



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

**MEJORAS PARA EL ANÁLISIS DE RESULTADOS EXPERIMENTALES
DE LLAMAS DE FLUJO LAMINAR AXISIMÉTRICAS,
USANDO TÉCNICAS DE CIENCIA DE DATOS**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

EFRAÍN MANUEL MAGAÑA TAPIA

PROFESOR GUÍA:

Benjamín Herrmann Priesnitz

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:

Felipe Escudero Barros

Mónica Zamora Zapata

SANTIAGO DE CHILE

2023

Resumen ejecutivo

Una de las principales fuentes de energía es la combustión de hidrocarburos debido a su gran disponibilidad y bajo costo, y a su vez es una de las principales causas del calentamiento global y contaminación del medio ambiente, perjudicando además la salud de las personas. Debido a esto, múltiples países han puesto como meta el realizar una transición energética a fuentes de energía más limpias. Aun así, una transición energética completa se ve a un futuro muy lejano, por lo que en el entretiem po es necesario seguir dependiendo de la combustión. En vista de esto, es claro notar que el estudio de la combustión es un acto vital para un futuro sostenible.

Si acotamos el estudio de la combustión, al fenómeno de una llama sostenida en el tiempo, laminar y axisimétrica, una metodología experimental que se usa ampliamente corresponde a la Atenuación de la línea de visión (LOSA, por sus siglas en inglés), la cual no requiere de equipos costosos, y las propiedades que se pueden obtener se pueden relacionar con las propiedades del hollín generado en la llama. Una de estas propiedades corresponde a la fracción en volumen de hollín.

La fracción en volumen de hollín es recuperada mediante métodos de análisis de datos, en particular una deconvolución, pero estos métodos generalmente son sensibles al ruido. Debido a esto, el desarrollo de nuevos métodos que aprovechen técnicas modernas de ciencia de datos tiene el potencial de extender las capacidades y aumentar la robustez de métodos existentes. Con esto en mente se plantea el objetivo general de este trabajo, desarrollar una metodología que complemente o mejore la deconvolución de la fracción en volumen de hollín de llamas laminares axisimétricas.

La metodología propuesta es una extensión del método Onion Peeling con regularización de Tikhonov, un método ya existente, que incorpora regularización para suavizar el campo resultante de la deconvolución. Se investigan tres tipos de regularización que buscan promover la suavidad en la dirección radial r , al igual que el método original, en la dirección axial z , y en r y z simultáneamente.

El método propuesto es comparado con dos métodos del estado del arte, Onion Peeling con regularización de Tikhonov y Fitting the line-of-sight projection of a predefined intensity distribution (FLiPPID), además de comprobar la validez del método por si solo, usando datos sintéticos y experimentales.

El análisis de resultados, aplicados tanto a simulaciones numéricas como a datos de llamas experimentales, muestra que el método propuesto trae consigo una mejora en la captura de zonas de máximo hollín en los resultados de la deconvolución tal que amerita su uso por sobre otros métodos, completando el objetivo general de este trabajo.

Tabla de Contenido

1. Introducción	1
1.1. Objetivos	2
2. Antecedentes	3
2.1. Bases de la deconvolución	3
2.1.1. Combustión	3
2.1.2. Line of Sight Attenuation	4
2.1.3. Fracción en Volumen de hollín	5
2.2. Estado del arte	7
2.2.1. Onion Peeling con Regularización de Tikhonov	7
2.2.1.1. Onion Peeling	8
2.2.1.2. Regularización de Tikhonov	9
2.2.2. FLiPPID	10
2.3. Conceptos de álgebra lineal	12
2.3.1. Producto Kronecker	12
2.3.1.1. Vectorización de matrices	12
2.3.2. De-blurring de imágenes	12
3. Metodología	14
3.1. Datos	14
3.1.1. Datos sintéticos	14
3.1.2. Datos experimentales	16
3.2. Método Propuesto	18
3.3. Evaluación del método propuesto	21
3.3.1. Comportamiento	21
3.3.2. Comparación	22
4. Resultados	23
4.1. Comportamiento	23
4.1.1. Cambios de matriz	23
4.1.2. Regularización simple y doble	27
4.1.3. Resumen	31
4.2. Comparación	32

4.2.1. Datos sintéticos	32
4.2.2. Datos experimentales	34
4.2.2.1. Longitud de onda 660 nm	34
4.2.2.2. Longitud de onda 800 nm	37
4.2.3. Resumen	40
5. Conclusiones	41
Bibliografía	42

Índice de Ilustraciones

1.1.	Diagrama de combustión y ejemplo de contaminación urbana.	1
2.1.	Esquema del crecimiento de las partículas de hollín [2].	4
2.2.	Diagrama estándar de un experimento LOSA.	5
2.3.	Metodología LOSA en una llama axisimétrica [5].	6
2.4.	Discretización del espacio de una llama axisimétrica [5].	8
2.5.	Ejemplo de deblurring con $\lambda = 10^{-6}$, 10^{-4} , 10^{-2} y 1 [8].	13
3.1.	A la izquierda, la transmitancia en escala logarítmica (P), y la derecha, la fracción en volumen de hollín (f_s) de una llama medida con un $\lambda = 660$ [nm].	15
3.2.	Datos sintéticos de la transmitancia logarítmica, P , sin ruido y con ruido añadido.	16
3.3.	Esquema del setup experimental para capturar la absorbancia por medio de la técnica LOSA [13].	16
3.4.	Absorbancia medida con $\lambda = 660$ [nm], a la izquierda, y con $\lambda = 800$ [nm], a la derecha.	17
3.5.	Esquema del método OP.	18
3.6.	Esquema de $\mathbf{B} = \mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{X}$	18
3.7.	Esquema de $\mathbf{b}' = \mathbf{A}'_{\text{op}}\mathbf{x}'$	19
3.8.	Simplificación de $\mathbf{b}' = \mathbf{A}'_{\text{op}}\mathbf{x}'$	19
4.1.	Caso específico, de izquierda a derecha tenemos, las observaciones sin ruido, luego con el ruido agregado, luego f_s real, terminando con f_s deconvolucionado con Onion Peeling.	24
4.2.	Deconvolución usando el método propuesto con las matrices de regularización $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{r1}}$, al extremo izquierdo, $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{r2}}$, $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{z1}}$ y $\mathbf{\Gamma}_{\mathbf{z2}}$ al extremo derecho.	24
4.3.	Comparación de curvas usando distintas matrices de regularización, arriba las matrices de regularización en r , y abajo, en z , tanto para las curvas en alturas distintas, izquierda, como en radios distintos, derecha.	25
4.4.	Curvas RMSE promedio de 1000 iteraciones de ruido distintas, a la izquierda, curva RMSE en torno al radio, a la derecha, en torno a la altura.	26
4.5.	Curvas RMSE promedio de 1000 realizaciones distintas para cada ruido, el área representa una desviación estándar del promedio, la línea negra punteada corresponde a 1% de ruido.	26
4.6.	Curvas resultantes del estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, en donde este va creciendo de arriba hacia abajo, partiendo por $\alpha = 10^{-5}$ hasta 10^{-1}	27

4.7.	Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, los valores en la curva corresponden al valor de α en ese punto. $\ \mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\ _2^2$ en escala logarítmica.	28
4.8.	Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, en gris se encuentran las posibles combinaciones al realizar una doble regularización. $\ \mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\ _2^2$ en escala logarítmica.	28
4.9.	Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión al realizar regularización singular.	29
4.10.	Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor de pérdida al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica.	30
4.11.	Comparación del valor deconvolucionado de f_s al utilizar distintos métodos para los datos sintéticos.	32
4.12.	Comparación entre f_s y f_s^{pred} , normalizado por el máximo de f_s conocido, de distintos métodos para los datos sintéticos.	33
4.13.	Comparación del valor residual de P versus el P resultante de convolucionar el κ predicho, para distintos métodos con los datos sintéticos.	34
4.14.	Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión del problema de optimización para el caso experimental de $\lambda = 660$ [nm].	35
4.15.	Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica para el caso experimental de $\lambda = 660$ [nm].	35
4.16.	Comparación del valor deconvolucionado de κ_λ al utilizar distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 660$ [nm] a partir de las mediciones en el extremo izquierdo.	36
4.17.	Comparación del valor residual de distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 660$ [nm].	37
4.18.	Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión del problema de optimización para el caso experimental de $\lambda = 800$ [nm].	37
4.19.	Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica para el caso experimental de $\lambda = 800$ [nm].	38
4.20.	Comparación del valor deconvolucionado de κ_λ al utilizar distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 800$ [nm] a partir de las mediciones en el extremo izquierdo.	38
4.21.	Comparación del valor residual de distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 800$ [nm].	39

Capítulo 1

Introducción

Debido al crecimiento de la población y al desarrollo económico, el consumo de energía aumenta año a año, siendo una de las principales fuentes de energía la combustión de hidrocarburos. Debido al contenido de carbono en las moléculas de hidrocarburos, se produce inevitablemente CO_2 como producto de combustión, el cual es uno de los principales gases de efecto invernadero, y además se producen partículas de hollín cuando la combustión se produce en condiciones de déficit de oxidante, este hollín es un particulado cancerígeno identificado como la segunda causa más importante del calentamiento global [1]. Un ejemplo de uso cotidiano contaminante corresponde al transporte público, como se muestra en la Figura 1.1.

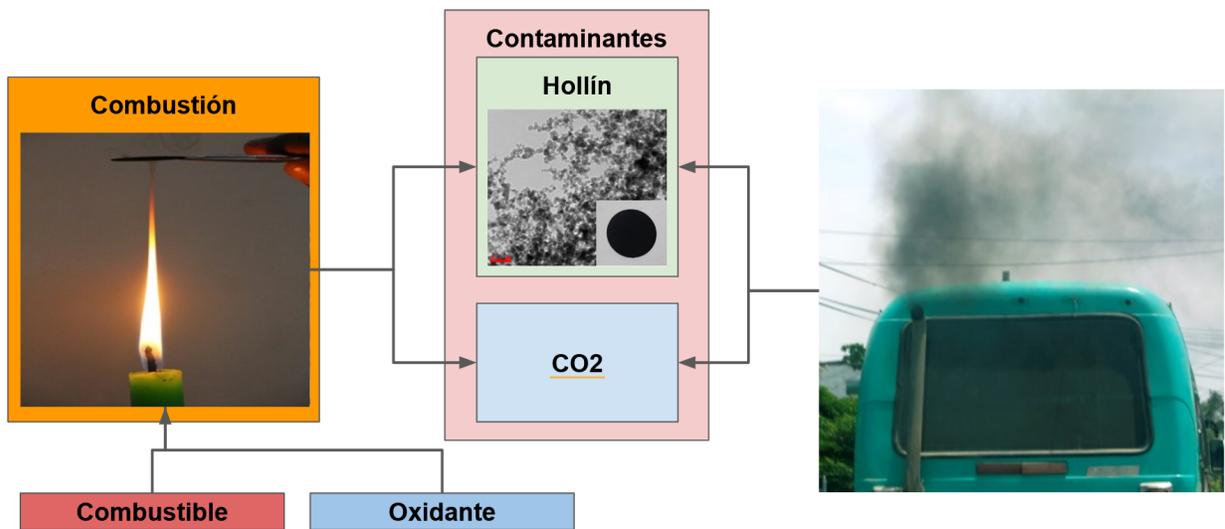


Figura 1.1: Diagrama de combustión y ejemplo de contaminación urbana.

Debido a esto, existen múltiples agentes, privados y públicos, que están trabajando con tal de aumentar la calidad y eficiencia de la combustión. Pero aun así, el estudio de nuevos combustibles, y de la combustión como tal, se ve limitado por la gran barrera de entrada en cuanto a equipos experimentales necesarios para evaluar las propiedades de las llamas generadas por la combustión.

Aun así, existen metodologías experimentales de bajo costo basadas en Line of sight attenuation, el cual consiste en medir la atenuación de un láser que atraviesa a un sujeto de estudio y a partir de estas mediciones, extraer propiedades de manera indirecta mediante el análisis de los datos resultantes.

Este procesamiento es sensible al ruido de las mediciones, por lo cual es necesario desarrollar metodologías de análisis complementarias o rediseñar las ya existentes. En vista de esto es que se plantea el trabajo de título en investigación y desarrollo de nuevas metodologías de análisis, acotando el estudio a llamas de flujo laminar axisimétricas.

1.1. Objetivos

Con tal de poder determinar el nivel de logro en el desarrollo del trabajo de título, definimos un objetivo general, y objetivos específicos que desglosen al objetivo general, con tal de hacer un seguimiento al desarrollo del trabajo de título.

Objetivo General:

- Desarrollar un método que complemente o mejore la sensibilidad ante el ruido del proceso de deconvolución para obtener la fracción en volumen de hollín a través de datos de la transmisividad de la luz integrados en el camino óptico de llamas laminares axisimétricas.

Objetivos Específicos:

- Determinar, desde la perspectiva del álgebra lineal, el origen de la sensibilidad de la deconvolución al ruido experimental.
- Implementar métodos del estado del arte para la deconvolución de la fracción en volumen de hollín con datos ruidosos.
- Formular un nuevo método mediante la incorporación de regularización enfocada en lidiar con el problema identificado.
- Evaluar la robustez del método propuesto.
- Comparar el método propuesto con el estado del arte.
- Analizar y discutir los resultados.

Capítulo 2

Antecedentes

A continuación se presentan los antecedentes teóricos que dan fundamento a la deconvolución, una revisión del estado del arte para resolver esta deconvolución y conceptos de álgebra lineal que son necesarios para desarrollar el método propuesto.

2.1. Bases de la deconvolución

2.1.1. Combustión

La combustión es una reacción química de oxidación exotérmica. Esta reacción involucra a un combustible, un oxidante y una fuente de ignición. La fuente de ignición es lo que da hincapié a la reacción de la mezcla de combustible-oxidante, como ejemplo tenemos la bujía de los motores de combustión de vehículos.

Un combustible muy utilizado históricamente son los hidrocarburos por su gran densidad energética. Estos combustibles están compuestos de átomos de carbono (C) e hidrógeno (H). Mientras que para el oxidante, usualmente se usa el aire, el cual está compuesto principalmente por los elementos O_2 y N_2 , donde el nitrógeno en general no reacciona y solo extrae calor sensible del proceso, aunque a altas temperaturas puede descomponerse y formar óxidos de nitrógeno, un componente nocivo para el medio ambiente y la salud de las personas.

Por otro lado, podemos encontrar principalmente entre los productos de esta reacción, H_2O , CO_2 y hollín, siendo el hollín una partícula compuesta por diversas especies de moléculas. En general, el hollín empieza siendo hidrocarburos radicales simples, las cuales se unen entre sí formando ciclos aromáticos simples, estos ciclos se unen entre sí, formando hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs), la unión de PAHs ya se puede considerar una partícula, a partir de este punto estas partículas se aglomeran aumentando su tamaño, este proceso se puede ver en la Figura 2.1. Siendo la composición final del hollín dependiente de los subproductos de la combustión que se lleva a cabo, puesto que en el hollín no solo se aglomeran PAHs sino que también otras moléculas como óxidos metálicos.

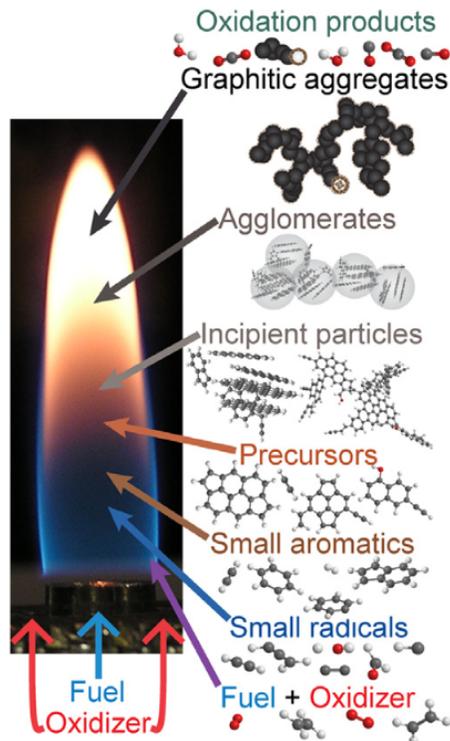


Figura 2.1: Esquema del crecimiento de las partículas de hollín [2].

La combustión es un proceso que se puede autosostener en el tiempo una vez que la temperatura es suficientemente alta para guiar las reacciones químicas y liberación de energía. Una llama es simplemente una mezcla de gases y partículas de hollín incandescentes, que emiten luz en ventanas espectrales pequeñas (gases) y como cuerpo negro (partículas). Esta emisión de radiación es utilizada usualmente por métodos no intrusivos para inferir propiedades de la llama.

Dependiendo de la velocidad de los flujos y de las propiedades de la llama, esta puede clasificarse como laminar o turbulenta. Siendo una llama laminar, una que mantiene su forma en el tiempo, mientras que una turbulenta, cambia su forma constantemente. Además, dependiendo de cómo se encuentra el combustible respecto al oxidante, se puede clasificar como llama de premezcla o difusión. Siendo una llama de premezcla, una en la cual el oxidante y el combustible están mezclados antes de la combustión, mientras que una de difusión, el combustible y el oxidante se mezclan mientras ocurre la combustión.

Enfocándonos en llamas laminares de difusión, tenemos que sus propiedades geométricas dependen de la geometría en donde se está haciendo la combustión, de esta manera al usar una boquilla de combustible cilíndrica, la llama también sería axisimétrica, es decir presentaría una simetría axial.

2.1.2. Line of Sight Attenuation

Line of Sight Attenuation(LOSA) hace referencia a la metodología experimental que muestra la atenuación de un haz de luz de longitud de onda conocida al pasar por un objeto.

Tal como se ve en la Figura 2.2, esta metodología no es intrusiva y es de costo reducido en comparación a otras.

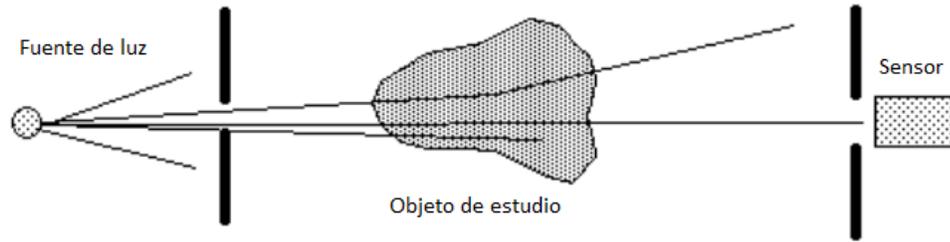


Figura 2.2: Diagrama estándar de un experimento LOSA.

En combustión es el hollín el que principalmente atenúa al haz de luz, por lo que con este experimento solo se pueden recuperar propiedades respecto al hollín.

A continuación se presenta una de las propiedades que se puede obtener a través de la metodología LOSA en llamas laminares de difusión axisimétricas.

2.1.3. Fracción en Volumen de hollín

La fracción en volumen de hollín se puede determinar usando la Ecuación 2.1 [3].

$$f_s = \kappa_{abs,\lambda} \frac{\lambda}{6\pi E_\lambda}. \quad (2.1)$$

Donde:

- λ : Longitud de onda de la luz.
- $\kappa_{abs,\lambda}$: Coeficiente de absorción espectral.
- E_λ : Función de absorción, que depende del índice de refracción del hollín.

De la Ecuación 2.1 se desconoce $\kappa_{abs,\lambda}$, pero este se puede determinar a partir de mediciones realizadas con el método LOSA para la llama laminar axisimétrica, como se muestra en la Figura 2.3. En donde se asume que las partículas de hollín extinguen la luz en el camino óptico dado por y , para luego relacionar el coeficiente de extinción con la transmisividad de la llama por medio de la ley de Beer-Lambert [4]. Luego, si se considera que las partículas son suficientemente pequeñas para considerarse en el régimen de Rayleigh, podemos utilizar la Ecuación 2.1 y despreciar los efectos de dispersión. Asumiendo que el coeficiente de absorción es igual al de extinción. Esto nos da la Ecuación 2.2, donde tenemos el coeficiente de extinción espectral local dentro de la integral, ya que las mediciones tomadas corresponden a la absorbancia en el camino óptico que describe la integral, por lo que es necesario realizar una deconvolución con tal de despejar el valor de $\kappa_{abs,\lambda}$, para luego calcular la fracción en volumen de hollín.

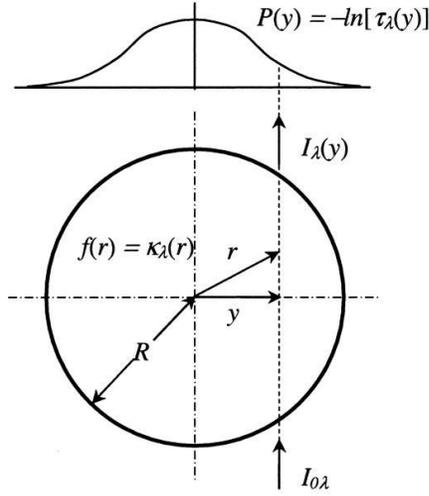


Figura 2.3: Metodología LOSA en una llama axisimétrica [5].

$$\underbrace{P(y) = -\ln(\tau_\lambda(y)) = -\ln\left(\frac{I_\lambda(y)}{I_{\lambda 0}}\right)}_{\text{Ley de Beer-Lambert}} = 2 \int_y^R \frac{\kappa_\lambda(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr. \quad (2.2)$$

Donde:

- $P(y)$: Absorbancia registrada en y .
- λ : Longitud de onda de la luz.
- $\tau_\lambda(y)$: Transmitancia registrada en y .
- $\kappa_\lambda(r)$: Coeficiente de extinción espectral local.
- $I_{\lambda 0}$: Intensidad lumínica entrante.
- $I_\lambda(y)$: Intensidad lumínica saliente en y .

A la Ecuación 2.2 también se le conoce como a la transformada de Abel, la cual es usada para el procesamiento de señales en distintos rubros.

Si reemplazamos 2.2 en 2.1 podemos observar de manera directa la relación de $P(y)$ con la fracción en volumen de hollín.

$$P(y) = 2 \int_y^R \frac{6\pi E_\lambda}{\lambda} \frac{f_s(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr = \frac{12\pi E_\lambda}{\lambda} \int_y^R \frac{f_s(r)r}{\sqrt{r^2 - y^2}} dr. \quad (2.3)$$

2.2. Estado del arte

A lo largo del tiempo se han diseñado distintas metodologías para realizar la deconvolución descrita por la transformada de Abel. Entre ellas se encuentran [6]:

- Onion Peeling (OP):
Consiste en la discretización de la transformada de Abel en anillos, los cuales se asumen cumplen con una función constante diferente para cada anillo.
- Three-Point Abel Deconvolution:
Consiste en la discretización de la transformada de Abel en anillos, los cuales se asumen cumplen con una función cuadrática basada en el valor del anillo y de sus dos vecinos, de ahí que se llame deconvolución de Abel de tres puntos.
- Onion Peeling con regularización de Tikhonov:
Consiste en extender el problema de optimización presentado por la metodología de Onion Peeling con una regularización de Tikhonov con tal de aumentar la robustez ante el ruido de la metodología original. Si bien se puede regularizar cualquier discretización de la integración, esta combinación es la que entrega mejores resultados [5]. Por su simplicidad, es la que más se usa.
- Fitting the line-of-sight projection of a predefined intensity distribution (FLiPPID) [7]:
Consiste en ajustar los parámetros de una función conocida tal de que al integrarla se ajuste a los valores medidos.

Como acotación importante, notamos que el estado del arte presentado y el explorado no toman en cuenta la dirección axial del problema, esto debido a que el problema de la transformada de Abel se define solo considerando la dirección radial.

A continuación se entra en detalle de las metodologías de Onion Peeling con Regularización de Tikhonov y FLiPPID, puesto que estas representarán el estado del arte con el cual se llevará a cabo la validación de la metodología propuesta.

2.2.1. Onion Peeling con Regularización de Tikhonov

Como se adelantaba, Onion Peeling con regularización de Tikhonov consiste en expandir el problema de optimización original de OP añadiéndole una matriz de regularización que limite el efecto del ruido en la deconvolución. Esto se puede apreciar a continuación.

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_x \|\mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 \quad \longrightarrow \quad \mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_x (\|\mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\alpha\mathbf{\Gamma}\mathbf{x}\|_2^2). \quad (2.4)$$

Donde $\mathbf{A}_{\text{op}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ corresponde a la discretización de la integral usando el método de OP en forma matricial, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ al coeficiente de absorción, el cual corresponde a la función que queremos conocer, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ a los datos medidos de transmitancia, y tanto α como $\mathbf{\Gamma}$ a parámetros de la regularización, siendo α una constante y $\mathbf{\Gamma}$ una matriz.

A continuación se explica en mayor detalle las distintas partes que conforman a esta metodología.

2.2.1.1. Onion Peeling

Este método discretiza el espacio de la integral en anillos, como se muestra en la Figura 2.4. Esta discretización crea un sistema de ecuaciones que dan lugar a la matriz \mathbf{A}_{op} la cual está definida como:

$$\mathbf{A}_{\text{op},ij} = \begin{cases} 0 & j < i, \\ 2\Delta r \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - i^2} & j = i, \\ 2\Delta r \sqrt{(j + \frac{1}{2})^2 - i^2} - \sqrt{(j - \frac{1}{2})^2 - i^2} & j > i. \end{cases} \quad (2.5)$$

Notamos que \mathbf{A}_{op} es una matriz triangular superior de rango completo.

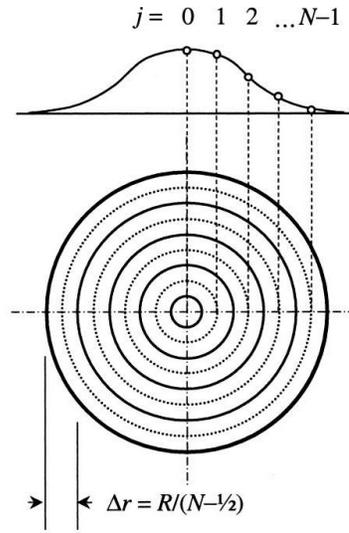


Figura 2.4: Discretización del espacio de una llama axisimétrica [5].

Obteniendo el siguiente problema de optimización:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_x \|\mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2. \quad (2.6)$$

En donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ representa $\kappa_\lambda(r)$ y $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$, $P(y)$, en específico $\mathbf{b}_i = P(\Delta r \cdot (i - 1))$ y $\mathbf{x}_i = \kappa_\lambda(\Delta r \cdot (i - 1))$ para $i \in [1, N]$.

A pesar de que \mathbf{A}_{op} es una matriz triangular superior de rango completo y que, por lo tanto, es invertible, en la práctica los valores de las columnas son casi idénticos, por lo cual se resuelve como si fuese un problema de mínimos cuadrados, el cual tiene una solución dada por [8]:

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}_{\text{op}}^T \mathbf{A}_{\text{op}})^{-1} \mathbf{A}_{\text{op}}^T \mathbf{b}. \quad (2.7)$$

2.2.1.2. Regularización de Tikhonov

La regularización de Tikhonov es utilizada para que el resultado de un problema de optimización sea suave [9], y consiste en agregar al problema de optimización el término $\|\alpha\mathbf{\Gamma}\mathbf{x}\|_2^2$, en donde $\mathbf{\Gamma}$ es una matriz de regularización y α un parámetro que indica qué tan importante es suavizar \mathbf{x} . Por ejemplo, si a la Ecuación 2.6 le agregamos regularización de Tikhonov, nos queda de la siguiente forma [10]:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_x (\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\alpha\mathbf{\Gamma}\mathbf{x}\|_2^2). \quad (2.8)$$

La cual sigue siendo un problema de mínimos cuadrados, y por ende, su solución es la siguiente ecuación a continuación [5].

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^T\mathbf{A} + \alpha^2\mathbf{\Gamma}^T\mathbf{\Gamma})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b}. \quad (2.9)$$

Entrando en más detalle en el parámetro y matriz de regularización, tenemos:

- **Parámetro de regularización**

Este parámetro es el método principal de control sobre la regularización, ya que en el problema de optimización indica qué tanto vamos a regularizar.

Si este valor es muy grande, el problema de optimización va a tomarle más importancia a la regularización que al problema original con los cual estaríamos sobre regularizando, y en particular si es que se escoge un $\mathbf{\Gamma}$ que busca suavizar, $\mathbf{x} \rightarrow 0$. Por otro lado, si su valor es muy pequeño, la regularización no tendrá efecto y sería equivalente a optimizar solamente el problema original.

Por esto mismo, existen diversos métodos para escoger el valor de este parámetro de manera automática [10], pero aun así, el método iterativo de prueba y error sigue siendo el método más común.

- **Matriz de regularización**

La matriz de regularización, si bien puede ser arbitraria, es común que esta corresponda a una matriz de diferenciación finita [5]. Estas matrices tienen su origen en las diferencias finitas. Las cuales se usan como un método numérico para calcular la derivada de una función a partir de una cantidad finita de puntos de la función, es principalmente usada cuando no es posible calcular la derivada de la función de manera analítica.

Para el cálculo de la primera derivada, se tienen los siguientes esquemas de diferencias finitas para la primera derivada [11], donde u es una función de x y h corresponde al paso entre los puntos.

1. Diferencias Posterior:

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} + O(h).$$

2. Diferencias Anterior:

$$u'(x) = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} + O(h).$$

3. Diferencias Centradas:

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + O(h^2).$$

En donde O indica el orden del error de la aproximación, de las cuales en las diferencias centradas presentan el error más pequeño, puesto que al ser h pequeño, en particular para $h \leq 1$, se tiene que $h^2 \leq h$.

La definición de la matriz de diferenciación sigue el siguiente patrón, tenemos un vector $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$, tenemos que su derivada calculada por diferencias posteriores corresponde al sistema de ecuaciones:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} u'_1 \\ \vdots \\ u'_k \\ \vdots \\ u'_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}'} \approx h^{-1} \cdot \begin{bmatrix} -u_1 & u_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -u_k & u_{k+1} & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -u_N \end{bmatrix} = h^{-1} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & -1 & 1 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{D}} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_k \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{u}}. \quad (2.10)$$

Donde \mathbf{D} se define como una matriz de diferenciación, este mismo procedimiento se puede realizar con cualquiera de las diferencias finitas presentadas.

2.2.2. FLiPPID

Este método optimiza los parámetros (ν) de una función $f(r, \nu)$ conocida, tal que al integrarla se minimice la diferencia con los datos medidos [7]. Definiendo el problema de optimización como:

$$\nu^* = \operatorname{argmin}_{\nu} (\|\mathbf{A}\mathbf{f}(\nu) - \mathbf{b}\|_2^2). \quad (2.11)$$

En donde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ es una matriz de integración, esta puede ser \mathbf{A}_{op} , y $\mathbf{f}(\nu) \in \mathbb{R}^N$ en donde $\mathbf{f}_i = f(\Delta r \cdot (i-1), \nu)$ para $i \in [1, N]$. Con esto es claro que $f(r, \nu^*) \approx \kappa_{\lambda}(r)$.

La mayor característica de este método es que la elección de la función f dictará el comportamiento de κ_{λ} y la calidad de la deconvolución. En específico, en el contexto de llamas axisimétricas laminares, la función a utilizar corresponde a:

$$f(r, \nu) = \frac{\nu_1}{\nu_2 \sqrt{(\pi)}} \exp \left\{ \nu_3 \left(\frac{r}{\nu_2} \right)^2 - \left(\frac{r}{\nu_2} \right)^6 \right\}. \quad (2.12)$$

En este caso, para cada parámetro tenemos una restricción y una relación con la llama,

así para:

- $\nu_1 \in \mathbb{R}^+$, es la amplitud característica de f .
- $\nu_2 \in \mathbb{R}^+$, es el orden de magnitud del radio de la llama.
- $\nu_3 \in \mathbb{R}$, es la posición del mínimo en el extremo de llama.

2.3. Conceptos de álgebra lineal

Para la comprensión completa del método propuesto es necesario conocer unos operadores claves en la formulación de este, además de ilustrar un caso de estudio que inspira a la formulación desarrollada.

2.3.1. Producto Kronecker

El producto Kronecker, anotado como \otimes , para dos matrices $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times q}$ y $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{r \times s}$, en donde p, q, r y s son tamaños arbitrarios, está definida como [11]:

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & \dots & a_{1q}\mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{p1}\mathbf{B} & \dots & a_{pq}\mathbf{B} \end{bmatrix} = \mathbf{C}. \quad (2.13)$$

Donde $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{pr \times qs}$

2.3.1.1. Vectorización de matrices

La vectorización de una matriz corresponde al operador *vec*, el cual para una matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ está definido como

$$\text{vec}(\mathbf{A}) = (a_{11}, \dots, a_{m1}, a_{12}, \dots, a_{m2}, \dots, a_{1n}, \dots, a_{mn})^T. \quad (2.14)$$

Es decir, *vec* es un operador que apila las columnas de una matriz formando un vector de largo mn .

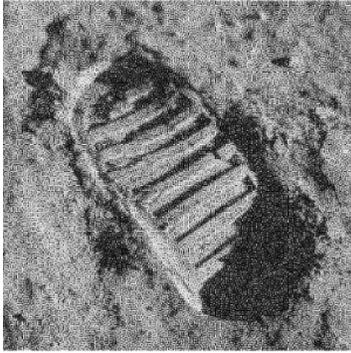
2.3.2. De-blurring de imágenes

Cuando se tiene una imagen difuminada (\mathbf{y}) con ruido, y la matriz de difuminación (\mathbf{A}) que la origina, es conocida, podemos hacer el supuesto de que la imagen original (\mathbf{x}) es suave, es decir, que los píxeles vecinos no son tan diferentes entre ellos, con esto podemos definir el siguiente problema de optimización para encontrar la imagen original [8].

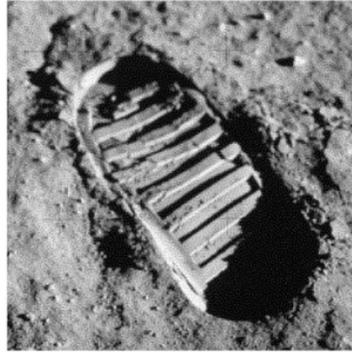
$$\mathbf{x}^* = \underset{\mathbf{x}}{\text{argmin}} (\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 + \lambda(\|\mathbf{D}_h\mathbf{x}\|_2^2 + \|\mathbf{D}_v\mathbf{x}\|_2^2)). \quad (2.15)$$

Donde \mathbf{D}_h corresponde a una matriz de diferenciación a posterior horizontal de la imagen y \mathbf{D}_v , a una vertical. En la Figura 2.5 se puede apreciar cómo este parámetro λ afecta al proceso de de-blurring.

$$\lambda = 10^{-6}$$



$$\lambda = 10^{-4}$$



$$\lambda = 10^{-2}$$



$$\lambda = 1$$



Figura 2.5: Ejemplo de deblurring con $\lambda = 10^{-6}$, 10^{-4} , 10^{-2} y 1 [8].

Capítulo 3

Metodología

Una vez ya recopilados los antecedentes necesarios, podemos distinguir la siguiente metodología de trabajo para completar nuestros objetivos. La cual se puede separar principalmente en la adquisición de los datos, la formulación del método propuesto y la validación de este.

Cada uno de estos ejes es descrito en su correspondiente sección a continuación.

3.1. Datos

Al ser un trabajo enfocado en el desarrollo de un método, es necesario tener datos con los cuales probar el método propuesto y cuantificar el comportamiento que este presenta, con respecto a sí mismo y con respecto a otros métodos ya establecidos. En este caso, los datos fueron proporcionados por el Departamento de Industrias de la Universidad Técnica Federico Santa María y se pueden dividir en dos categorías: datos sintéticos y experimentales.

3.1.1. Datos sintéticos

Corresponden a los datos de una llama simulada usando el software CoFlame [12]. Siendo la llama simulada producida por etileno, con los supuestos de llama de difusión laminar axisimétrica, y con un flujo de etileno de 3.465 [cm/s] y de oxidante, compuesto 21 % O₂ y 79 % N₂, de 61.255 [cm/s] [13].

Los datos a utilizar de la simulación corresponden a la fracción en volumen de hollín y la absorbancia que registraría una cámara en un entorno experimental en una malla regular de 114 elementos en la dirección axial y 18 en la dirección radial.

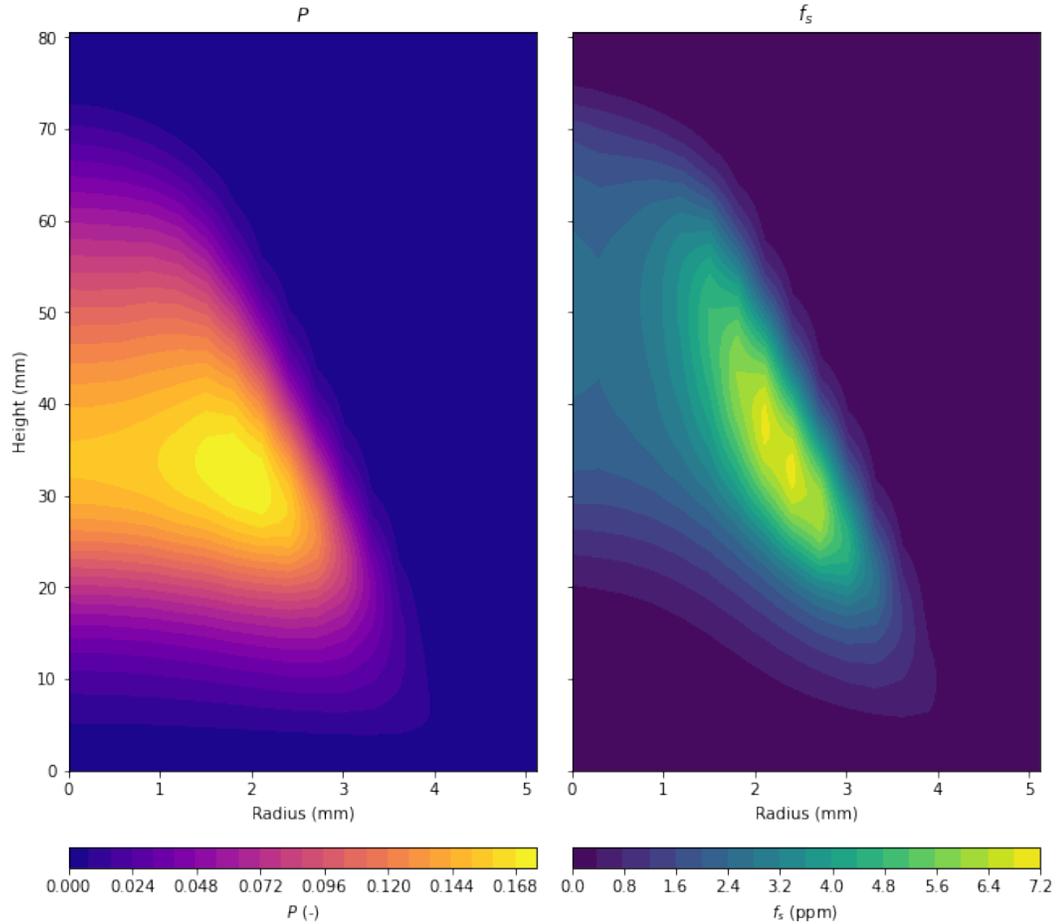


Figura 3.1: A la izquierda, la transmitancia en escala logarítmica (P), y la derecha, la fracción en volumen de hollín (f_s) de una llama medida con un $\lambda = 660$ [nm].

Al ser datos simulados, estos no poseen el ruido característico de la toma de datos experimentales. Para replicar este entorno experimental se añade ruido Gaussiano con una media de 0 y desviación estándar proporcional al máximo de la simulación. Ejemplos de simulaciones con el ruido añadido se pueden observar en la Figura 3.2. Este procedimiento nos permite estudiar la robustez de los métodos ante el ruido. Además, se sabe que el ruido característico de este tipo de experimentos corresponde a un 1% [14].

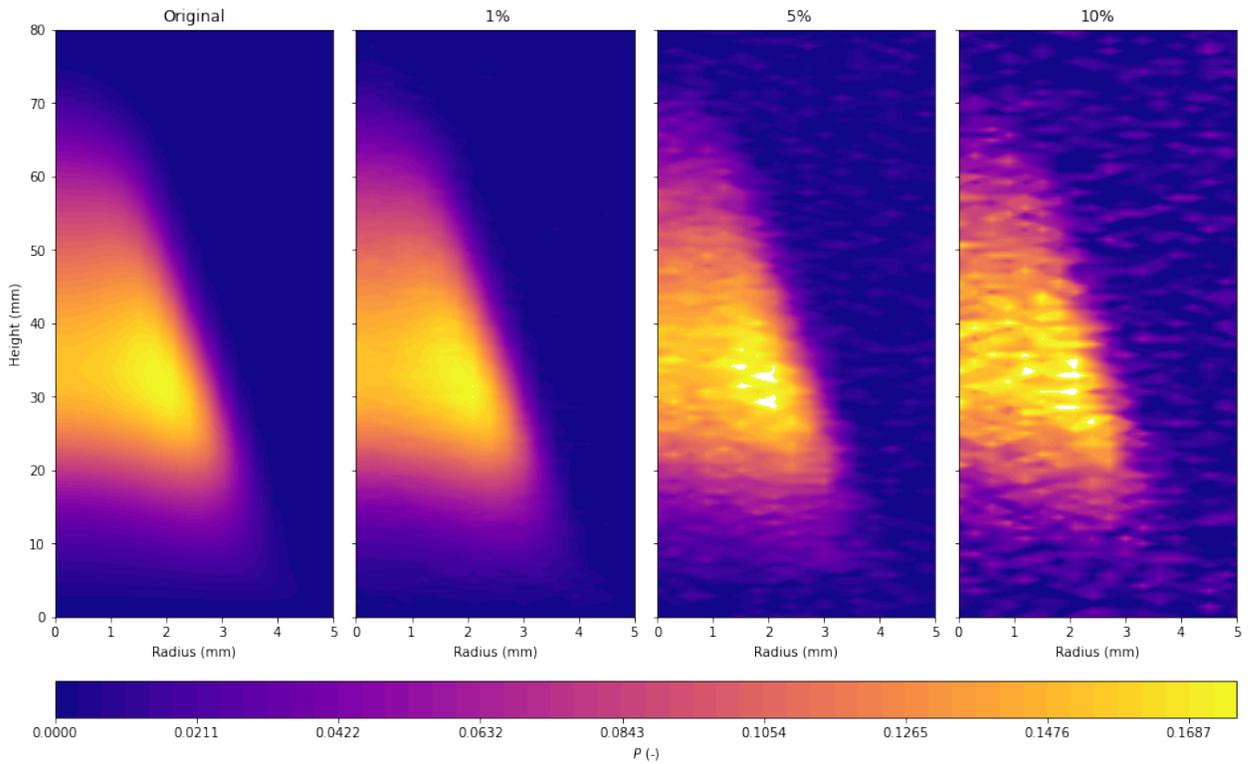


Figura 3.2: Datos sintéticos de la transmitancia logarítmica, P , sin ruido y con ruido añadido.

3.1.2. Datos experimentales

Los datos experimentales son resultados de medir la transmitancia de una llama de etileno con la técnica LOSA. Esta llama corresponde a una con un flujo de 0.194 [slpm] de etileno y 284 [slpm] de aire a condiciones de 21.1 [°C] y 1 [bar]. El setup experimental se puede observar en la Figura 3.3, en la cual además se notan los distintos componentes que fueron usados [13].

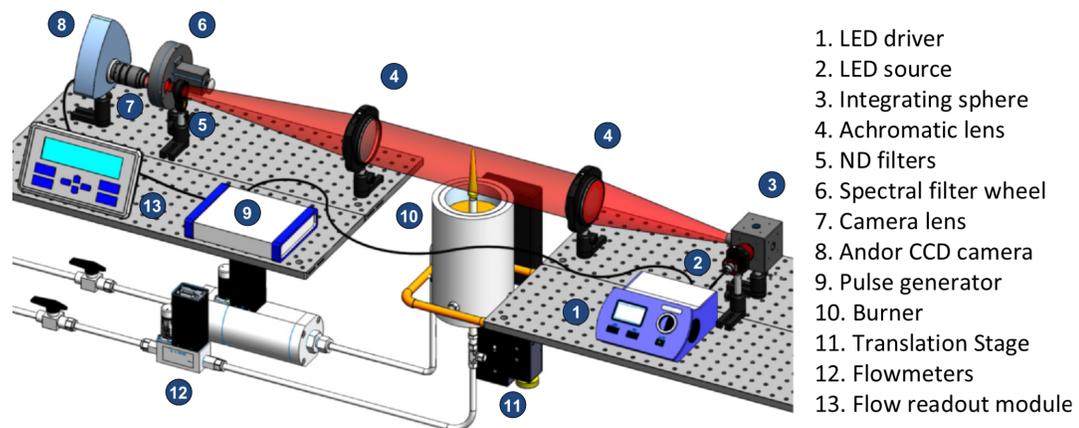


Figura 3.3: Esquema del setup experimental para capturar la absorbancia por medio de la técnica LOSA [13].

Los datos resultantes de este experimento se pueden observar en la Figura 3.4. Cabe destacar que para estos datos experimentales no se conoce la fracción en volumen de hollín. Y que sus dimensiones de la malla regular a usar corresponde de 128 elementos en la dirección axial y 40 en la dirección radial. Además, en la figura podemos notar que a mayor longitud de onda la cantidad de luminancia absorbida es menor, esto debido a que la longitud de onda es mayor al tamaño de las partículas.

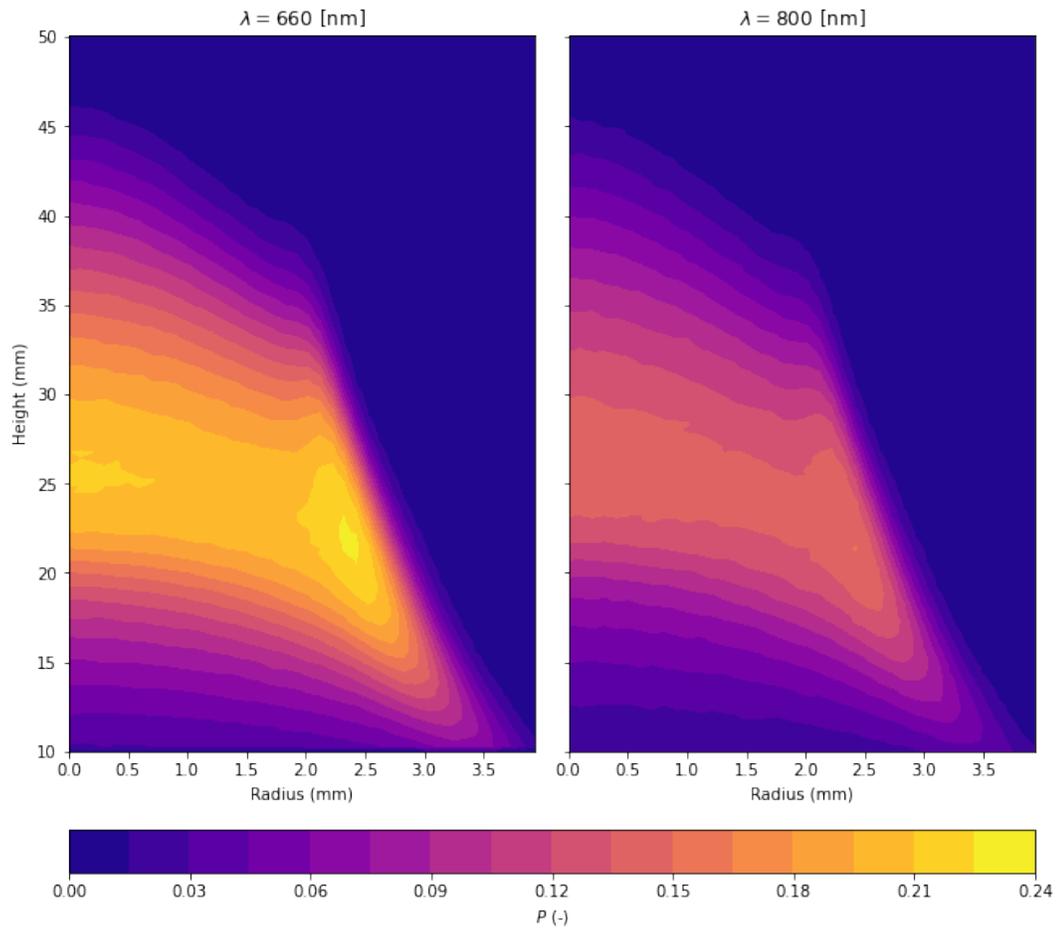


Figura 3.4: Absorbancia medida con $\lambda = 660 \text{ [nm]}$, a la izquierda, y con $\lambda = 800 \text{ [nm]}$, a la derecha.

3.2. Método Propuesto

El método propuesto tiene sus bases en el método de Onion Peeling, este originalmente se aplica para una altura específica, por lo que para realizar una deconvolución de información en 2D, se tiene que iterar para cada altura distinta, esto lo podemos representar como se muestra en la Figura 3.5:

$$\underbrace{\mathbf{b}_i}_{\in \mathbb{R}^{N_r}} = \underbrace{\mathbf{A}_{\text{op}}}_{\in \mathbb{R}^{N_r \times N_r}} \underbrace{\mathbf{x}_i}_{\in \mathbb{R}^{N_r}} \quad \forall i \in [1, N_z]$$

Figura 3.5: Esquema del método OP.

Esto se puede definir como un problema multivariable, puesto que la matriz \mathbf{A}_{op} es independiente de la altura. Con esto definimos la matriz \mathbf{B} , que representa los datos convolucionados (los que medimos), y la matriz \mathbf{X} , que representa los datos deconvolucionados (la distribución radial del coeficiente de extinción). Esto se puede representar como se muestra en la Figura 3.6:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 & \mathbf{b}_2 & \mathbf{b}_3 & \mathbf{b}_4 \end{bmatrix}}_{\in \mathbb{R}^{N_r \times N_z}} = \underbrace{\mathbf{A}_{\text{op}}}_{\in \mathbb{R}^{N_r \times N_r}} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \mathbf{x}_3 & \mathbf{x}_4 \end{bmatrix}}_{\in \mathbb{R}^{N_r \times N_z}}$$

Figura 3.6: Esquema de $\mathbf{B} = \mathbf{A}_{\text{op}}\mathbf{X}$.

Ahora, con la ayuda del producto Kronecker y $\text{vec}()$ podemos volver a vectorizar el sistema multivariable, de tal manera que $\mathbf{b}' = \text{vec}(\mathbf{B})$, $\mathbf{x}' = \text{vec}(\mathbf{X})$ y $\mathbf{A}'_{\text{op}} = \mathbf{I}_{N_z} \otimes \mathbf{A}_{\text{op}}$. La Figura 3.7 muestra un esquema de esta vectorización. Notamos que \mathbf{I}_N corresponde a la matriz identidad de dimensión N .

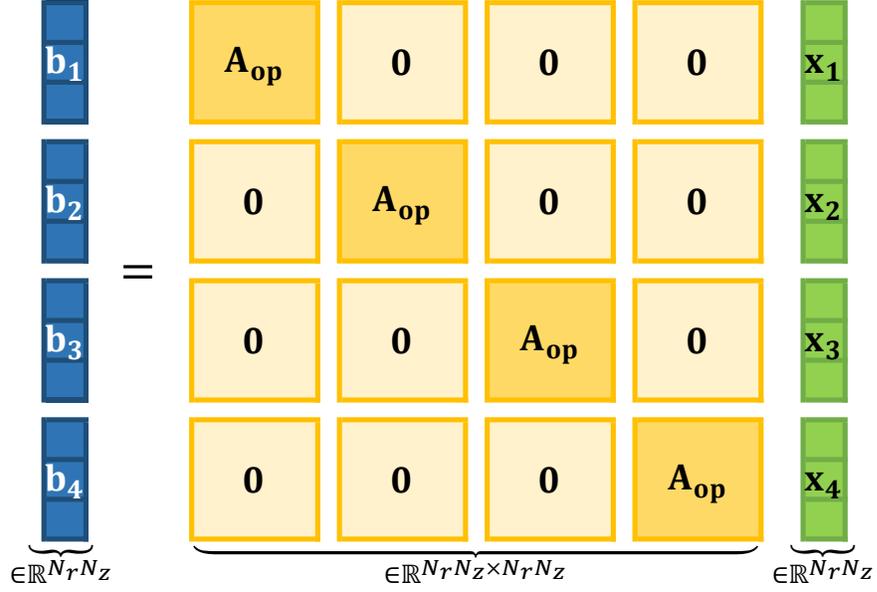


Figura 3.7: Esquema de $\mathbf{b}' = \mathbf{A}'_{\text{op}} \mathbf{x}'$.

El sistema resultante tiene una estructura equivalente a la del sistema original, esto se puede observar en la Figura 3.8 y tiene la característica de realizar la deconvolución en todas las alturas en un mismo paso.

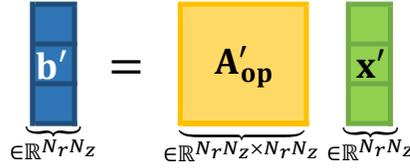


Figura 3.8: Simplificación de $\mathbf{b}' = \mathbf{A}'_{\text{op}} \mathbf{x}'$.

Por último, al igual que con el problema de Onion Peeling original, podemos usar regularización de Tikhonov.

$$\mathbf{x}^* = \underset{x}{\operatorname{argmin}} (\|\mathbf{A}'_{\text{op}} \mathbf{x}' - \mathbf{b}'\|_2^2 + \|\alpha \Gamma \mathbf{x}'\|_2^2) \quad \longrightarrow \quad \mathbf{x}^* = (\mathbf{A}'_{\text{op}}{}^T \mathbf{A}'_{\text{op}} + \alpha^2 \Gamma^T \Gamma)^{-1} \mathbf{A}'_{\text{op}}{}^T \mathbf{b}'. \quad (3.1)$$

Aunque a diferencia de la matriz de regularización del problema original, la del método propuesto tiene acceso a la información de distintas alturas. Esto nos permite regularizar de tal manera que podemos suavizar tanto en la dirección r como en z .

En específico podemos definir las matrices, donde \mathbf{D}_N corresponde a la matriz de diferenciación de $N \times N$:

- $\Gamma_r = \mathbf{D}_{N_r} \otimes \mathbf{I}_{N_z}$, para promover suavidad en el eje r .
- $\Gamma_z = \mathbf{I}_{N_r} \otimes \mathbf{D}_{N_z}$, para promover suavidad en el eje z .

Y al realizar una doble regularización promoveríamos suavidad en ambas direcciones, lo cual define el siguiente problema de optimización:

$$\mathbf{x}^* = \operatorname{argmin}_x (\|\mathbf{A}'_{\text{op}} \mathbf{x}' - \mathbf{b}'\|_2^2 + \|\alpha_r \mathbf{\Gamma}_r \mathbf{x}'\|_2^2 + \|\alpha_z \mathbf{\Gamma}_z \mathbf{x}'\|_2^2). \quad (3.2)$$

El cual tiene como solución:

$$\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}'_{\text{op}}{}^T \mathbf{A}'_{\text{op}} + \alpha_r^2 \mathbf{\Gamma}_r{}^T \mathbf{\Gamma}_r + \alpha_z^2 \mathbf{\Gamma}_z{}^T \mathbf{\Gamma}_z)^{-1} \mathbf{A}'_{\text{op}}{}^T \mathbf{b}'. \quad (3.3)$$

Esta nueva metodología nos entrega tres casos de regularización para el estudio:

- $\alpha_z = 0, \alpha_r \neq 0$, promueve suavidad solo en r , equivale al método clásico de OP con regularización de Tikhonov.
- $\alpha_z \neq 0, \alpha_r = 0$, promueve suavidad solo en z .
- $\alpha_z \neq 0, \alpha_r \neq 0$, promueve suavidad en ambas direcciones al mismo tiempo.

3.3. Evaluación del método propuesto

Con tal de comprender las debilidades y fortalezas del método propuesto, es necesario realizar dos tipos de estudios, el primero busca contestar como se comporta el método ante cambios de ruido y parámetros, y el segundo en como se compara el método a las demás soluciones del estado del arte.

En específico, estos estudios se detallan en sus respectivas secciones.

3.3.1. Comportamiento

Al estudiar el comportamiento usaremos como base las llamas sintéticas, puestas que conocemos los valores reales de la fracción en volumen de hollín. Con esto somos capaces de comparar los efectos en los cambios de los parámetros.

Para cuantificar el error usaremos root-mean-square error (RMSE), Ecuación 3.4, entre la fracción en volumen de hollín real (f_s) y el deconvolucionado (\hat{f}_s). Entre menor el RMSE mejor.

$$\text{RMSE}(f_s, \hat{f}_s) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{f}_s^i - f_s^i)^2}. \quad (3.4)$$

De esta manera, lo que queremos estudiar corresponden a:

- Cambios en la matriz de regularización:

Como se menciona en los antecedentes la matriz de regularización corresponde a una matriz de diferenciación, en específico esto nos permite cambiar de la matriz de diferenciación basada en diferencias posteriores (\mathbf{D}^p) a una de diferencias centrales (\mathbf{D}^c) con lo que aumentaría la precisión del cálculo de la derivada. Este cambio se puede realizar para cada eje con lo que tendríamos 4 matrices de regularización, las cuales quedan definidas como:

- $\Gamma_{r1} = \mathbf{D}_{N_r}^p \otimes \mathbf{I}_{N_z}$, para suavizar en el eje r con diferencias posteriores.
- $\Gamma_{r2} = \mathbf{D}_{N_r}^c \otimes \mathbf{I}_{N_z}$, para suavizar en el eje r con diferencias centrales.
- $\Gamma_{z1} = \mathbf{I}_{N_r} \otimes \mathbf{D}_{N_z}^p$, para suavizar en el eje z con diferencias posteriores.
- $\Gamma_{z2} = \mathbf{I}_{N_r} \otimes \mathbf{D}_{N_z}^c$, para suavizar en el eje z con diferencias centrales.

Vamos a comparar la robustez de cada tipo de regularización ante el ruido e identificar las ubicaciones en la llama donde se encuentran los errores de mayor magnitud.

- Cambios en la cantidad de tipos de regularización:

El método propuesto permite regularizar solo en un eje, regularización simple, o en ambos a la vez, regularización doble, estos corresponden a los tres casos antes descritos, regularizar en r , en z y en ambos. Para esto usaremos las matrices de regularización basadas en diferencias posteriores.

Principalmente, queremos ver el efecto de modificar los parámetros de regularización para el caso de regularización simple y doble. Además, de comparar los resultados entre sí.

3.3.2. Comparación

Con tal de comparar utilizaremos tanto los datos de llamas sintéticas como los experimentales. Ya que con los datos sintéticos somos capaces de determinar la calidad y precisión esperada de los métodos, mientras que con los datos experimentales, tenemos una comparación de cómo sería su uso en el laboratorio. Para esto usaremos el residual, Ecuación 3.5, el cual definimos como la magnitud del error con respecto a los datos, entre más cercano a 0 mejor.

$$\text{RES}(P_y, A'_{op}\hat{\kappa}_\lambda) = 100 \cdot \frac{A'_{op}\hat{\kappa}_\lambda - P_y}{\max(P_y)} \quad (3.5)$$

En específico, en cuanto a la comparación en:

- Llamas sintéticas:

Al tener la fracción en volumen de hollín real, podemos comparar de manera cuantitativa la calidad de la deconvolución al usar los distintos métodos de deconvolución, además de identificar las locaciones en la llama en las cuales los métodos poseen una mayor magnitud de error.

A esto se le añade el estudiar los residuales de cada método, esto nos indicará la influencia real que tienen los datos medidos para la deconvolución, esto es relevante en cuanto a que los residuales son la única métrica que tenemos disponible en casos simulados como en experimentales.

- Llamas experimentales:

En este caso, no tenemos la fracción en volumen real, pero este corresponde al uso real en el cual se va a desempeñar el método propuesto, por lo que es necesario realizar la comparación. Esta será en parte cualitativa en cuanto a la calidad del resultado y cuantitativa al evaluar los residuales para cada método.

Capítulo 4

Resultados

A continuación se presentarán los resultados del apartado de validación de la metodología, una vez presentados estos serán analizados en la misma sección.

4.1. Comportamiento

4.1.1. Cambios de matriz

Para estudiar el comportamiento, primero trabajamos con un caso específico en el que se agregó un ruido de 1% a la llama sintética, Figura 4.1, luego este caso específico los resolvemos con las distintas matrices de regularización, Figura 4.2.

En estas figuras podemos notar que en todos los casos los artefactos que se generan están elongados principalmente en la dirección de regularización, de este modo las que regularizan en r , son más largas en r , y las en z , en z . Aunque si nos fijamos en la Figura 4.2 en el resultado correspondiente a Γ_{z2} podemos notar artefactos en la dirección r . Además, se observa que al regularizar en solo una dirección afecta a la otra dirección. El claro ejemplo es el resultado de Γ_{z1} en donde ambas direcciones se ven con el mismo grado de suavidad.

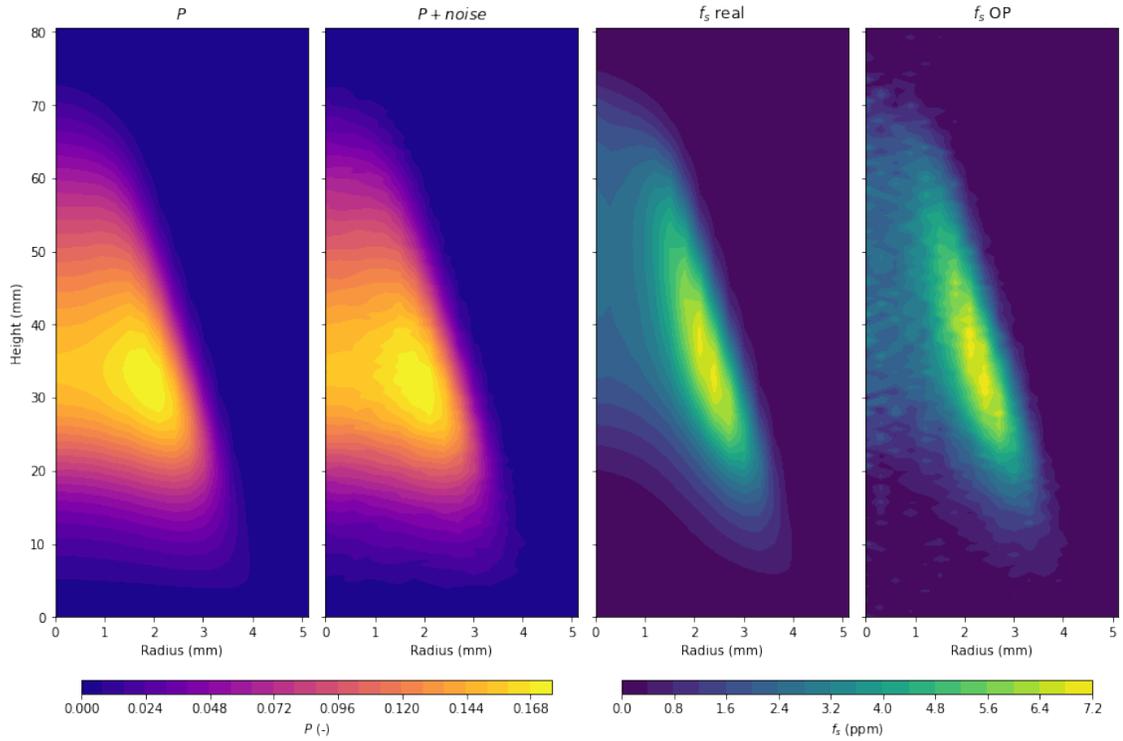


Figura 4.1: Caso específico, de izquierda a derecha tenemos, las observaciones sin ruido, luego con el ruido agregado, luego f_s real, terminando con f_s deconvolucionado con Onion Peeling.

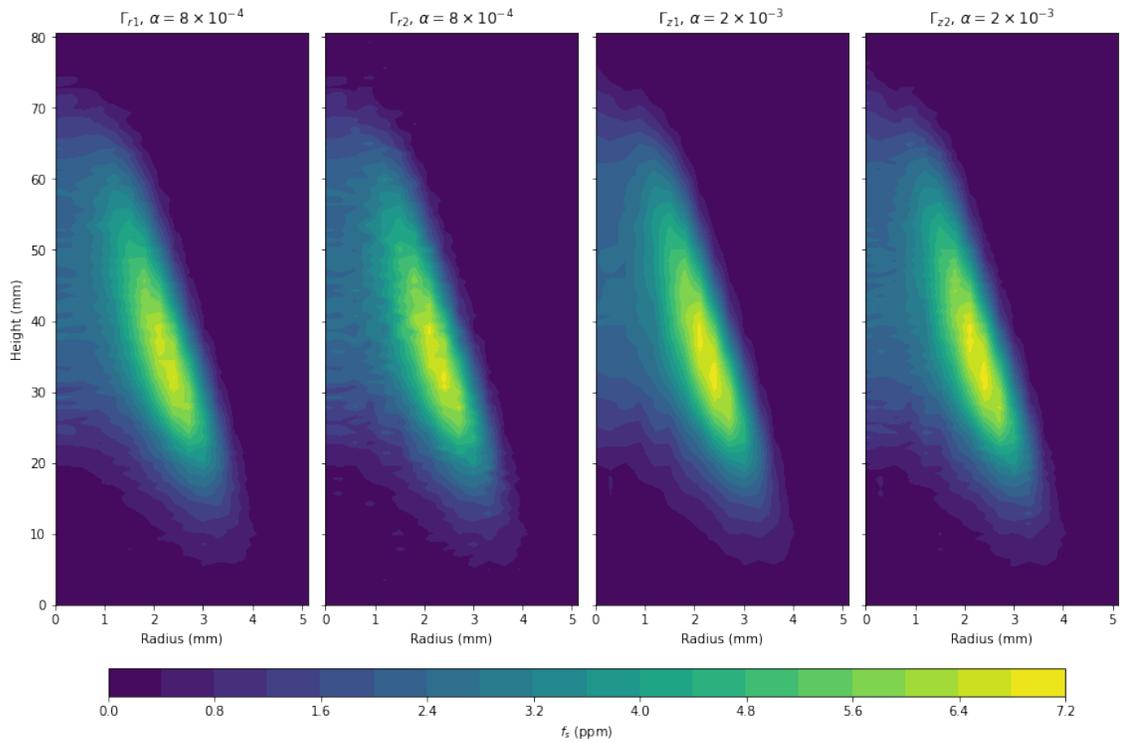


Figura 4.2: Deconvolución usando el método propuesto con las matrices de regularización Γ_{r1} , al extremo izquierdo, Γ_{r2} , Γ_{z1} y Γ_{z2} al extremo derecho.

A continuación, tomamos las curvas deconvolucionadas del caso anterior a distintas alturas y radios, y las comparamos con la curva real, Figura 4.3. En esta observamos que las matrices de regularización en r tienden a subestimar el máximo de f_s , y que en ambas direcciones se puede notar el error acumulado en el origen radial de la llama. Cuando comparamos las curvas en distintos radios, notamos que las matrices que regulan en r , estiman de mejor manera el origen ($r = 0$) a distintas alturas, mientras que las que regulan en z estiman mejor alejadas del centro.

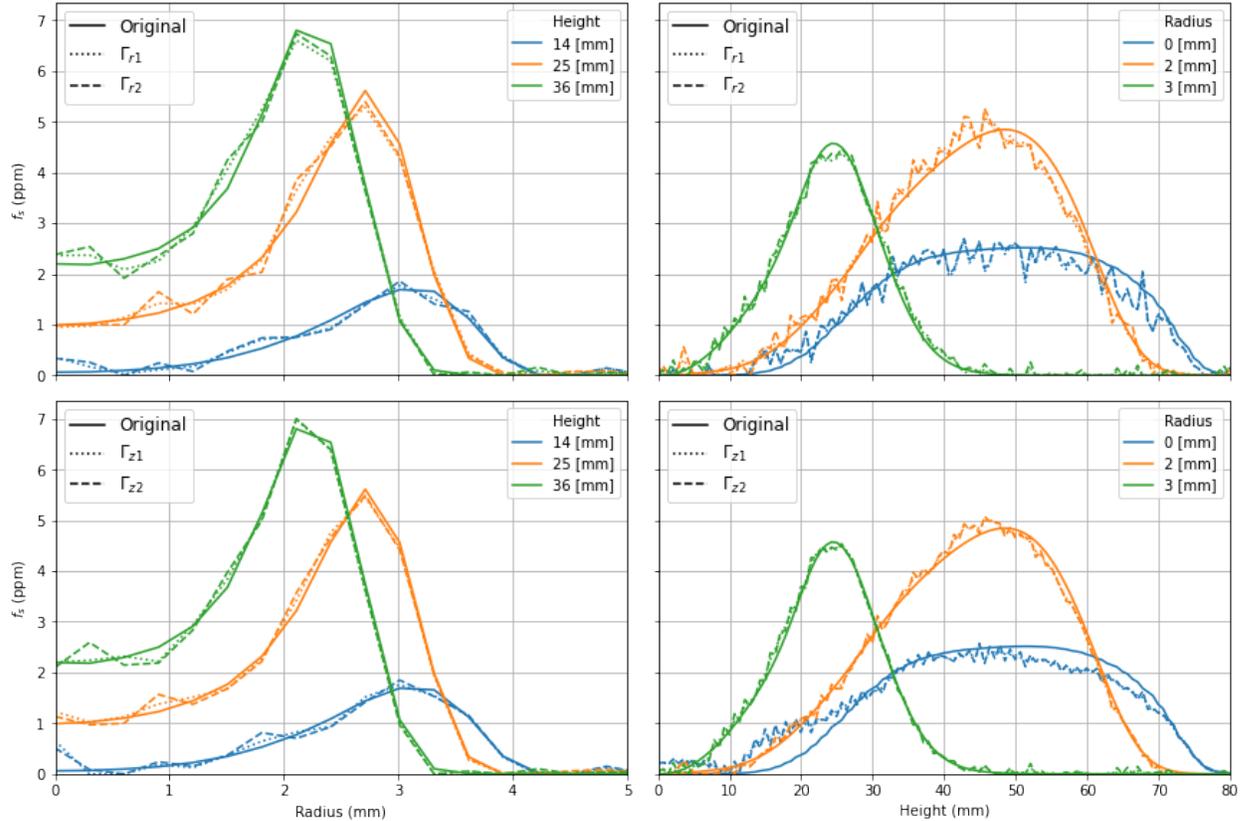


Figura 4.3: Comparación de curvas usando distintas matrices de regularización, arriba las matrices de regularización en r , y abajo, en z , tanto para las curvas en alturas distintas, izquierda, como en radios distintos, derecha.

En la Figura 4.4 se presentan las curvas RMSE de 1000 problemas con ruido distinto de la misma, en este caso se escogió α usando fuerza bruta, es decir, se iteró el valor de α hasta minimizar $\|\hat{f}_s - f_s\|_2$, en la primera iteración de cada matriz de regularización. Un proceso parecido se utilizó para la Figura 4.5, en el cual para cada nivel de ruido se realizaron 1000 iteraciones de ruidos distintos en los cuales en la primera optimización se escogía el α usando fuerza bruta.

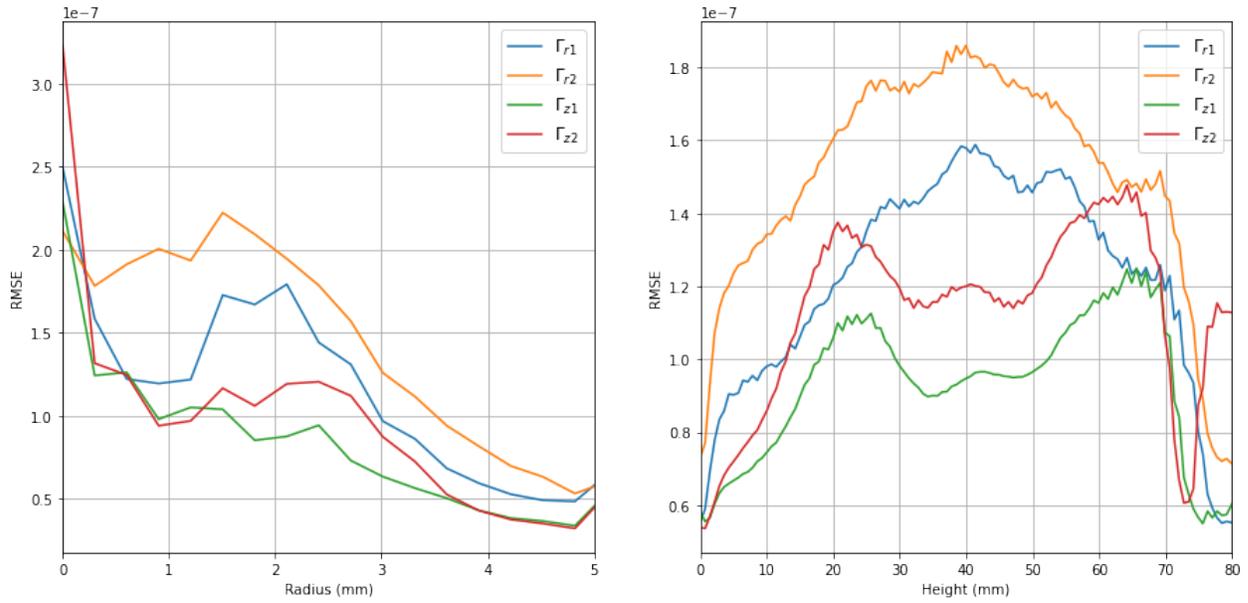


Figura 4.4: Curvas RMSE promedio de 1000 iteraciones de ruido distintas, a la izquierda, curva RMSE en torno al radio, a la derecha, en torno a la altura.

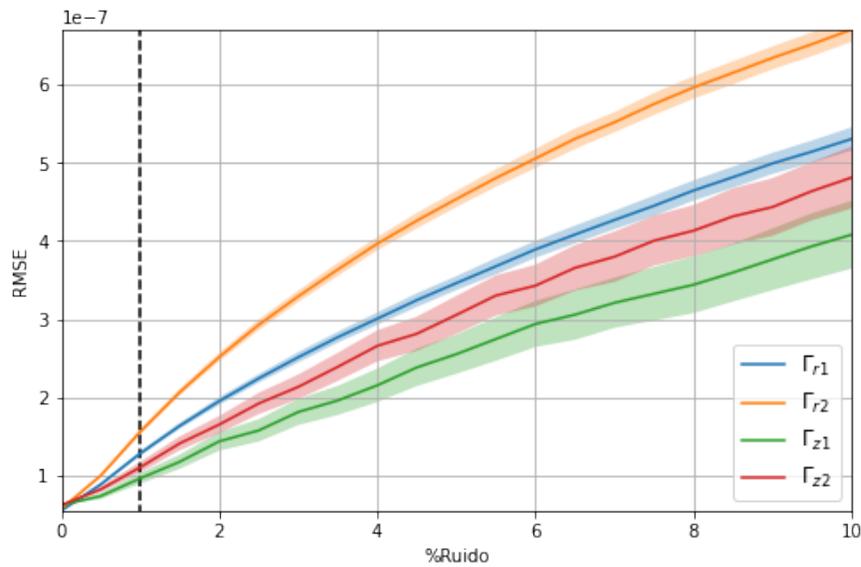


Figura 4.5: Curvas RMSE promedio de 1000 realizaciones distintas para cada ruido, el área representa una desviación estándar del promedio, la línea negra punteada corresponde a 1% de ruido.

En la Figura 4.4 notamos que las matrices basadas en \mathbf{D}^c no mejoran el desempeño de la regularización y que la ubicación de la acumulación de error depende de la dirección de regularización. Mientras que las matrices de regularización en r tienen un mayor error en donde se encuentran los máximos de f_s , esto debido a que como vimos en la Figura 4.3 estas las subestiman, las regularizaciones en z , son capaces de estimar correctamente los máximos.

Luego los errores al regularizar en cualquier dirección siguen el patrón esperado de acumularse en el centro, siendo la matriz $\mathbf{\Gamma}_{z2}$ la que acumula mayor error en $r = 0$. Que las matrices basadas en \mathbf{D}^c no mejoran el desempeño de la regularización también lo podemos notar en la Figura 4.5, en la cual independiente del ruido las matrices basadas en \mathbf{D}^p tienen menor error que las \mathbf{D}^c en la misma dirección.

4.1.2. Regularización simple y doble

A continuación se muestra en las Figuras 4.6, 4.7 y 4.8, un estudio de como modificar el parámetro de regularización afecta a las distintas dimensiones del problema de optimización, correspondiendo al ajuste de los datos ($\|\mathbf{A}_{op}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$), la suavidad en r ($\|\mathbf{\Gamma}_r\mathbf{x}\|_2^2$) y la suavidad en z ($\|\mathbf{\Gamma}_z\mathbf{x}\|_2^2$). Además, en estas figuras podemos comparar basándonos en estas dimensiones el valor real al cual queremos llegar con la deconvolución. Con esto notamos que el valor real siempre está más cerca de la curva dibujada por la regularización en el eje z . También, en la Figura 4.8 notamos que toda combinación de parámetros de regularización al realizar doble regularización está entre las curvas de regularización de z y r , generando un hiperplano. Por otro lado, notamos que la solución real no está en este hiperplano, esto se puede observar en la curva de $\|\mathbf{A}_{op}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$ vs. $\|\mathbf{\Gamma}_r\mathbf{x}\|_2^2$. Por último notamos que en las curvas de $\|\mathbf{\Gamma}_r\mathbf{x}\|_2^2$ vs. $\|\mathbf{\Gamma}_z\mathbf{x}\|_2^2$ se genera una especie de codo en ambas curvas y que este codo es cercano al valor real, por lo cual podemos usar el α que genera este codo para determinar el valor del parámetro de regularización, esto corresponde a una heurística y no necesariamente será el caso para todas las deconvoluciones con regularización.

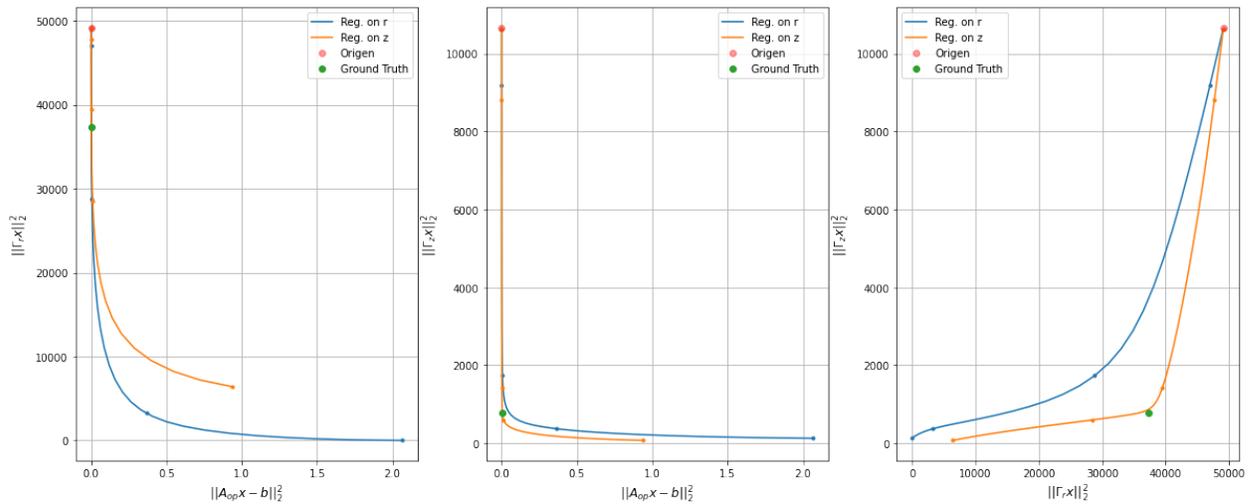


Figura 4.6: Curvas resultantes del estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, en donde este va creciendo de arriba hacia abajo, partiendo por $\alpha = 10^{-5}$ hasta 10^{-1} .

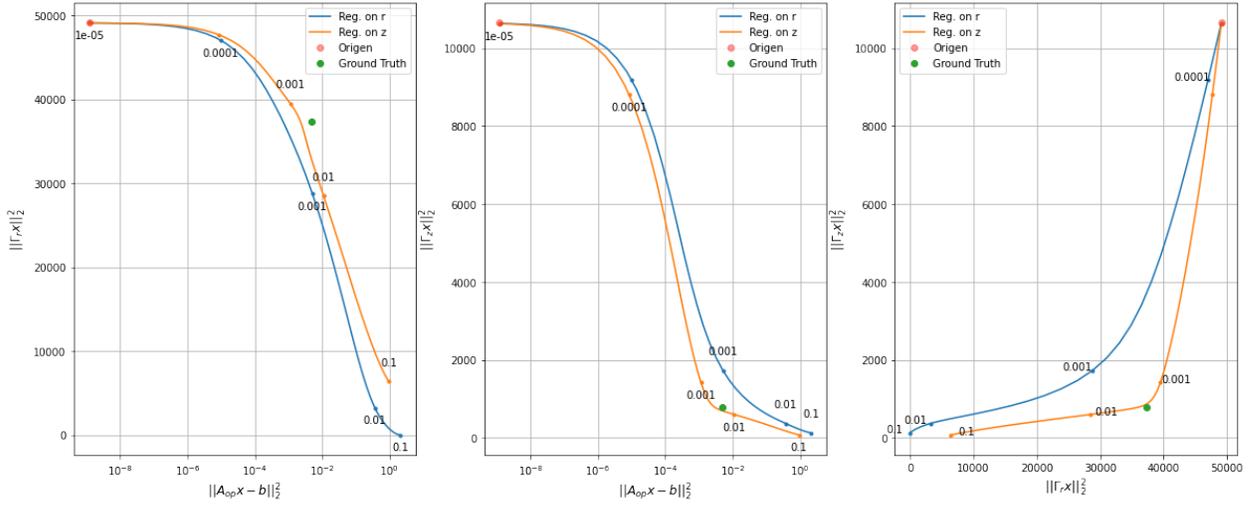


Figura 4.7: Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, los valores en la curva corresponden al valor de α en ese punto. $\|\mathbf{A}_{op}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$ en escala logarítmica.

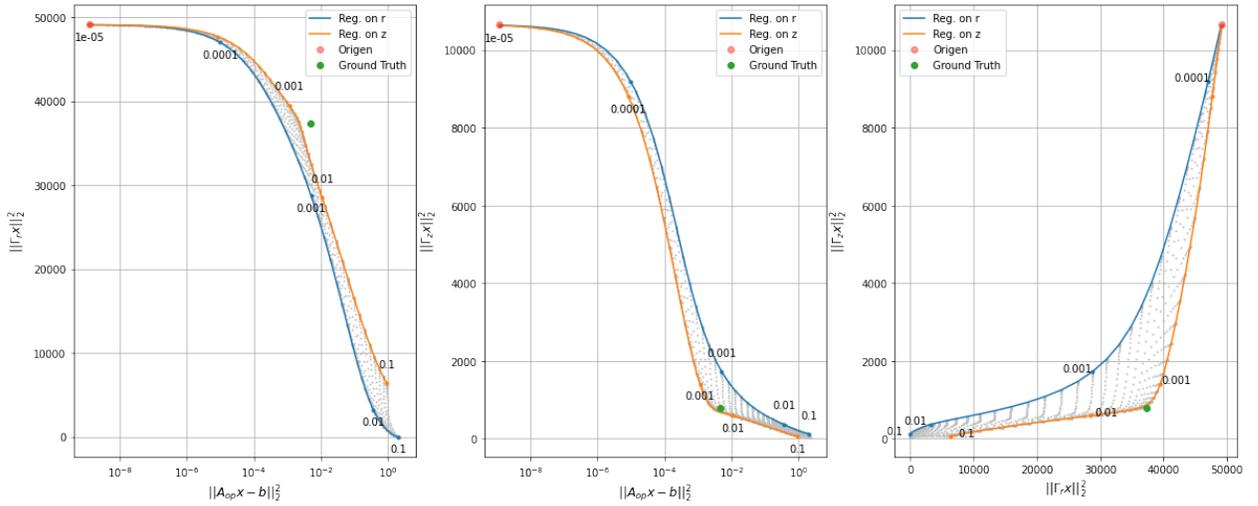


Figura 4.8: Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión, en gris se encuentran las posibles combinaciones al realizar una doble regularización. $\|\mathbf{A}_{op}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2$ en escala logarítmica.

En la Figura 4.9 se observa de manera más directa como se comparan las distintas regularizaciones singulares en torno al parámetro de regularización. Pudiendo notar que ambas regularizaciones suavizan en z de igual manera, mientras que al regularizar en z suaviza en r de manera menos brusca, logrando de esta manera que se ajuste a los datos por más un intervalo de α mas grande.

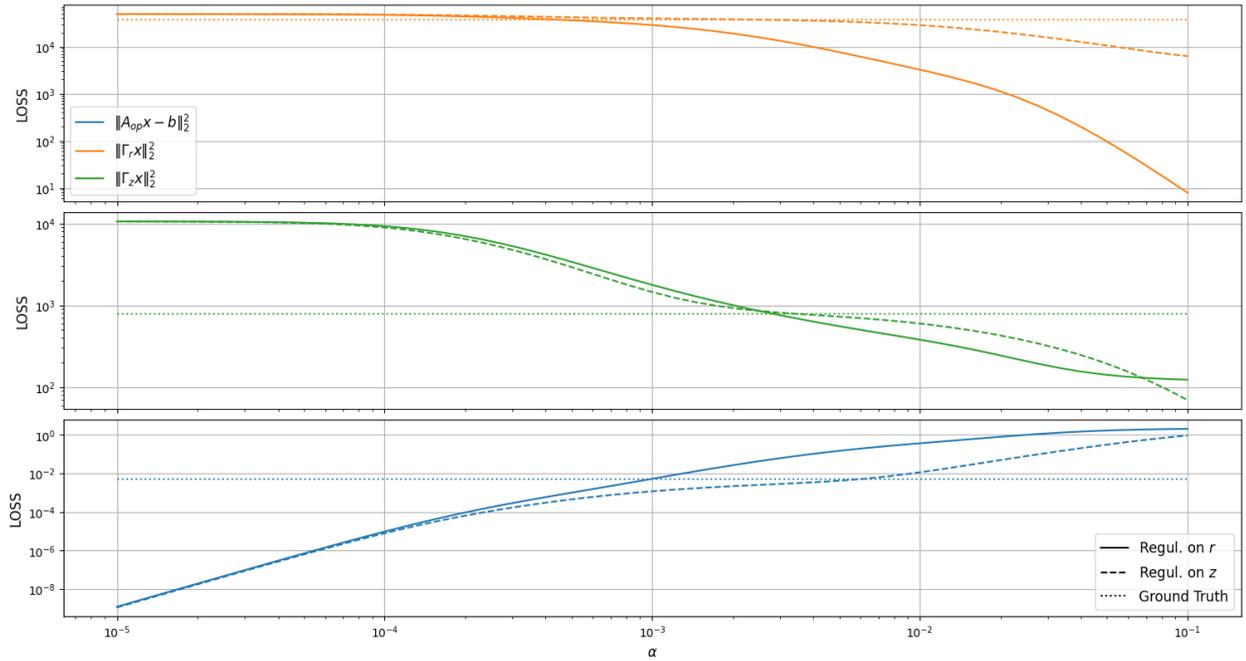


Figura 4.9: Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión al realizar regularización singular.

Al realizar una regularización doble cada combinación de parámetros de regularización tiene valores distintos en las dimensiones de optimización y de RMSE, como se puede observar en la Figura 4.10, en la cual notamos 4 resultados:

- Regularizar tanto en r como en z tienen una tasa de cambio con respecto a α parecida al suavizar en z , pero la regularización en z llega a una especie de valle antes de seguir decayendo.
- Regularizar en z suaviza en r con una tasa de cambio menor que el regularizar en r .
- La banda de α_z que otorga un resultado con un $\text{RMSE}(x, x^{truth})$ menor a 8×10^{-1} de deconvolución es 2 veces más ancho que el de α_r , siendo desde 10^{-3} a 10^{-2} y de 5×10^{-4} a 10^{-3} .
- Realizar una regularización doble no tiene mejoras apreciables con respecto a realizar una regularización simple en z .

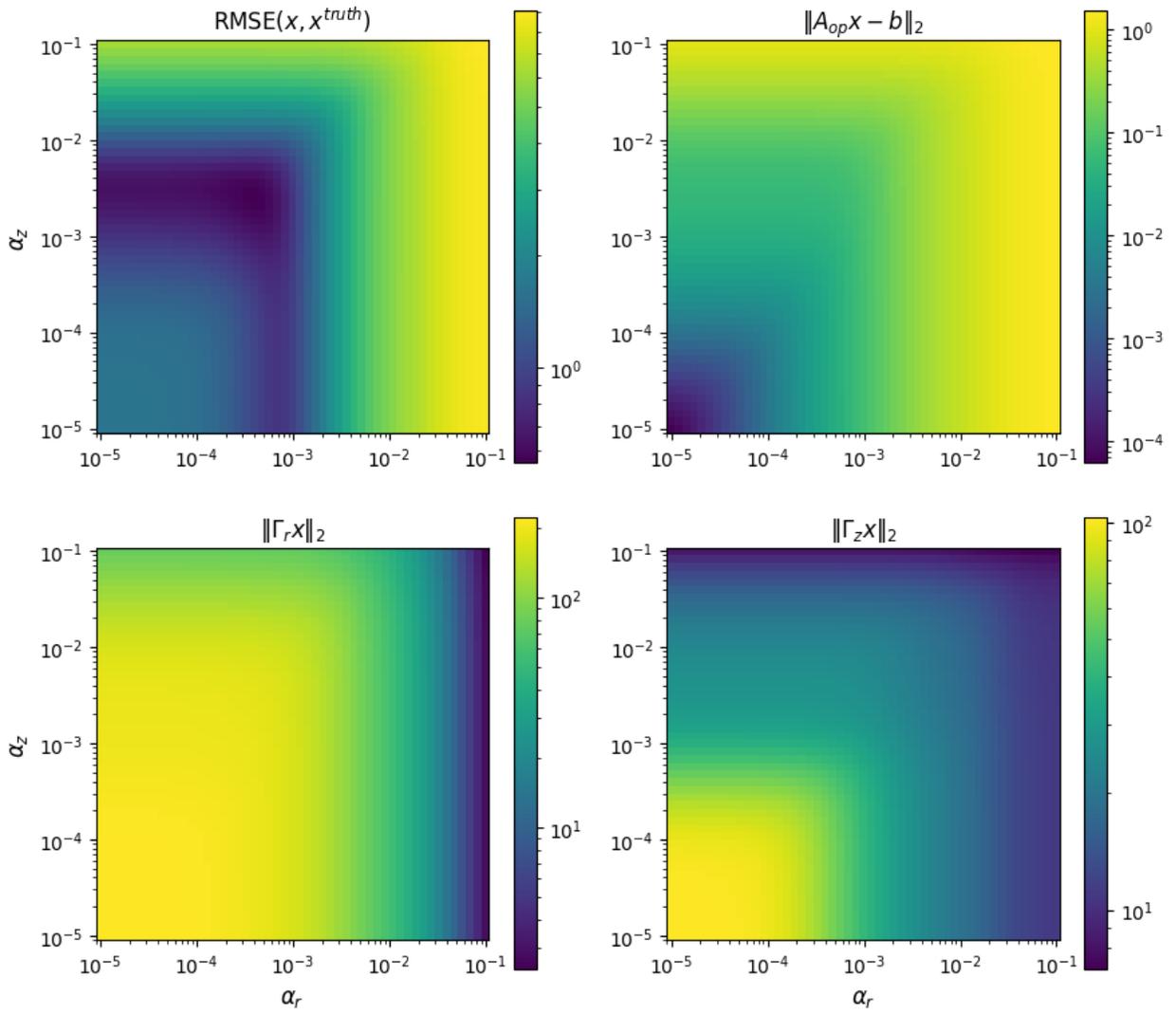


Figura 4.10: Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor de perdida al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica.

4.1.3. Resumen

En cuanto al comportamiento del modelo podemos destacar que:

1. Las matrices de regularización basadas en diferencias posteriores (\mathbf{D}^p) tienen mejores resultados que las basadas en diferencias centradas (\mathbf{D}^c).
2. Regularizar en z tiene mejores resultados que regularizar en r , en específico logra estimar de manera correcta los máximos en la llama.
3. Para regularizar en z es más fácil determinar el parámetro de regularización usando prueba y error, puesto que existen más valores que otorgan un buen resultado.
4. Realizar una regularización doble no asegura una mejora, pero sí es más difícil de realizar puesto que requiere de dos parámetros de regularización diferentes.
5. Una heurística para encontrar el parámetro que mejor regulariza la deconvolución para los casos simples corresponde a buscar el codo en la curva $\|\mathbf{\Gamma}_r \mathbf{x}\|_2$ vs. $\|\mathbf{\Gamma}_z \mathbf{x}\|_2$, este codo es más notorio en la regularización en z .

Los puntos 2 y 3, podemos argumentar que son debido a que en la dirección de axial se tiene más información que en la dirección radial, por lo que es posible discriminar mejor el ruido. Esto es verdad para la mayoría de los casos puesto que las llamas tienden a ser más altas que anchas.

4.2. Comparación

4.2.1. Datos sintéticos

A continuación se compara el método de Onion Peeling con regularización de Tikhonov original y FLiPPID, con el método propuesto al regularizar de manera simple en el eje z y la regularización doble, esto en la Figura 4.11, mientras que en la Figura 4.13 encontramos el valor residual de cada deconvolución.

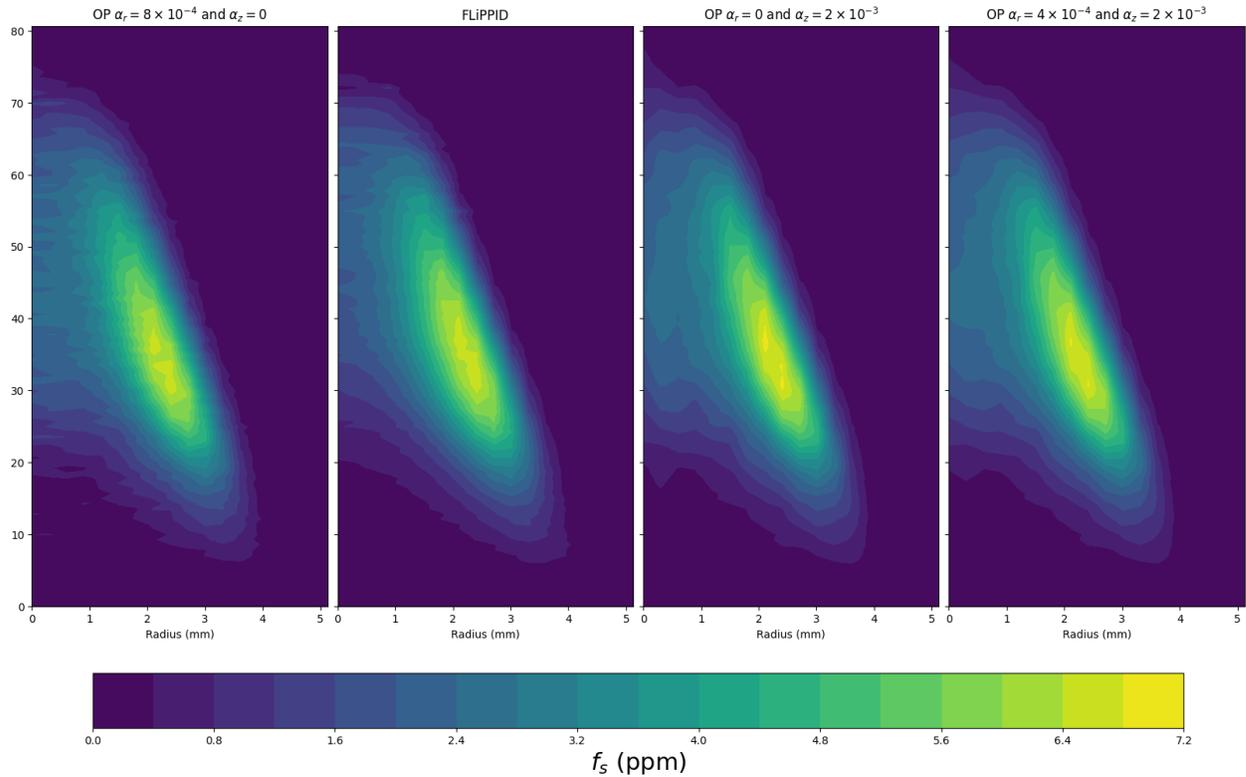


Figura 4.11: Comparación del valor deconvolucionado de f_s al utilizar distintos métodos para los datos sintéticos.

En la Figura 4.12 notamos que tan cercano está cada método con respecto al valor de f_s conocido, para OP con regularización en r los errores se acumulan en el origen y principalmente en donde encontraríamos los valores más altos de fracción en volumen de hollín, este comportamiento también se aplica para el método FLiPPID, pero en este en el origen hay una tendencia clara a subestimar el valor correspondiente, por otro lado, al regularizar en z tenemos que los errores se acumulan principalmente en el origen y que se puede recuperar los máximos de la fracción en volumen de hollín con menor error, y finalmente, para la regularización doble, notamos que esta toma ambos comportamientos tanto de la regularización en r y z , disminuyendo errores en el origen pero aumentando en la zona de máximos.

Los comportamientos observados de los métodos basados en OP son coherentes con los resultados de la sección anterior.

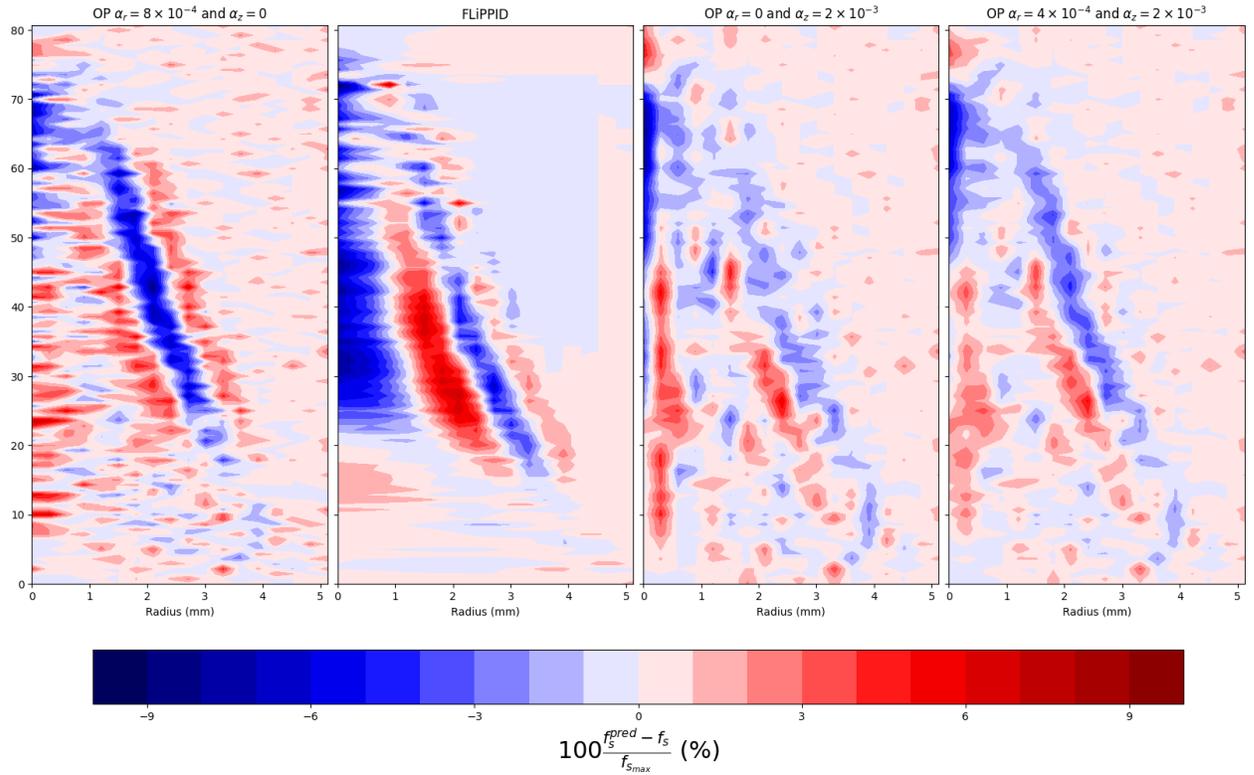


Figura 4.12: Comparación entre f_s y f_s^{pred} , normalizado por el máximo de f_s conocido, de distintos métodos para los datos sintéticos.

Notamos en la Figura 4.13 que el método FLiPPID tiene residuales de mayor magnitud, luego sigue el método de OP con regularización en r , luego OP de doble regularización y por último OP con regularización en z . Además, podemos notar que para los métodos basados en Onion Peeling el residual es mayor en la zona en donde se encontrarían los máximos valores de f_s . Mientras que para FLiPPID el residual se encuentra más disperso. Esto último es debido a que el resultado de la deconvolución cumple con la forma de la función escogida para FLiPPID por lo que los residuales son mayores en zonas en las que la función escogida no es la más adecuada.

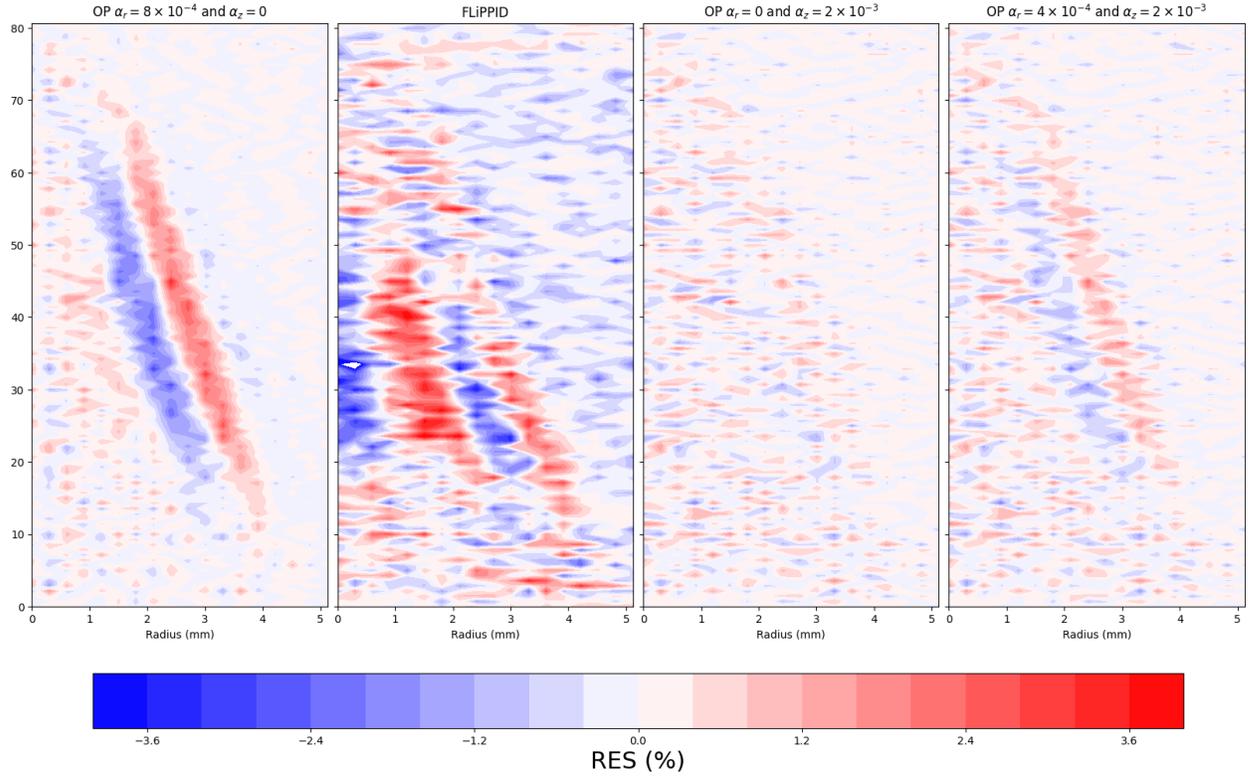


Figura 4.13: Comparación del valor residual de P versus el P resultante de convolucionar el κ predicho, para distintos métodos con los datos sintéticos.

Además, observamos que en la Figura 4.13 los residuales correspondientes a la regularización en z , no forman patrones coherentes a diferencia de los demás métodos. Esto nos indica que la regularización en z esta filtrando el ruido original de P .

También notamos que los residuales corroboran las conclusiones de la sección de comparación para las regularizaciones basadas en Onion Peeling.

4.2.2. Datos experimentales

4.2.2.1. Longitud de onda 660 nm

En primera instancia, para elegir los valores de los parámetros de regularización para la regularización simple y doble, realizamos un estudio del parámetro para cada dirección, Figura 4.14, tal como se hizo en la sección de comportamiento, además de los gráficos de color, Figura 4.15.

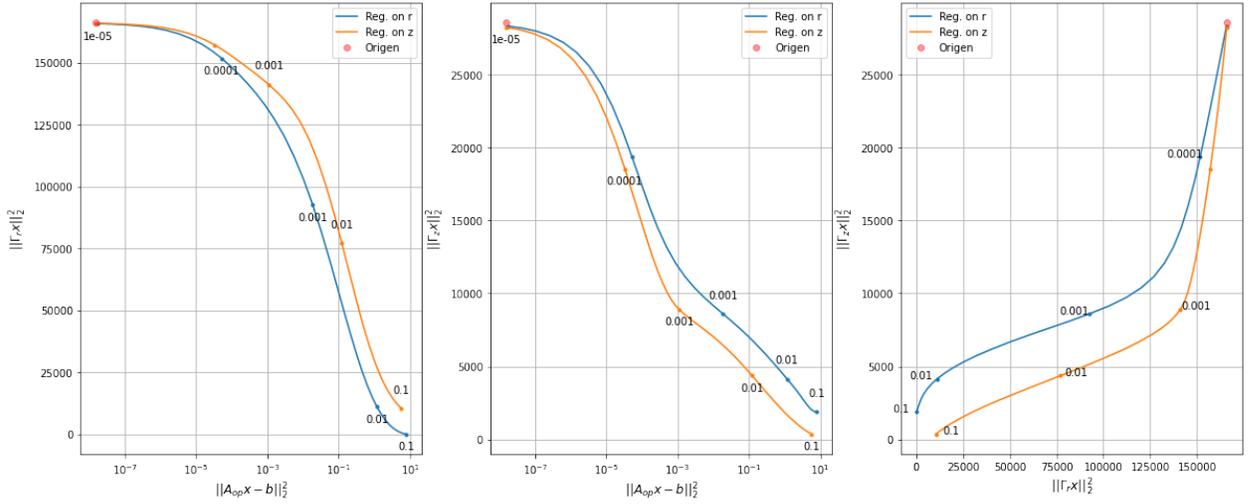


Figura 4.14: Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión del problema de optimización para el caso experimental de $\lambda = 660$ [nm].

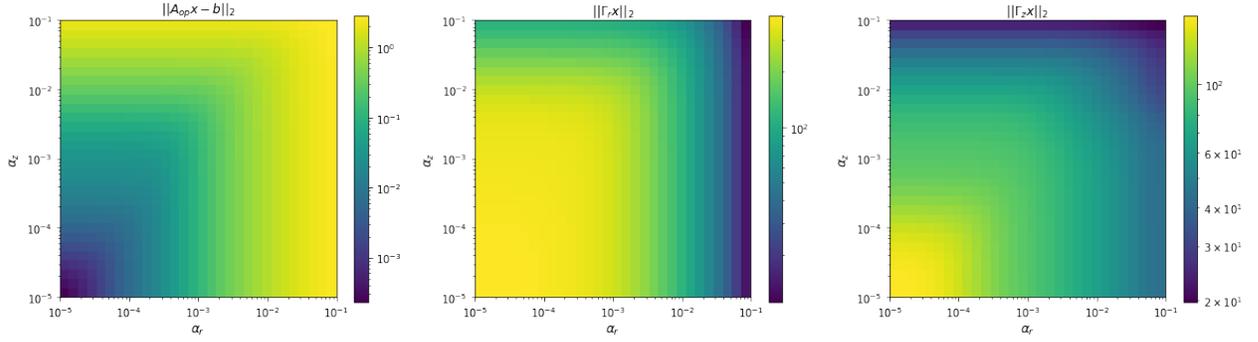


Figura 4.15: Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica para el caso experimental de $\lambda = 660$ [nm].

En las figuras anteriores notamos que siguiendo la heurística propuesta anteriormente los codos se generan entre 1×10^{-3} y 1×10^{-4} , para la regularización en r , y entre 1×10^{-2} y 1×10^{-3} , para la regularización en z . Visualmente tomamos los valores $\alpha_r = 2 \times 10^{-4}$ y $\alpha_z = 1 \times 10^{-3}$ para las regularizaciones simples, mientras que para la regularización doble, los valores de los parámetros a usar, los determinamos mediante prueba y error, y corresponden a $\alpha_r = 2 \times 10^{-4}$ y $\alpha_z = 5 \times 10^{-4}$.

Luego realizamos la comparación de los métodos en las Figuras 4.16 y 4.17, comparando el resultado de la deconvolución y el residual, respectivamente.

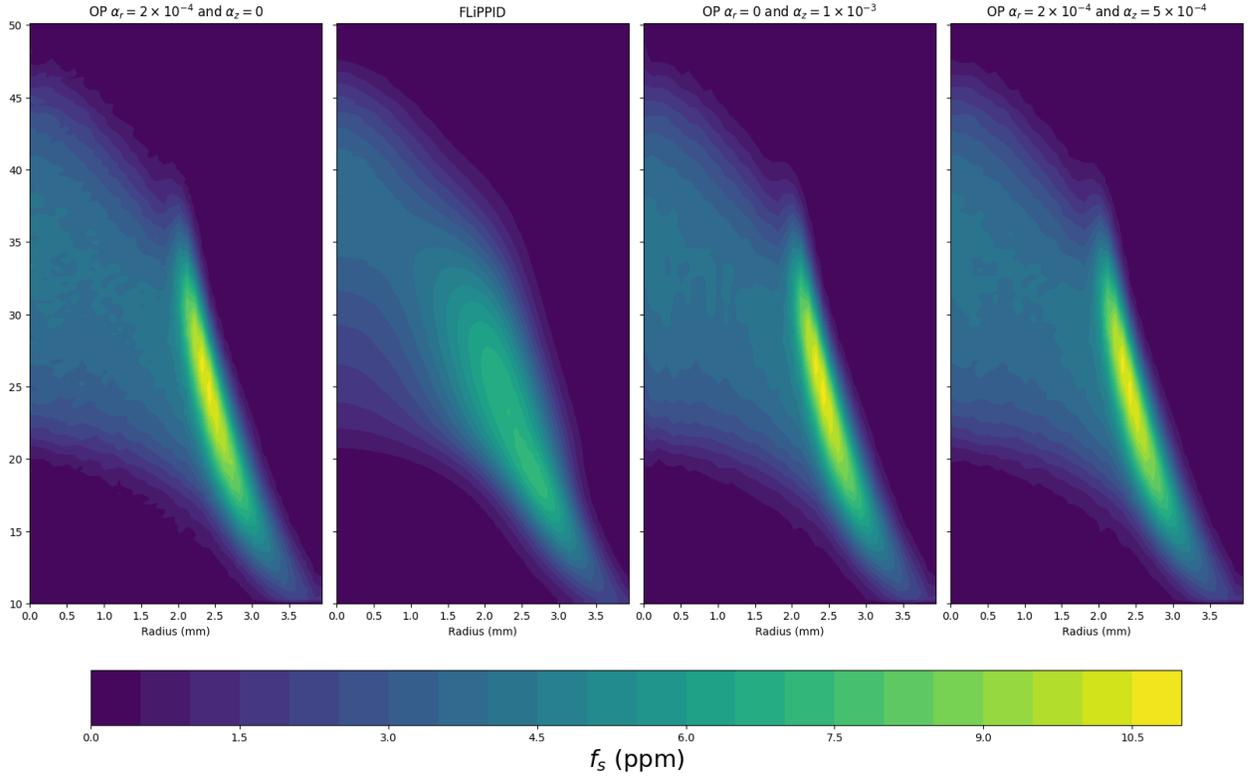


Figura 4.16: Comparación del valor deconvolucionado de κ_λ al utilizar distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 660$ [nm] a partir de las mediciones en el extremo izquierdo.

En primera instancia notamos que el resultado obtenido por el método FLiPPID, Figura 4.16 no posee la misma forma que los otros resultados de la deconvolución, esto también se nota en su residual, Figura 4.17, en donde está supera los límites $\pm 2.5\%$, mientras que los otros métodos no superan los $\pm 1.0\%$. Este resultado es producto de que la función escogida para FLiPPID no es la adecuada para esta llama específica. Por otro lado, para los métodos basados en Onion Peeling, tenemos nuevamente que la capacidad de filtrar el ruido, es decir que no se encuentren estructuras coherentes, de la regularización en z es mejor que la regularización doble y que la regularización en r , siendo esta última la que peor se comporta generando estructuras coherentes en el residuo en las zonas donde se esperaría los valores máximos de fracción en volumen de hollín y no generando estructuras parecidas al ruido.

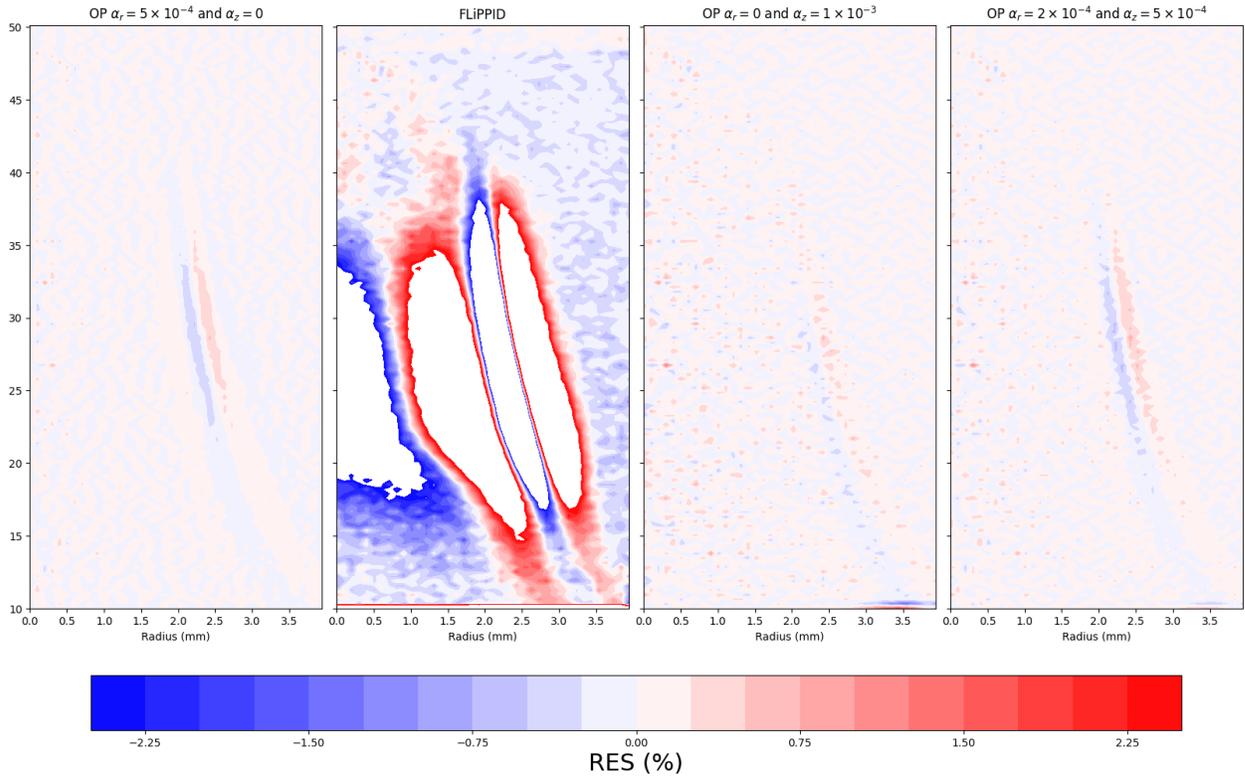


Figura 4.17: Comparación del valor residual de distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 660$ [nm].

4.2.2.2. Longitud de onda 800 nm

Al igual que con el caso de 660 [nm], en primera instancia realizamos los gráficos en las Figuras 4.18 y 4.19 con tal de proceder a usar la heurística para los casos de regularización simple.

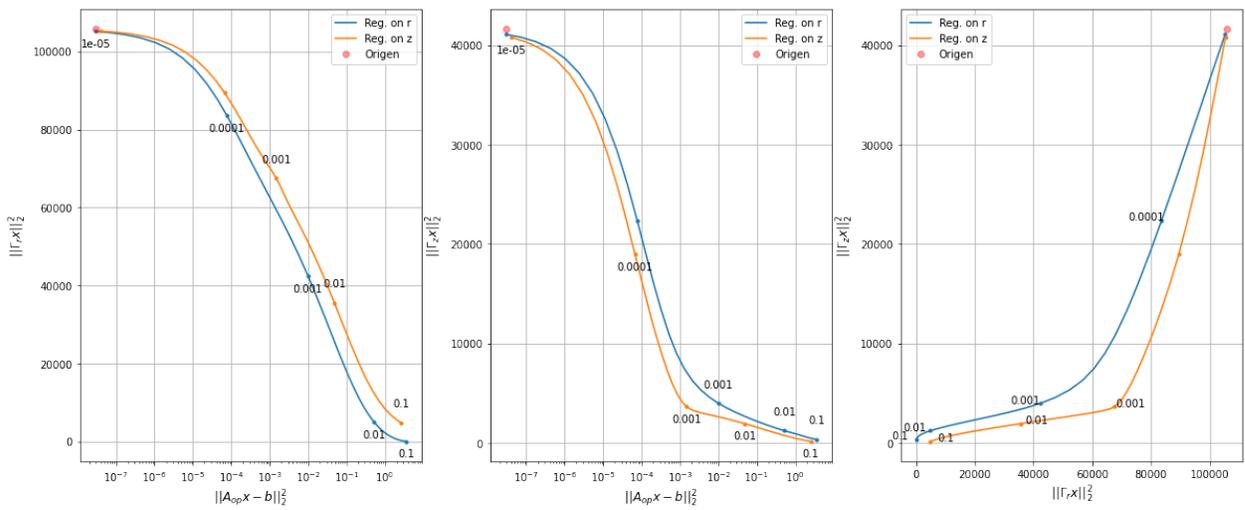


Figura 4.18: Estudio del parámetro de regularización para cada dimensión del problema de optimización para el caso experimental de $\lambda = 800$ [nm].

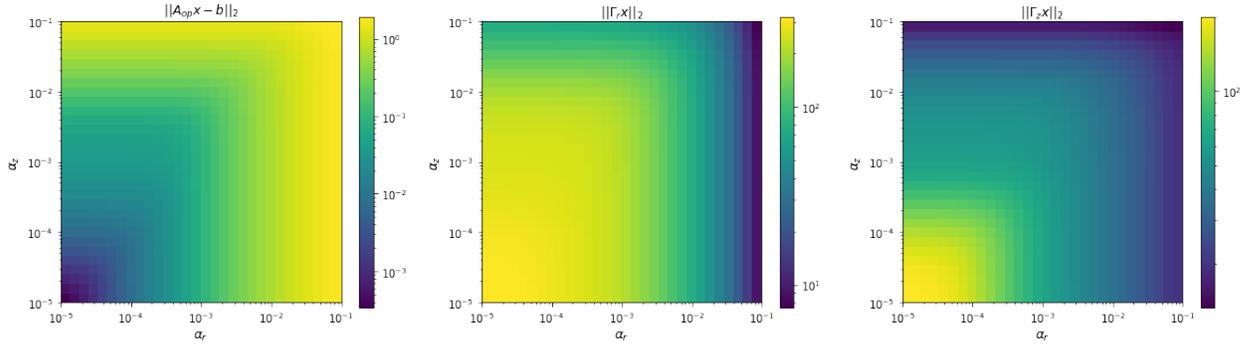


Figura 4.19: Gráficos α_r vs. α_z , en donde el color indica el valor al cual se alcanzó con esa combinación de parámetros específica para el caso experimental de $\lambda = 800$ [nm].

Usando la heurística notamos que los codos se generan entre 1×10^{-3} y 1×10^{-4} , para la regularización en r , y entre 1×10^{-2} y 1×10^{-3} , para la regularización en z , esto corresponde también con el caso de 660 [nm]. Por lo que al igual que en ese caso tomamos los valores $\alpha_r = 2 \times 10^{-4}$ y $\alpha_z = 1 \times 10^{-3}$ para las regularizaciones simples, mientras que para la regularización doble, $\alpha_r = 2 \times 10^{-4}$ y $\alpha_z = 5 \times 10^{-4}$.

Luego realizamos la comparación de los métodos en las Figuras 4.20 y 4.21, comparando el resultado de la deconvolución y el residual, respectivamente.

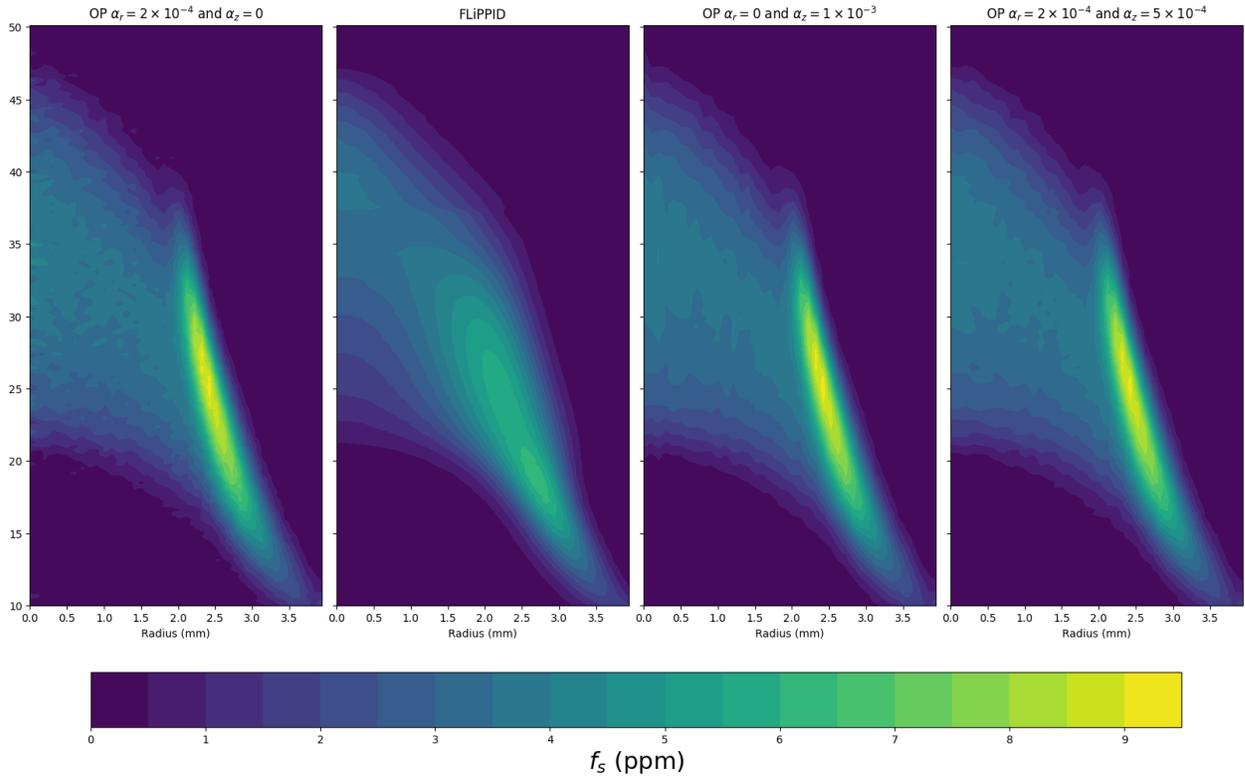


Figura 4.20: Comparación del valor deconvolucionado de κ_λ al utilizar distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 800$ [nm] a partir de las mediciones en el extremo izquierdo.

Al igual que para el caso de 660 [nm] los resultados obtenidos por el método FLiPPID, Figura 4.20, no poseen la misma forma que los otros resultados de la deconvolución, esto también se nota en su residual, Figura 4.21, en donde está supera los límites $\pm 2.5\%$, mientras que los otros métodos no superan los $\pm 1.0\%$. Mientras que para los métodos basados en Onion Peeling, tenemos nuevamente que regularizando en r da el peor resultado, siguiéndole la regularización doble, y por último la regularización en z , esto basándonos en el residual y las estructuras que se generan en este.

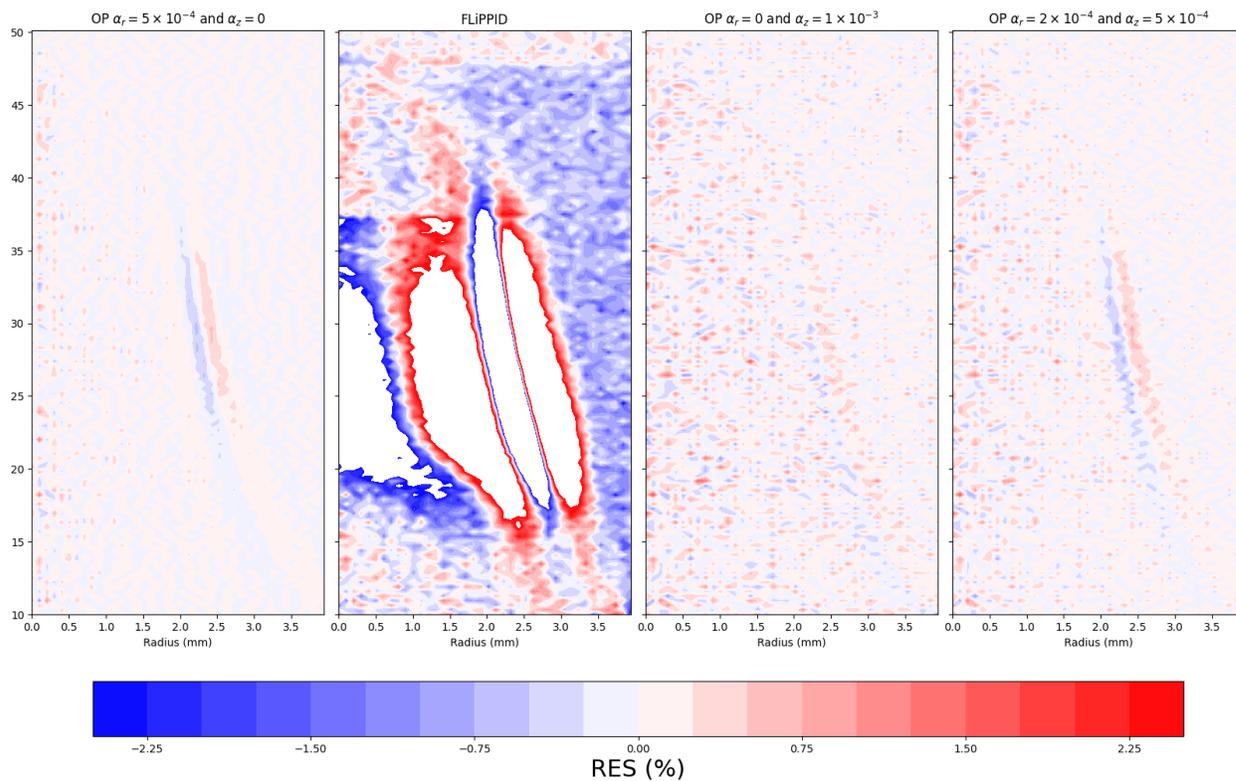


Figura 4.21: Comparación del valor residual de distintos métodos para los datos experimentales de $\lambda = 800$ [nm].

4.2.3. Resumen

En cuanto a la comparación realizada podemos destacar que:

1. El utilizar la heurística para la selección del parámetro de regularización da un buen resultado al inspeccionarlo visualmente y al revisar el residual en los casos experimentales.

Ya que al seguir la heurística para ambos casos experimentales se llegó a deconvoluciones que respetaban de buena manera a los datos disponibles y lo esperado de manera cualitativa.

2. El resultado del método FLiPPID depende de si la función propuesta es capaz de generar la curva de la llama deconvolucionada.

Esto se puede apreciar comparando los resultados del caso sintético con el de los datos experimentales, ya que para el caso sintético el método FLiPPID obtiene un resultado mucho mejor que para los casos experimentales, esto en sí es debido a la forma de la distribución del hollín a deconvolucionar y que esta forma se pueda expresar de manera adecuada con la función propuesta, caso que sí ocurre para los datos sintéticos y no ocurre para los datos experimentales.

3. El orden descendiente de la calidad de la deconvolución corresponde a la regularización en z , con los mejores resultados, siguiéndole la regularización doble, luego la regularización en r , y por último usando FLiPPID, con los peores resultados.

La razón por la que FLiPPID tiene los peores resultados es que la función propuesta no es la adecuada para el tipo de llamas usadas.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo propusimos un método para regularizar el problema de deconvolución de la propiedad de absorbencia espectral del hollín con la finalidad de determinar la fracción en volumen de hollín. Este fue validado estudiando su comportamiento ante el cambio de sus parámetros, además de compararlo con otras técnicas.

El método propuesto en sus dos variantes innovadoras, regularización simple en z y regularización doble, es capaz de entregar mejores resultados que el método OP con regularización clásico, regularización en r , tal como se pudo observar al realizar la deconvolución de los datos sintéticos y los experimentales.

También notamos que la regularización doble no necesariamente da mejores resultados que la regularización en z , de hecho para los casos experimentales la regularización doble tenía peores residuales que la regularización en z , esto es conveniente, pues la regularización doble requiere de dos parámetros de regularización, para los cuales no existe una metodología clara para determinar su valor. Mientras que para las regularizaciones simples hemos formulado una heurística simple que entregó buenos resultados en los casos experimentales, la validación de esta heurística con más casos es un trabajo que queda a futuro. Independientemente de esto, para la regularización en z , a priori, es más fácil encontrar un parámetro de regularización que entregue un buen resultado en comparación a la regularización en r . Con lo cual, la recomendación inicial es que si se llegase a usar el método propuesto, solo bastaría con una regularización simple en z para los casos particulares de llamas laminares axisimétricas. Que la regularización en z entregue mejores resultados que la regularización en r , puede ser debido a que tenemos más información en la dirección axial que en la radial, por lo que el ruido es más fácil de mitigar. Esta proposición requiere de una exploración más extensiva que queda propuesta para un trabajo a futuro.

Además, notamos que el método FLiPPID depende demasiado de la elección de función, pero que aun así, este método puede ser la base para un modelo más robusto con una función arbitraria, como lo puede ser una red neuronal o procesos gaussianos.

El método propuesto permite mejorar la calidad de las deconvoluciones en el área de combustión, y además tiene el potencial de beneficiar otras áreas del saber, puesto que en sí la deconvolución realizada corresponde a la transformada de Abel, un problema genérico.

Bibliografía

- [1] Bond, T. C., Doherty, S. J., Fahey, D. W., Forster, P. M., Berntsen, T., DeAngelo, B. J., Flanner, M. G., Ghan, S., Kärcher, B., Koch, D., Kinne, S., Kondo, Y., Quinn, P. K., Sarofim, M. C., Schultz, M. G., Schulz, M., Venkataraman, C., Zhang, H., Zhang, S., Bellouin, N., Guttikunda, S. K., Hopke, P. K., Jacobson, M. Z., Kaiser, J. W., Klimont, Z., Lohmann, U., Schwarz, J. P., Shindell, D., Storelvmo, T., Warren, S. G., y Zender, C. S., “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, [doi:https://doi.org/10.1002/jgrd.50171](https://doi.org/10.1002/jgrd.50171).
- [2] Michelsen, H., “Probing soot formation, chemical and physical evolution, and oxidation: A review of in situ diagnostic techniques and needs,” *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 1, pp. 717–735, 2017, [doi:https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.08.027](https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.08.027).
- [3] Snelling, D. R., Thomson, K. A., Smallwood, G. J., Guider, O. L., Weckman, E. J., y Fraser, R. A., “Spectrally resolved measurement of flame radiation to determine soot temperature and concentration,” *AIAA Journal*, vol. 40, no. 9, pp. 1789–1795, 2002, [doi:10.2514/2.1855](https://doi.org/10.2514/2.1855).
- [4] Kyriacou, P. A. y Chatterjee, S., “2 - the origin of photoplethysmography,” en *Photoplethysmography* (Allen, J. y Kyriacou, P., eds.), pp. 17–43, Academic Press, 2022, [doi:https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823374-0.00004-9](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823374-0.00004-9).
- [5] Daun, K. J., Thomson, K. A., Liu, F., y Smallwood, G. J., “Deconvolution of axisymmetric flame properties using tikhonov regularization,” *Appl. Opt.*, vol. 45, pp. 4638–4646, 2006, [doi:10.1364/AO.45.004638](https://doi.org/10.1364/AO.45.004638).
- [6] Dasch, C. J., “One-dimensional tomography: a comparison of abel, onion-peeling, and filtered backprojection methods,” *Appl. Opt.*, vol. 31, pp. 1146–1152, 1992, [doi:10.1364/AO.31.001146](https://doi.org/10.1364/AO.31.001146).
- [7] Dreyer, J. A. H., Slavchov, R. I., Rees, E. J., Akroyd, J., Salamanca, M., Mosbach, S., y Kraft, M., “Improved methodology for performing the inverse abel transform of flame images for color ratio pyrometry,” *Appl. Opt.*, vol. 58, pp. 2662–2670, 2019, [doi:10.1364/AO.58.002662](https://doi.org/10.1364/AO.58.002662).
- [8] Boyd, S. y Vandenberghe, L., *Introduction to Applied Linear Algebra: Vectors, Matrices,*

- and Least Squares. Cambridge University Press, 2018, [doi:10.1017/9781108583664](https://doi.org/10.1017/9781108583664).
- [9] Brunton, S. L. y Kutz, J. N., Data-Driven Science and Engineering: Machine Learning, Dynamical Systems, and Control. Cambridge University Press, 2019, [doi:10.1017/9781108380690](https://doi.org/10.1017/9781108380690).
- [10] Åkesson, E. O. y Daun, K. J., “Parameter selection methods for axisymmetric flame tomography through tikhonov regularization,” *Appl. Opt.*, vol. 47, pp. 407–416, 2008, [doi:10.1364/AO.47.000407](https://doi.org/10.1364/AO.47.000407).
- [11] Trefethen, L. N., *Spectral Methods in MATLAB*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000, [doi:10.1137/1.9780898719598](https://doi.org/10.1137/1.9780898719598).
- [12] Eaves, N. A., Zhang, Q., Liu, F., Guo, H., Dworkin, S. B., y Thomson, M. J., “Coflame: A refined and validated numerical algorithm for modeling sooting laminar coflow diffusion flames,” *Computer Physics Communications*, vol. 207, pp. 464–477, 2016, [doi:https://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.06.016](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.06.016).
- [13] Rodríguez, A., Escudero, F., Cruz, J., Carvajal, G., y Fuentes, A., “Retrieving soot volume fraction fields for laminar axisymmetric diffusion flames using convolutional neural networks,” *Fuel*, vol. 285, p. 119011, 2021, [doi:https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119011](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119011).
- [14] Thomson, K. A., Ömer L. Gülder, Weckman, E. J., Fraser, R. A., Smallwood, G. J., y Snelling, D. R., “Soot concentration and temperature measurements in co-annular, nonpremixed ch₄/air laminar flames at pressures up to 4 mpa,” *Combustion and Flame*, vol. 140, no. 3, pp. 222–232, 2005, [doi:https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.11.012](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.11.012).