INFLUENCIA DEL ÍNDICE DE OXÍGENO EN LA PRODUCCIÓN DE HOLLÍN DE UNA LLAMA DE DIFUSIÓN GENERADA POR UNA VELA

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE

INGENIERO CIVIL INDUSTRIAL

AUTOR

CRISTOPHER ALEXIS ANWANDTER SILVA

PROFESOR GUÍA

RODRIGO DEMARCO

VALPARAÍSO 2017

Resumen Ejecutivo

El objetivo principal de este estudio es analizar como influye el índice de oxígeno en una llama de difusión generada por una vela. El índice de oxígeno (OI) se define como la cantidad de oxígeno en el flujo total de oxidante, OI = $O_2/(O_2+N_2)$. El rango de variación analizado es en condiciones de sobre-ventilación, desde 21% al 37%. Esta variación permite estudiar como influye el OI en la altura de la llama, la producción de hollín y la radiación emitida. La altura de la llama se midió mediante la emisión de radicales CH*, basado en el método de segmentación de Ko, y se logró determinar que la altura de la llama disminuye a medida que se aumenta el OI. Para la producción de hollín el cálculo se hizo en base a la metodología de Absorción y Emisión Modulada (MAE) pasando luego por un proceso de deconvolución y regularización. Los perfiles radiales en volumen de hollín obtenidos se ven favorecidos por el proceso de formación de hollín por sobre el de oxidación al aumentar el OI, alcanzando los máximos en la zona cercana al centro de llama en su eje vertical. A su vez, la fracción en volumen de hollín integrada también se ve favorecida por el aumento del OI. Finalmente el flujo radiativo emitido por la llama al igual que para la producción de hollín se ve favorecido a medida que se aumenta el OI. Se observa que existe una fuerte relación entre la producción de hollín y la transferencia de calor por radiación. Hay que destacar que la mayoría de las relaciones entre el OI y las variables estudiadas presentan una tendencia lineal en el rango estudiado. Adicionalmente en el presente trabajo se describen todos los equipos utilizados y su configuración en el laboratorio. Además se presentan en detalle los procedimientos utilizados para el cálculo de las diferentes variables, en base a trabajos anteriores y la bibliografía existente.

Tabla de contenido

1 Introducción 5
1.1 Justificación 5
1.2 Antecedentes 9
1.2.1 Las 6 Conferencias de Faraday y la historia de la vela 9
1.2.2 Llama de difusión laminar 11
1.2.3 La vela 13
1.2.4 Hollín 16
1.2.5 Trabajos Previos Realizados 23
1.3 Objetivos 27
1.3.1 Objetivo General 27
1.3.2 Objetivos Específicos 27
1.4 Alcance 28
2 Marco Teórico 29
2.1 Descripción del arreglo de equipos para el diagnóstico óptico. 29
2.2 Condiciones experimentales 33
3 Metodología experimental 35
3.1 Contorno y altura máxima de llama en el tiempo 35
3.2 Determinación de la fracción en volumen de hollín 36
3.2.1 Método de extinción de luz 37
3.2.2 Modelo de Absorción / Emisión Modulada (MAE) 40
3.2.3 Método de deconvolución. 41
3.2.4 Regularización de Tikhonov 44
3.2.5 Criterio de la curva-L 46
3.2.6 Fracción en volumen de hollín integrada. 47
3.2.7 Análisis de error 48
4 Presentación y Análisis de resultados 51
4.1 Pérdida de masa 51

4.2 Contorno y altura de llama 54
4.3 Fracción en volumen de hollín 56
4.3.1 Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín 56
4.3.2 Fracción en volumen de hollín integrado β 60
4.4 Radiación 62
5 Conclusiones 67
6 Referencias Bibliográficas 72

1 Introducción

1.1 Justificación

El presente trabajo se basa en investigaciones realizadas anteriormente, formando parte de las investigaciones financiadas por el Proyecto Fondecyt N° 11130125. Este trabajo busca seguir aumentando el conocimiento disponible del complejo proceso de la combustión, debido a la gran cantidad de factores que intervienen en éste. El fin es el desarrollo de avances científicos en un campo que aún tiene mucho por ser explorado y estudiado.

Uno de los pioneros en la investigación acerca del comportamiento químicos y físicos producidos por la combustión de una vela fue Michael Faraday. Él comenzó realizando 6 conferencias donde deseaba mostrar a sus oyentes la historia química de la vela de una forma sencilla y fácil de entender, todas estas conferencias fueron unidas para componer un libro muy conocido dentro de la comunidad científica llamado "The Chemical History of a Candle" [1]. Faraday empezó sus conferencias explicando cual era la fuente de combustible de las velas (cera proveniente del petróleo), sus características principales y la forma en que se fabrican, las cuales actualmente casi no han variado en el tiempo. Luego siguió con la explicación de como se producía la combustión de la vela, donde demostró que la llama de una vela es muy estable a menos que se produzcan acciones externas. Además logró demostrar con simples experimentos que el lugar más caliente de la llama es donde el aire y el combustible en forma gaseosa entran en contacto, ahí se produce una reacción química que libera calor. Luego prosiguió afirmando que para que se produzca esta reacción química de combustión es estrictamente necesaria la presencia de aire (oxidante), esto lo demostró con un experimento donde deja una vela prendida

al aire libre y luego esta misma la encierra creando una cámara de combustión donde al acabarse el aire disponible la llama termina apagándose.

En uno de sus experimentos finales demostró que cuando se colocaba un tubo en la parte más luminosa de la llama de la vela (aproximadamente la parte más alta de la llama), se podía apreciar de forma casi instantánea que el tubo se empezaba a ennegrecer por el humo que circulaba. Estas partículas negras que se pegaban en el tubo vienen a hacer visible la formación de hollín en la llama de la vela.

En la investigación de Thomsen [2], tomada como base, se obtuvo experimentalmente información de la quema de una vela manteniendo constantes el tipo de combustible (parafina) y el ambiente en cual se producía la combustión (índice de oxigeno), para solo variar las dimensiones del pabilo o comúnmente llamada mecha de la vela (ancho y largo). A su vez, la investigación realizada por Thomsen se basó en el estudio realizado por Musalem [3], donde se diseñó y construyó un aparato experimental que permitió realizar mediciones de la fracción en volumen de hollín y de la liberación de energía en forma de radiación en distintas llamas de difusión.

En particular en este estudio se estudiarán los cambios que se producen en la combustión de una vela, en términos de la cantidad de hollín que se genera, la radiación térmica que produce y la altura de llama, cuando se realizan cambios en el ambiente en el cual se produce la combustión. Se utilizan velas para los experimentos de esta investigación porque de esta manera es una forma sencilla, de bajo costo y segura de realizar este tipo de mediciones. Luego estos datos serán extrapolados para procesos de mayor complejidad y riesgo como los son los procesos

industriales de combustión, principalmente, además de obtener información en detección y prevención de incendios.

Al ocupar velas para obtener los datos, ésta genera una llama de difusión, es decir, cuando el combustible y el aire se mezclan en el área de combustión debido al movimiento natural de la propia llama. Estas llamas pueden ser laminares o turbulentas. Para este estudio se estudiarán llamas de difusión laminares, ya que son mucho más simples de estudiar que las turbulentas que agregan una mayor complejidad, aun cuando las llamas turbulentas son las más comunes [4]. Se usan llamas laminares como simplificación del problema, pero es necesario traspasar estos resultados a llamas turbulentas, que son las más comunes como se dijo anteriormente. Esta simplificación se justifica mediante el concepto de Flamelet [5], que modela las llamas turbulentas a partir de datos obtenidos de llamas laminares [6].

En los estudios anteriores se mantuvieron las condiciones de combustión, llámese una presión de una atmósfera y una concentración de oxígeno de 21% en volumen (79% de nitrógeno). En un comienzo en este estudio se pretendía variar el porcentaje de oxígeno de 17% hasta un 37%. Se sabe que el oxígeno es imprescindible para la combustión, por este motivo si existe un déficit de éste, mucho del combustible se queda sin quemar y se pierde en el proceso. Esto genera que el proceso de combustión no sea eficiente, por lo que al aumentar el porcentaje de oxígeno se pretende obtener un valor en el cual se queme todo el combustible disponible y se logre generar la mayor eficiencia en el proceso, aprovechando al máximo la energía generada por la combustión. Finalmente este estudio solo abarcó el porcentaje de oxigeno desde 21% a 37%, esto debido que para valores menores a 21% la llama era muy inestable por lo que los datos obtenidos no eran lo suficientemente fidedignos para desarrollar esta investigación.

De acuerdo para los resultados obtenidos en estudios anteriores, para los índices de oxígeno inferiores a 25%, este primer régimen está dominado por la oxidación de hollín. El segundo régimen, que se producen para los índices de oxígeno superior al 25%, está dominado por la formación de hollín. Finalmente, el pico de flujo de radiación aumenta con el índice de oxígeno, pero su tasa de aumento también se encuentra reducida considerablemente con índices de oxígeno superiores al 25% [7]. Este comportamiento está directamente relacionado con la cantidad de hollín producido en la reacción.

Para poder realizar esta experiencia, es necesario de forma previa diseñar y construir un quemador "coflow" que nos permita poder introducir dentro de él la vela y generar alrededor de ésta todos los escenarios a estudiar con los diferentes índices de oxígeno antes nombrados. Es necesario además tomar en cuenta las características del laboratorio y sus instrumentos, por lo que el diseño y la construcción de este quemador no son algo trivial, ya que de éste depende que los datos obtenidos sean lo más precisos y reales con el proceso a estudiar.

Al no existir modelos numéricos que logren reflejar de forma fidedigna lo que ocurre en estos complejos procesos, es necesario obtener relaciones de forma experimental que ayuden a explicar y entender que sucede en estos procesos. Si se logran relacionar las variables de forma confiable con el estudio a realizar, se pueden hacer cambios y mejoras en los procesos aumentando su eficiencia. Principalmente se medirá el hollín, la radiación y las alturas de llama, para poder generar y encontrar las relaciones necesarias en un futuro.

Este estudio pretende proporcionar información experimental que permitirá seguir avanzando en el conocimiento. Se espera que dentro del marco de este proyecto Fondecyt se logre modelar los procesos de producción de hollín de una vela de forma numérica, por este

motivo este trabajo es el primer paso, ya que éste proporcionará los datos experimentales que se necesitarán posteriormente para realizar las simulaciones.

1.2 Antecedentes

1.2.1 Las 6 Conferencias de Faraday y la historia de la vela

Michael Faraday, científico inglés, fue uno de los pioneros en la investigación acerca del comportamiento químicos y físicos producidos por la combustión de una vela. Comenzó realizando 6 conferencias donde deseaba mostrar a sus oyentes la historia química de la vela de una forma sencilla y fácil de entender. Todas estas conferencias fueron unidas para componer un libro muy conocido dentro de la comunidad científica llamado "The Chemical History of a Candle" [1]. Con The Chemical History of a Candle se buscaba ante todo democratizar el saber sin caer en su banalización. Faraday realizaba ejercicios y experimentos que le permitían dar a entender de forma clara los fenómenos involucrados en la combustión de una vela, de forma que pudiese acercar estos conocimientos a sus oyentes de una forma didáctica y entretenida, una forma no convencional para la época. Incluso Faraday motivaba a sus oyentes a realizar los experimentos con sus hijos en la casa para demostrar lo sencillo que podía ser aprender de este tema a pesar de su aparente complejidad.

Faraday empezó sus conferencias explicando cual era la fuente de combustible de las velas (cera proveniente del petróleo), sus características principales y la forma en que se fabrican, las cuales actualmente casi no han variado en el tiempo. Luego siguió con la explicación de cómo se producía la combustión de la vela, donde demostró que la llama de una

vela es muy estable a menos que se produzcan acciones externas a esta. Además logró mostrar a sus oyentes con simples experimentos que el lugar más caliente de la llama es donde el aire y el combustible en forma de gas entran en contacto, ahí se produce una reacción química que libera calor. Luego prosiguió afirmando que para que se produzca esta reacción química de combustión es estrictamente necesaria la presencia de aire (oxigeno), esto lo demostró con un experimento donde deja una vela prendida al aire libre y luego esta misma la encierra creando una cámara de combustión donde al acabarse el aire disponible la llama termina apagándose como lo muestra la Figura 1.1.

Figura 1.1: Experimento de necesidad de aire para la combustión.

Como explica Thomsen [2], Faraday luego abordó la presencia de productos de la combustión, donde destacan el agua, hidrogeno y oxígeno, y también hizo una aproximación bastante buena sobre la formación del hollín y su presencia en la llama. Finalizando sus presentaciones hizo un experimento donde por medio de un tubo puesto al interior de la llama de la vela quería demostrar la existencia de hollín en las llamas. Al mostrar el experimento a sus oyentes, encendió la llama y por este tubo empezó a circular un poco de humo, el cual salía por

el otro extremo y podía ser además encendido. Con esto quedó demostrado que existía combustible (en forma gaseosa) que no se había consumido por la falta de aire en el centro de la llama.

Por otra parte, cuando se colocaba el tubo en la parte más luminosa de la llama de la vela (aproximadamente la parte alta de la llama), se podía apreciar de forma casi instantánea que el tubo se empezaba a ennegrecer por el humo que circulaba, estas partículas negras que se pegaban en el tubo vienen a hacer visible la formación de hollín en la llama de la vela como se muestra en la Figura 1.2.

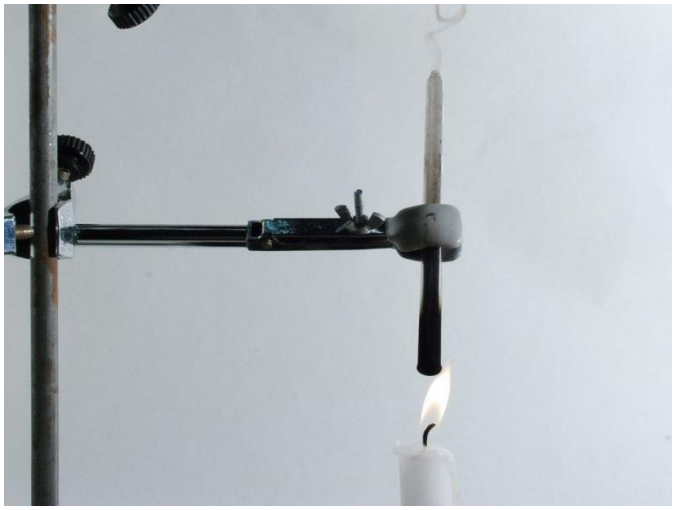


Figura 1.2: Experimento detección de hollín en la llama.

1.2.2 Llama de difusión laminar

Dentro de las características más importantes de una llama es donde se produce la mezcla de aire (oxidante) con el combustible, dependiendo de esto es posible generar dos tipos de llamas, de premezcla o de difusión. Las llamas de premezcla se producen cuando el aire y el gas

se mezclan antes de la zona de combustión. Las llamas de difusión se producen cuando el aire y combustible se mezclan durante el proceso mismo y en la zona combustión [8]. Las llamas de difusión son las que se ocuparán para realizar los experimentos y el análisis de los datos obtenidos.

Una característica importante de una llama de difusión es la velocidad de combustión de ésta, es decir, la velocidad con la que el combustible y el aire se mezclan en proporciones adecuadas para que ocurra la reacción. Esto implica que las llamas de difusión producen una reacción química mucho más compleja que las llamas de premezcla, debido principalmente a que dependiendo de las proporciones de las mezclas estas pueden ser ricas o pobres [9].

Por otra parte las llamas de difusión se pueden dividir en llamas de difusión laminar o turbulentas, el tipo de llama depende principalmente de la velocidad de los flujos de oxidante y combustible. Las llamas de difusión turbulentas son las más comunes en los procesos de combustión que las llamas de difusión laminar, pero las llamas turbulentas son mucho más difíciles de analizar debido a su inestabilidad, distorsión y la cinética química presente, entre otros [10]

Debido a la complejidad del análisis de llamas turbulentas y bajo el concepto Flamelet [6], se establece que cuando la reacción química se produce mucho más rápido que los procesos de transporte de combustible mediante convección y difusión, se dice que la combustión se produce en capas asintóticas que integradas forman un flujo turbulento en la llama. Estas capas al estar bien definidas dentro del proceso de combustión de una llama se pueden aproximar a llamas laminares [5]. Por este motivo todos los resultados obtenidos para llamas laminares

pueden luego ser ampliadas a llamas turbulentas, que son las más comunes en los procesos de combustión más importantes de la industria.

1.2.3 La vela

Actualmente una vela se compone principalmente de cera y un pabilo. La cera puede ser mezclada o formulada con aditivos tales como colorantes o pigmentos para el color, fragancias para aroma, así como otros ingredientes que afectan el acabado de la superficie y la adhesión. El tipo más común de cera utilizada en la fabricación de velas es la parafina, un derivado del petróleo, que ha sido refinado para contener un bajo porcentaje de aceite residual [11], este es el tipo de combustible que se ocupará en las velas con las cuales se harán los experimentos.

El componente principal de una vela es la cera de parafina, que es un material que se compone de una mezcla de hidrocarburo de cadena recta. La fórmula molecular para la parafina es C_nH_{2n+2}, Donde el valor n varía de 19 a 36 y el valor promedio es de 25 [12]. Las características de una cera de parafina se definen comúnmente por sus propiedades físicas. Estas propiedades incluyen el punto de fusión, penetración, peso molecular, viscosidad, contenido de aceite, color, olor, y otros enumerados en la Tabla 1.1. La más importante de estas propiedades desde el punto de vista de fabricación es el punto de fusión, que determina el tipo de vela que puede ser producido.

Property	Value
Carbon number, range (C_nH_{2n+2})	19–36
Carbon number, average (C_nH_{2n+2})	23–25
Molecular weight (average)	350–420 kg/kmol
Melting point	48–68°C
Congealing point	66–69°C
Flash point	204–271°C
Fire point	238–263°C
Boiling point	350–430°C
Oil content (average)	0.1–0.5%
Oil content (maximum)	0.5–0.9%
Density (at room temperature)	865–913 kg/m^3
Density (at 82°C)	766–770 kg/m^3
Specific gravity	0.82–0.92
Kinematic viscosity (at 100°C)	3.1–7.1 mm^2/s
Vapor pressure (at 100°C)	2.67 kPa
Net heat of combustion	43.1 MJ/kg
Gross heat of combustion	46.2 MJ/kg
Latent heat of fusion	0.147–0.163 kJ/g
Specific heat (solid at 35–40°C)	2.604 kJ/kg K
Specific heat (liquid at 60–63°C)	2.981 kJ/kg K
Thermal conductivity (at room temperature)	0.23 W/m K
Melted wax temperature (average, around base of wick)	82–85°C
Maximum flame temperature	1400°C

Tabla 1.1: Propiedades de una vela hecha de cera de parafina [11].

Según publicaciones del National Candle Association [13], el pabilo (mecha) se compone de un trenzado o tejido trenzado (generalmente de algodón) que está diseñado para que coincida con el tipo de vela y cera. El tipo más común de mecha es la mecha trenza plana, siendo una trenza cuadrada o con alma. El pabilo es el encargado llevar el combustible (cera) mediante capilaridad a la parte donde se produce la combustión en el extremo superior, dependiendo del largo y ancho de las mechas, dependerá la forma y dimensión que tendrá la llama de la vela cuando se empiece a quemar [14].

Como explica Thomsen [2] cuando se quema una vela se produce la coexistencia de “una fase gaseosa representada por la zona reactiva, necesaria para iluminar pero también para liberar energía (por radiación) que es recuperada por la superficie de la vela. La fase líquida que aparece producto de la transferencia de calor desde la zona de llama y finalmente la fase sólida que permite almacenar de manera segura la carga combustible”.

Cuando se quema una vela se produce un proceso continuo que no se acaba a menos de una acción externa, falta de aire o falta de combustible. En este proceso continuo el calor producido por la llama de la vela derrite la base de la vela creando una piscina de cera, ésta a su vez sube por capilaridad por la mecha donde se evapora, éste sirve como combustible y mantiene la llama prendida de forma estable. En la figura 1.3 se muestran los distintos procesos que interactúan en la combustión de una vela.

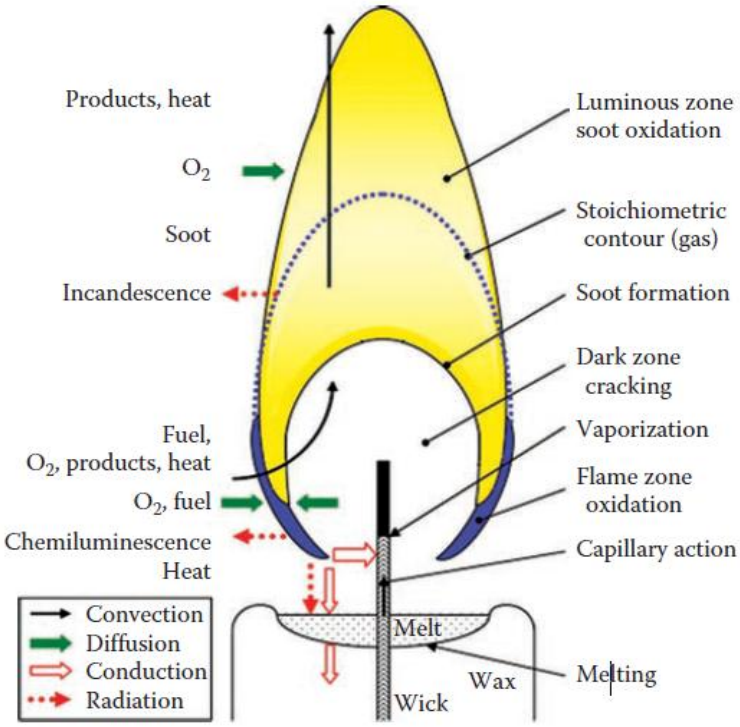


Figura 1.3: Procesos que se producen en la combustión de una vela [15].

La combustión de la vela produce 3 productos principalmente que son el CO2, el vapor de agua y las partículas de hollín. La incandescencia de las partículas de hollín produce que la llama tenga una parte luminosa [15].

1.2.4 Hollín

1.2.4.1 Características del hollín

En el último tiempo se han logrado grandes avances en la comprensión de los mecanismos y la fenomenología de la formación de hollín en los sistemas de combustión. Como se produce el hollín es un problema importante para la ciencia. La atención que este problema ha recibido, refleja el difícil problema que plantea la formación de hollín para los diseñadores de sistemas de combustión y los operadores de sistemas de combustión. Aunque se han logrado progresos en la comprensión de la química y la física, persisten muchas interrogantes y continúa el debate sobre los detalles de la formación de hollín y la oxidación [16].

El hollín es comúnmente considerado como un producto indeseado en los procesos de combustión, ya que este es un agente contaminante importante por lo que no es deseada su aparición en los procesos de combustión. Sin embargo, lo planteando por Fuentes [7] contradice en gran parte lo que hasta no hace mucho se creía, esto porque se demostró que cuando aumenta la producción de hollín también existe un aumento en la radiación y en la tasa de liberación de energía de una llama. Esto hace suponer que la producción de hollín logra que los procesos de combustión sean más eficientes al aportar una tasa de energía mayor al sistema. Esto genera un gran problema a la ciencia y a los desarrolladores de sistemas de combustión, ya que deben

enfrentar por un lado el desafío de reducir al mínimo la producción de hollín para no contaminar (según normas ambientales) y por otro aumentar la producción de hollín para generar un proceso con mayor eficiencia y aporte de energía.

A pesar que algunos aspectos de la fenomenología del hollín siguen siendo inciertos, la necesidad de diseñar sistemas que controlen la cantidad de hollín que se produce es indispensable para la ingeniería. Los ingenieros que diseñan motores, diésel especialmente, se enfrentan a uno de los problema más difíciles de la ciencia de la combustión. Como se dijo anteriormente, por un lado se enfrentan a limitaciones ambientales para reducir las emisiones de partículas contaminantes y a obtener la mayor eficiencia en sus motores. Por este mismo motivo cuando estos procesos no se controlan de la forma adecuada la llama puede generar humo, lo que indica una mayor concentración de hollín. A su vez se produce una mayor cantidad monóxido de carbono (CO), que al ser inhalado puede llegar a ser letal para las personas. Esta producción de CO letal no necesariamente se produce solo en incendios, también se puede producir en cualquier tipo de sistema de combustión en la industria y hasta en una casa con un sistema de calefacción por ejemplo. Esto genera que las soluciones de ingeniería convencionales a través del desarrollo de numerosos prototipos no sea trivial y deban pasar por varios procesos de evaluación, ya que algunos no son económicamente atractivos o incluso no son factibles.

El hollín está principalmente formado de carbono; otros elementos como el hidrógeno y el oxígeno están presentes normalmente en pequeñas cantidades. Se produce durante la pirólisis a alta temperatura o la combustión de hidrocarburos. La emisión de hollín de una llama se determina por la competencia entre la formación de hollín y la oxidación. Un modelo integral del proceso de hollín debe incluir ambos fenómenos.

A través de los años se ha obtenido una gran cantidad de información con respecto al paso de formación de hollín en tubos de choque, llamas laminares premezcladas y llamas de difusión laminar. A medida que los hidrocarburos se pirolizan, producen principalmente hidrocarburos más pequeños, en particular acetileno. El paso inicial en la producción de hollín es la formación de las primeras especies aromáticas a partir de estos hidrocarburos alifáticos.

Las especies aromáticas crecen por la adición de otras especies alquílicas aromáticas y más pequeñas para formar hidrocarburos aromáticos policíclicos más grandes (PAH). El crecimiento continuado de los PAH, conduce finalmente a las partículas más pequeñas de hollín identificables, con diámetros del orden de 1 nm y con masas de alrededor de 1.000 uma [16].

Las partículas de hollín exhiben una distribución de tamaños, usualmente no muy lejos de log-normal. Sin embargo, Palmer y Cullis [18], señalan que las partículas recogidas de una amplia variedad de procesos de combustión (en condiciones normales de funcionamiento) tales como llamas de horno, motores de pistón, combustores de turbina o llamas premezcladas, no difieren mucho en tamaño, siendo típicamente 200-400 Å de diámetro medio.

Al examinar las partículas de hollín en un microscopio electrónico, estas parecen consistir en partículas aparentemente esféricas que están entrelazadas entre sí. Los diámetros de estas pueden variar entre 100 a 2000 Å. Las partículas más pequeñas se encuentran en llamas que no generan hollín y las más grandes en llamas que generan mucho hollín [19]. Las partículas de hollín de forma esférica comúnmente son llamadas “Partículas Elementales de Hollín”. Estas partículas elementales al aglomerarse forman cadenas o racimos como se pueden apreciar en la Figura 1.4.

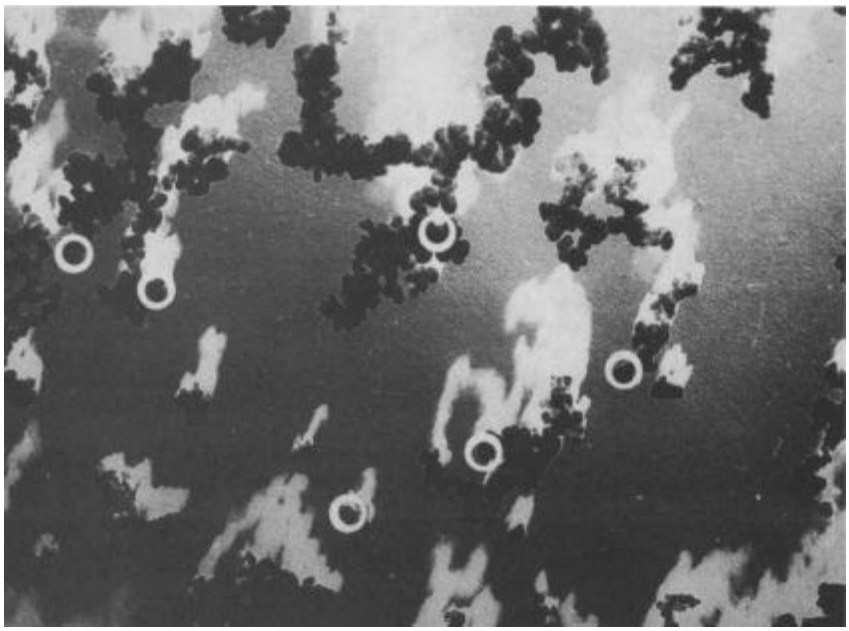


Figura 1.4: Micrografía electrónica de partículas de hollín de tamaño medio de 200 Å [20].

1.2.4.2 Mecanismo de formación del hollín

Como plantea Kennedy [16], la producción de partículas de hollín en una llama es inherentemente un fenómeno controlado químicamente. Los hidrocarburos de bajo peso molecular (gaseosos) se convierten en carbono esencialmente sólido en sólo unos pocos milisegundos. La termodinámica por sí sola no puede describir este proceso ya que el hollín se forma más allá de regímenes donde es termodinámicamente estable con relación a los óxidos de carbono. Por lo tanto, la cinética química desempeña un papel importante en la producción de hollín. La química ocurre durante casi todas las fases de la producción de hollín: creación, crecimiento superficial, envejecimiento y oxidación. Además, ahora se reconoce que el hollín puede participar químicamente en la reducción de otro contaminante indeseable, el óxido nítrico. En la Figura 1.5 se muestra los mecanismos de formación de hollín:

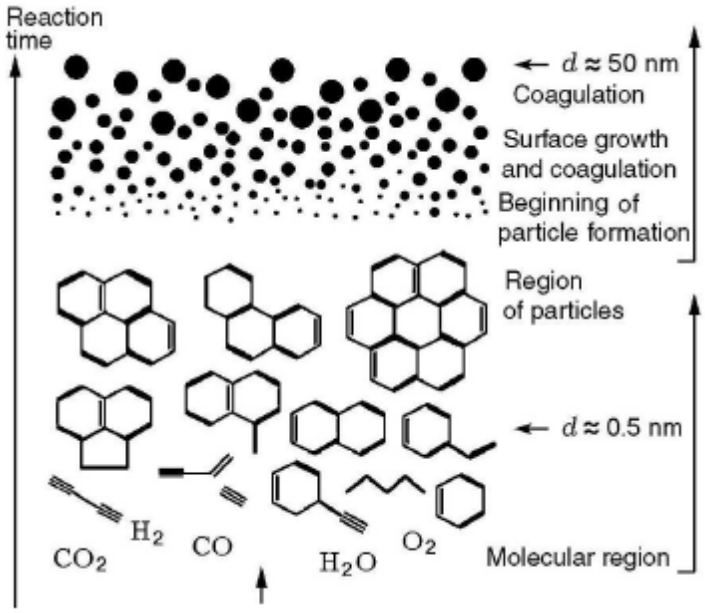


Figura 1.5: Mecanismo de formación de hollín [21].

Las primeras partículas se forman en la etapa de creación, éstas aparecen a partir de las moléculas de combustible producto de la pirólisis. Los productos incluyen varios hidrocarburos no saturados, como acetileno (C_2H_2) y sus análogos superiores, también producto de este proceso aparecen los PAH. El acetileno y los PAH son considerados los más probables generadores de hollín en las llamas. En el proceso de nucleación a partir de los PAH se forman las primeras partículas de hollín reconocibles, estas son muy pequeñas con un tamaño no mayor a 20 Å de diámetro. Luego comienza la etapa de crecimiento superficial (aumento de los diámetros de las partículas), donde se produce la mayor cantidad de material en fase sólido. Durante este proceso la masa de los núcleos de hollín crecen, el mecanismo más citado para este proceso es el Hydrogen Abstraction by Carbon (Acetylene) Addition (HACA), después de este proceso los núcleos crecen de 2 nm hasta 30 nm aproximadamente. En las reacciones de crecimiento existe un incremento en la fracción en volumen de hollín pero la cantidad de partículas se mantiene constante en el proceso [17]. Finalmente, se produce la coagulación, proceso en el cual pequeñas

partículas de hollín se van uniendo a partículas de mayor tamaño formando una aglomeración de múltiples partículas formando largas cadenas y/o racimos de partículas de hollín. Al contrario de la etapa de crecimiento, en la etapa de coagulación la fracción de volumen de hollín se mantiene constante pero el número de partículas disminuye. El crecimiento superficial y la coagulación se producen en forma simultánea para generar el crecimiento de las partículas, lo que finalmente se traduce en el proceso de aglomeración de partículas, donde se forman los racimos o cadenas de partículas.

Seguido de los procesos anteriores que constituyen la formación de hollín se produce de forma simultánea la oxidación, donde participan elementos como el O_2, O y radicales OH, que generan la quema del hollín en la parte superior de la llama. La oxidación del hollín finalmente produce gases como el CO o CO_2. En un sistema de combustión lo que determina la producción de hollín es como compiten los procesos de formación y oxidación en forma simultánea.

1.2.4.3 Influencia de la composición de oxidante en la formación de hollín

Cuando se habla de composición del oxidante se hace referencia al índice de oxígeno (OI), el cual se calcula como,

$$\mathrm{OI} = \frac{\text{flujo oxígeno}}{\text{flujo oxígeno} + \text{flujo inerte}}$$

Es decir, se define índice de oxigeno como la concentración de oxígeno presente en el flujo oxidante. Donde el flujo de gas inerte o diluyente es generalmente helio (He), argón (Ar) o nitrógeno (N_2).

El consenso luego de varios estudios [22] es que al bajar la concentración de oxigeno o índice de oxigeno (OI) la concentración de hollín disminuye, y viceversa. Además, al disminuir la concentración de oxigeno la temperatura de la llama disminuye, lo que conduce a una reducción de la tasa de formación de hollín, sin embargo también ocurre que el tiempo de residencia aumenta para la formación de hollín, fomentando su acumulación. Por lo tanto, cuando se disminuye la concentración de oxígeno en la llama, la formación de hollín está supeditada al enfrentamiento de estos dos procesos, por una parte la disminución de la temperatura de la llama y por otra el aumento del tiempo de residencia.

Además, otras investigaciones [23, 24] respecto de la influencia del índice de oxígeno en la producción de hollín han demostrado que el aumento de la producción de hollín es considerablemente mayor cuando se aumenta la concentración de oxigeno, estando esta en un nivel inicial bajo (por ejemplo un 10%), en comparación a realizar la misma operación pero con un nivel de concentración de oxigeno inicial mayor (cercano al 25% por ejemplo). En este sentido, otros trabajos [7] han apoyado esta tesis demostrando que al disminuir el OI desde valores altos ($OI \approx 0.4$) la tendencia es a aumentar la formación de hollín, hasta un valor máximo de $OI \approx 0.25$. Luego de este punto, la disminución del OI tiene el efecto contrario, es decir, la producción de hollín disminuye, hasta la extinción de la llama en $OI \approx 0.1$. Por lo tanto, el incremento en la formación de hollín con el aumento del OI, a valores relativamente bajos de OI ($0.1 < OI < 0.25$), se atribuye a la predominación de la pirolisis sobre la oxidación en este rango de temperatura, considerando que la concentración de oxigeno también tiene una influencia sobre la temperatura de la llama, lo cual afecta los procesos de formación y oxidación.

Cabe destacar que la variación del índice de oxígeno (OI) , no solo afecta la producción de partículas de hollín, sino que también influye en otras propiedades de la zona reactiva, tales como, los límites de inflamabilidad, temperatura, liberación de energía, etc.

1.2.5 Trabajos Previos Realizados

Como se dijo anteriormente, uno de los pioneros en realizar estudios acerca de esta materia fue M. Faraday a mediados del siglo XIX. Todos sus trabajos fueron compilados y publicados en el libro "The chemical history of a candle" [1]. En estos trabajos durante sus 6 lecturas entrego información que actualmente es tomada como base para muchos estudios y que se pueden resumir en:

- Conferencia 1: Una Vela: La Llama - Sus Orígenes - Estructura - Movilidad – Brillo.
- Conferencia 2: Brillo de la Llama - Aire necesario para la combustión - Producción de Agua.
- Conferencia 3: Productos: Agua de la combustión - Naturaleza del Agua - Hidrógeno.
- Conferencia 4: Hidrógeno en la Vela - Quemaduras en agua - La otra parte de Agua – Oxígeno.
- Conferencia 5: El oxígeno presente en el aire - Naturaleza de la Atmósfera - Sus Propiedades - Otros productos de la Vela - Ácido carbónico - Sus propiedades.
- Conferencia 6: Carbón – Gas Carbón y la respiración - Su analogía con la quema de una vela.

Weinberg y Lawton [25] quisieron seguir ahondando en el conocimiento científico de la combustión, en su trabajo estudiaron el efecto que producían campos magnéticos en la detección de llamas, y en este experimento se utilizaron velas para generar las llamas.

Siguiendo con el aporte al conocimiento de la combustión, Hamins et. al [11] realizaron una serie de experimentos, el propósito de su investigación era identificar el comportamiento y las propiedades de las velas comunes, con el fin de proporcionar herramientas adicionales para su uso por los investigadores de prevención de incendios. Las propiedades de la cera de parafina se obtienen a partir de la literatura y de los experimentos anteriores. Las velas se queman en condiciones controladas de laboratorio para medir la tasa de quema de masa, tasa de regresión de la vela, altura de la llama, y el flujo de calor. El uso de las propiedades de la cera de parafina y las características de las velas, permitieron realizar numerosas simulaciones con el NIST Fire Dynamics Simulator (FDS) para modelar la velocidad de combustión y el perfil del flujo térmico de la llama de la vela. Los resultados del modelo se comparan luego con la altura de la llama y de los datos de flujo de calor obtenidos experimentalmente. El modelo facilita una mejor comprensión de la estructura de las llamas de las velas.

Para continuar lo realizado por Hamins et. al [11], Raju y T'ien [26] desarrollaron un modelo de la quema de velas con una mecha porosa. El análisis de los medios porosos incluye el flujo de combustible inducido por capilaridad, la vaporización y el movimiento de los gases combustibles considerados en la transferencia de calor involucrada. Además se incluyó en este estudio, el auto recorte que se producen en las mechas a través del proceso de combustión y cómo puede afectar este fenómeno en la elección de las dimensiones de la mecha.

Allan, Kaminski, Bertrand, Head, & Sunderland [27], presentaron una investigación experimental del smoke point para llamas de velas. Usaron mechas ajustables con diámetros de 1.7 a 7.3 mm, estas se utilizaron para medir el smoke point en el aire a través 14 ceras diferentes. El smoke point queda definido por el punto en el cual la llama en cuestión comienza a emitir hollín, es decir, comienza la aparición de humo negro de llama, se representa por el valor de la altura a la cual se produce dicho fenómeno. De los experimentos realizados se obtuvo que los smoke point medidos aumentaron con el diámetro de la mecha y los smoke point disminuyeron con el número creciente de carbono en la cera.

Un estudio analítico y experimental combinado se realizó para determinar la longitud y la anchura de una llama de vela [28]. Las mediciones se realizaron de llamas laminares estables a partir de fotografías de velas recta - mecha compuestas de n-tetracosano y ceras de parafina normales. También se observó y registró que el punto de unión de la llama a lo largo de las mechas verticales variaba. El punto de unión se encontró que dependía de la relación de aspecto de la mecha. Se utilizó el modelo de Roper [29] para estimar la altura de la llama, adaptado a las condiciones particulares de una vela. Con un ligero ajuste a una constante, la anchura de la llama fue bien modelada, y la predicción para la altura de la llama era aproximadamente un 60% más alto. Además, el modelo dio una visión para producir una correlación simple pero precisa para altura de la llama en términos de relación de aspecto de la mecha y el número de Rayleigh.

Musalem [3], realizó un trabajo que permitió el estudio de la combustión de llamas de difusión en condiciones de gravedad reducida. Para este trabajo Musalem tuvo que diseñar y construir un aparato que permitiera medir la fracción en volumen de hollín y la cantidad de energía que liberaban distintas llamas de difusión. También expuso el diagnostico óptico a través del método de extinción de luz (LE) con modulación absorción/emisión (MAE)

monocromática. Además también se explica cómo funciona el programa MATLAB, que es el cual fue utilizado para el tratamiento de las imágenes obtenidas. Finalmente se realizó una serie de experimentos con llamas de difusión en velas, para poder caracterizarlas y así sentar un precedente para futuras experiencias que logren aumentar el conocimiento acerca de la combustión, por motivos de seguridad y de eficiencia en los diferentes procesos.

El último trabajo realizado y que sirve como base para el que se realizará, es lo realizado por Thomsen [2], donde en términos concretos, se realiza un estudio experimental con el objeto de entender los cambios que se producen en las características de las llamas, al modificar las dimensiones de la mecha de la vela. Thomsen [2] expone que "Particularmente, se efectuaron mediciones de llamas de difusión laminar estables utilizando mechas con diámetros y largos variados, manteniendo siempre un ratio de aspecto (D/L) dentro del rango 0,1-2". Principalmente en este estudio se midieron la pérdida de masa, la geometría de la llama, la producción de hollín y el flujo radiativo. Todo esto medido bajo severas mediciones no intrusivas a la vela con el fin de no provocar alteraciones en los resultados obtenidos.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

El objetivo principal de este trabajo es generar información experimental que logre caracterizar el proceso de combustión. Se medirá en la combustión de una vela la producción de hollín, la pérdida de masa del combustible, la radiación y la energía liberada por su llama. Todo estos datos se medirán en diferentes ambientes generados, donde se comenzará con aire normal con 21% de Oxigeno hasta un valor de Oxigeno de 37% en el aire.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Generar las velas necesarias para ser utilizadas en la obtención de datos experimentales mediante la quema de ellas, y con estas mismas generar llamas de difusión laminar para los estudios experimentales a realizar.

- Estudiar la radiación que producen las llamas a medida que varía el porcentaje de Oxigeno en el aire.

- Obtener los perfiles de producción de hollín a través del procesamiento de los datos obtenidos mediante un programa computacional para relacionarlos con la energía liberada en cada caso.

- Verificar la validez de los resultados obtenidos al compararlos con resultados de trabajos anteriores.

1.4 Alcance

El presente trabajo de investigación se enmarca dentro del proyecto FONDECYT Nº 11130125: “Numerical Simulation of Soot Kinetics in Laminar Diffusion Flames”. Se trata de un análisis de distintos fenómenos característicos de las llamas tales como; la producción de hollín, el flujo radiactivo, geometría y pérdida de masa de un combustible bajo condiciones experimentales particulares. Como fuente combustible fueron utilizadas velas comunes de parafina, a partir de las cuales fue posible la generación de llamas laminares axisimétrica, que a su vez hicieron posible el estudio de las variables de interés. En particular, el presente proyecto de investigación busca estudiar los efectos del índice de oxigeno (OI) sobre las principales variables y características del proceso de combustión, como lo son, la altura y geometría de la llama, la producción de hollín, la radiación liberada y la pérdida de masa en el tiempo, utilizando como combustible velas de parafina. Adicionalmente, es importante analizar la relación que pudiese existir entre las diferentes variables en estudio, es decir, caracterizar la producción de hollín y explorar su posible relación con la altura máxima de llama, la zona de reacción, la pérdida de masa y la liberación de energía por radiación de la llama. Cabe mencionar que la variación del índice de oxigeno se realizó entre un 21 % y un 37 %. Posteriormente, se realizó el procesamiento y análisis de los datos obtenidos experimentalmente para extraer los resultados y conclusiones finales.

2 Marco Teórico

2.1 Descripción del arreglo de equipos para el diagnóstico óptico.

Con la finalidad de obtener mediciones confiables de las variables de interés se utilizó el equipo óptico presentado en la Figura 2.1. Dicho arreglo óptico se basa en una técnica de medición no intrusiva que permite obtener las mediciones de manera simultánea sin alterar las propiedades ni condiciones físicas de la llama.

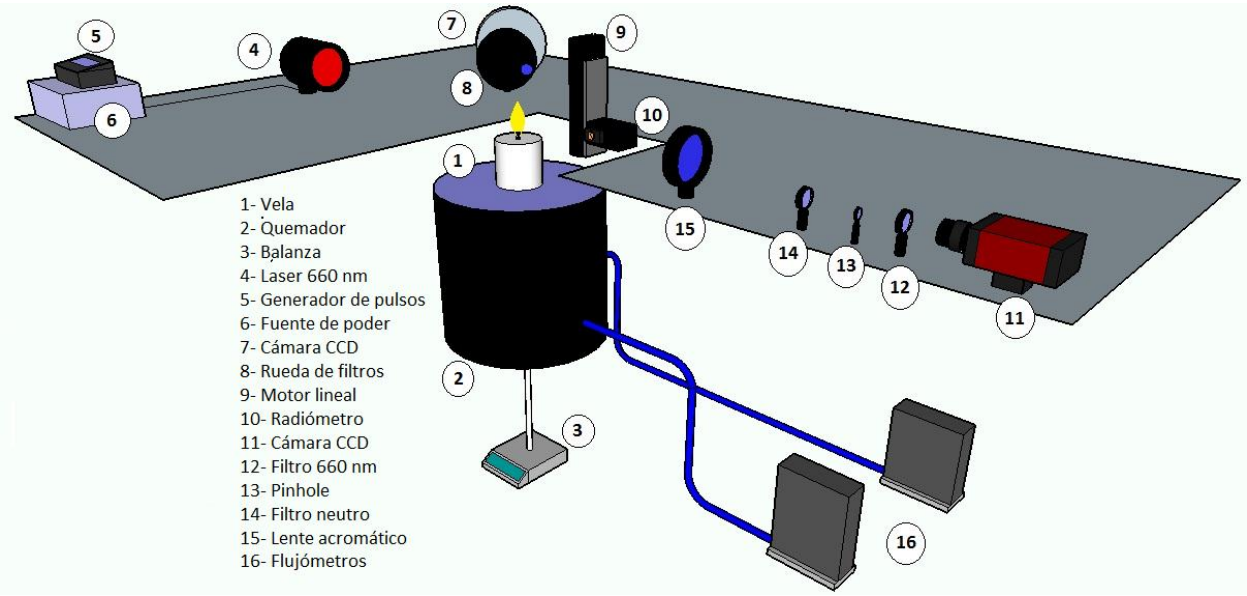


Figura 2.1: Arreglo del equipo experimental.

Para la determinación del contorno de la llama y altura máxima de llama en el tiempo se utilizó una cámara CCD, la cual captura la emisión espontanea de radicales CH liberados en la combustión mediante un filtro de 431 nm. Esta cámara posee una resolución espacial de 1004x1002 pixeles lo que resulta en un área de 0,14 mm×0,14 mm para cada elemento de la imagen. Las imágenes capturas son procesadas digitalmente mediante el método de

segmentación explicado en el capítulo siguiente, a través del cual es posible obtener la evolución de la altura y contorno de la llama en el tiempo.

Para el cálculo de la fracción en volumen de hollín se aplica la técnica MAE propuesta por Jenkins y Hanson [30], la cual será explicada en detalle en el próximo capítulo. Dicha técnica consiste básicamente en tomar mediciones de la atenuación del haz de luz de un láser, a una determinada longitud de onda, al pasar a través de la llama. En este caso se utilizó como fuente de luz un láser THORLABS operado a una longitud de onda de 660 nm, el cual es pulsado a una frecuencia de 1 Hz mediante un generador de pulsos a una intensidad de 350 mA. El camino del haz de luz es el siguiente: primero se hace pasar a través de la llama para luego ser concentrado por un lente acromático, posteriormente pasa por un filtro neutro que evita la saturación de la imagen, luego por un agujero de aguja o pinole que evita ruidos indeseados y finalmente por un filtro de 660 nm antes de llegar a la cámara CCD, la cual captura las imágenes requeridas para el cálculo de la transmisividad (τ). Dicha cámara posee resolución de 1.384 × 1.038 pixeles, lo que resulta en un área de 0,06 mm × 0,06 mm para cada elemento de la imagen.

La pérdida de masa en el tiempo fue medida, con la ayuda de una balanza analítica marca KERN, modelo PFB-120-3, de alta precisión, registrando la variación experimentada por la masa de la vela a cada segundo desde el momento de la ignición inicial.

Para registrar la radiación emitida por la llama en el tiempo se utilizó un radiómetro marca MEDTHERM, modelo 64-0.5-15, del tipo Schmidt-Boelter, el cual posee una ventana de zafiro con un ángulo de 150° para evitar cualquier lectura de calor por convección. El radiómetro registra las mediciones en mV por lo que se utiliza la escala de calibración entregada por el fabricante en la Figura 2.2 para traspasar los datos a kW/m2.

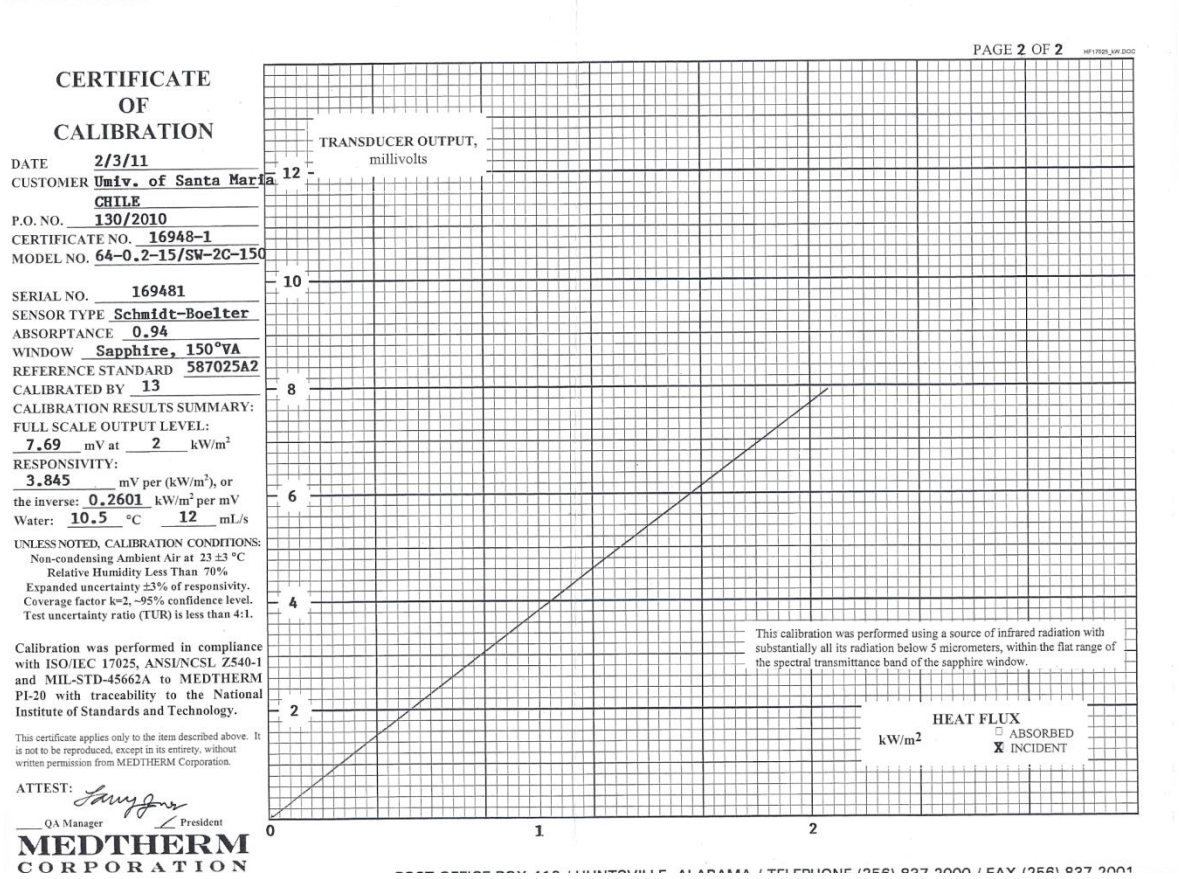


Figura 2.2: Escala de calibración Radiómetro.

El radiómetro fue montado en un motor lineal marca THORLABS, paralelo al eje de la llama, que permitió un desplazamiento vertical preciso del radiómetro. El posicionamiento del radiómetro respecto a la vela se aprecia en la Figura 2.3, donde se tomaron mediciones de radiación desde 5 mm bajo el borde superior de la vela, hasta los 145 mm por sobre la superficie de la vela, a una velocidad constante de 3 mm/s logrando un recorrido total de 150 mm.

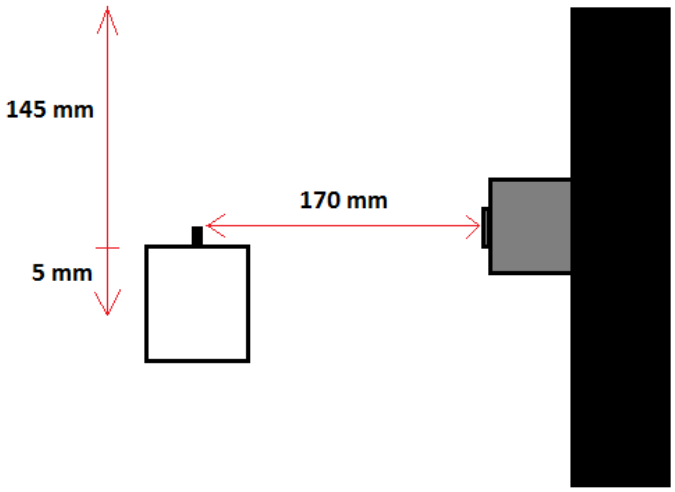
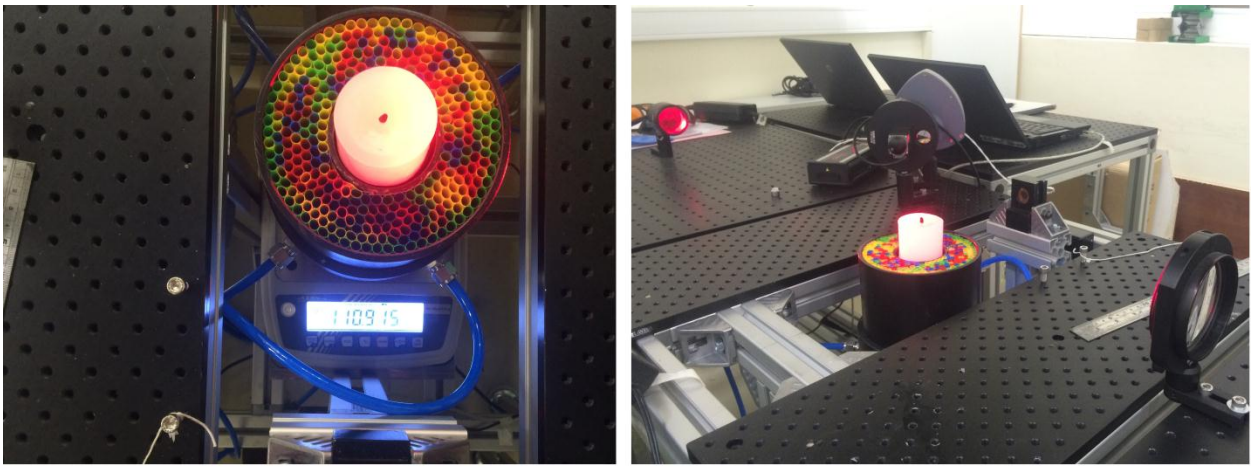


Figura 2.3: Esquema de la posición del radiómetro.

Por último, se utilizó un quemador de tubos concéntricos especialmente diseñado y fabricado para el presente trabajo de investigación como se ve en la Figura 2.4. Este quemador se diseñó con diámetro total de 100 mm en PVC, con un tubo interior de 40 mm donde es introducida la vela de 35 mm de diámetro como se aprecia en la Figura 2.4a. Por el tubo interior de dicho quemador se hizo pasar un vástago para sostener la vela y conectarla a la balanza analítica, mientras esta realizaba las mediciones de pérdida de masa. A su vez, por el tubo exterior se hizo pasar el flujo de oxidante previamente mezclado en la base del mismo quemador mediante bolitas de vidrio para luego subir en un flujo laminar a través de las bombillas. Adicionalmente, para variar el índice de oxigeno OI, se necesitaron dos flujómetros Brooks Instrument de la seria SLA5850 y un controlador central de flujo de alta precisión que fijó de manera digital los flujos requeridos.



(a) (b)

Figura 2.4: Quemador “coflow” (a) Vista en planta. (b) Vista en perspectiva.

2.2 Condiciones experimentales

Como se mencionó anteriormente, el índice de oxigeno se modificó desde un 21 % hasta un 37 %, para lo cual se utilizó una mezcla de oxígeno y nitrógeno, ambos en estado puro y en distintas proporciones. Para variar el índice de oxígeno en el flujo oxidante, se necesitaron dos flujómetros Brooks Instrument y un controlador central de flujo de alta precisión que fijó los flujos de manera digital. En la Tabla 2.1 se muestran las condiciones experimentales utilizadas en la presente experiencia, es decir, como se configuraron los flujos de oxígeno y nitrógeno para alcanzar cada índice de oxígeno (OI). Como se puede apreciar, en todos los casos, dado la limitante de capacidad de los flujómetros, el flujo de oxigeno fue ajustado a 25 l/min haciendo variar en flujo de nitrógeno para conseguir los OI deseados. De este modo se lograron flujos de oxidante elevados, los cuales son requeridos para asegurar condiciones sobre ventiladas y poder obtener una llama que no libere humo al entorno. Cabe destacar que para el índice de oxigeno de 17 y 19 % la combustión no se pudo sustentar.

OI (%)	O_2 (l/min)	N_2 (l/min)	Oxidante (l/min)	Reynolds
17	25	122,0	147,0	1078,1
19	25	106,6	131,6	965,0
21	25	94,0	119,0	873,1
23	25	83,7	108,7	797,2
25	25	75,0	100,0	733,4
27	25	67,6	92,6	679,1
29	25	61,2	86,2	632,2
31	25	55,6	80,6	591,4
33	25	50,8	75,8	555,6
35	25	46,4	71,4	523,9
37	25	42,6	67,6	495,5

Tabla 2.1: Condiciones de flujo para la obtención del OI.

3 Metodología experimental

3.1 Contorno y altura máxima de llama en el tiempo

La determinación del contorno y altura máxima de llama en el tiempo se realiza a través del procesamiento digital de imágenes de emisión espontanea de los radicales CH* liberados en la combustión y capturados por la cámara CCD. Dichos radicales vuelven a su estado fundamental por medio de fluorescencia espontánea emitida a una longitud de onda del orden de 430 nm, razón por la cual se utiliza el filtro descrito en el capítulo anterior. Este análisis entrega información respecto la estabilidad y geometría de la llama para distintos tiempos durante la combustión. El procesamiento de las imágenes aplicado para definir la zona de llama está basado en el método de segmentación propuesto por Ko et al. [31], el cual se basa un robusto algoritmo que a partir de las imágenes capturadas permite la detección de la zona de reacción. En concreto, el método consiste en evaluar cada uno de los pixeles de las imágenes en la función de densidad de probabilidad normal, junto a la selección de un umbral (ζ), para luego de un análisis verificar que pixeles corresponden a la zona de reacción, generando así una nueva imagen como se observa en la Ecuación 3.1.

$$P(x,y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} exp \frac{(I(x,y)-\mu)^2}{2\sigma^2} \tag{3.1}$$

Donde $I(x,y)$ es el valor de la intensidad del pixel en la imagen original, μ es el valor medio de todos los pixeles $I(x,y)$, y σ es la desviación estándar de los pixeles $I(x,y)$. Por su parte, los valores de μ y σ, fueron definidos experimentalmente para cada caso a partir de las imágenes capturadas por la cámara CCD.

El criterio de comparación para decidir si el pixel en cuestión es o no parte de la zona de llama es el siguiente: $Si\ P(x, y) > \zeta$ entonces el pixel analizado pertenece a la zona de reacción, en caso contrario, se ubica fuera de esta.

La ventaja de este método es que con la segmentación se obtienen resultados considerablemente mejores, del contorno de la zona de reacción, en comparación a un análisis visual directo de la imagen.

3.2 Determinación de la fracción en volumen de hollín

Para la determinación de la fracción en volumen de hollín es necesario aplicar la serie de técnicas que se describen a continuación, además de contar con una llama de difusión laminar axisimétrica.

Como síntesis, en primer lugar se aplica una técnica conocida como método de extinción de luz, que básicamente mide la atenuación de un haz de luz por efecto de la dispersión y absorción causado por las partículas presentes en el medio, en este caso la llama [7, 30, 32]. Luego, con las mediciones extraídas de la técnica anterior se aplica el método de deconvolución Onion Peeling para resolver la ecuación integral de Abel, que a su vez es la que relaciona las mediciones de extinción realizadas con el coeficiente de absorción espectral de las partículas de hollín, de este modo se logra determinar la distribución radial del coeficiente de absorción espectral, es decir, la fracción en volumen de hollín. Finalmente se aplica una técnica conocida como Regularización de Tikhonov que soluciona el problema de mal condicionamiento que

presenta la ecuación integral de Abel, generando un set de datos menos susceptibles a errores de medición y variaciones de los parámetros experimentales.

A partir de la técnicas mencionadas es posible calcular la los perfiles de la fracción en volumen de hollín y dicha producción integrada radialmente para diferentes tiempo y alturas.

A continuación se describen cada una de las técnicas mencionadas.

3.2.1 Método de extinción de luz

A través de esta técnica es posible identificar la distribución de las partículas de hollín al interior de la llama. Como se mencionó anteriormente la técnica consiste en medir la atenuación de un haz de luz por efecto de la dispersión y absorción causado por las partículas presentes en el medio. En particular, la atenuación del haz laser, medida a partir de este método, se produce por efecto de la absorción de las partículas de hollín presentes en la llama y que se encuentran en la línea de visión del haz laser.

Es a través de la ley de Beer-Lambert que se relacionan la intensidad de luz entrante en un medio con la intensidad de luz saliente, una vez que en dicho medio se haya producido el fenómeno de absorción. De este modo se establece la siguiente relación como muestra la Ecuación 3.2:

$$\frac{I_\lambda}{I_\lambda^0} = e^{-\int_0^{L_f} k_\lambda^{ext}(r)ds} \tag{3.2}$$

Donde, I_λ^0 es la intensidad de haz incidente, I_λ es la intensidad transmitida, L_f es la longitud recorrida por el haz de luz al interior de la llama y k_λ^{ext} corresponde al coeficiente de extinción, que a su vez engloba los fenómenos de absorción (k_λ) y dispersión (ρ_λ).

Cabe destacar que en este caso se asume que las partículas son gobernadas por un régimen de Rayleigh, donde se cumple que el radio de las partículas de hollín es mucho menor a la longitud de onda del láser incidente ($2\pi r/\lambda < 0{,}3$), razón por la cual, los efectos de dispersión son despreciables en comparación a los de absorción.

Adicionalmente, se sabe que cualquier cuerpo que se encuentra a una temperatura superior al cero absoluto emite radiación y que cuando dicha radiación incide en otro cuerpo, se debe cumplir la siguiente relación:

$$k_\lambda + \rho_\lambda + \tau_\lambda = 1 \tag{3.3}$$

Donde las tres fracciones de energía que integran la Ecuación 3.3, se definen como: absortividad (k_λ), la reflectividad (ρ_λ) y la transmisividad (τ_λ).

Luego, considerando el régimen de Rayleigh, es decir, despreciando los efectos de la dispersión, la fracción de luz absorbida por las partículas queda definida de la siguiente forma.

$$k_\lambda = 1 - \tau_\lambda \tag{3.4}$$

Aplicando la ley de Kirchhoff, la cual establece que la absortividad (k_λ) de un cuerpo es igual a la emisividad (ϵ_λ), asumiendo que el cuerpo está en equilibrio térmico.

$$\epsilon_\lambda = k_\lambda = 1 - \tau_\lambda \tag{3.5}$$

Utilizando la teoría de Mie y asumiendo que las partículas son gobernadas por un régimen de Rayleigth, la fracción en volumen de hollín (f_s) es obtenida a partir del coeficiente de absorción espectral, a partir de la siguiente relación.

$$k_{s,\lambda} = F_\lambda \frac{f_s}{\lambda} \tag{3.6}$$

Donde (F_λ) representa el factor óptico, el cual está definido por:

$$F_\lambda = \frac{36\,\pi\, n_s k_s}{(n_s - k_s + 2)^2 + 4 n_s^2 k_s^2} \tag{3.7}$$

En la Ecuación 3.7, n_s y k_s son las partes real e imaginarias respectivamente del índice de refracción del hollín, los cuales a su vez dependen de la longitud de onda. Ambos factores son determinados usando el método de correlación de Chang y Charalampopoulos [33], considerando una $\lambda = 660\ nm$.

$$n = 1{,}811 + 0{,}1263 ln\lambda + 0{,}027 ln^2\lambda + 0{,}0417 ln^3\lambda = 1{,}76019 \tag{3.8}$$

$$k = 0{,}5821 + 0{,}1213 ln\lambda + 0{,}2309 ln^2\lambda + 0{,}01 ln^3\lambda = 0{,}572281 \tag{3.9}$$

Luego de realizar un análisis geométrico de la ecuación derivada de la ley de Beer-Lambert es posible demostrar que las medidas de extinción $P(y) = -\ln(\tau) = -\ln(I_\lambda / I_\lambda^0)$ y el coeficiente de absorción espectral local $f(r) = k_{s,\lambda}$ se relacionan a través de la conocida ecuación integral de Abel de la siguiente manera.

$$P(y) = 2 \int_y^R \frac{f(r) r}{\sqrt{r^2 - y^2}}\, dr \tag{3.10}$$

Con lo anterior, es necesario conocer el valor de los datos de intensidad de luz que permitan calcular la transmisividad (τ), para lo cual, se realiza el método propuesto por Jenkins y Hanson [30] de adquisición experimental de imágenes moduladas, conocido como método MAE.

3.2.2 Modelo de Absorción / Emisión Modulada (MAE)

Como se mencionó en el apartado anterior, para obtener la fracción en volumen de hollín (f_s) es preciso calcular el coeficiente de absorción espectral $(k_{s,\lambda})$ de las partículas de hollín, y este a su vez se determina en base al cálculo de la transmisividad (τ). En este contexto, el método de Absorción / Emisión modulada MAE permite determinan la transmisividad a partir de las mediciones de extinción, y en particular a través de la adquisición experimental de imágenes moduladas de emisión y absorción en la misma frecuencia de onda y a lo largo del mismo trayecto óptico. En concreto, la transmisividad se calcula a partir de cuatro variables medidas experimentalmente, que son las intensidad de luz emitida por el láser, y captura por la cámara CCD, tanto con llama encendida y llama apagada, y la intensidad medida con láser apagado y llama apagada.

De este modo, la transmisividad queda definida por la Ecuación 3.11:

$$\tau = \frac{S - S\prime}{I_0 - I_0'} \tag{3.11}$$

Donde las cuatro variables necesarias para el cálculo de la fracción en volumen de hollín son:

- $S = I + J$: Intensidad medida con láser encendido y llama encendida.
- $S' = I' + J$: Intensidad medida con láser apagado y llama encendida.
- I_0: Intensidad medida láser encendido y llama apagada.
- I_0': Intensidad medida con láser apagado y llama apagada.

En la Ecuación 3.11 se aprecia que la transmisividad queda definida en términos de la intensidad de luz láser atenuada (luz transmitida) e intensidad de luz del láser no atenuada (luz emitida o incidente). En la Figura 3.1 se muestra un esquema de modulación MAE para calcular la transmisividad:

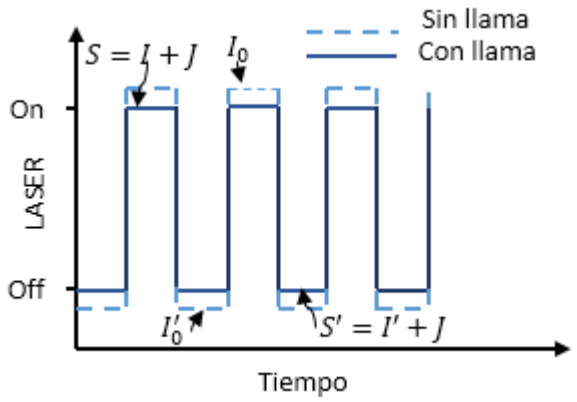


Figura 3.1: Esquema modulación MAE.

3.2.3 Método de deconvolución.

Como ya sabemos es necesario determinar el coeficiente de absorción espectral para luego calcular la fracción en volumen de hollín. Es por esta razón que se utiliza el método de

deconvolución Onion Peeling para resolver la ecuación integral de Abel que relaciona el coeficiente de absorción con las mediciones de extinción realizadas a través del método MAE. De este modo es posible pasar la información proyectada integrada a una información radial.

La ecuación integral de Abel relaciona las medidas de extinción de la siguiente forma:

$$P(y) = -\ln(\tau) = -\ln(I_\lambda / I_\lambda^0)\ , \tag{3.12}$$

el coeficiente de absorción espectral local $f(r) = k_{s,\lambda}$ se puede presentar de dos formas:

$$f(r) = \frac{-1}{\pi} \int_y^R \frac{P\prime(y)}{\sqrt{y^2 - r^2}}\ dy \tag{3.13}$$

$$P(y) = 2 \int_y^R \frac{f(r) r}{\sqrt{r^2 - y^2}}\ dr \tag{3.14}$$

La Ecuación 3.13 corresponde a una solución analítica conocida, donde $P'(y) = dP(y)/dy$. Dicha solución es, en la práctica, de poca utilidad dado que la derivada analítica de los datos proyectados ($P'(y)$) es generalmente desconocida y aproximar dicho valor amplifica el error experimental presente en las mediciones [34]. Dado lo anterior, es que para resolver la ecuación integral de Abel se aplica el método de deconvolución Onion Peeling (OP) a la Ecuación 3.14 siendo la más ocupada en trabajos previos [7, 32]. Para aplicar este método es preciso contar con una llama de difusión laminar axisimétrica, lo cual es posible gracias al procedimiento de ignición utilizado, y consiste básicamente en considerar un plano de la llama, es decir, un área circular, la cual se divide en N anillos anulares espaciados uniformemente, cada uno con un espesor $\Delta r = \frac{R}{N - 1/2}$.

El la Figura 3.2 se observa un esquema del método de deconvolución Onion Peeling.

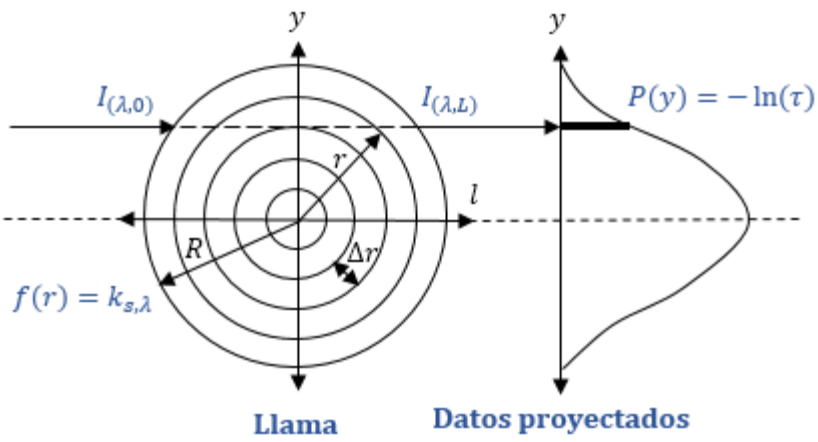


Figura 3.2: Esquema del método de deconvolución.

En la ecuación integral de Abel $f(r)$ es llamada variable de campo y $P(y)$ es el dato proyectado. Considerando esto, si $f(r)$ se supone constante al interior de cada elemento anular, la Ecuación 3.14 queda como:

$$P_i = 2\sum_{j=i}^{N-1} f_j \int_{\substack{r_j-\frac{\Delta r}{2}, j>i}}^{\substack{r_j+\Delta r/2 \\ r_i, j=1}} \frac{r}{\sqrt{r^2-y^2}}\, dr \tag{3.15}$$

Donde $y_i = i\Delta r$, $r_j = j\Delta r$, $P_i = P(y_i)$ y f_j aproxima $f(r_j)$. Al reescribir la Ecuación 3.15 para cada elemento anular, se obtiene un conjunto de ecuaciones lineales que se puede reescribir de la siguiente forma $A_{OP}x = b$, donde x representa el vector que contiene todas las variables de campo desconocidas $x^T = \{f_i, i = 0, 1, \dots, N-1\}$, b contiene los datos proyectados de la siguiente forma $b^T = \{P(y_i), i = 0,1, \dots, N-1\}$ y A_{OP} representa la contribución de $f(r)$ a la variable proyectada y es una matriz triangular superior, que se determina mediante:

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

Posteriormente el sistema matricial se puede resolver fácilmente mediante un método de sustitución hacia atrás.

3.2.4 Regularización de Tikhonov

El problema que presenta la ecuación integral de Abel se relaciona con su mal condicionamiento matemático. De acuerdo al criterio de Hadamard [35] un problema matemático se define como bien planteado cuando cumple con tres condiciones:

1. El problema tiene solución.
2. La solución al problema debe ser única.
3. La solución debe ser función continua para todos los datos de entrada.

La ecuación integral de Abel cumple sin problema las primeras dos condiciones, sin embargo la tercera no se satisface. Esto es debido a que pequeñas perturbaciones en los datos proyectados son maximizados en el proceso de deconvolución generando grandes errores en la determinación de la variable de campo, es decir, la solución para $f(r)$ es sensible a pequeñas perturbaciones en $P(y)$, y cabe mencionar que los datos proyectados presentan perturbaciones intrínsecas que hacen necesario un proceso de regularización.

Para este trabajo se utilizó el proceso de Regulación de Tikhonov de orden cero, cuyo objetivo es encontrar una solución con equilibrio entre precisión y suavizamiento.

Para problemas discretos mal condicionados el método de regularización de Tikhonov se expresa de la siguiente forma:

$$min\{\| \boldsymbol{A}_{OP}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \|_2^2 + \alpha_0^2 \| \boldsymbol{L}_0\boldsymbol{x}\|_2^2\} \tag{3.16}$$

De la Ecuación 3.16 α_0 corresponde al parámetro de regularización utilizado para controlar la estabilidad y precisión de la solución.

El método de regularización de Tikhonov considera de manera conjunta dos funciones objetivo, $F_1(x)$ y $F_2(x)$. Donde $F_1(x)$ representa la precisión de la solución y $F_2(x)$ la estabilidad de la misma.

$$F_1(x) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}_{OP}^T\boldsymbol{A}_{OP}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}_{OP}^T\boldsymbol{b} \tag{3.17}$$

$$F_2(x) = \sum_{p=0}^{n_T} \alpha_p \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{L}_p^T\boldsymbol{L}_p\boldsymbol{x} \tag{3.18}$$

Donde $\boldsymbol{L}$ es una matriz de dimensiones $(N-1) \times (N)$ que aproxima de p-ésima derivada del operador en el espacio discreto y el parámetro α ayuda a controlar la estabilidad y precisión de la solución [32, 36]. En este caso se trata de una regularización de orden cero.

$$L_0 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Minimizando de manera conjunta ambas ecuaciones del siguiente modo $\nabla F(x^*) = \nabla F_1(x^*) + \nabla F_2(x^*) = 0$, considerando el proceso de deconvolución OP y el proceso de regularización, llegamos a lo siguiente.

$$\boldsymbol{A}_{Tik}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}_{Tik} \tag{3.19}$$

Es decir, el procedimiento descrito conduce a un nuevo sistema matricial, donde.

$$\boldsymbol{A}_{Tik} = \boldsymbol{A}_{OP}^{T}\boldsymbol{A}_{OP} + \alpha_0\boldsymbol{L}_0^{T}\boldsymbol{L}_0 \tag{3.20}$$

$$\boldsymbol{b}_{Tik} = \boldsymbol{A}_{OP}^{T}\boldsymbol{b} \tag{3.21}$$

Al combinar las Ecuaciones 3.19, 3.20 y 3.21 llegamos a la siguiente expresión:

$$(\boldsymbol{A}_{OP}^{T}\boldsymbol{A}_{OP} + \alpha_0\boldsymbol{L}_0^{T}\boldsymbol{L}_0)\boldsymbol{x}^{*} = \boldsymbol{A}_{OP}^{T}\boldsymbol{b} \tag{3.22}$$

Dicha expresión no es más que una formulación alternativa, en término de datos empíricos, de la forma general de la regularización de Tikhonov expresada en la Ecuación 3.16.

3.2.5 Criterio de la curva-L

Un aspecto clave y que impacta de manera importante en los resultados obtenidos del proceso de regularización es la selección del parámetro de regularización α_0. Es decir, las diferencias que se pueden obtener, en términos de precisión y suavizamiento, de la solución con dos α_0 distintos es notable. En el presente trabajo el parámetro α_0 fue determinado de acuerdo al criterio de la curva-L. Este método se basa en un análisis grafico de la norma de la solución ($\| \boldsymbol{Lx} \|_2$) y los vectores residuales ($\| \boldsymbol{A}_{OP}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \|_2$) en una escala log-log para un rango de valores posibles del parámetro α_0. Por otra parte, a partir del trabajo realizado por Daun [32] se aplicó un algoritmo que permite encontrar el parámetro correspondiente a la curvatura máxima de la curva-L. Dicho valor se obtiene a partir de la siguiente expresión.

$$K_\alpha = \frac{\rho'_\alpha\eta''_\alpha - \rho''_\alpha\eta'_\alpha}{[(\rho'_\alpha)^2 + (\eta'_\alpha)^2]^{3/2}} \tag{3.23}$$

Donde $\rho_\alpha = log_{10}(\| \boldsymbol{A}_{OP}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \|_2)$, $\eta_\alpha = log_{10}(\| \boldsymbol{Lx} \|_2)$ y todas las derivadas son con respecto al parámetro α. La Figura 3.3 muestra una ejemplificación esquemática del criterio de la curva-L.

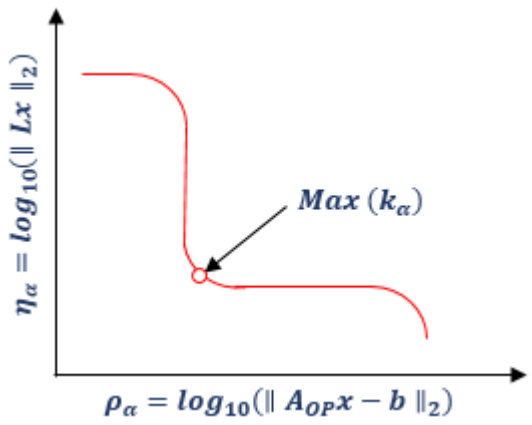


Figura 3.3: Esquema del método de la curva-L.

3.2.6 Fracción en volumen de hollín integrada.

Con el objetivo de poder medir comparativamente como varia la producción de hollín al ir modificando la concentración de oxigeno del flujo oxidante es que se calcula la fracción en volumen de hollín integrado. Dicha producción de hollín integrada (β) se puede considerar un indicador capaz de medir en términos globales la producción de hollín, y se determina a partir de la siguiente formula.

$$\beta = 2\pi \int_0^\infty f_{soot} r dr \tag{3.24}$$

Considerando que se obtienen valores puntuales de f_s, la ecuación anterior se puede discretizar de la siguiente forma:

$$\beta \approx 2\pi\, \Delta r_{soot} \sum_{i=1}^{N} f_{s,i} r_i \tag{3.25}$$

En este caso, r_i corresponde a la posición radial (mm) desde el centro de la llama hasta el punto donde f_s fue calculado, N es el número de pixeles radiales de la imagen y Δr_{soot} es una constante y corresponde a la distancia entre cada medición, debiendo ser relativamente pequeña para aproximarse a β.

3.2.7 Análisis de error

Para complementar el estudio de la fracción en volumen de hollín y obtener resultados estadísticamente robustos es que se consideró el error o incertidumbre presente en los procedimientos realizados. Para esto se aplicó una metodología similar a la desarrollada por Fuentes et al [7], la cual plantea tres fuentes principales de incertidumbre para la determinación de la fracción en volumen de hollín. Dichas fuentes de incertidumbre son: el error derivado de las mediciones de extinción ($\frac{\delta k_\lambda}{k_\lambda}$), la contribución la función de absorción $\left(\frac{\delta F_\lambda}{F_\lambda}\right)$ y el valor de error asociado a variaciones en la longitud de onda del láser $\left(\frac{\delta \lambda}{\lambda}\right)$. Si consideramos conjuntamente la tres fuentes de error se obtiene la siguiente expresión.

$$\frac{\delta f_s}{f_s} = \frac{\delta k_\lambda}{k_\lambda} + \frac{\delta F_\lambda}{F_\lambda} + \frac{\delta \lambda}{\lambda} \tag{3.26}$$

En primer lugar, tenemos la incertidumbre asociada a las mediciones de extinción. De acuerdo a la ley de Bourger el error asociado a las mediciones de transmisividad (τ) , viene dado de la siguiente forma:

$$\frac{\delta k_\lambda}{k_\lambda} = \frac{1}{\ln\left(\frac{I_0}{S}\right)}\left(\frac{\delta I_0}{I_0} + \frac{\delta S}{S}\right) \tag{3.27}$$

Acá I_0 es la intensidad de la luz incidente y S es la intensidad de luz transmitida. Para la obtención de este error se utilizaron una secuencia de imágenes para cada condición, calculando el promedio y la desviación estándar para cada pixel.

El porcentaje de error asociado a las mediciones de extinción que se realizaron en la campaña experimental, se logró determinar que después de analizar dichas mediciones el error varía entre un 10,18 y 14,72%

Luego, para obtener el valor correspondiente al error asociado a la función de absorción o función de propiedades ópticas, se aplica la siguiente formula.

$$\delta F_\lambda = \left|\frac{\partial F_\lambda}{\partial n}\right| \delta n + \left|\frac{\partial F_\lambda}{\partial k}\right| \delta k \tag{3.28}$$

Donde F_λ corresponde al factor óptico y se obtiene mediante.

$$F_\lambda = \frac{36\,\pi\, n_s k_s}{(n_s - k_s + 2)^2 + 4 n_s^2 k_s^2} \tag{3.29}$$

En este caso, los valores de $n_s\ y\ k_s$ corresponden a la parte real e imaginarias respectivamente del índice de refracción del hollín, los cuales a su vez dependen de la longitud de onda ($\lambda = 660\ nm$). Como se mencionó anteriormente, dichos valores se calcular mediante el método de correlación de Chang y Charalampopoulos [33], obtenido los siguientes resultados: $n_s = 1{,}76019$ y $k_s = 0{,}57228$. Evaluado se obtiene $F_\lambda = 4{,}24794$.

Posteriormente, las derivadas del índice de refracción con respecto a $n\ y\ k$ se obtienen a partir de:

$$\left|\frac{\partial F_\lambda}{\partial n}\right| = \left| -\frac{36kn\left(8k^2n+4n(2-k^2+n^2)\right)\pi}{(4k^2n^2+(2-k^2+n^2)^2)^2} + \frac{36k\pi}{4k^2n^2+(2-k^2+n^2)^2}\right| = 3{,}63752 \quad (3.30)$$

$$\left|\frac{\partial F_\lambda}{\partial k}\right| = \left| -\frac{36kn\left(8kn^2+4k(2-k^2+n^2)\right)\pi}{(4k^2n^2+(2-k^2+n^2)^2)^2} + \frac{36n\pi}{4k^2n^2+(2-k^2+n^2)^2}\right| = 6{,}90587 \quad (3.31)$$

Es preciso mencionar que, en su trabajo, Chang y Charalampopoulos [33] cuantifican el porcentaje de incertidumbre asociado a cada valor asociado al índice de refracción, es decir, su parte real e imaginaria ($n_s\ y\ k_s$), asignándole valores de 5,4% y 12.4% respectivamente. Luego, se puede determinar el valor de $\delta F_\lambda = 0{,}8358074$, y la incertidumbre porcentual asociada a la función de propiedades ópticas.

$$\frac{\delta F_\lambda}{F_\lambda} = \frac{0{,}83580740}{4{,}24794} = 0{,}196755 = 19{,}68\ \% \quad (3.32)$$

A continuación, para calcular la última fuente de incertidumbre, correspondiente al error asociado a variaciones en la longitud de onda del láser, la longitud de onda es de λ = 660 nm y se considera que para el láser utilizado como fuente de luz se tiene una variación relativa de la longitud de onda provista de 0,3 %.

Finalmente, se considera la suma de todos los errores explicados anteriormente para la obtención del error total. Por lo que el error asociado a las mediciones de las velas varía entre 30,16 y 34,70%.

4 Presentación y Análisis de resultados

4.1 Pérdida de masa

Uno de los primeros supuestos que se estableció antes de iniciar las campañas experimentales fue que se realizarían mediciones de llamas estacionarias en el tiempo. Por este motivo se realizó primeramente la medición de pérdida de masa de las velas para cada OI, con el fin de verificar este supuesto.

En la Figura 4.1 se muestra la variación de la masa de las velas para los distintos OI usados en función del tiempo. En el gráfico se puede apreciar claramente que a medida que el OI va aumentando (de 21% a 37%) la pérdida de masa de las velas es cada vez mayor en un mismo lapso de tiempo. Esto produce que las pendientes se hagan más pronunciadas a medida que el OI aumenta, lo que se traduce en que la tasa de pérdida de masa sea mayor en OI más grandes. Esta situación es la esperada, ya que con un porcentaje mayor de oxigeno hace que la llama de la vela produzca un mayor consumo de combustible. Es importante destacar que todas las velas fueron encendidas 30 segundos previamente a la medición, esto se hace para lograr la estabilidad de la llama y obtener datos con menores errores.

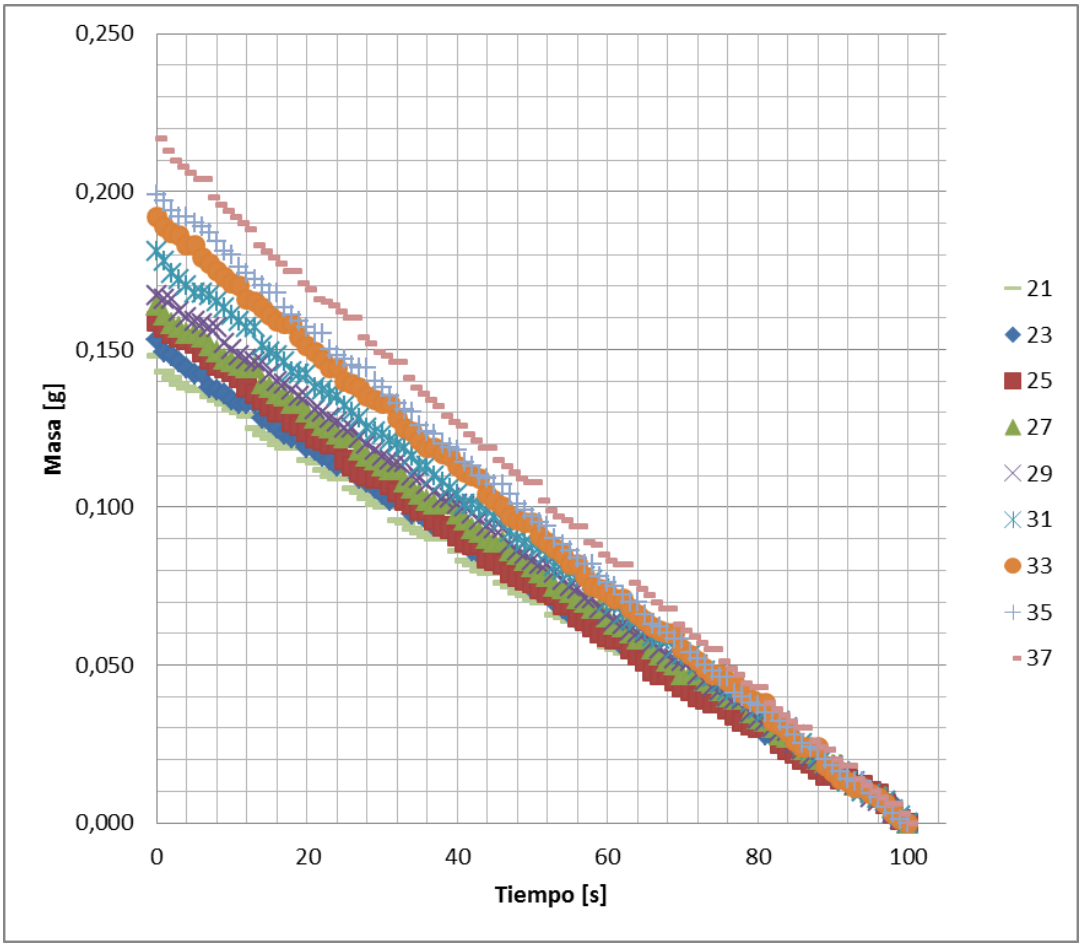


Figura 4.1: Pérdida de masa de la vela en función del tiempo para distintos OI.

A continuación en la Tabla 4.1 se puede apreciar el Mass Lost Rate (MLR) para la vela en los distintos OI, además de su coeficiente R cuadrado y su error. Se observa que a medida que aumenta el OI el MLR aumenta, lo que es esperable al existir un consumo mayor de combustible por la llama a mayores OI. De la misma tabla se desprende que al tener R cuadrado tan cercanos a 1 y errores muy bajos, el MLR se comporta en forma constante a lo largo del tiempo que permanezca encendida la vela. Esto es característico de una vela estacionaria con una tasa de consumo de combustible constante en el tiempo, lo que confirma nuestro supuesto.

OI [%]	MLR [mg/s]	R^2	Error [mg/s]
21	1,430	0,9991	0,004
23	1,492	0,9994	0,004
25	1,580	0,9982	0,007
27	1,609	0,9995	0,003
29	1,674	0,9997	0,003
31	1,767	0,9993	0,005
33	1,918	0,9994	0,005
35	2,007	0,9994	0,005
37	2,145	0,9994	0,005

Tabla 4.1: Calculo de MLR, R^2 y error para distintos OI.

Finalmente con todos los datos obtenidos además se realiza un análisis de tendencia con los distintos MLR obtenidos. En la Figura 4.2 se aprecia que a medida que se aumenta el OI, los MLR aumentan. Se puede ver que tiene una relación aproximadamente lineal con un representación gráfica dada por $MLR = 0{,}0437*OI + 0{,}4694$, con un coeficiente de determinación $R^2 = 0{,}97$.

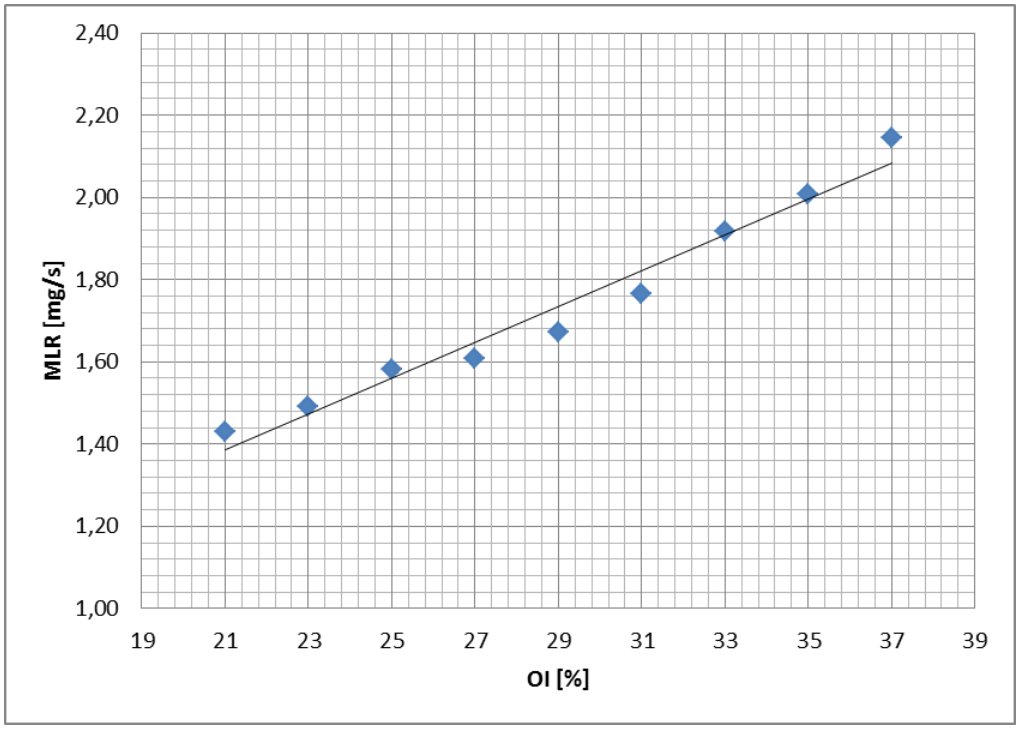


Figura 4.2: MLR en función del OI.

4.2 Contorno y altura de llama

Para determinar el contorno de la llama y a la vez la altura de ésta, se llevan a cabo mediciones de quimioluminiscencia por medio de la liberación espontanea de radicales CH*. Para identificar el contorno de la llama se utiliza el método de segmentación desarrollado por Ko et al. [31], el cual fue explicado anteriormente.

En la Figura 4.3a se observa una imagen de la zona reactiva de la llama generada por la vela con un OI de 21% y a la vez el contorno generado por el algoritmo alrededor de ésta para poder calcular su geometría y su altura posteriormente. En la Figura 4.3b se observa la misma medición hecha anteriormente a la vela, pero ahora cambiando el OI a 37%. Se aprecia claramente que la altura de llama ha disminuido considerablemente, no así su ancho que se ha mantenido de forma similar.

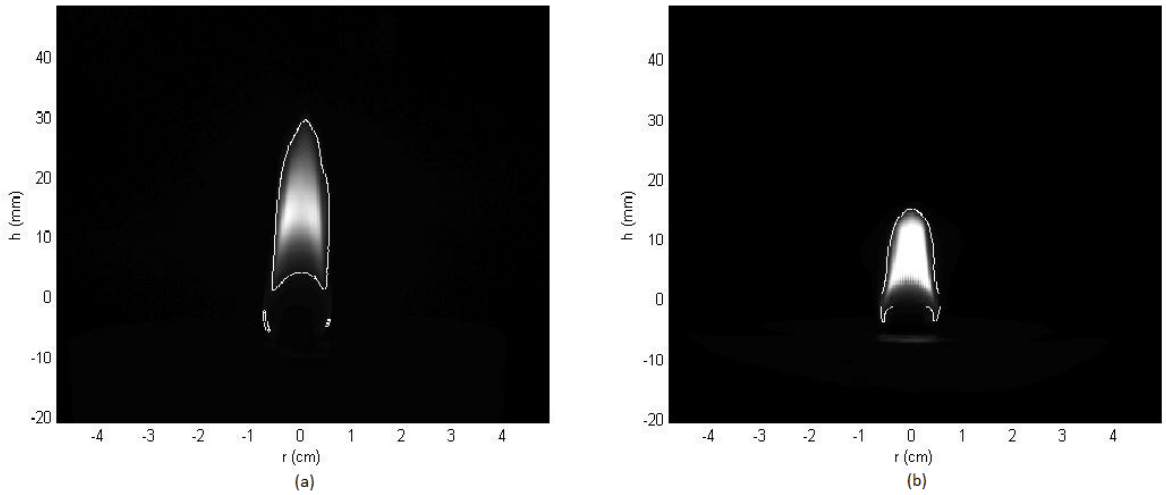


Figura 4.3: Zona reactiva de la llama y contorno de la llama generado por el algoritmo. (a) Llama generada con OI 21% (b) Llama generada con OI 37%.

En la Figura 4.4 se representan todas las alturas obtenidas para los distintos OI estudiados, estas alturas fueron generadas por el mismo algoritmo que describe la geometría de

la llama. Se observa que a medida que aumenta el OI la altura de llama disminuye, lo que es consistente con trabajos anteriores ya que al aumentar el OI se produce una intensificación en la reacción del combustible, ya que al existir una mayor cantidad de oxígeno disponible el combustible se consume más intensamente.

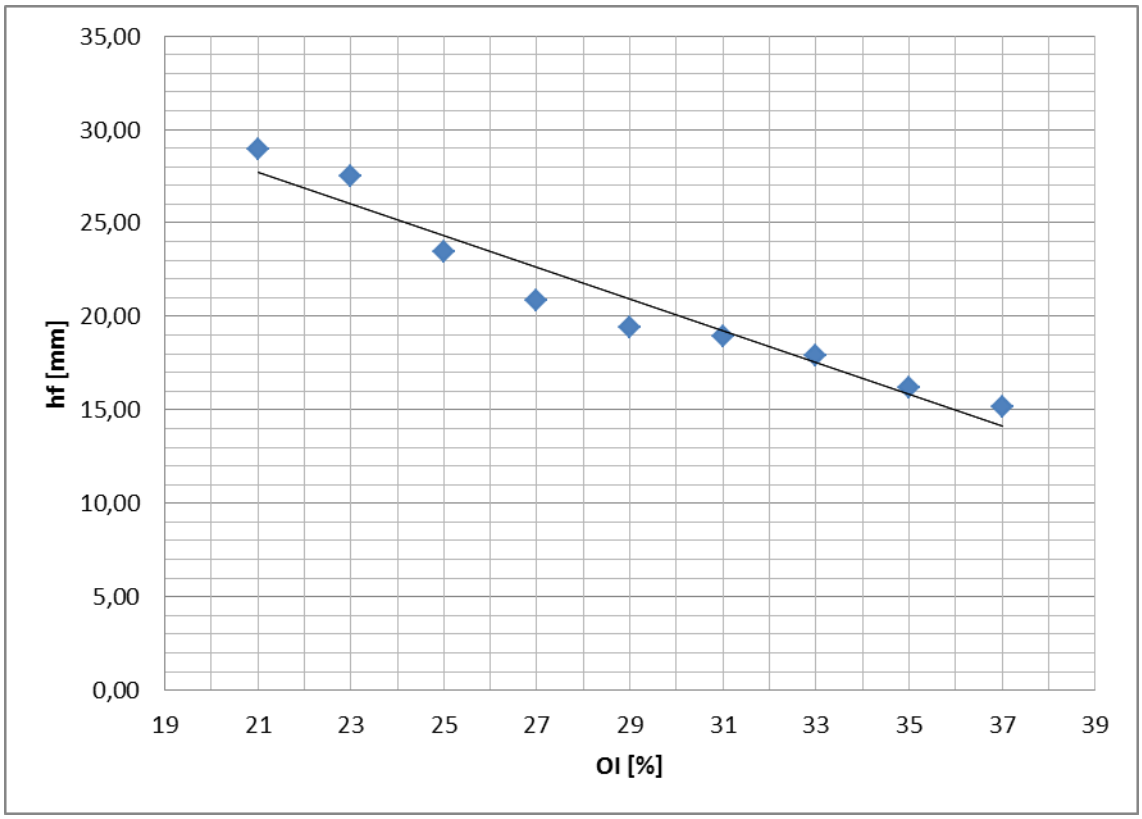


Figura 4.4: Altura de llama en función del OI.

En un análisis de tendencia para la variación de la altura con respecto a los diferentes OI estudiados, se aprecia que existe un comportamiento aproximadamente lineal. Esta curva se puede expresar como $hf = -0{,}8497*OI + 45{,}57$, con un coeficiente de determinación $R^2 = 0{,}94$.

En la Tabla 4.2 están detalladas las distintas alturas de llamas medidas y sus correspondientes errores. Hay que destacar que para el cálculo de estas alturas de llama se realizó un análisis de sensibilidad del método de segmentación variando el valor del umbral τ en un

40%, esto se hace para identificar que pixel pertenece o no a la llama y cuanta variación existe en el cálculo de la altura final. Finalmente después de hacer el análisis de sensibilidad de τ se concluyó que la variación en el cálculo de las alturas es mínima, no llegando a superar el 1% del valor de la altura de llama.

OI [%]	hf [mm]	Error [mm]
21	28,92	0,16
23	27,53	0,10
25	23,47	0,08
27	20,86	0,06
29	19,41	0,05
31	18,96	0,06
33	17,88	0,01
35	16,22	0,03
37	15,18	0,06

Tabla 4.2: Cálculo de altura de llama y error para distintos OI.

La variación total que existe entre las alturas de llama va desde 28,92 mm a 15.18 mm, para OI de 21% a 37% correspondientemente. Esto corresponde a una disminución de un 52% aproximadamente en la altura de llama.

4.3 Fracción en volumen de hollín

4.3.1 Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín

En las Figuras 4.5 y 4.6 se muestran los perfiles radiales de fracción en volumen de hollín. Se escogen alturas normalizadas para cada llama, ya que como las alturas de las llamas varían considerablemente en función del OI se hace necesario hacer este arreglo para poder comparar las tendencias entre éstas. Se eligen 4 alturas normalizadas para cada vela basándose

principalmente en lo que hizo Thomsen [2] para el análisis de los perfiles radiales de producción de hollín. Se eligió una primera altura de un 20% de la altura máxima de la llama, que corresponde a la parte donde comienza el proceso de formación de hollín, luego se elige una segunda y tercera altura de 40% y 60% respectivamente donde se busca observar cómo se comporta el proceso de producción de hollín al ir subiendo a través de la llama. Finalmente se elige una cuarta altura de un 80% que es donde el proceso de oxidación de hollín prevalece. Con la elección de estas 4 alturas normalizadas, se quiso mostrar los distintos procesos involucrados en la producción de hollín y a la vez que los perfiles radiales fueran lo más representativo posible de cada llama con su respectivo OI.

Al comparar las tendencias de los perfiles de fracción de hollín en función de cada altura normalizada se puede apreciar que sus comportamientos son similares para cada llama al ir variando el OI. Se observa que existe un incremento en la cantidad de hollín generada por las llamas en las mismas alturas relativas al ir aumentando el OI. Para un OI de 21% la fracción máxima en volumen de hollín es aproximadamente 5.5 ppm y para un OI de 37% el máximo es de aproximadamente 14 ppm.

De los resultados obtenidos, se observa en la primera altura elegida de 0,2hf que la fracción en volumen de hollín aumenta gradualmente a lo largo del radio para luego disminuir al final, en esta zona de la llama predomina el fenómeno de la formación de hollín lo que produce que a medida que se recorre la llama hacia arriba aumente la fracción en volumen de hollín. En la segunda altura elegida de 0,4hf se observa que se produce la fracción máxima en volumen de hollín para todos los OIs estudiados. Luego al analizar la tercera altura elegida de 0,6hf la fracción en volumen de hollín es un poco menos comparado con la segunda la altura, esto hace suponer que alrededor del centro de la llama se produce un punto de inflexión donde la fracción

en volumen de hollín deja de aumentar para comenzar a disminuir, esto se explica porque empieza a ser más importante el fenómeno de oxidación de las partículas por sobre el de formación. Finalmente al observar la cuarta altura de 0,8hf la fracción en volumen de hollín es mínima, casi imperceptible para OIs bajos y ya más notoria para OIs altos. Esto se produce debido a que en la parte más alta de la llama el proceso de oxidación juega un papel fundamental en la combustión de la vela.

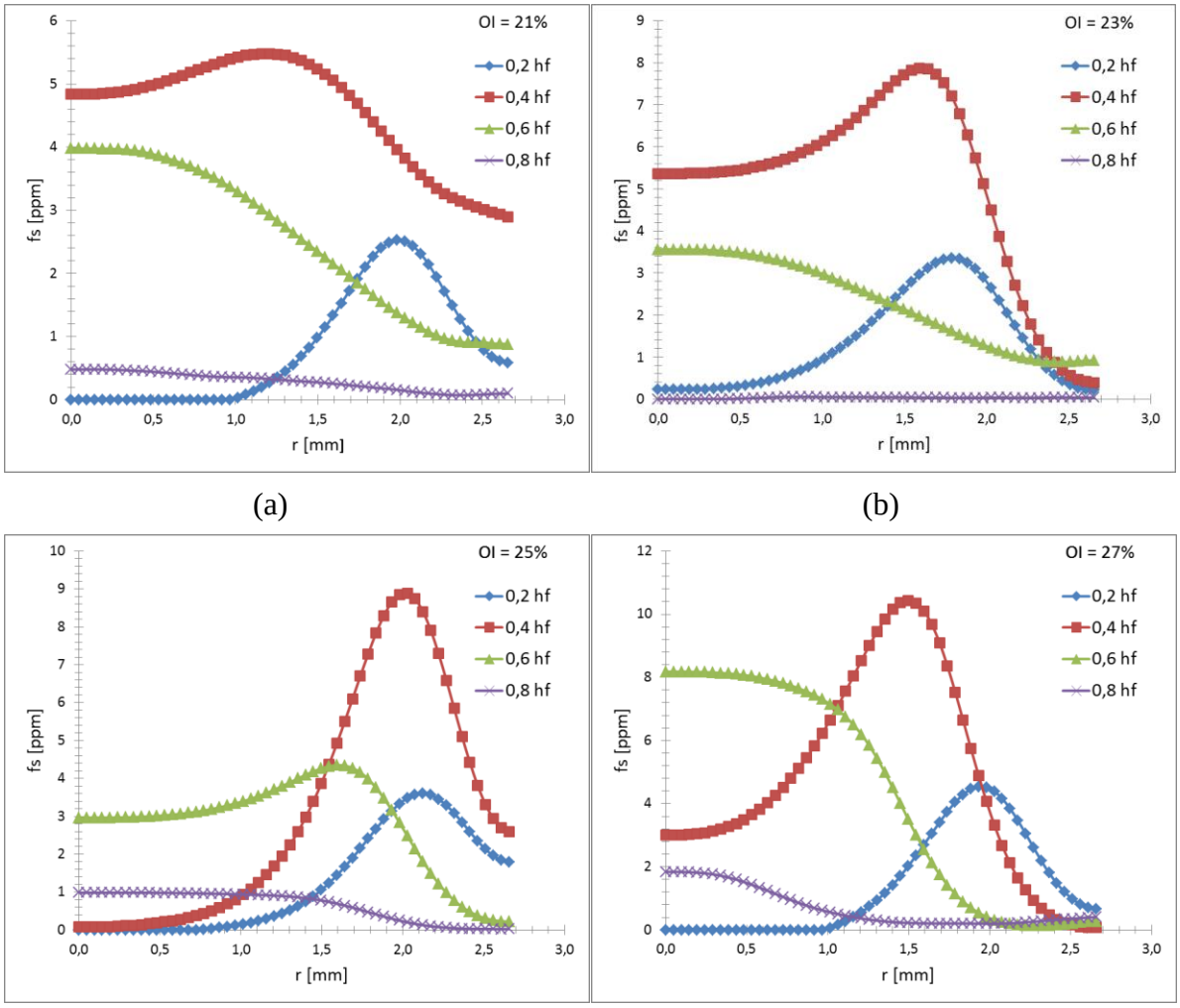
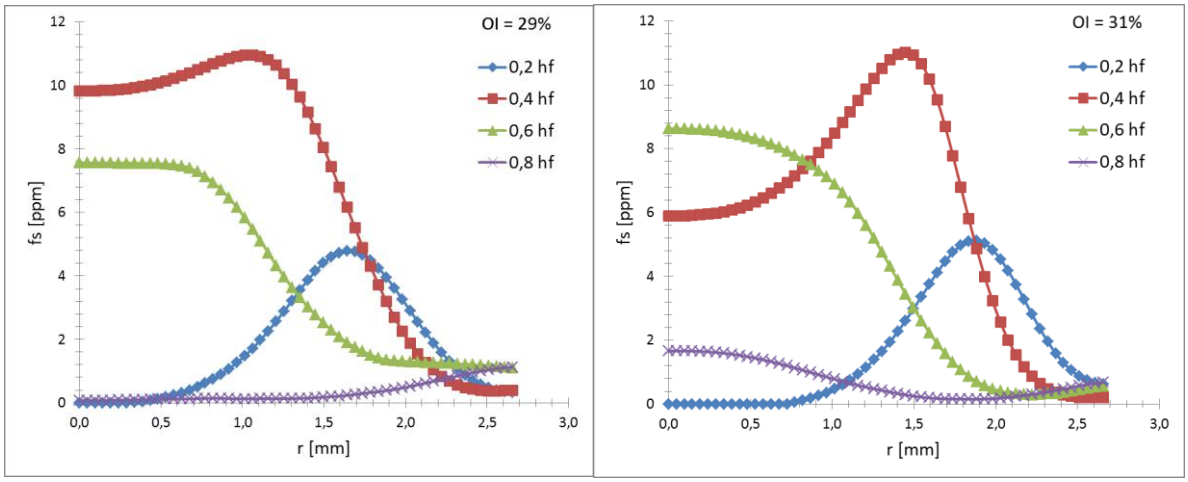
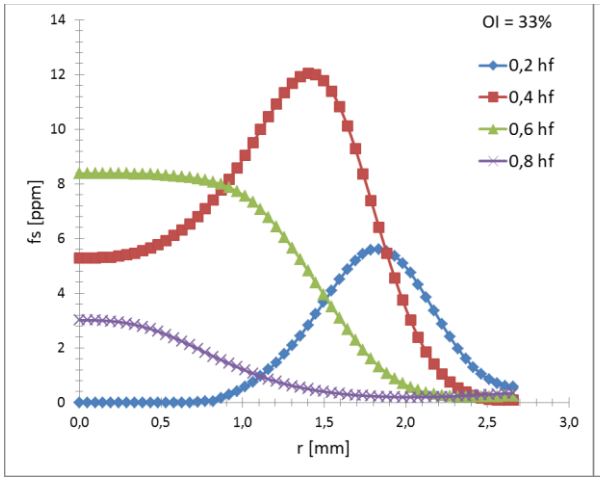


Figura 4.5: Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín para OIs de (a) 21, (b) 23, (c) 25, (d) 27.

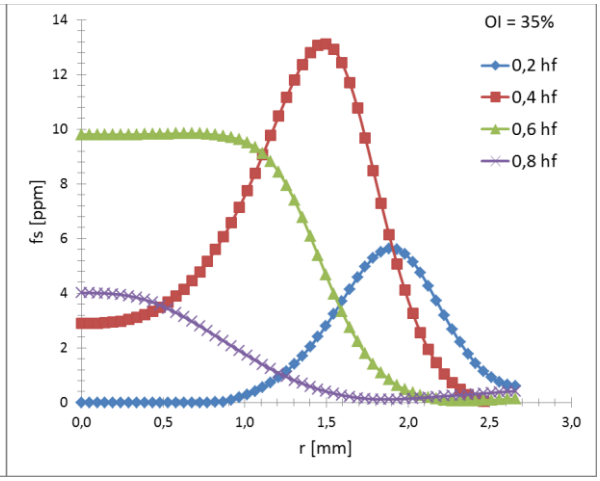


(a)

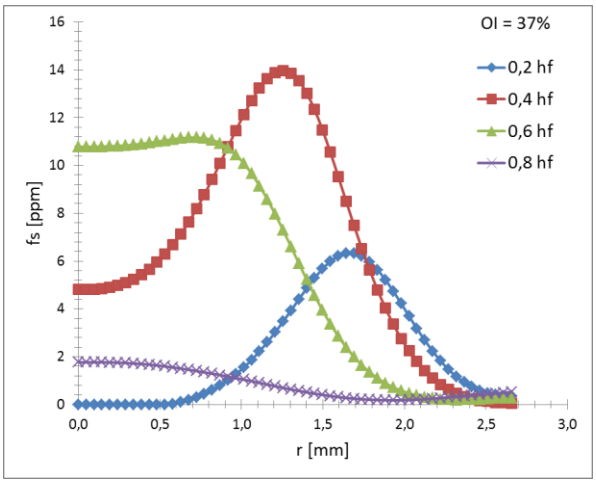
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 4.6: Perfiles radiales de fracción en volumen de hollín para OIs de (a) 29, (b) 31, (c) 33, (d) 35, (e) 37.

4.3.2 Fracción en volumen de hollín integrado β

Para evaluar la producción total o global de hollín generada en cada altura de la llama se calculó la fracción en volumen de hollín integrada β. Este valor β se define por la Ecuación 4.1 la cual se puede aproximar a la Ecuación 4.2 para simplificar el cálculo. Donde r_i corresponde a la posición radial medida en mm desde el eje de la llama hasta el punto donde se calculó cada valor de f_s, Δr es un valor constante igual a 0,048 mm y corresponde a la distancia entre cada medición, finalmente N es el número total de mediciones de f_s en cada altura normalizada de llama. Para que la curva de β fuera lo más representativa posible se calculó el f_s en 15 alturas normalizadas para cada llama generada por cada OI.

$$\beta(z) = 2\pi \int_0^R f_s \, r \, dr \tag{4.1}$$

$$\beta(z) \approx 2\pi \, \Delta r \sum_{i=1}^{N} f_{s,i}(r_i) \, r_i \tag{4.2}$$

En la Figura 4.7 se grafica la fracción en volumen de hollín integrado β en función de las distintas alturas de llama normalizada. Este parámetro β es un indicador de como evoluciona la producción de hollín a través de la altura de llama. Al analizar los resultados obtenidos se aprecia que al igual que en los perfiles de la fracción en volumen de hollín se mantiene la tendencia al alza, en decir, a medida que se aumenta el índice de oxigeno también aumenta la producción global de hollín. En este caso se observa que se produce un aumento en el β máximo de 32% aproximadamente desde un OI de 21% a uno de 37%. Para simplificar la forma en que se muestran los resultados, solo para el OI de 21% se graficó junto con sus barras de error antes calculado en la sección 3.2.7.

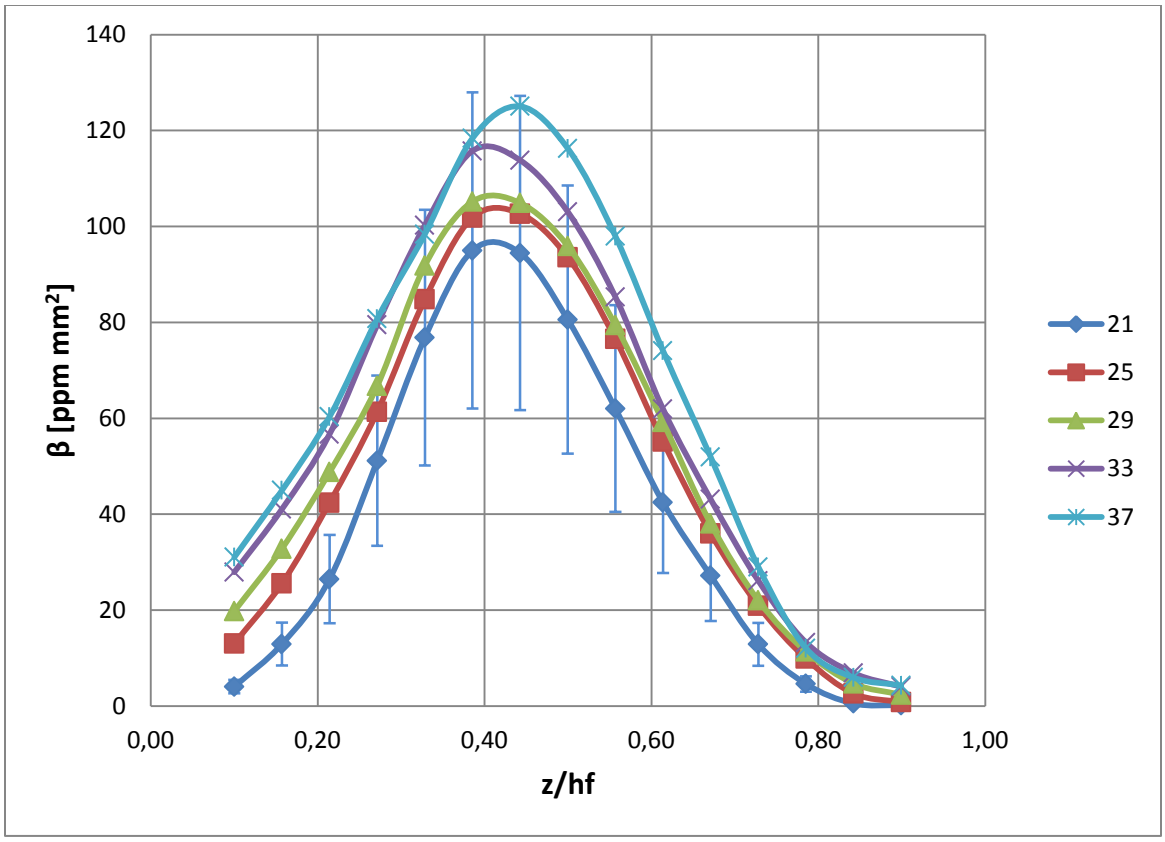


Figura 4.7: Fracción en volumen de hollín integrado β para OIs de 21, 25, 29, 33 y 37.

A continuación en la Figura 4.8 se hace una comparación en la evolución del fs y β máximos para los distintos OI. Se aprecia claramente que ambos tienen una tendencia a aumentar la producción de hollín local y global en la llama a medida que se va aumentando el índice de oxígeno. Cabe destacar que para todas las llamas generadas a pesar de que se aumente el índice de oxigeno todas siguen estando bajo el punto de humo, es decir, todas las llamas son cerradas al alcanzar la altura máxima, esto se produce principalmente porque al existir mayor concentración de oxigeno los mecanismos de oxidación de hollín se ven favorecidos.

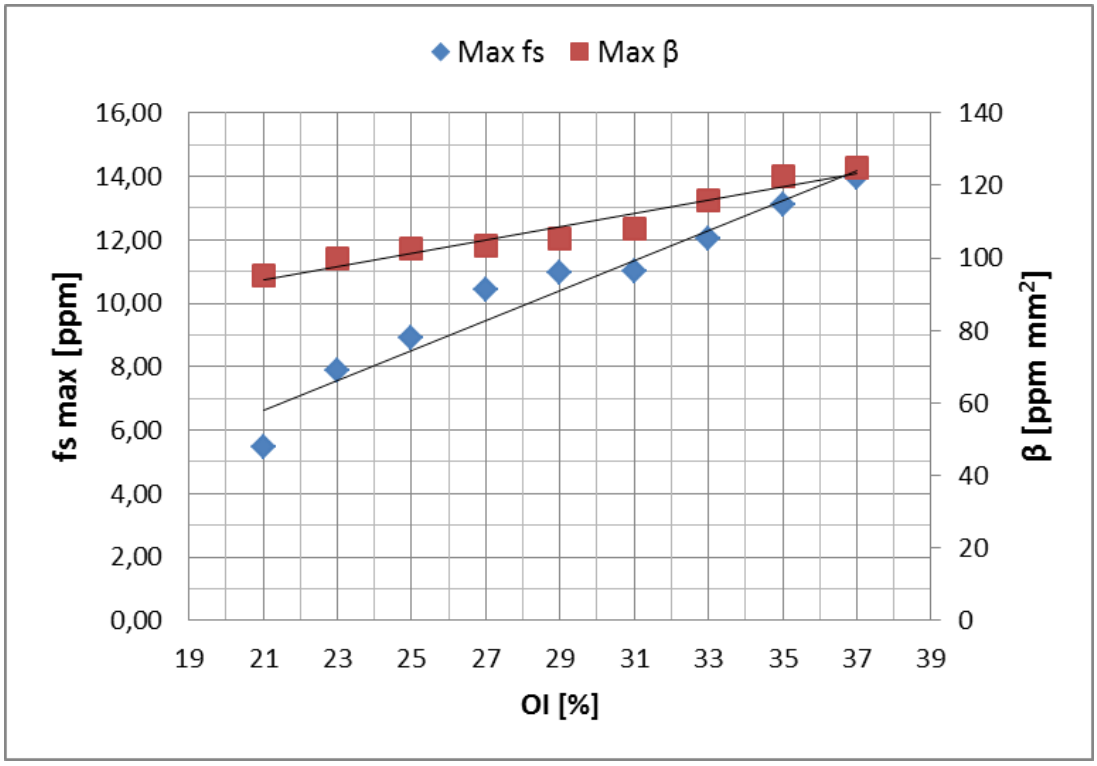
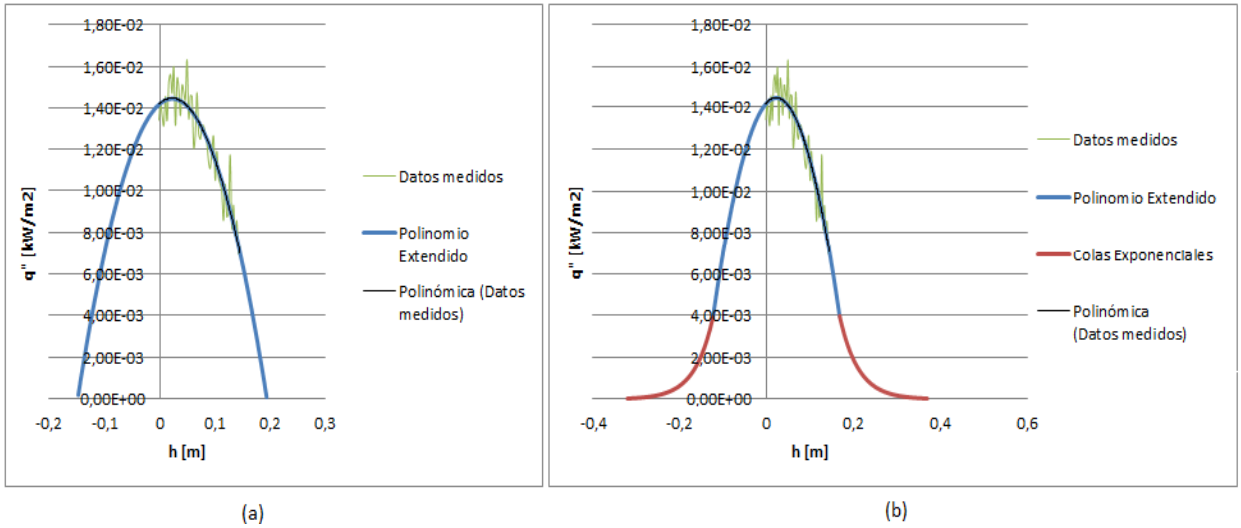


Figura 4.8: Fracción en volumen de hollín máximo y fracción en volumen de hollín integrado máximo en función del índice de oxígeno.

4.4 Radiación

A continuación se mostrará la distribución vertical del flujo radiativo generado a una distancia de 170 mm desde el eje de la llama y cómo evoluciona al ir aumentando el OI. Cabe destacar que por la limitación del recorrido del radiómetro que tan solo puede recorrer una distancia vertical total de 150 mm, se hizo una aproximación de la curva obtenida experimentalmente a una curva polinómica de segundo grado con el fin de eliminar el ruido en las mediciones, luego se extiende esta curva polinómica y en la parte final de ambos extremos de la curva generada se hizo una aproximación exponencial para simular datos más reales como se muestra en la Figura 4.9 y así la radiación fuera acercándose a cero gradualmente a medida que se alejaba de la posición del radiómetro.



(a) (b)

Figura 4.9: Aproximación curva de datos obtenidos del radiómetro.

Se calculó el valor de la fracción radiativa con este arreglo y se comparó con la aproximación que se utilizó en anteriores trabajos como la del cilindro más sus dos caras y se obtuvieron valores muy cercanos por lo que se puede suponer que esta aproximación es bastante buena y se acerca mucho más a la realidad, ya que es muy difícil suponer que el flujo radiativo pasa desde un valor positivo a cero de una forma brusca en un punto mientras se mide a lo largo del eje vertical.

Los valores obtenidos en las curvas de la Figura 4.10 son una muy buena forma de comparar cualitativamente las diferentes condiciones estudiadas al variar el OI, pero sus valores no son un parámetro de comparación con otros trabajos. Esto debido a que la radiación medida depende de la configuración física del radiómetro, ya que la energía recibida y medida depende de la distancia a la que se encuentra del eje de la llama. También se observa que a medida que aumenta el OI los máximos valores de las distintas distribuciones verticales del flujo radiativo también aumentan.

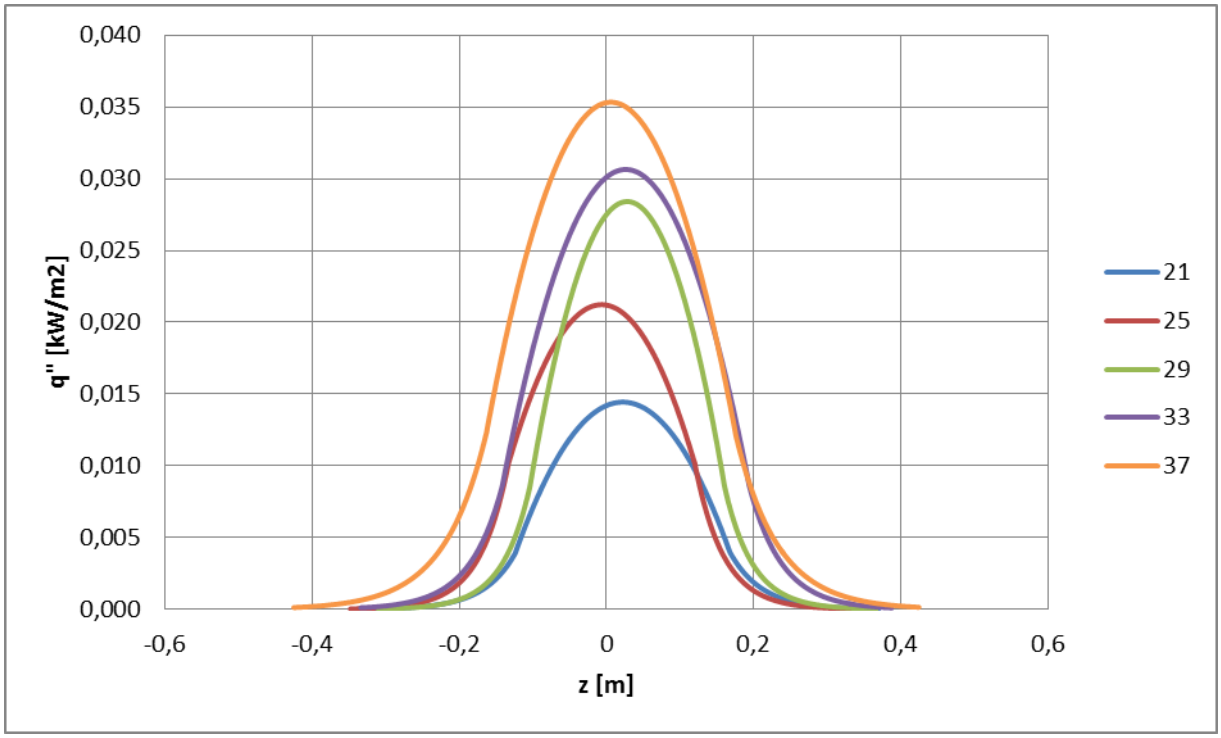


Figura 4.10: Distribución vertical del flujo radiativo emitido por OIs de 21, 25, 29, 33 y 37.

La Figura 4.11 muestra como evoluciona la pérdida total radiativa (PTR) en función del OI en las distintas llamadas generadas con sus respectivos errores. De la misma figura se desprende que a medida que aumenta el OI también aumenta el PTR, lo que es consistente con las distribuciones verticales del flujo radiativo. Además los valores del PTR se pueden aproximar linealmente generando un recta con un coeficiente de determinación $R^2 = 0{,}97$. Los valores del PTR son calculados para conocer la energía total liberada por la llama por unidad de tiempo, en este caso expresado en kW.

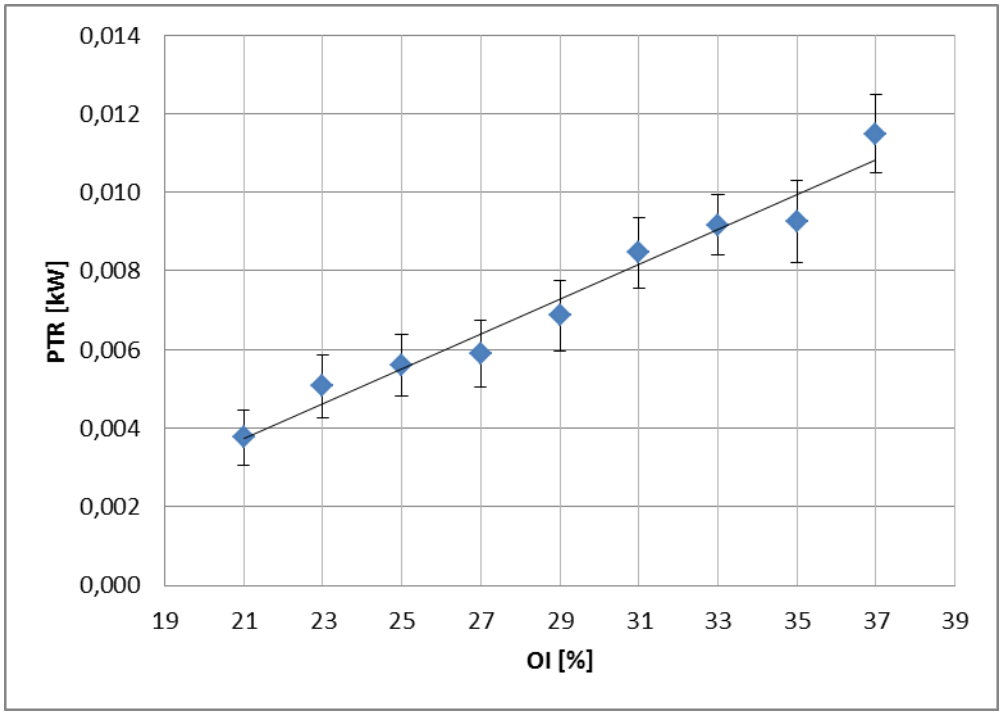


Figura 4.11: Pérdida total radiativa en función del OI.

En la Figura 4.12 se muestra la fracción radiativa χ_r, este valor se calcula como el cociente entre la pérdida total radiativa y la tasa de liberación de calor asumiendo combustión completa, como se muestra a continuación en la Ecuación 4.3:

$$\chi_r = \frac{PTR}{HRR} \tag{4.3}$$

El valor de HRR se calcula según la Ecuación 4.4, donde $\dot{m}$ corresponde al flujo másico de combustible y LHV es el poder calorífico inferior de la parafina correspondiente a 43 MJ/kg.

$$HRR = \dot{m}\ LHV \tag{4.4}$$

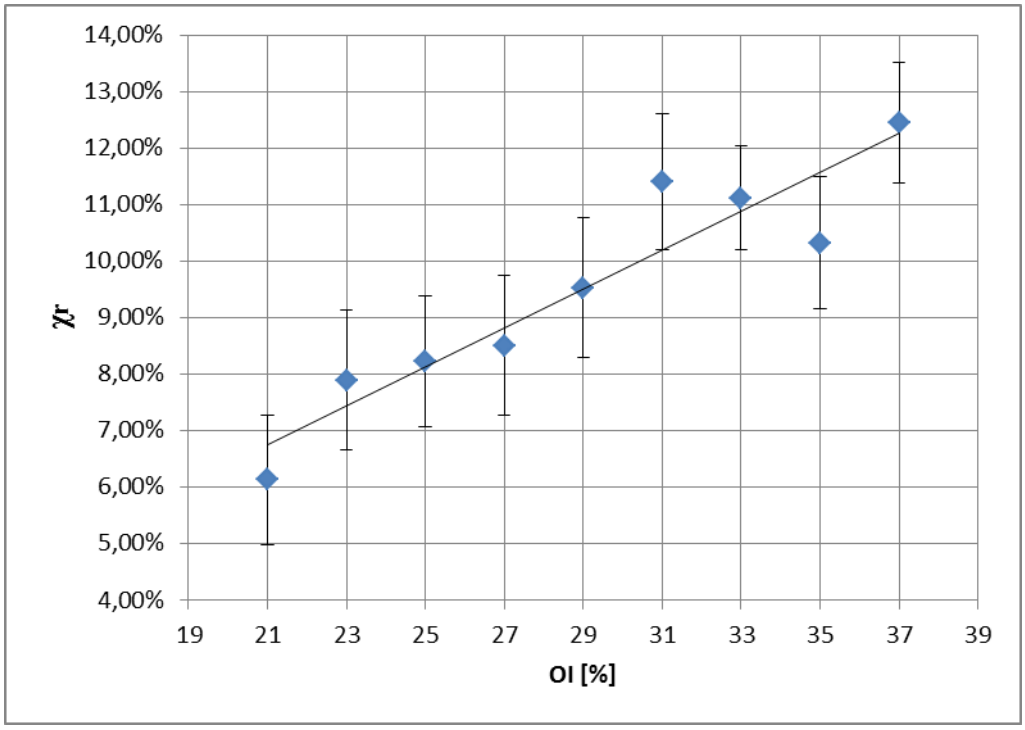


Figura 4.12: Fracción radiativa en función del OI.

Se aprecia que existe un incremento en la fracción radiativa y el calor liberado por la llama a medida que se va aumentando el OI. Si bien existe una relación, no se puede decir que es aproximadamente lineal como en otros casos, al hacer una regresión lineal nos arroja un coeficiente de determinación $R^2 = 0,88$. Aunque si observamos el grafico e incorporamos sus barras de error de propagación podemos observar que si pudiese existir una relación lineal entre ambas variables, lo que es consistente con trabajos anteriores.

Como se vio anteriormente la fracción en volumen de hollín también crece al aumentar el OI, esto nos demuestra que la radiación y el hollín están directamente relacionados.

5 Conclusiones

Mediante el presente estudio de los datos obtenidos de la campaña experimental se ha buscado evaluar los efectos del índice de oxígeno en la pérdida de masa, geometría, producción de hollín y radiación en una llama generada por la combustión de una vela de parafina. Para obtener las datos necesarios en primer lugar se realizaron todos los procedimientos e instalaciones experimentales validados en trabajos similares anteriores [2, 17, 19]. Según experiencias anteriores y la literatura se logró analizar las llamas de difusión laminar estables en el tiempo, generadas por una vela variando su índice de oxígeno desde 21% a 37%. Se siguieron todos los procedimientos de recopilación y análisis computacional de datos usando los mismos algoritmos y métodos numéricos para que todos los resultados obtenidos sean comparables. Cabe destacar que se utilizaron métodos no intrusivos para medir la fracción en volumen de hollín, radiación, geometría de la llama y pérdida de masa. Esto nos asegura que la llama en ningún momento sufrió una perturbación externa que pudiese influir en los datos obtenidos.

De los resultados analizados se aprecia que la producción de hollín en la llama puede tener una relación directa con el flujo radiativo y la tasa de pérdida de masa, sin embargo, existe una relación inversa con la altura de llama. Respecto a los datos obtenidos se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- Se midió la variación de la pérdida de masa en el tiempo y se verificó que las velas independientes del OI se mantenían es un estado estacionario y estables en el tiempo que se tomaban las mediciones.
- Las tasas de pérdida de masas medidas variaron apreciablemente a medida que se aumentaba el OI en las llamas. Se observó que la tasa de pérdida de masa aumento de una

forma aproximadamente lineal desde un OI 21% a 37%, con valores que van desde 1,430 mg/s a 2,145 mg/s respectivamente. Esto se puede explicar por el aumento de la radiación y la temperatura de la zona de reacción, lo que provoca que se tenga una mayor cantidad de combustible disponible en la piscina de la vela que sube a través de la mecha.

- Al aumentar el OI la altura de la zona de reacción de la llama, que se midió con la emisión espontanea de radicales CH*, va disminuyendo pasando de 28,92 mm para 21% a 15,18 mm para 37%. Esta disminución corresponde a un 52% aproximadamente de la altura, la cual además presenta una tendencia lineal. Si bien en este rango de OIs estudiados la altura decrece linealmente, al seguir aumentando el OI esta tendencia podría cambiar y en algún momento la altura puede tender a mantenerse constante.
- La fracción en volumen de hollín se ve favorecida al aumentar el índice de oxigeno, se aprecia en los perfiles radiales de hollín para cada OI estudiado, como a medida que aumenta el OI los máximos de cada perfil también lo hacen y además tienen un tendencia lineal como se aprecia en la Figura 4.8. Los máximos de los perfiles radiales de hollín en la base de la llama se ubican en los costados, luego estos máximos se ubican hacia el eje central de la llama a medida que se avanza por el eje vertical, para todos los OIs estudiados. Estos resultados se pueden explicar debido a que aumentan las tasas de formación de hollín con el índice de oxígeno sin notar una influencia significativa de las tasas de oxidación. Predomina la tasa de formación de hollín producto de una temperatura mayor y a que el tiempo de residencia se reduce debido a la menor altura de la llama a medida que se aumenta el índice de oxígeno.
- De forma similar a los perfiles radiales de hollín, la fracción en volumen de hollín integrado β también se ve favorecida al aumentar el índice de oxígeno. Este valor nos

entrega información de la producción total de hollín que es generado por la combustión de la vela y como evoluciona ésta a través de la altura de la llama. Se aprecia que alrededor del centro de la llama, a medida que se avanza por su altura, se encuentran los máximos. Estos β máximos para cada índice de oxígeno, de forma similar a los perfiles radiales, aumentan con una tendencia lineal.

- El flujo radiativo producido por la llama aumenta a medida que el índice de oxígeno se incrementa de 21% a 37%. La distribución del flujo radiativo a lo largo del eje vertical tiene un máximo cercano al centro de la llama, para luego disminuir a medida que se aleja del centro de la llama. Al observar como evoluciona la pérdida total radiativa (PTR) para los diferentes OIs, se aprecia que se produce una evolución aproximadamente lineal, tal como sucedió con la fracción en volumen de hollín. Con este dato podemos decir que existe una relación, que a mayor producción de hollín mayor es la radiación emitida por la llama. Este comportamiento puede ser explicado por el aumento de las partículas de hollín, las que a su vez transfieren más calor por radiación al ambiente.
- La fracción radiativa χ_r se ve favorecida a medida que el índice de oxígeno aumenta, como se aprecia tiene una tendencia lineal aunque no tan marcada como la fracción en volumen de hollín o la pérdida total radiativa. El aumento de la fracción radiativa se explica por un aumento del PTR significativamente mayor que el aumento del flujo másico del combustible a medida que se incrementa el OI, por lo que se puede decir que a mayor índice de oxigeno la transferencia de calor es más eficiente.

En resumen, luego de analizar los resultados obtenidos después de esta campaña experimental se puede establecer que existe una fuerte relación entre el aumento en el índice de oxígeno y la producción de hollín. A su vez la producción de hollín también se ve relacionada

con el flujo de calor emitido por radiación y la altura de llama. A mayor producción de hollín mayor es el flujo de calor que la llama libera al entorno y a su vez menor la altura de ésta. Este aumento en la producción de hollín se ve favorecido por el aumento del índice de oxígeno. Por otra parte el incremento en el índice de oxigeno provoca que el mecanismo de formación de hollín se vea favorecido por sobre la oxidación durante la combustión.

Finalmente como perspectivas futuras principales para seguir recopilando información valiosa sobre la influencia de oxígeno en la producción de hollín, se deben seguir analizando distintos tipos de combustibles en condiciones similares para poder comparar sus comportamientos y ver si estos resultados pueden ser extrapolados a distintos combustibles con llamas similares. Además, todos los resultados experimentales obtenidos sirven para la validación de modelos numéricos, la mejora de estos o inclusive la creación de nuevos. Una parte importante de este estudio es que se establecieron muchas relaciones entre las principales variables que en su mayoría se pueden aproximar de forma lineal, como el rango de estudio solo abarco de 21% a 37% de oxígeno en el ambiente sería de mucho interés crear las condiciones experimentales necesarias para poder abarcar un rango mayor, con la finalidad de ver si esta tendencia se mantiene o en algún punto el índice de oxígeno deja de influir en la producción de hollín tendiendo a mantenerse constante. Al igual que en el índice de oxigeno el rango en que se midió la radiación emitida por la llama es bastante pequeño, abarcando solo 150 mm en forma vertical manteniendo constante la distancia horizontal. Esto lleva a realizar muchos supuestos y aproximaciones, por lo que sería muy importante tratar de encontrar alguna forma en la configuración experimental del radiómetro donde se pueda abarcar una mayor distancia tanto vertical como horizontal a la llama y así lograr resultados experimentales mejores para poder compararlos con las aproximaciones utilizadas. En conclusión es necesario generar nueva

información sobre el proceso de combustión centrándose principalmente en la relación entre la producción de hollín y la energía liberada, con distintos tipos de combustibles y condiciones, de forma que se puedan generar nuevos modelos numéricos que ayuden a hacer procesos más eficientes y a la vez menos contaminantes, que es donde radica el mayor desafío de la industria.

6 Referencias Bibliográficas

[1] Faraday, M. (1861). *The chemical history of a candle*. New York: Harper & Brothers.

[2] Thomsen, M. (2013). *Caracterización de las nano partículas y carbón negro emitido en una llama de difusión generada por una vela.* Tesis de Grado, Universidad Técnica Federico Santa María.

[3] Musalem, R. J. (2011). *Modelo Computacional para Medir la Fracción en Volumen de Hollín: Aplicación en una Llama de Vela Axisimétrica.*

[4] Glassman, I. (1987). *Combustion*. Academic Press, INC.

[5] Peters, N. (1984). *Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion*, Progress in Energy and Combustion Science, vol. 10, pp. 319–339.

[6] Peters, N. (1986). *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*. The Combustion Institute, pp. 1231–1250.

[7] Fuentes, A., Henríquez, R., Nmira, F., Liu, F., & Consalvi, J. L. (2013). *Experimental and numerical study of the effects of the oxygen index on the radiation characteristics of laminar coflow diffusion flames*. Combustion and Flame, 160(4), 786-795.

[8] Amell, A. (2009). *Tipos de Llama.*

[9] Warnatz, J., U. Maas U. &. Dibble R. (2006). *Combustion*. 4th Edition.

[10] Bilger, R.W. (1989). *Turbulent Diffusion Flame*. Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 21, pp. 101–135.

[11] Hamins, A., Bundy, M., & Dillon, S. E. (2005). *Characterization of candle flames.* Journal of Fire Protection Engineering, 15(4), 265-285.

[12] Suslick, K. S. (1998). *Kirk-Othmer encyclopedia of chemical technology*. John Wiley and Sons, Inc., New York, pp. 473–476.

[13] *Candle Making and Ingredients*. (2002). National Candle Association, Washington, DC.

[14] Raju, M. P. (2007). *Heat and Mass Transport Inside a Candle Wick*. PhD thesis, Case Western Reserve University.

[15] Takahashi, F. (2009). *Candle and jet diffusion flames: Mechanisms of combustion under gravity and microgravity conditions*. Combustion Phenomena: Selected Mechanisms of Flame Formation, Propagation and Extinction. Boca Raton, Fla.: Taylor and Francis, 170-177.

[16] Kennedy I.M. (1997). *Models of soot formation and oxidation*. Progress in Energy and Combustion Science, Volume 23, Issue 2, pp. 95-132.

[17] Henriquez, R. (2013). *Efectos del índice de oxígeno sobre la producción de hollín en una llama de difusión laminar*. Tesis de Grado, Universidad Técnica Federico Santa María.

[18] Palmer, H. B., Cullis, C. F. (1965) *The formation of carbon from gases, Chemistry and Physics of Carbon*, (editor Walker, P. L.), Vol. 1, pp. 265 325. Marcel Dekker, New York.

[19] Escudero, F. (2014). *Estudio de los efectos del índice de oxigeno sobre las propiedades de una llama de difusión laminar inversa*. Tesis de Grado, Universidad de Chile.

[20] Haynes, H., Wagner, H. (1981). *Prog. Energy Combust*. Sci., vol. 7, pp. 229-273.

[21] Bockhorn, H. (1991). *Soot Formation in Combustion*, Round Table Discussion.

[22] Mclintock, I. (1968). *The effect of various diluents on soot production in laminar ethylene diffusion flames*. Combustion and Flame, 12(12):217–225.

[23] Gülder, O. (1995). *Effects of oxygen on soot formation in Methane , Propane , and n-Butane diffusion flames*. Combustion and Flame, 101:302–310.

[24] Glassman, I. & Yaccarino, P. (1980). *The effect of oxygen concentration on sooting diffusion flames*. Combustion Science and Technology, 24(3):107–114.

[25] Weinberg, F. J. & Lawton, J. (1969). *Electrical Aspects of Combustion*.

[26] Raju, M. P., & T'ien, J. S. (2008). *Modelling of candle burning with a self-trimmed wick*. Combustion Theory and Modelling, 12(2), 367-388.

[27] Allan, K. M., Kaminski, J. R., Bertrand, J. C., Head, J., & Sunderland, P. B. (2009). *Laminar smoke points of wax candles*. Combustion Science and Technology, 181(5), 800-811.

[28] Sunderland, P. B., Quintiere, J. G., Tabaka, G. A., Lian, D., & Chiu, C. W. (2011). *Analysis and measurement of candle flame shapes*. Proceedings of the Combustion Institute, 33(2), 2489-2496.

[29] Roper, F. (1977). *The prediction of laminar jet diffusion flame sizes.* Combustion and Flame, vol. 29, pp. 219–234.

[30] Jenkins, T. P. and Hanson, R. K. (2001). *Soot Pyrometry using Modulated Absorption/Emission*. Combustion and Flame, vol. 126, no. 01, pp. 1669–1679.

[31] Ko, B. C., Cheong, K. H. and J.-Y. Nam. (2009). *Fire detection based on vision sensor and support vector machines*. Fire Safety Journal, 44(3):322 – 329.

[32] Daun, K. J., Thomson, K., Liu, F. and Smallwood, G. J. (2006). *Deconvolution of axisymmetric flame properties using Tikhonov regularization*. Applied optics, vol. 45, pp. 4638–4646.

[33] Chang, H. & Charalampopoulos, T. T. (1990). *Determination of the wavelength dependence of refractive indices of flame soot*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences, 430(1880):577 – 591.

[34] Dasch, C. J (1992). *One-dimensional tomography: a comparison of Abel, onion-peeling, and filtered backprojection methods*. Applied optics, vol. 31, pp. 1146–52.

[35] Hadamard, J. (2003). *Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations*. Dover phoenix editions. Dover Publications.

[36] Akesson, E. O. & Daun, K. J. (2008). *Parameter selection methods for axisymmetric flame tomography through Tikhonov regularization*., Applied optics, vol. 47, pp. 407–16,