final, la simulación entrega mapas detallados de las variables termodinámicas clave: la temperatura del gas (T), la fracción volumétrica de hollín (f_v) y las concentraciones molares de las especies radiantes (X_{CO_2} , X_{H_2O}). Estos campos escalares, que representan la realidad física teórica de la llama, fueron posteriormente interpolados a la grilla cartesiana de la cámara para alimentar el modelo óptico directo y generar las imágenes sintéticas necesarias para la validación.

6.4. Implementación del Modelo Radiativo Directo (Forward Problem)

La formulación del problema directo (Forward problem) establece el marco computacional para calcular la señal radiativa teórica a partir de los datos conocidos de temperatura y concentración (T , P , X_i , f_v). Este procedimiento se define como el cálculo determinista de la radiancia espectral integrada que incide sobre el detector, permitiendo traducir las variables de estado de la simulación fluidodinámica (CoFlame) al dominio de la señal óptica.

El objetivo fundamental de este módulo es generar proyecciones sintéticas dimensionalmente equivalentes a las mediciones experimentales. Esta metodología permite evaluar la validez de los modelos de transferencia

radiativa y las propiedades ópticas adoptadas, habilitando una comparación directa entre la simulación numérica y la respuesta instrumental en términos de radiancia en banda ($W/m^2/sr$).

El modelo se fundamenta en la resolución numérica de la Ecuación de Transferencia Radiativa (RTE) a lo largo de la línea de visión (LOS). La implementación computacional se resume en el esquema de la Figura 6.4.

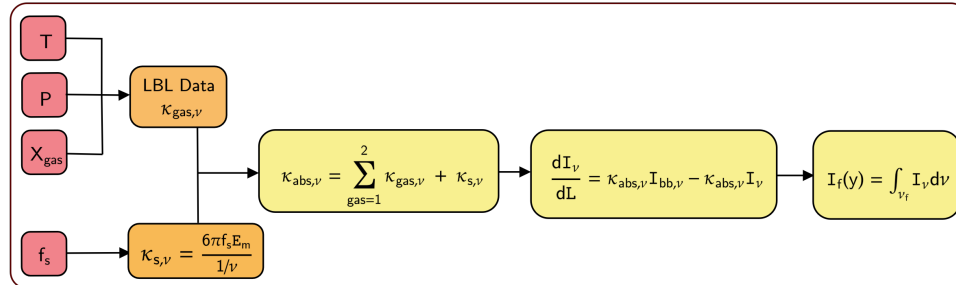


Figura 6.4: Esquema del algoritmo del Modelo Directo. Las variables termodinámicas de entrada (T, P, X_{gas}) alimentan el cálculo espectral (HAPI), el cual se combina con la absorción del continuo de hollín para obtener el coeficiente de absorción total $\kappa_{abs,\nu}$. Posteriormente, se integra la RTE diferencial para obtener la radiancia espectral emergente.

6.4.1. Generación de base de datos espectral

La evaluación rigurosa de la radiancia requiere una modelación detallada del coeficiente de absorción espectral de los gases. Si bien el método Línea por Línea (LBL) es considerado la referencia de máxima exactitud, su aplicación directa implica un costo computacional extremadamente alto, ya que requiere resolver la contribución de millones de líneas de transición individuales para cada volumen de control en el dominio.

Si consideramos que el problema inverso es un proceso iterativo, donde el modelo directo debe ejecutarse cientos o miles de veces hasta encontrar la solución óptima, realizar este cálculo resulta inviable. Un solo ciclo de optimización podría tardar horas o días en completarse. Para superar esta barrera y lograr tiempos de respuesta razonables, en esta tesis se implementó la generación de una base de datos de propiedades radiativas, adoptando el enfoque metodológico validado por Raman, Consalvi et al. [56].

El procedimiento consiste en generar una base de datos espectral propia ("offline") utilizando la interfaz HAPI. Para la reconstrucción de las transiciones, se seleccionó el perfil de Voigt como función de forma de línea. Esta elección metodológica es imperativa para garantizar la precisión en el régimen de ensanchamiento mixto característico de la llama, donde el uso de perfiles simplificados introduciría errores significativos en el cálculo de la absortividad integrada.

En consecuencia, para resolver digitalmente la morfología completa de estos perfiles sin sufrir pérdidas por sub-muestreo, fue necesario definir una malla espectral de alta densidad. Se estableció un paso de cálculo de $\Delta\nu = 0,01 \text{ cm}^{-1}$, resolución que asegura tener suficientes puntos de evaluación tanto en el núcleo estrecho de la línea como en sus alas, permitiendo una integración rigurosa del espectro molecular.

Esta resolución impone una carga computacional significativa: para cubrir el ancho de banda típico de un filtro de la cámara (aprox. 0.3 a $0.6 \mu\text{m}$ en el infrarrojo medio), el algoritmo debe integrar entre 20,000 y 40,000 puntos espectrales individuales, sumando en cada uno las contribuciones de las transiciones moleculares listadas en HITEMP.

Se calcularon los coeficientes de absorción monocromáticos para las especies gaseosas ($\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{CO}$) variando sistemáticamente las condiciones termodinámicas. La discretización del espacio de estados se detalla en la Tabla 6.3. Se definieron mallas finas para la temperatura (pasos de 100 K) y una distribución específica para las fracciones molares, asegurando mayor densidad de datos en las zonas de bajas concentraciones.

Tabla 6.3: Espacio de estados termodinámicos para la base de datos LBL pre-calculada ($\Delta\nu = 0,01 \text{ cm}^{-1}$).

Parámetro	Rango	Resolución / Muestreo
Temperatura	300 K- 3000 K	Cada 100 K
Presión Total	1 atm	Fija
Fracción Molar (X_i)	$10^{-5} - 9 \cdot 10^{-5}$	Cada 10^{-5}
	$10^{-4} - 10^{-3}$	Cada 10^{-4}
	$10^{-3} - 10^{-2}$	Cada 10^{-3}
	0,01 – 0,20	Pasos variables

Una vez construida esta base de datos, el cálculo del Problema Directo durante la simulación de la llama se reduce a una operación de interpolación multilineal eficiente. De esta manera, para cualquier valor de temperatura y concentración en la malla, el algoritmo simplemente extrae el dato desde la tabla generada. Esto acelera drásticamente el tiempo de cómputo, permitiendo ejecutar las miles de iteraciones necesarias para resolver el problema inverso.

6.4.2. Modelado del continuo de hollín

En contraste con la fase gaseosa, cuya firma espectral se calcula mediante bases de datos pre-tabuladas (LBL), la radiación térmica emitida por el hollín se modela mediante una formulación analítica directa. Tal como se ilustra en la rama inferior del esquema de la Figura 6.4, el modelo asume que las partículas de hollín se encuentran en el régimen de Rayleigh.

Esta aproximación es físicamente rigurosa para las llamas de etileno estudiadas, ya que el diámetro promedio de las partículas primarias ($d_p \approx 10 - 50\text{nm}$) es despreciable frente a las longitudes de onda del infrarrojo medio ($\lambda > 1500\text{nm}$). Bajo esta hipótesis, el coeficiente de absorción espectral del hollín ($\kappa_{s,\nu}$) se determina algebraicamente en función de la fracción volumétrica local (f_s) y el número de onda (ν):

$$\kappa_{s,\nu}(f_s) = 6\pi\nu E(m)f_s \quad (6.2)$$

Nótese que en la implementación computacional (ver Fig. 6.4), esta relación se evalúa dinámicamente utilizando la función de absorción del índice de refracción $E(m)$. A diferencia del cálculo LBL que es intensivo en memoria, esta operación es computacionalmente eficiente y se ejecuta en tiempo real dentro del bucle de simulación.

El parámetro crítico en esta formulación es la función $E(m) = \text{Im}((m^2 - 1)/(m^2 + 2))$. La selección de este parámetro es fuente habitual de incertidumbre en la literatura, dado que el índice de refracción complejo m varía significativamente con la longitud de onda. El uso de constantes simplificadas (común en modelos de cuerpo gris) introduciría errores sistemáticos al comparar bandas espectrales distantes.

Para garantizar la consistencia espectral del modelo, en este trabajo se implementaron las correlaciones de Chang y Charalampopoulos [20]. Estas funciones describen explícitamente la dispersión óptica del hollín de combustión en el infrarrojo, permitiendo que el término $E(m)$ se ajuste automáticamente para cada filtro de la cámara, mejorando así la fidelidad física de la imagen sintética generada.

6.4.3. Interpolación espacial y superposición de coeficientes

Para resolver el problema radiativo, es necesario traducir los campos termodinámicos generados por la simulación (CoFlame) al dominio óptico de la cámara. Dado que las llamas Yale 32 y Yale 80 fueron simuladas en un dominio 2D axisimétrico (r, z), el primer paso consiste en realizar una interpolación espacial de las variables de estado (T, P, X_i, f_i) sobre los puntos discretos que conforman cada línea de visión (LOS) en el sistema de coordenadas cartesiano 3D del instrumento.

Una vez definidas las propiedades termodinámicas locales en cada nodo del camino óptico, el algoritmo procede a determinar el coeficiente de absorción total. Tal como se esquematiza en el bloque central de la Figura 6.4, la opacidad del medio es aditiva. Para cada punto espectral ν dentro del ancho de banda del filtro seleccionado, el código realiza dos operaciones simultáneas:

1. **Contribución de los gases:** Utiliza la temperatura local T y las fracciones molares X_i para interpolar el coeficiente de absorción $\kappa_{gas,\nu}$ directamente desde la base de datos LBL pre-calculada.
2. **Contribución del hollín:** Utiliza la fracción volumétrica f_ν para calcular $\kappa_{s,\nu}$ mediante la aproximación de Rayleigh previamente descrita.

El coeficiente de extinción total $\kappa_{abs,\nu}$ se obtiene mediante la superposición lineal de estas contribuciones individuales:

$$\kappa_{abs,\nu}(s) = \sum_{k=gas} \kappa_{k,\nu}(T, X_k) + \kappa_{s,\nu}(f_\nu) \quad (6.3)$$

Este paso es fundamental, ya que captura no solo la absorción individual de cada especie, sino también los efectos de solapamiento espectral entre las bandas de emisión de los gases (CO_2 , H_2O , CO) y el continuo de hollín.

6.4.4. Solución de la RTE y síntesis de la imagen

La etapa final del modelo directo consiste en la generación de la proyección radiométrica 2D. Computacionalmente, esto se implementa mediante una estrategia de trazado de rayos simplificado, donde se realiza un barrido iterativo sobre la malla espacial que define el plano focal de la cámara.

El algoritmo ejecuta un doble ciclo anidado, recorriendo primero el eje vertical y posteriormente el eje horizontal de la imagen virtual. Para cada par de coordenadas de píxel (x, y) en el detector, se define una Línea de Visión perpendicular que atraviesa el volumen de control de la llama. La resolución de la Ecuación de Transferencia Radiativa se efectúa de manera independiente para cada uno de estos rayos.

Despreciando el scattering, la variación de la intensidad espectral monocromática I_ν a lo largo de la trayectoria espacial L se rige por la competencia entre la emisión térmica local y la autoabsorción del medio:

$$\frac{dI_\nu}{dL} = \kappa_{abs,\nu}(I_{bb,\nu}(T) - I_\nu) \quad (6.4)$$

En esta expresión, $I_{bb,\nu}(T)$ representa la intensidad de cuerpo negro. Este valor se calcula localmente para cada celda de la malla en función de su temperatura T y para cada número de onda ν específico, rigiéndose por la Ley de Planck:

$$I_{bb,\nu}(T) = \frac{2hc^2\nu^3}{e^{\frac{hc\nu}{k_B T}} - 1} \quad (6.5)$$

donde h es la constante de Planck, c la velocidad de la luz en el vacío y k_B la constante de Boltzmann.

Para resolver la ecuación diferencial de transporte (Ec. 6.4) computacionalmente, el dominio continuo L se discretiza en N segmentos finitos de longitud ΔL . El algoritmo integra numéricamente avanzando desde el fondo de la llama ($L = 0$, con condición de borde $I_{\nu,0} = 0$, asumiendo fondo frío) hacia el lente de la cámara. En cada paso k de la trayectoria, la intensidad saliente se calcula discretizando la solución formal:

$$I_{\nu,k+1} = I_{\nu,k} \cdot e^{-\kappa_{abs,\nu}\Delta L} + I_{bb,\nu}(T) \cdot (1 - e^{-\kappa_{abs,\nu}\Delta L}) \quad (6.6)$$

Este cálculo se repite para cada frecuencia ν dentro del ancho de banda del filtro, acumulando la intensidad espectral emergente en la frontera del dominio.

Finalmente, el modelo debe replicar la respuesta del sensor. La cámara no registra un espectro continuo, sino una señal de energía integrada. Por consiguiente, la radiancia en banda (I_f) para el píxel (x, y) se obtiene convolucionando la intensidad espectral final con la curva de transmitancia del filtro experimental $\tau_f(\nu)$, tal como se indica en el bloque de salida del diagrama general:

$$I_f(x, y) = \int_{\nu_{min}}^{\nu_{max}} I_\nu(\nu) \cdot \tau_f(\nu) d\nu \quad (6.7)$$

Al completar el barrido sobre todos los píxeles de la malla, se obtiene una matriz 2D de valores de radiancia ($W/m^2/sr$). Este mapa de radiancia constituye la salida fundamental del modelo directo y establece el punto de comparación cuantitativo con las imágenes experimentales, permitiendo calcular el error residual que guiará el proceso de inversión.

6.4.5. Validación numérica y análisis de sensibilidad

Antes de su implementación en el esquema de inversión, el Modelo Directo fue sometido a pruebas de verificación para garantizar su robustez numérica y consistencia física.

En primera instancia, se evaluó la exactitud de la estrategia de interpolación frente al cálculo directo línea por línea. Se seleccionaron perfiles aleatorios de temperatura y concentración extraídos de la simulación CoFlame y se calculó la radiancia espectral utilizando ambos métodos. El error relativo promedio introducido por el uso de la base de datos pre-calculada se mantuvo por debajo del 0.5 %, confirmando que la discretización adoptada en la Tabla 6.3 es suficiente para capturar la física del problema sin introducir sesgos numéricos significativos.

Adicionalmente, se realizó un análisis de sensibilidad para cuantificar la respuesta del modelo ante perturbaciones en las variables de entrada (T, X_i, f_ν). Este paso es crítico para determinar las propiedades de la llama a partir de la señal integrada. Se define el coeficiente de sensibilidad relativa S_ϕ para una variable ϕ como:

$$S_\phi = \frac{\phi}{I_f} \frac{\partial I_f}{\partial \phi} \quad (6.8)$$

La evaluación de estos coeficientes permite jerarquizar las variables de control según su impacto en la radiancia integrada. De este modo, el análisis proporciona el criterio matemático para asegurar la convergencia del algoritmo inverso, permitiendo distinguir qué parámetros son dominantes en la señal y cuáles requieren estrategias de regularización adicionales debido a su menor influencia en la respuesta del sensor.

7 | Resultados

Este capítulo presenta la validación del modelo de transferencia radiativa directa (Forward Model) desarrollado. La metodología consiste en utilizar campos simulados (temperatura, concentración de especies y hollín) como datos de entrada para el modelo espectral LBL, para transformar estos campos bidimensionales axisimétricos en imágenes proyectadas comparables con la cámara, se realiza una integración por línea de visión (LOS). Para cada píxel del sensor virtual, se resuelve numéricamente la ecuación de transferencia radiativa (RTE) a lo largo de el camino óptico correspondiente que atraviesa el volumen de la llama. Este enfoque incorpora explícitamente el fenómeno de autoabsorción, modelando cómo la radiación emitida por el núcleo caliente es atenuada por las capas externas más frías antes de llegar al detector. Dada la alta carga de hollín (especialmente en la llama Yale 80) y las fuertes bandas de absorción del CO_2 , este efecto de re-absorción es altamente significativo y su inclusión es crítica para reproducir fielmente las magnitudes radiométricas experimentales. A continuación se analizan dos llamas de difusión de etileno: Yale 32 (baja carga de hollín) y Yale 80 (alta carga de hollín).

7.1. Condiciones de entrada: Campos simulados en CoFlame

Las propiedades escalares fundamentales de las llamas (temperatura, concentración de especies y fracción volumétrica de hollín) fueron obtenidas mediante simulaciones numéricas utilizando el código CoFlame. Estos campos termofísicos constituyen los datos de entrada sobre el cual se realiza la integración de la ecuación de transferencia radiativa (RTE).

La Figura 7.1 presenta los mapas bidimensionales resultantes para los dos casos de estudio seleccionados:

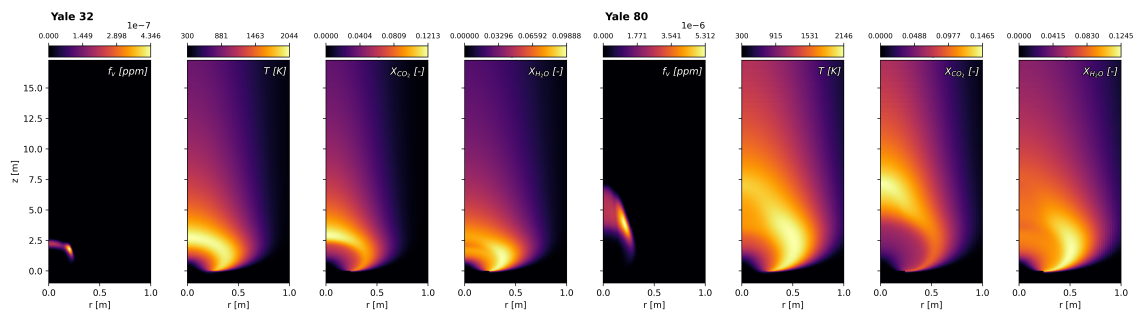


Figura 7.1: Campos simulados utilizados como input para el modelo radiativo: fracción volumétrica de hollín (f_v), temperatura (T) y fracciones molares de CO_2 y H_2O . Izquierda: Llama Yale 32 (baja formación de hollín). Derecha: Llama Yale 80 (alta formación de hollín).

El análisis comparativo de estos campos revela diferencias críticas que justifican la selección de estas llamas. En primer lugar, existe un contraste de un orden de magnitud en la carga de hollín: la llama Yale 80 presenta una fracción volumétrica máxima de $f_v \approx 5$ ppm, superando a la llama Yale 32 que apenas alcanza

los 0,4 ppm. Esta disparidad permite evaluar el modelo en dos escenarios ópticos opuestos, abarcando desde un régimen transparente dominado por bandas moleculares hasta uno con fuerte emisión continua de cuerpo gris. A pesar de esta diferencia en el particulado, ambas llamas alcanzan temperaturas máximas similares en el rango de 2000 – 2100 K, lo cual es fundamental para el estudio pues permite atribuir las diferencias de señal observadas casi exclusivamente al aumento del hollín. Finalmente, debido a la mayor dilución del combustible con nitrógeno en el caso Yale 32, se observa que esta llama es notablemente más corta y presenta fracciones molares de CO_2 y H_2O inferiores en comparación con Yale 80.

7.2. Comparación de imágenes sintéticas y experimentales

A continuación, se compara la radiancia integrada en banda (I) calculada por el modelo LBL con las imágenes reales capturadas por la cámara multispectral.

7.2.1. Llama Yale 32

La Figura 7.2 presenta la comparación espacial y los perfiles radiales/axiales para la llama Yale 32.

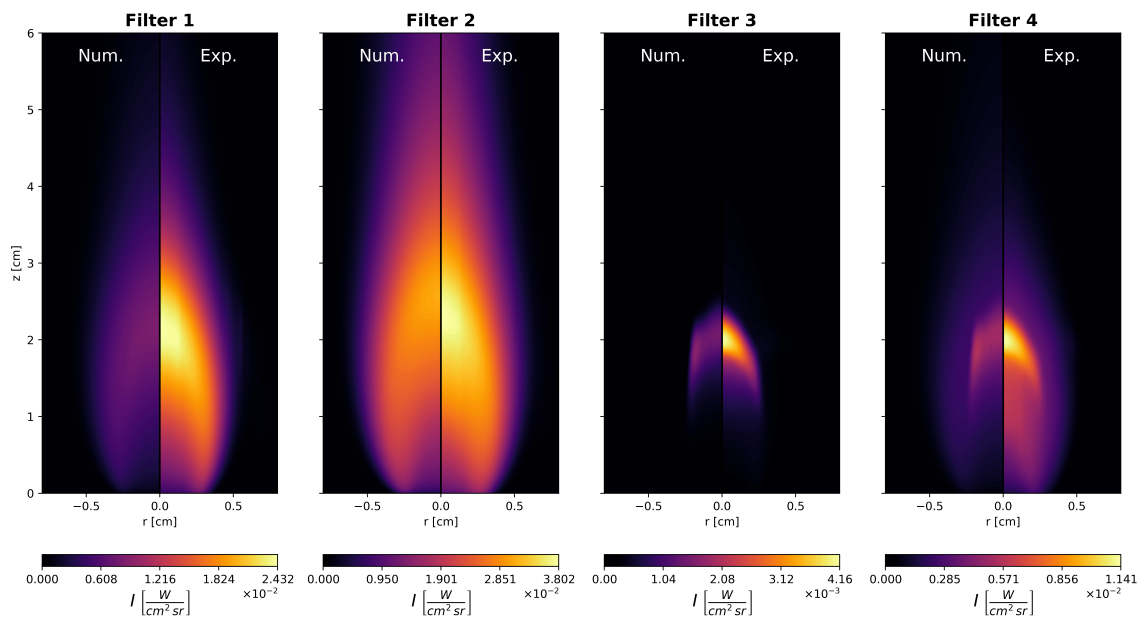


Figura 7.2: Comparación para Yale 32: Imágenes de intensidad de banda simuladas (izq.) vs. experimentales (der.). La radiancia se expresa en $\text{W} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{sr}^{-1}$.

El análisis espectral de los canales permite observar que el modelo reproduce la morfología general de la llama, replicando tanto su altura como su estructura espacial en los cuatro filtros, lo que respalda la consistencia de los campos de flujo y temperatura simulados. Específicamente, el Filtro 2 (centrado en $4.3 \mu\text{m}$) aísla la emisión del gas caliente y muestra una alta concordancia en la forma del perfil radial, validando así la distribución de CO_2 y temperatura, a pesar de que se distingue una leve subestimación en la intensidad máxima.

Por otro lado, la intensidad registrada en los Filtros 3 y 4 es notablemente inferior a la de los otros canales, un comportamiento que es consistente con la escasa formación de hollín ($f_v < 0,4 \text{ ppm}$) predicha para esta llama. En particular, se observa que el Filtro 4 captura la contribución combinada proveniente de las parte exterior de la emisión del agua (H_2O) junto con la señal del hollín que apenas se está formando. Si

bien la simulación tiende a subestimar la intensidad, la morfología de la llama se replica correctamente. Esta diferencia cuantitativa se atribuye a la incertidumbre de la medición experimental.

7.2.2. Llama Yale 80

Para el caso de la llama Yale 80, caracterizada por una alta carga de particulado, los resultados de la comparación espectral se presentan en la Figura 7.3.

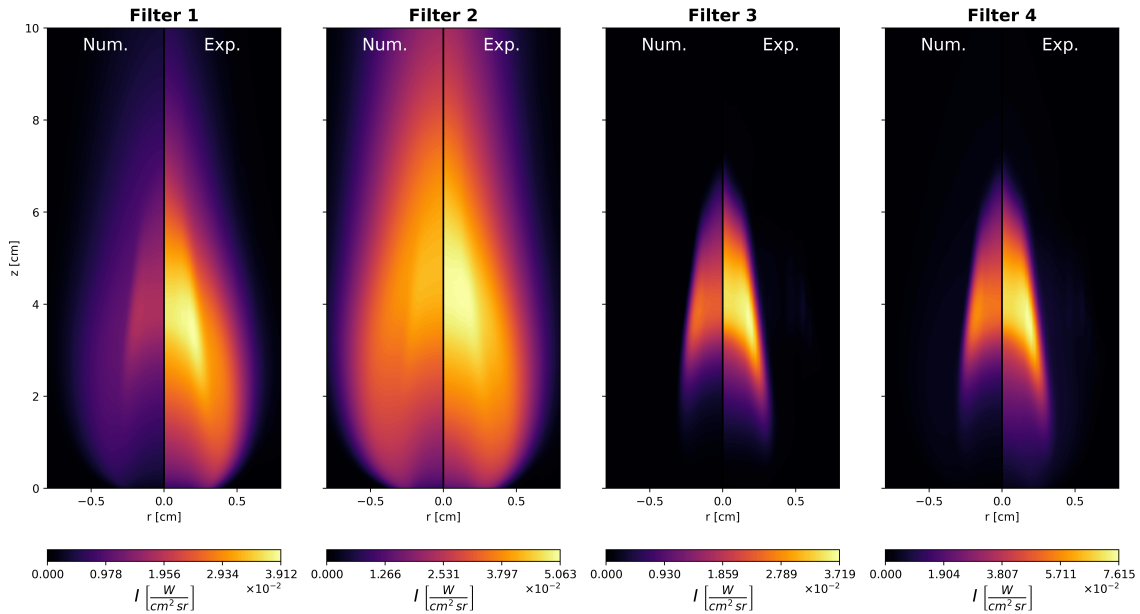


Figura 7.3: Comparación para Yale 80: Imágenes de intensidad de banda simuladas (izq.) vs. experimentales (der.). La radiancia se expresa en $W \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}$.

A diferencia del caso anterior, aquí la radiación continua del hollín domina el espectro, elevando considerablemente la intensidad en todos los canales. La simulación logra reproducir la distribución espacial observada experimentalmente, coincidiendo en la ubicación de los máximos de radiancia y capturando la estructura característica de la zona de hollín, visible especialmente en los filtros de mayor longitud de onda.

Un hallazgo de este análisis es el comportamiento del Filtro 2. A pesar de la fuerte presencia de hollín en la llama, la señal en este canal sigue estando dominada por la emisión molecular del CO_2 . Esta selectividad, capturada correctamente por el modelo sintético, es fundamental pues sugiere que dicho filtro mantiene su utilidad para restringir la temperatura del gas incluso en escenarios con alta carga de hollín. Por el contrario, los Filtros 3 y 4 exhiben un aumento drástico de intensidad respecto al caso Yale 32, confirmando su alta sensibilidad a la fracción volumétrica de hollín (f_v). Si bien existen diferencias en los valores de intensidad —atribuibles a incertidumbres en la cantidad de hollín (f_v) predicha—, la simulación replica correctamente la estructura de la llama. Esta concordancia espacial valida el uso del modelo radiativo en escenarios con alta carga de partículas.

7.3. Análisis de perfiles radiales y axiales

Para cuantificar las discrepancias observadas en los mapas 2D, se extrajeron perfiles de intensidad a lo largo de la línea central (axial) y cortes transversales (radiales).

7.3.1. Caso Yale 32

La Figura 7.4 detalla la comparación para la llama de baja carga de hollín.

7.3.1.1. Análisis en el punto de máxima fracción de hollín ($f_{v,max}$)

Los perfiles se evaluaron en las coordenadas específicas donde la simulación predice la máxima concentración de hollín. Para la llama Yale 32, este máximo ($f_{v,max}$) se localiza a una altura axial de $z = 1,80$ cm y en una posición radial de $r = 0,20$ cm.

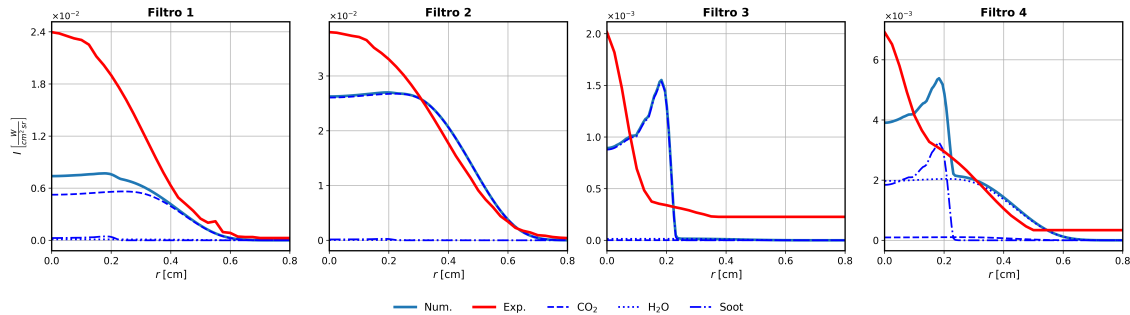


Figura 7.4: Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima formación de hollín ($z \approx 1,80$ cm). Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2 , H_2O y hollín).

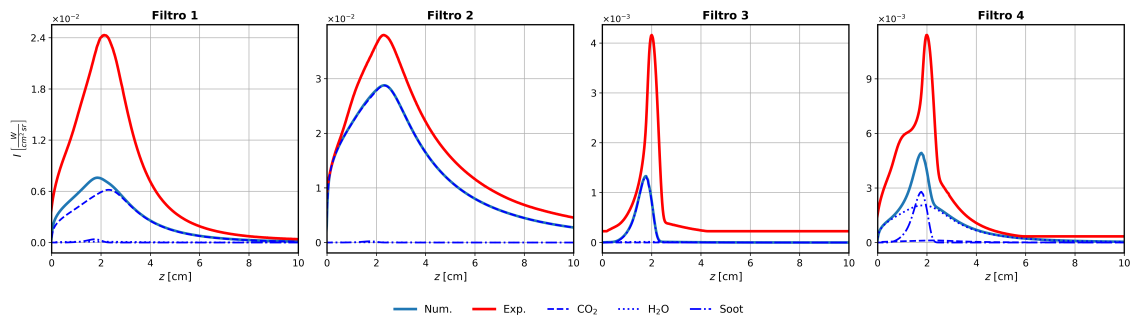


Figura 7.5: Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 32. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2 , H_2O y hollín).

Si bien existen diferencias en los valores de intensidad, estas pueden atribuirse a una combinación de factores, tales como condiciones experimentales de medición no ideales, incertidumbres en la carga de hollín predicha o la omisión de especies minoritarias en el modelo radiativo que podrían aportar a la señal global. A pesar de ello, la simulación replica correctamente la estructura de la llama, validando su uso en escenarios con alta carga de partículas.

7.3.1.2. Análisis en el punto de máxima concentración de CO_2 ($X_{\text{CO}_2,max}$)

De manera análoga, se evaluó el desempeño del modelo donde la simulación predice la máxima concentración de productos de combustión gaseosos. Para la llama Yale 32, la fracción molar máxima de CO_2 ($X_{\text{CO}_2,max}$) se localiza sobre la línea central ($r = 0$ cm) a una altura de $z = 2,90$ cm.

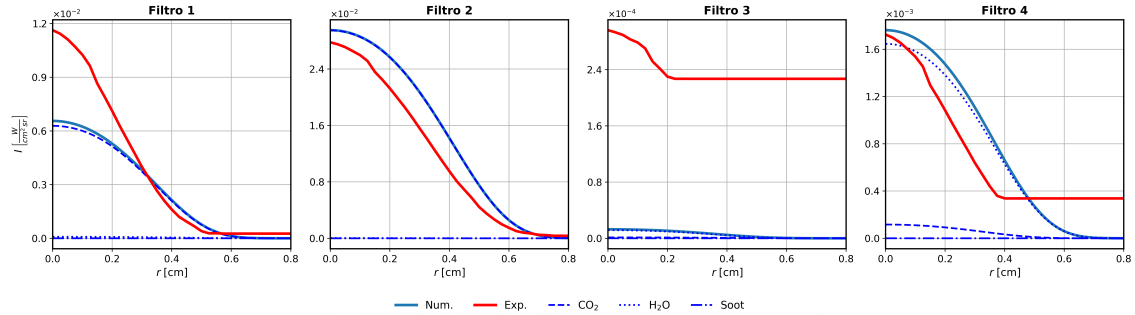


Figura 7.6: Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima concentración de CO_2 ($z \approx 2,90$ cm). Línea azul continua: Simulación. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas indican la contribución por especies.

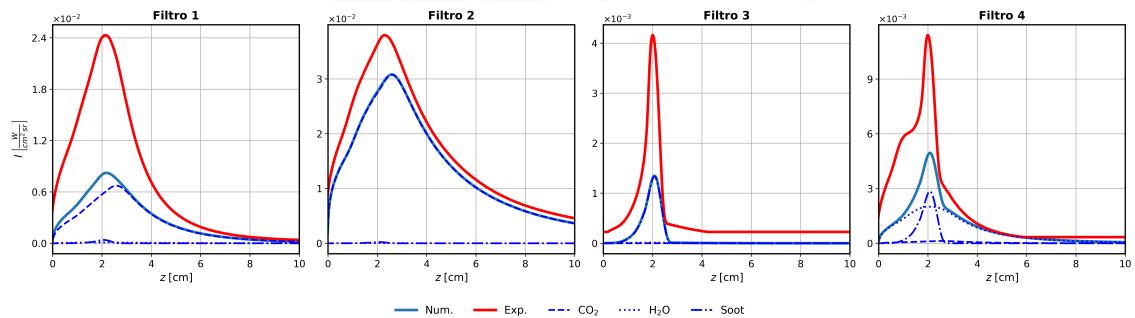


Figura 7.7: Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 32. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2 , H_2O y hollín).

Al analizar esta altura ($z \approx 2,90$ cm), la estructura de la llama cambia respecto a las zonas inferiores. A diferencia de la base donde la llama tiene forma de anillo, a esta altura los gases de combustión ya se han mezclado y concentrado en el eje central.

El perfil del Filtro 2 confirma esto mostrando un único peak de intensidad máximo en el centro ($r = 0$), con una forma de campana que la simulación logra reproducir con precisión. Esta coincidencia valida que el modelo CoFlame predice correctamente que el CO_2 y la temperatura máxima se encuentran ahora en el núcleo de la llama.

Por otro lado, en los Filtros 3 y 4 (sensibles al hollín), la simulación muestra una señal prácticamente nula (línea azul plana en cero), lo cual es físicamente correcto para esta llama. Aunque los datos experimentales muestran un nivel de fondo constante (offset) en estos filtros, la ausencia de picos o estructuras definidas confirma que no hay formación significativa de hollín en esta zona, validando la predicción del modelo.

7.3.2. Caso Yale 80

La Figura 7.8 y la Figura 7.9 presentan la evaluación cuantitativa para la llama Yale 80 de mayor contribución de hollín.

7.3.2.1. Análisis en el punto de máxima fracción de hollín ($f_{v,max}$)

Los perfiles se evaluaron en las coordenadas específicas donde la simulación predice la máxima concentración de particulado. Para la llama Yale 80, este máximo ($f_{v,max}$) se localiza a una altura axial de

$z \approx 3,88$ cm y en una posición radial de $r \approx 0,21$ cm.

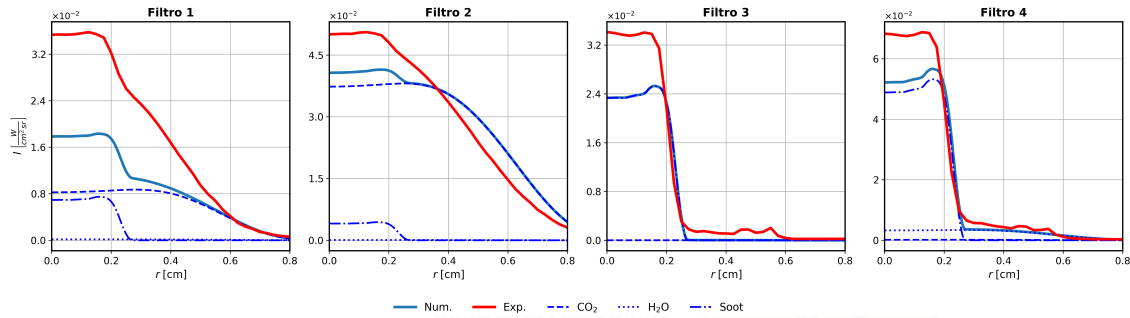


Figura 7.8: Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima formación de hollín ($z \approx 3,88$ cm) para Yale 80. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas detallan la contribución individual de las especies (CO_2 , H_2O y hollín).

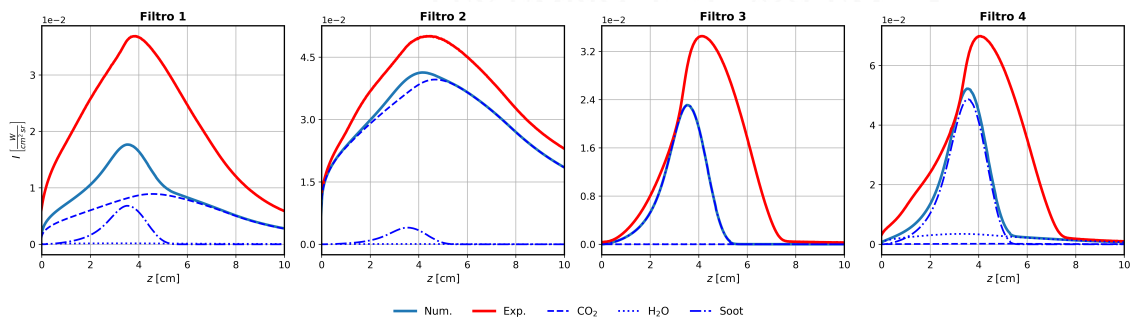


Figura 7.9: Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 80. Línea azul continua: Simulación total. Línea roja: Experimento.

Los resultados obtenidos en los filtros 1 y 2, se observan una predominancia principalmente por la emisión del CO_2 . En el filtro 2, se observa una concordancia en la tendencia entre la simulación y los resultados experimentales, confirmando que la señal en esta banda proviene mayoritariamente de dicho gas. No obstante, se registra una discrepancia en el decaimiento radial hacia la periferia ($r > 0,4$ cm), donde la simulación tiende a sobreestimar la radiancia. Un comportamiento similar se aprecia en el Filtro 1, donde los perfiles muestran una coincidencia satisfactoria en la ubicación de los máximos, replicando con éxito la estructura de la pluma térmica.

Posteriormente, al examinar los filtros 3 y 4, se confirma que la señal en el núcleo de la llama está dominada casi exclusivamente por la radiación del hollín, la cual supera en más de un orden de magnitud a la contribución molecular del H_2O . Los perfiles simulados exhiben una clara morfología anular con máximos en $r \approx 0,2$ cm, coincidiendo con precisión espacial con los datos experimentales. Esta concordancia geométrica valida la capacidad del modelo para predecir la estructura principal del anillo de hollín. Sin embargo, un aspecto relevante surge al analizar la zona externa de la llama ($r > 0,4$ cm). En los datos experimentales de ambos filtros, se observan máximos locales que no son capturados por el modelo numérico. En esta región periférica, donde la señal del hollín es débil, la presencia de otras especies se vuelve detectable. En el Filtro 4, este aporte podría atribuirse a la emisión de H_2O . Para el Filtro 3, la especie responsable de estos picos experimentales es menos evidente; no obstante, dada la ubicación espectral, se considera que podría tratarse de la contribución del CO u otros productos de la combustión no contabilizados en el peso radiativo de la simulación en esa zona.

7.3.2.2. Análisis en el punto de máxima concentración de CO_2 ($X_{CO_2,max}$)

De manera análoga, se evaluó el desempeño del modelo en las coordenadas donde la simulación predice la máxima concentración de productos de combustión gaseosos. Para la llama Yale 80, este pico de fracción molar de CO_2 ($X_{CO_2,max}$) se localiza sobre la línea central ($r = 0$) a una altura de $z \approx 7,14$ cm.

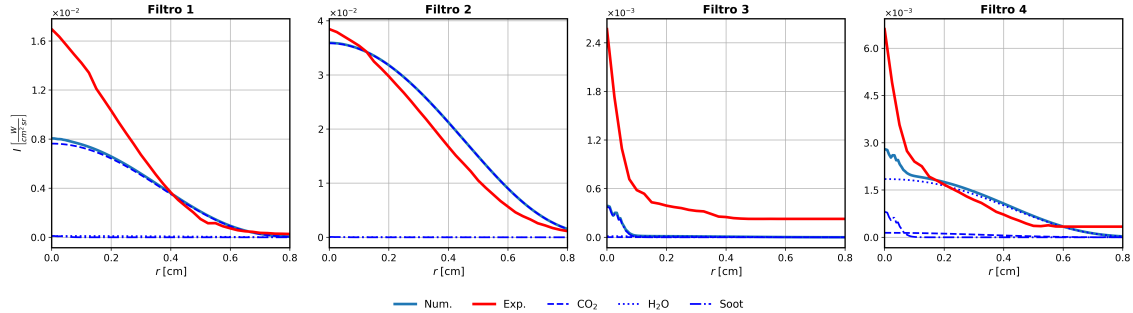


Figura 7.10: Perfiles radiales de radiancia espectral evaluados a la altura de máxima concentración de CO_2 ($z \approx 7,14$ cm). Línea azul continua: Simulación. Línea roja: Experimento. Las líneas azules discontinuas indican la contribución por especies.

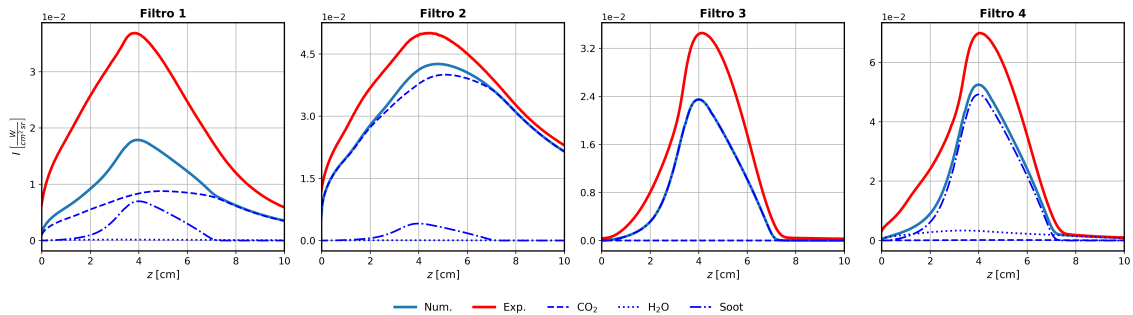


Figura 7.11: Perfiles axiales de radiancia a lo largo de la línea central ($r = 0$) para la llama Yale 80, destacando la evolución de la columna de gases calientes.

En los filtros 1 y 2, se confirma la fuerte influencia del CO_2 , comportamiento consistente con lo observado previamente para la llama Yale 32. No obstante, destaca una discrepancia significativa en el filtro 1, donde la radiancia experimental supera en casi el doble a los resultados numéricos. Una de las hipótesis principales para esta subestimación es la omisión de especies radiativamente activas en el modelo que presentan una emisión significativa en este rango, tales como el monóxido de carbono (CO). Asimismo, el desglose por especies indica que, aunque el CO_2 es predominante, el aporte del H_2O es más notorio en este canal que en el resto de los filtros analizados.

Por otro lado, el filtro 2 indica una mayor concordancia en la morfología y magnitud de ambos perfiles, a pesar de que la simulación presenta una ligera sobreestimación de la radiancia. Esta mayor estabilidad en el ajuste se debe a que la ventana coincide con el pico de absorción fundamental del CO_2 , lo que genera un régimen de mayor opacidad que reduce la sensibilidad del filtro ante incertidumbres en la concentración de especies secundarias. De esta forma, el Filtro 2 actúa como una validación robusta de la estructura térmica de la llama, mientras que el Filtro 1 actúa como un indicador más sensible de la composición química y la presencia de especies no contabilizadas.

En cuanto a los filtros 3 y 4, los valores calculados por la simulación resultan considerablemente bajos en comparación con los datos experimentales. En el filtro 3, la señal numérica es impulsada por una contribución combinada de hollín y vapor de agua, mientras que en el filtro 4 la predominancia del hollín es

casi absoluta. La diferencia en magnitud indica que, en estas llamas de baja intensidad (Yale 32), la medición experimental captura un nivel de ruido ambiental que no es considerado en el modelo numérico. Por lo tanto, cuando la señal útil de la llama es reducida en estas longitudes de onda, el ruido del sistema domina la comparación, impidiendo que los perfiles experimentales converjan al nivel de intensidad predicho por la simulación.

Finalmente, al extender el análisis hacia los perfiles axiales, se observa una tendencia morfológica coherente a lo largo de los cuatro filtros, lo que confirma una estructura esta bien definida en todo el espectro infrarrojo. Se ratifica que el H₂O mantiene una participación transversal en todas las ventanas analizadas, actuando como un aporte secundario al CO₂, en los filtros de hollín su presencia se vuelve fundamental para definir la señal en las regiones de post-reacción donde la carga de particulado ha disminuido por procesos de oxidación.

7.4. Análisis detallado de la contribución por especies

Una vez validada la precisión espacial del modelo, es fundamental descomponer espectralmente la señal para comprender que especies dominan en cada banda de la cámara. Este análisis permite determinar la "pureza" de cada filtro y evaluar posibles interferencias cruzadas (crosstalk) entre la radiación gaseosa y la incandescencia del particulado.

7.4.1. Análisis por variables en llama Yale 32

La Figura 7.12 presenta los mapas de radiancia desglosados espacialmente para las especies estudiadas CO₂, H₂O y hollín. Complementariamente, la Figura 7.13 cuantifica la contribución porcentual relativa de cada especie en los puntos de máxima concentración de CO₂, H₂O y hollín.

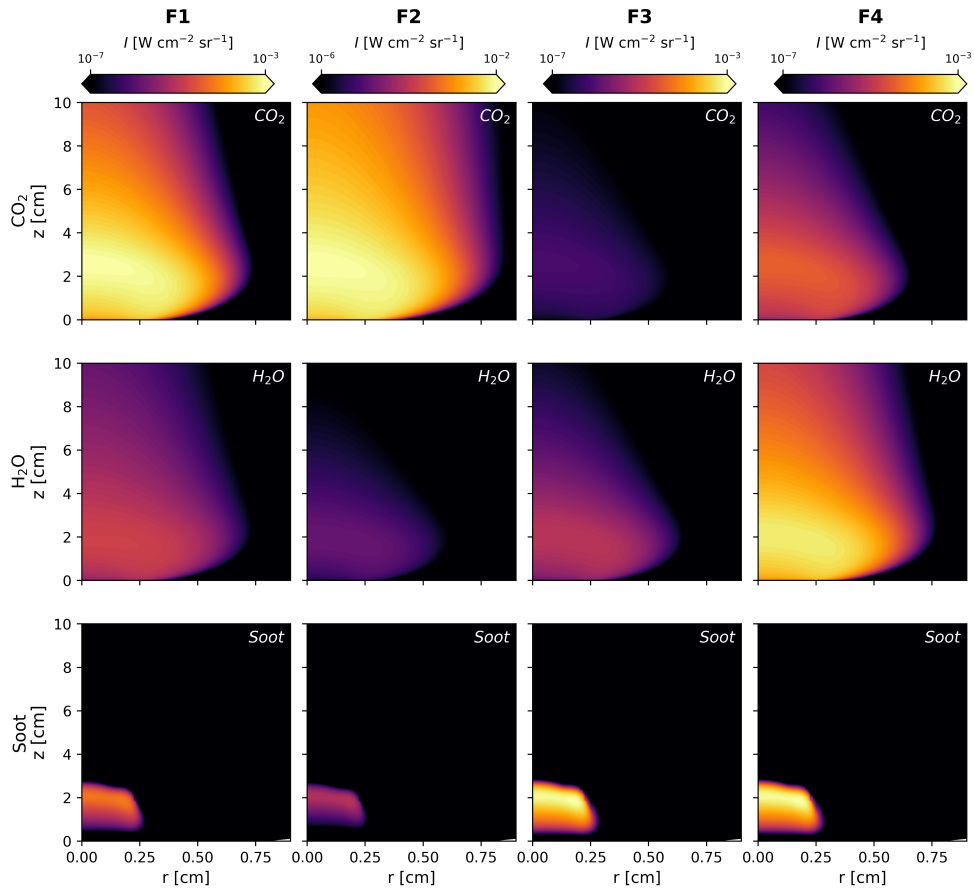


Figura 7.12: Desglose espacial de la radiancia espectral simulada para la llama Yale 32. Las filas representan la contribución aislada de cada especie (CO_2 , H_2O , Hollín) y las columnas corresponden a los cuatro filtros de la cámara.

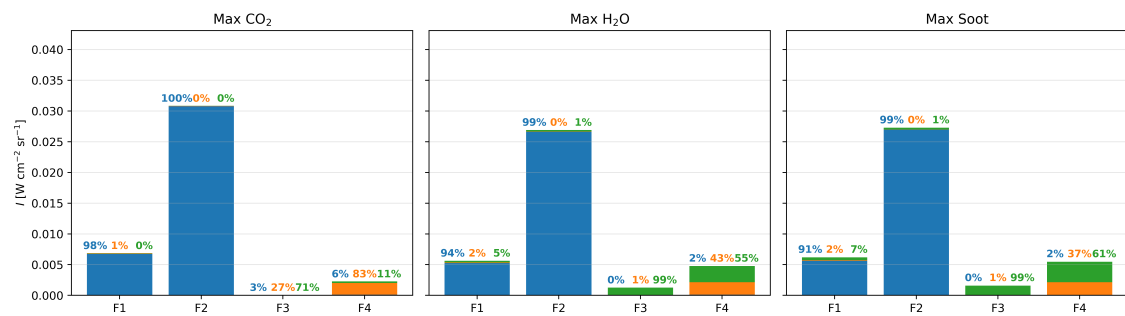


Figura 7.13: Contribución relativa porcentual de cada especie a la señal total integrada en cada filtro. El análisis se realiza en tres coordenadas distintas: (Izq.) Punto de máximo CO_2 ; (Centro) Punto de máximo H_2O ; (Der.) Punto de máximo Hollín. Código de colores: Azul (CO_2), Naranja (H_2O), Amarillo (Hollín).

Del análisis conjunto de estas figuras se desprenden tres conclusiones determinantes para la metodología de diagnóstico.

Como se observa en la primera fila de la Figura 7.12, la emisión de CO_2 domina espacialmente en los Filtros 1 y 2. Esto se corrobora cuantitativamente en la Figura 7.13, donde el CO_2 representa entre el 94 % y el

100 % de la señal en estas bandas. Esto valida el uso de F1 y F2 para la recuperación de temperatura de gas y concentración de CO₂ con mínima interferencia de otras especies en esta llama de baja carga.

En los mapas 2D, las filas correspondientes a CO₂ y H₂O aparecen completamente oscuras para la columna F3, indicando una muy baja emisión gaseosa en esta banda. El gráfico de barras de Max Soot confirma esto. En la región de máxima formación de partículas, el 99 % de la señal capturada por el Filtro 3 proviene exclusivamente de la incandescencia del hollín. Esta característica convierte al Filtro 3 en el canal más robusto para determinar la fracción volumétrica de hollín (f_v) sin necesidad de correcciones por interferencia de gas. A diferencia del Filtro 3, el Filtro 4 presenta un comportamiento híbrido. Aunque captura la radiación del hollín, los mapas de intensidad revelan una contribución brillante y extensa del vapor de agua (H₂O) en la base de la llama. El impacto cuantitativo de esta interferencia se aprecia en el panel derecho de la Figura 7.13, incluso en la ubicación de máximo hollín, el vapor de agua (barra naranja) aporta aproximadamente un 37 % de la señal total, compitiendo con el 61 % del hollín.

Esto demuestra que, en llamas con baja carga de hollín (como Yale 32), no se puede asumir que la señal del Filtro 4 proviene solo de partículas. Utilizar este filtro para calcular temperatura de hollín sin descontar previamente la contribución del agua induciría errores significativos en la medición.

7.4.2. Análisis por variables en llama Yale 80

La Figura 7.14 presenta los mapas de radiancia desglosados espacialmente para las tres especies estudiadas (CO₂, H₂O y hollín) en la llama Yale 32. Complementariamente, la Figura 7.15 cuantifica la contribución porcentual relativa de cada especie en los puntos de máxima concentración.

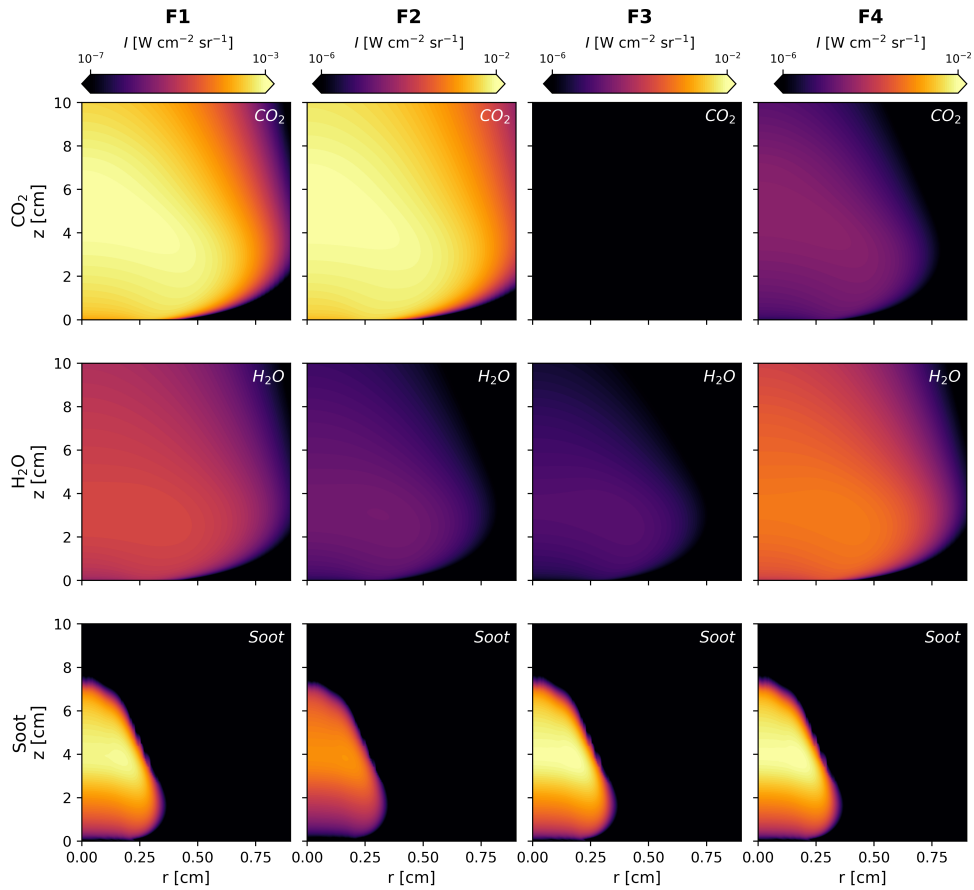


Figura 7.14: Desglose espacial de la radiancia espectral simulada para la llama Yale 80. Las filas representan la contribución aislada de cada especie (CO_2 , H_2O , Hollín) y las columnas corresponden a los cuatro filtros de la cámara.

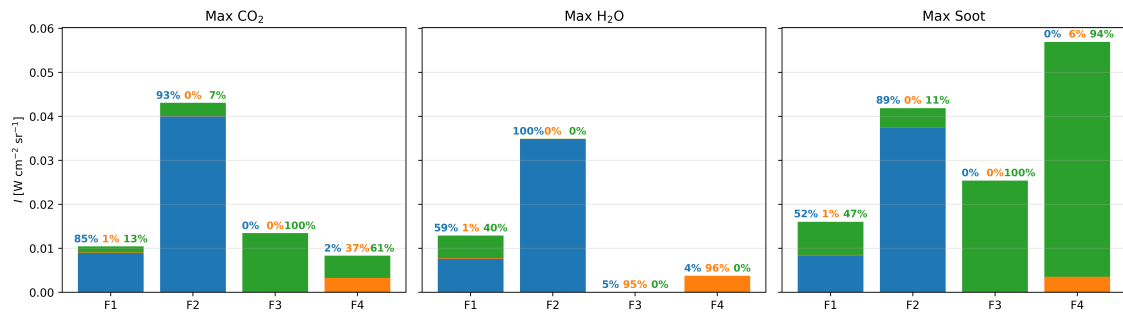


Figura 7.15: Contribución relativa porcentual de cada especie a la señal total integrada en cada filtro. El análisis se realiza en tres coordenadas distintas: (Izq.) Punto de máximo CO_2 ; (Centro) Punto de máximo H_2O ; (Der.) Punto de máximo Hollín. Código de colores: Azul (CO_2), Naranja (H_2O), Amarillo (Hollín).

Al replicar el análisis de descomposición espectral para la llama Yale 80, se evidencia un cambio radiativo fundamental. A diferencia del caso anterior, la radiación de cuerpo gris generada por la incandescencia del hollín se vuelve lo suficientemente intensa como para competir con, e incluso dominar, las bandas de emisión de los gases. Las Figuras 7.14 y 7.15 revelan lo siguiente:

Mientras que en la llama Yale 32 los filtros de onda corta eran exclusivos para el CO_2 , en la Yale 80 se observa

una intrusión severa del continuo térmico. El gráfico muestra que, en las regiones de alta concentración de partículas, el hollín aporta el 47 % de la señal total en el Filtro 1 y el 11 % en el Filtro 2. Esto invalida la asunción de que F1 y F2 son canales "limpios" de gas. Cualquier intento de calcular la concentración de CO_2 sin descontar previamente la contribución del hollín resultará en una sobreestimación masiva de la densidad del gas. A pesar del incremento en la carga térmica y la densidad de especies, el Filtro 3 mantiene su calidad como el canal más selectivo del sistema. Los mapas de radiancia confirman que las especies gaseosas no emiten en esta banda (filas superiores oscuras en columna F3), y el gráfico de barras indica que el 100 % de la señal en la zona de las alas proviene exclusivamente del hollín. Esto reafirma al Filtro 3 como el ancla principal para la recuperación de f_v , siendo insensible tanto a la interferencia del gas como al cambio de régimen de la llama. Se observa un fenómeno opuesto al caso Yale 32 respecto a la interferencia del agua. Debido a que la emisividad del hollín escala con su concentración, la señal del particulado en Yale 80 se vuelve tan intensa que opaca la contribución del vapor de agua. En el panel Max Soot, el hollín representa ahora el 94 % de la señal del Filtro 4 (comparado con el 61 % en Yale 32), reduciendo la contribución relativa del agua a un marginal 6 %. En regímenes de alta opacidad, el Filtro 4 mejora su utilidad como canal secundario de hollín, aunque la corrección por agua sigue siendo necesaria para mantener la precisión en el núcleo de la llama.

7.5. Análisis de Sensibilidad

Para evaluar la estrategia de inversión y ver la influencia de las distintas variables en la señal capturada, se utiliza el coeficiente de elasticidad ($E_\phi^{(j)}$). Este parámetro adimensional cuantifica la sensibilidad relativa de la radiancia integrada ante perturbaciones en las variables de estado termoquímicas. Matemáticamente, se define como el cociente entre la variación porcentual de la intensidad de salida y la variación porcentual de la variable de entrada. Siguiendo la metodología establecida, este cálculo se efectúa aplicando una perturbación controlada del 10 % en el parámetro de interés (X_{CO_2} , $X_{\text{H}_2\text{O}}$, f_v y T):

$$E_\phi^{(j)} \approx \frac{\Delta I^{(j)} / I^{(j)}}{\Delta \phi / \phi} \quad \text{con} \quad \frac{\Delta \phi}{\phi} = 0,10 \quad (7.1)$$

Donde:

- $I^{(j)}$ es la radiancia integrada total en el filtro j .
- $\Delta I^{(j)}$ es la variación de intensidad resultante en dicho filtro.
- ϕ representa la variable de estado perturbada, siendo $\phi \in \{T, X_{\text{CO}_2}, X_{\text{H}_2\text{O}}, f_v\}$.
- El valor 0,10 representa la variación controlada del 10 % impuesta en el sistema.

El valor numérico de $E_\phi^{(j)}$ permite determinar que tanto afecta una variación del 10 % en la entrada al resultado final. La interpretación se clasifica en tres regímenes:

1. Alta Sensibilidad ($E > 1$):

Si el coeficiente es mayor a la unidad (por ejemplo, $E \approx 2,0$), indica que el sistema amplifica la perturbación. En este caso, un error del 10 % en la variable de entrada provocaría un error del 20 % en la señal medida.

2. Sensibilidad Lineal ($E \approx 1$):

Un valor cercano a 1 indica que el cambio en la señal es proporcional al cambio en la variable.

3. Baja Sensibilidad ($E \ll 1$):

Si el coeficiente es cercano a cero (por ejemplo, $E < 0,2$), significa que la perturbación del 10 % en la variable apenas afecta la señal de la cámara. Esto indica que el filtro no se ve afectado por dicha especie.

7.5.1. Llama Yale 32

La Figura 7.16 resume los coeficientes de elasticidad calculados para la llama Yale 32. Este análisis permite jerarquizar que variables dominan la señal en cada banda espectral.

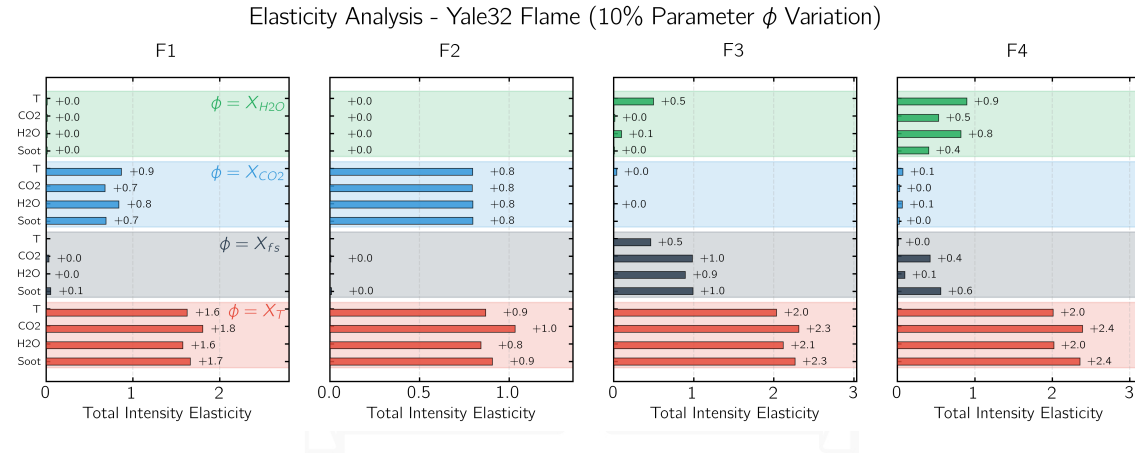


Figura 7.16: Análisis de elasticidad para la llama Yale 32. Las barras representan la respuesta de la intensidad en cada filtro (F1-F4) ante un aumento del 10 % en la variable indicada por el color: Rojo (T), Azul (X_{CO_2}), Verde (X_{H_2O}) y Gris (f_v). Los valores se evaluaron en las ubicaciones de máxima concentración de cada especie.

Del análisis de estas sensibilidades se desprenden en todos los filtros, la temperatura (T) presenta los coeficientes de elasticidad más altos, con valores que oscilan entre +1,6 y +2,4. Esto indica que la radiancia es extremadamente sensible a cambios térmicos, comportándose de manera no lineal (consistente con la Ley de Planck). En términos prácticos, esto implica que la temperatura es la variable gobernante de la señal. Por lo tanto, cualquier error en la estimación de T se propagará amplificadamente a las concentraciones de especies.

Los filtros de onda corta (Filtro 1 y 2) muestran una sensibilidad significativa y selectiva al dióxido de carbono CO_2 . En F1 y F2, la elasticidad del X_{CO_2} alcanza valores de +0,7 y +0,8 respectivamente, mientras que la sensibilidad al hollín (barras grises) es despreciable en esta llama de baja carga. Esto confirma que F1 y F2 son canales robustos para recuperar la concentración de CO_2 una vez que la temperatura ha sido acotada.

El análisis de elasticidad corrobora la contaminación del Filtro 4 observada en los mapas de radiancia. Aunque este filtro es sensible al hollín (barra gris con $E \approx 0,6$ en la zona de hollín), presenta una sensibilidad aún mayor al vapor de agua (barra verde, $E \approx 0,8$). Esto demuestra matemáticamente que F4 no puede considerarse un canal exclusivo de hollín en la llama Yale 32; la señal es una mezcla competitiva donde la variación por H_2O puede enmascarar la contribución del particulado.

A diferencia de F4, el Filtro 3 muestra una elasticidad casi nula para el CO_2 y muy baja para el H_2O , manteniendo una sensibilidad positiva al hollín ($E \approx 1,0$ en la zona de máximo soot). Esto refuerza la conclusión de que F3 es el canal espectralmente más adecuado para aislar la fracción volumétrica de hollín (f_v) en llamas de difusión.

7.5.2. Llama Yale 80

Al extender el análisis de sensibilidad a la llama Yale 80, se observa lo siguiente en la figura 7.17:

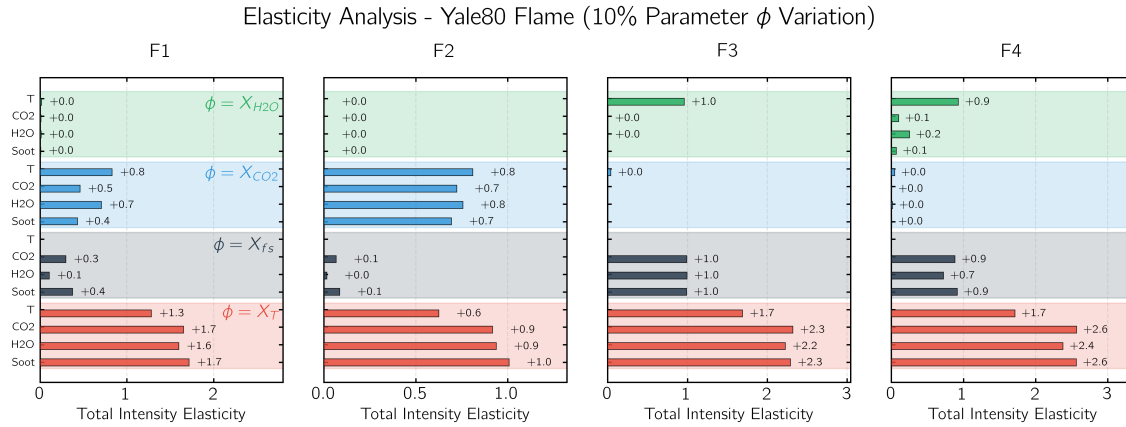


Figura 7.17: Análisis de elasticidad para la llama Yale 80. Las barras representan la respuesta de la intensidad en cada filtro (F1-F4) ante un aumento del 10% en la variable indicada por el color: Rojo (T), Azul (X_{CO_2}), Verde (X_{H_2O}) y Gris (f_v). Los valores se evaluaron en las ubicaciones de máxima concentración de cada especie.

Si bien la temperatura mantiene su rol como la variable dominante en todos los canales, con coeficientes de elasticidad que alcanzan valores de hasta +2,6, la influencia del hollín deja de ser un fenómeno localizado para convertirse en un factor de peso en todo el espectro infrarrojo.

Una diferencia fundamental respecto al caso de baja carga es la intrusión de la señal del hollín. Mientras que en la llama Yale 32 la sensibilidad al hollín en los filtros 1 y 2 era prácticamente nula, en la Yale 80 se registran elasticidades no despreciables para f_v en estas bandas (barras grises con valores cercanos a +0,4 en F1). Esto implica que, en llamas con alto material particulado, la radiación del cuerpo gris es lo suficientemente intensa como para competir con la emisión molecular del CO_2 . En consecuencia, para calcular la concentración de gases en este régimen, no es posible considerar que el filtro es exclusivo para el gas. Es indispensable descontar matemáticamente la interferencia del hollín para evitar errores en la medición de las especies gaseosas.

Por otro lado, el comportamiento de los filtros de menor longitud de onda (F3 y F4) confirma una mayor dominancia de la radiación del hollín en comparación con el resto de los filtros. En particular, en el filtro 4 se observa un cambio de jerarquía respecto al caso anterior. La sensibilidad al hollín (elasticidad $\approx +0,9$) supera a la del vapor de agua (elasticidad $\approx +0,2$) por un margen del orden de $(\approx +0,2)$, lo que evidencia que este canal es más sensible al hollín que a H_2O . No obstante, la temperatura se mantiene como una variable clave dentro del análisis de sensibilidad, influyendo de manera transversal en la radiancia y en la respuesta del modelo.

Esto significa que, a diferencia de la llama limpia donde el agua generaba una fuerte interferencia, en la Yale 80 la señal del Filtro 4 proviene mayoritariamente de la incandescencia de las partículas. Esto define la estrategia de cálculo, dado que la señal de hollín es tan fuerte y clara en estas bandas, se debe priorizar el cálculo de la fracción volumétrica de hollín (f_v) usando estos filtros, antes de intentar resolver las concentraciones de gases que tienen una señal más débil.

8 | Conclusiones y discusiones

El presente trabajo logró desarrollar y validar integralmente una metodología de modelado directo para la simulación de la radiancia espectral infrarroja en llamas de difusión laminares. Al acoplar los campos termoquímicos generados por el código CoFlame con un modelo de transferencia radiativa línea a línea (LBL) y la respuesta instrumental de una cámara multispectral, se estableció un marco robusto para interpretar la señal física de la combustión. La comparación cuantitativa con mediciones experimentales en llamas de etileno de baja (Yale 32) y alta (Yale 80) carga de hollín permitió extraer conclusiones determinantes sobre la física de la llama y las limitaciones de los sistemas de diagnóstico óptico actuales.

Desde una perspectiva morfológica, el modelo demostró una alta fidelidad en la reproducción de la topología de la llama, validando la precisión del transporte de especies y partículas predicho por la simulación numérica. En el caso Yale 32, el modelo replicó correctamente la estructura de la pluma térmica gobernada por la difusión gaseosa. Más notable aún fue el desempeño en el régimen crítico de Yale 80, donde la simulación capturó con precisión la transición espacial del hollín: desde la estructura anular de “doble pico” en la base ($r \approx 0,2$ cm), característica de las zonas de nucleación y crecimiento superficial, hasta el cierre de la llama en el eje central a mayor altura ($z \approx 7,14$ cm), consistente con la física de oxidación en la punta de la llama. Esta concordancia geométrica confirma que el modelo resuelve adecuadamente la ubicación de las zonas de reacción, independientemente de la carga de particulado.

En cuanto al comportamiento espectral, el estudio reveló que la asunción tradicional de filtros monocromáticos es insuficiente para llamas complejas. Se demostró que el Filtro 4, usualmente destinado a medir la temperatura del hollín, presenta una naturaleza híbrida: sufre de fuertes interferencias por bandas calientes de vapor de agua (H_2O) en llamas limpias, pero pasa a ser dominado por la incandescencia del particulado en regímenes de alta carga (Yale 80), invirtiendo su jerarquía espectral. Asimismo, se identificó un fenómeno crítico en las llamas sucias: la radiación de cuerpo gris del hollín genera señal de fondo significativa incluso en los filtros de onda corta (F1 y F2), diseñados teóricamente para el CO_2 . En contraste, el Filtro 3 emergió como el canal espectralmente más robusto, mostrando una sensibilidad casi nula a las especies gaseosas y una respuesta exclusiva a la fracción volumétrica de hollín (f_v), validándose como el candidato óptimo para aislar la señal de partículas.

El análisis de sensibilidad mediante coeficientes de elasticidad permitió establecer una jerarquía inmutable en las variables de estado: la temperatura (T) es el factor gobernante en todos los filtros, con una respuesta altamente no lineal y amplificada que supera a la influencia de las concentraciones de especies. Sin embargo, se observó un cambio de régimen fundamental al pasar de Yale 32 a Yale 80. Mientras que en llamas limpias los filtros responden selectivamente, en llamas de alta opacidad la elasticidad respecto al hollín (f_v) deja de ser un fenómeno localizado para convertirse en un peso significativo en todo el espectro infrarrojo, contaminando incluso los canales de gas. Aunque persisten discrepancias en la magnitud absoluta de la radiancia para el caso Yale 80, donde el modelo tiende a subestimar los picos de intensidad experimental, sugiriendo la necesidad de refinar la cinética de formación de hollín o sus propiedades ópticas complejas, la tendencia estructural se mantiene correcta.

Finalmente, estos hallazgos tienen implicancias directas para la futura resolución del problema inverso (tomografía). Se concluye que no es viable recuperar campos de concentración tratándolos de forma independiente o simultánea con la misma prioridad. La evidencia sugiere la adopción imperativa de una estrategia de inversión escalonada: restringir primero el campo térmico debido a su dominancia, seguido por la determinación de la

carga de hollín utilizando preferentemente el Filtro 3, y finalmente resolver las especies gaseosas aplicando una corrección matemática que descuenta la contribución del continuo de fondo. Además, el uso de máscaras espaciales que exploten la separación física entre el núcleo gaseoso y el anillo de hollín se presenta como una herramienta esencial para mejorar la convergencia y robustez de los algoritmos de reconstrucción.

8.1. Trabajos Futuros

A partir de la validación del modelo directo (Forward Model) y los hallazgos sobre la sensibilidad espectral presentados en esta tesis, se abren nuevas líneas de investigación orientadas a resolver el problema inverso con mayor precisión. El siguiente paso natural en esta dirección es la implementación de técnicas de aprendizaje automático (Machine learning) para abordar la desagregación espectral. Dado que el presente trabajo ha generado una base de datos robusta de imágenes sintéticas validadas físicamente, se propone utilizar estos campos simulados para el entrenamiento de redes neuronales profundas. El objetivo es que estos algoritmos aprendan a desacoplar la contribución del hollín de la de los gases basándose en la morfología y la correlación entre canales, permitiendo obtener mapas de concentración de especies directamente a partir de las imágenes experimentales, incluso en zonas de fuerte superposición espectral donde los métodos tradicionales fallan.

Otra alternativa, es que se propone una metodología de inversión robusta basada en la generación de una base de datos sintética de radiancia. Dado que el problema inverso es inherentemente mal condicionado, esta estrategia consiste en realizar un barrido exhaustivo de combinaciones de las variables de estado (temperatura y concentración) dentro de un rango físico factible, calculando para cada par la intensidad teórica esperada mediante el modelo directo. Esta metodología aprovecha la selectividad espectral demostrada en este estudio (por ejemplo, la dominancia exclusiva del CO_2 en el Filtro 2) para restringir el espacio de búsqueda. Al comparar la intensidad experimental medida en dicho filtro con la base de datos pre-calculada, se identifican las combinaciones específicas de termodinámica que minimizan el error residual. Si bien este enfoque de optimización global conlleva un costo computacional elevado debido a la necesidad de simular un gran número de escenarios, ofrece una ventaja crítica sobre los métodos iterativos tradicionales: garantiza la identificación de la región de solución global sin depender de condiciones iniciales, proporcionando un mapa de certeza que vincula unívocamente la intensidad medida con los posibles estados termoquímicos de la llama.

En el ámbito experimental, se proyecta extender la aplicabilidad de la metodología a configuraciones más complejas, específicamente a llamas de pool-fire. Aunque estos sistemas presentan un comportamiento transitorio y turbulento, se aprovechará su propiedad de axisimetría estadística promediada en el tiempo para intentar reconstruir sus campos escalares medios, lo cual podría requerir refinar el modelo de radiación para considerar los efectos de las fluctuaciones turbulencia-radiación. Asimismo, para garantizar la generalización del modelo, es necesario validar la metodología en otras llamas laminares estables con diferentes químicas de formación de hollín, tales como llamas de difusión de metano, propano o configuraciones de contraflujo, evaluando si las constantes ópticas asumidas se mantienen precisas bajo diversas condiciones estequiométricas.

Finalmente, se busca ampliar el alcance del diagnóstico óptico para incluir la detección de especies contaminantes minoritarias de alto impacto ambiental, como los óxidos de nitrógeno (NO_x) y el monóxido de carbono (CO). Esta línea de trabajo implicará analizar la viabilidad de incorporar filtros espectrales adicionales en el infrarrojo medio o cercano, y evaluar mediante análisis de sensibilidad si la señal de estas especies es distinguible del intenso fondo térmico generado por el hollín y el CO_2 en las condiciones de operación estudiadas.

Bibliografía

- [1] International Energy Agency, *Key World Energy Statistics 2023*. Paris: IEA, 2023. (document), 4.1
- [2] T. C. Bond, S. J. Doherty, D. W. Fahey, P. M. Forster, T. Berntsen, B. J. DeAngelo, M. G. Flanner, S. Ghan, B. Kärcher, D. Koch, S. Kinne, Y. Kondo, P. K. Quinn, M. C. Sarofim, M. G. Schultz, M. Schulz, C. Venkataraman, H. Zhang, S. Zhang, N. Bellouin, S. K. Guttikunda, P. K. Hopke, M. Z. Jacobson, J. W. Kaiser, Z. Klimont, U. Lohmann, J. P. Schwarz, D. Shindell, T. Storelvmo, S. G. Warren, and C. S. Zender, “Bounding the role of black carbon in the climate system: A scientific assessment,” *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 118, no. 11, pp. 5380–5552, 2013. (document), 4.1.1, 4.2, 4.3
- [3] M. F. Modest and S. Mazumder, “Chapter 1 - fundamentals of thermal radiation,” in *Radiative Heat Transfer (Fourth Edition)* (M. F. Modest and S. Mazumder, eds.), pp. 1–29, Academic Press, fourth edition ed., 2022. (document), 4.3.2, 4.4, 4.5, 4.4, 4.4, 4.4, 5.1.5, 5.2.1, 5.2.4, 5.4
- [4] Y. A. Çengel and A. J. Ghajar, *Transferencia de Calor y Masa: Fundamentos y Aplicaciones*. México: McGraw-Hill, 4ta ed., 2011. (document), 4.6, 4.4, 4.4
- [5] M. F. Modest and S. Mazumder, “Chapter 9 - the radiative transfer equation in participating media (rte),” in *Radiative Heat Transfer (Fourth Edition)* (M. F. Modest and S. Mazumder, eds.), pp. 285–309, Academic Press, fourth edition ed., 2022. (document), 4.7, 4.5.1, 4.6, 5.1.1, 5.3, 5.3.1, 5.4.1
- [6] M. D. Smooke and A. Gomez, “Yale coflow burner: Steady burner design and specifications.” http://guilford.eng.yale.edu/yalecoflowflames/steady_burner.html, 2019. Accedido: 2025. (document), 6.2
- [7] Ministerio de Energía, “Política Energética Nacional: Actualización 2022,” 2022. Gobierno de Chile. 3
- [8] OECD, “Oecd environmental performance reviews: Chile 2024.” https://www.oecd.org/content/dam/oecd/en/publications/reports/2024/03/oecd-environmental-performance-reviews-chile-2024_ce98cfc1/5bc65d36-en.pdf, March 2024. 3, 4.1
- [9] Ministerio de Energía, “Política energética nacional 2050: Actualización 2022,” 2022. Accedido el 16 de mayo de 2025. 3, 4.1
- [10] I. Gordon, L. Rothman, R. Hargreaves, R. Hashemi, E. Karlovets, F. Skinner, E. Conway, C. Hill, R. Kochanov, Y. Tan, P. Weislo, A. Finenko, K. Nelson, P. Bernath, M. Birk, V. Boudon, A. Campargue, K. Chance, A. Coustenis, B. Drouin, J. Flaud, R. Gamache, J. Hodges, D. Jacquemart, E. Mlawer, A. Nikitin, V. Perevalov, M. Rotger, J. Tennyson, G. Toon, H. Tran, V. Tyuterev, E. Adkins, A. Baker, A. Barbe, E. Canè, A. Császár, A. Dudaryonok, O. Egorov, A. Fleisher, H. Fleurbaey, A. Foltynowicz, T. Furtenbacher, J. Harrison, J. Hartmann, V. Horneman, X. Huang, T. Karman, J. Karns, S. Kass, I. Kleiner, V. Kofman, F. Kwabia–Tchana, N. Lavrentieva, T. Lee, D. Long, A. Lukashchinskaya, O. Lyulin, V. Makhnev, W. Matt, S. Massie, M. Melosso, S. Mikhailenko, D. Mondelain, H. Müller, O. Naumenko, A. Perrin, O. Polyansky, E. Raddaoui, P. Raston, Z. Reed, M. Rey, C. Richard, R. Tóbiás, I. Sadiq, D. Schwenke, E. Starikova, K. Sung, F. Tamassia, S. Tashkun, J. Vander Auwera, I. Vasilenko, A. Viganin, G. Villanueva, B. Vispoel, G. Wagner, A. Yachmenev, and S. Yurchenko, “The

- hitran2020 molecular spectroscopic database,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 277, p. 107949, 2022. 3, 5, 5.1.1, 5.3.2
- [11] International Energy Agency (IEA), “Global energy review 2025.” <https://www.iea.org/reports/global-energy-review-2025>, 2025. IEA, Paris. Licence: CC BY 4.0. 4.1
- [12] International Agency for Research on Cancer, “Iarc: Diesel engine exhaust carcinogenic.” Press Release No. 213, June 2012. World Health Organization. 4.1.1
- [13] C. A. Pope III and D. W. Dockery, “Health effects of fine particulate air pollution: Lines that connect,” *Journal of the Air & Waste Management Association*, vol. 56, no. 6, pp. 709–742, 2006. 4.1.1
- [14] A. C. Eckbreth, *Laser Diagnostics for Combustion Temperature and Species*. Amsterdam: Gordon and Breach, 2nd ed., 1996. 4.1.1, 5.1.3
- [15] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, and J. Warnatz, *Combustion*, vol. 4. Springer, 2006. 4.2, 4.3.2, 4.4
- [16] S. R. Turns, *An Introduction to Combustion: Concepts and Applications*. McGraw-Hill Education, 2 ed., 2000. 4.2.1
- [17] R. Santoro, H. Semerjian, and R. Dobbins, “Soot particle measurements in diffusion flames,” *Combustion and Flame*, vol. 51, pp. 203–218, 1983. 4.2.1.1
- [18] F. Roper, “The prediction of laminar jet diffusion flame sizes: Part i. theoretical model,” *Combustion and Flame*, vol. 29, pp. 219–226, 1977. 3
- [19] C. S. McEnally, A. M. Schaffer, M. B. Long, L. D. Pfefferle, M. D. Smooke, M. B. Colket, and R. J. Hall, “Computational and experimental study of soot formation in a coflow, laminar ethylene diffusion flame,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 27, no. 1, pp. 1497–1505, 1998. 4.2.1.1, 6.1.1
- [20] H.-c. Chang and T. T. Charalampopoulos, “Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, vol. 430, no. 1880, pp. 577–591, 1990. 4.3.2, 5.4.1, 6.4.2
- [21] M. F. Modest and S. Mazumder, “Chapter 10 - radiative properties of molecular gases,” in *Radiative Heat Transfer (Fourth Edition)* (M. F. Modest and S. Mazumder, eds.), pp. 311–399, Academic Press, fourth edition ed., 2022. 4.5, 4.7, 5, 5.1.2
- [22] R. Viskanta and M. P. Mengüç, “Radiation heat transfer in combustion systems,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 13, no. 2, pp. 97–160, 1987. 4.5.1
- [23] L. Rothman, I. Gordon, Y. Babikov, A. Barbe, D. Chris Benner, P. Bernath, M. Birk, L. Bizzocchi, V. Boudon, L. Brown, A. Campargue, K. Chance, E. Cohen, L. Coudert, V. Devi, B. Drouin, A. Fayt, J.-M. Flaud, R. Gamache, J. Harrison, J.-M. Hartmann, C. Hill, J. Hodges, D. Jacquemart, A. Jolly, J. Lamouroux, R. Le Roy, G. Li, D. Long, O. Lyulin, C. Mackie, S. Massie, S. Mikhailenko, H. Müller, O. Naumenko, A. Nikitin, J. Orphal, V. Perevalov, A. Perrin, E. Polovtseva, C. Richard, M. Smith, E. Starikova, K. Sung, S. Tashkun, J. Tennyson, G. Toon, V. Tyuterev, and G. Wagner, “The hitran2012 molecular spectroscopic database,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 130, pp. 4–50, 2013. HITRAN2012 special issue. 4.7.2, 5.3.2
- [24] R. Kochanov, I. Gordon, L. Rothman, P. Wcisło, C. Hill, and J. Wilzewski, “Hitran application programming interface (hapi): A comprehensive approach to working with spectroscopic data,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 177, pp. 15–30, 2016. XVIIIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2015), Tomsk, Russia. 4.7.4, 5.3.3
- [25] R. K. Hanson, R. M. Spearrin, and C. S. Goldenstein, “Spectroscopy and optical diagnostics for gases and flows,” *Springer*, 2016. 5, 5.5
- [26] C. K. Law, *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2010. 5.1
- [27] J. Meléndez and G. Guarnizo, “Multispectral mid-infrared camera system for accurate stand-off temperature and column density measurements on flames,” *Sensors*, vol. 21, no. 24, 2021. 5.1, 5.1.4, 5.1.5, 5.5

- [28] M. Lackner, ed., *Tunable diode laser spectroscopy: theory and applications*. Vienna: John Wiley & Sons, 2007. 5.1.1
- [29] X. Liu, L. Xu, Z. Chen, *et al.*, “Tomographic imaging of combustion systems using tunable diode laser absorption spectroscopy,” *Applied Spectroscopy Reviews*, vol. 50, no. 8, pp. 660–684, 2015. 5.1.1
- [30] N. Docquier and S. Candel, “Combustion control and sensors: a review,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 28, no. 2, pp. 107–150, 2002. 5.1.2
- [31] J. Pan *et al.*, “Digital processing of emission images for flame structure reconstruction,” *Measurement Science and Technology*, vol. 20, p. 065402, 2009. 5.1.2
- [32] H. McCann and K. B. Ozanyan, “Absorption and emission tomography of flames,” *Chemical Engineering Science*, vol. 12, pp. 123–150, 2017. 5.1.2
- [33] W. Cai and C. F. Kaminski, “Tomographic reconstruction of the temperature field in a flame using infrared emission spectroscopy,” *Applied Physics B*, vol. 119, pp. 29–38, 2015. 5.1.2
- [34] H. Michelsen, C. Schulz, G. Smallwood, and S. Will, “Laser-induced incandescence: Particulate diagnostics for combustion, atmospheric, and industrial applications,” *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 51, pp. 2–48, 2015. 5.1.2
- [35] C. R. Shaddix, “Diagnostics for the measurement of particulate matter in flames,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, pp. 165–175, 2005. 5.1.2, 5.4
- [36] F. Zhao *et al.*, “Simultaneous measurement of temperature and soot volume fraction distributions in axisymmetric flames,” *Applied Optics*, vol. 57, no. 10, pp. 2455–2463, 2018. 5.1.2
- [37] K. Kohse-Höinghaus, R. S. Barlow, M. Aldén, and J. Wolfrum, “Laser techniques for the quantitative detection of reactive intermediates in combustion systems,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, no. 1, pp. 89–123, 2005. 5.1.3
- [38] W. Meier, A. Vyrodov, V. Bergmann, and W. Stricker, “Simultaneous raman/lif measurements of major species and no in turbulent h₂/air diffusion flames,” *Applied Physics B*, vol. 63, no. 1, pp. 79–90, 1996. 5.1.3
- [39] J. L. Harley, B. A. Rankin, D. L. Blunck, J. P. Gore, and K. C. Gross, “Imaging fourier-transform spectrometer measurements of a turbulent nonpremixed jet flame,” *Opt. Lett.*, vol. 39, pp. 2350–2353, Apr 2014. 5.1.4
- [40] A. Rogalski, “History of infrared detectors,” *Opto-Electronics Review*, vol. 20, no. 3, pp. 279–308, 2012. 5.1.5
- [41] M. Vollmer and K.-P. Möllmann, *Infrared thermal imaging: fundamentals, research and applications*. John Wiley & Sons, 2nd ed., 2017. 5.1.5
- [42] C. Ferriso, C. Ludwig, and L. Acton, “Spectral-emissivity measurements of the 4.3- μm CO₂ band between 2650 and 3000 k,” *Journal of the Optical Society of America*, vol. 56, no. 2, pp. 171–173, 1966. 5.2.1
- [43] C. Ludwig, C. Ferriso, and C. Abeyta, “Spectral emissivities and integrated intensities of the 6.3- μm fundamental band of H₂O,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 5, no. 2, pp. 281–290, 1965. 5.2.2
- [44] I. V. Ptashnik, T. Petrova, and Y. Ponomarev, “Water vapor continuum absorption in the 2.7 and 6.25 μm bands,” *Atmospheric and Oceanic Optics*, vol. 29, no. 3, pp. 213–218, 2016. 5.2.2
- [45] M. L. Fotia and F. Schauer, “Absorption spectroscopy in the 4.4-4.6 μm infrared wavelength range for the 10 khz high-speed measurement of CO and CO₂ concentrations,” in *49th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, p. 778, AIAA, 2011. 5.2.3
- [46] Z. Wang *et al.*, “CH₄, C₂H₆, and CO₂ multi-gas sensing based on portable mid-infrared spectroscopy,” *Sensors*, vol. 23, no. 3, p. 1413, 2023. 5.2.3

- [47] L. S. Rothman, I. Gordon, R. Barber, H. Dothe, R. R. Gamache, A. Goldman, V. Perevalov, S. Tashkun, and J. Tennyson, "Hitemp, the high-temperature molecular spectroscopic database," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 111, no. 15, pp. 2139–2150, 2010. 5.2.4
- [48] H. Chu, F. Liu, and H. Zhou, "Calculations of gas radiation heat transfer in a two-dimensional rectangular enclosure using the line-by-line approach and the statistical narrow-band correlated-k model," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 59, pp. 66–74, 2012. 5.3.1
- [49] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, *et al.*, "Array programming with NumPy," *Nature*, vol. 585, no. 7825, pp. 357–362, 2020. 5.3.3
- [50] R. R. Gamache, C. Roller, E. Lopes, I. Gordon, *et al.*, "Total internal partition sums for 166 isotopologues of 51 molecules important in planetary atmospheres: Application to hitran2016 and beyond," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 203, pp. 70–87, 2017. 5.3.3
- [51] 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*, vol. 183, pp. 668–679, 2016. 5.4.2
- [52] D. Snelling, K. Thomson, G. Smallwood, and Gülder, "Measurement of soot temperature and volume fraction profiles in laminar diffusion flames with a two-color optical pyrometer," *Combustion and Flame*, vol. 136, pp. 180–190, 2002. 5.4.2
- [53] R. J. Tancin, Z. Chang, M. Gu, V. Radhakrishna, R. P. Lucht, and C. S. Goldenstein, "Ultrafast laser-absorption spectroscopy for single-shot, mid-infrared measurements of temperature, co, and ch4 in flames," *Opt. Lett.*, vol. 45, pp. 583–586, Jan 2020. 5.5
- [54] N. A. Eaves, Q. Zhang, F. Liu, H. Guo, S. B. Dworkin, and M. J. Thomson, "Coflame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames," *Computer Physics Communications*, vol. 207, pp. 464–477, 2016. 6.3
- [55] N. A. Slavinskaya and P. Frank, "A modelling study of aromatic soot precursors formation in laminar methane and ethene flames," *Combustion and Flame*, vol. 156, no. 9, pp. 1705–1722, 2009. 6.3
- [56] R. Raman, J.-L. Consalvi, S. Zaleski, and G. Legros, "Performances of approximate radiative property models for spectral radiation in luminous laminar flames," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 213, p. 109777, 2025. 6.4.1



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

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

Título del trabajo: Análisis espectral de llamas laminares mediante detección infrarroja de la radiación emitida por gases de combustión y hollín.

Nombre del candidato(a): Javiera Valentina Igor Solís.

Carrera / Grado: Ingeniería Civil Industrial y Magíster en Ciencias de la Ingeniería Industrial.

Campus: Casa Central **Departamento:** Industrias

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

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

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

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

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

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

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

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

4.- FIRMAS

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

Fecha: 21 de enero del 2026. **Firma:**

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 21 de enero del 2026. **Firma:**

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